

MODELO DE CALIDAD DEL AIRE PARA EVALUAR LAS CONCENTRACIONES DE NO₂ Y O₃ EN AREAS URBANAS

Andrea L. Pineda Rojas^{1,2}, Laura E. Venegas^{2,3}
pineda@cima.fcen.uba.ar

¹Centro de Investigaciones del Mar y la Atmósfera (CIMA/CONICET-UBA), DCAO/FCEN,
UMI-IFAECI/CNRS

²Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas

³Departamento de Ingeniería Química, Facultad Regional Avellaneda, Universidad
Tecnológica Nacional

RESUMEN

Diversas actividades humanas emiten a la atmósfera óxidos de nitrógeno (NO_x) y compuestos orgánicos volátiles (COV), que son los principales precursores de dióxido de nitrógeno (NO₂) y ozono (O₃) en la atmósfera urbana. El NO₂ y el O₃ son importantes contaminantes dado que en elevadas concentraciones pueden causar impactos adversos en la salud de las personas y en el ambiente natural. Si bien existen complejos modelos de dispersión atmosférica para estimar sus concentraciones en aire, su aplicación se ve frecuentemente limitada por la falta de información detallada sobre las especies químicas involucradas en los mecanismos fotoquímicos que incluyen. Una alternativa internacionalmente utilizada está dada por el Set de Reacciones Genérico (GRS), un esquema simplificado de dichos mecanismos que permite obtener resultados confiables de las concentraciones de ambas especies, requiriendo menos información de entrada. Recientemente se ha acoplado el esquema fotoquímico GRS al modelo de dispersión atmosférica DAUMOD. El modelo desarrollado (DAUMOD-GRS) permite estimar las concentraciones de NO₂ y O₃ en aire a nivel del suelo, originadas por el gran número de fuentes de emisión de NO_x y COV existentes en áreas urbanas. En este trabajo se describen las principales características del DAUMOD-GRS. Se presentan los resultados de la evaluación de su desempeño considerando observaciones horarias de NO₂ y O₃ provenientes de distintas campañas realizadas en el Área Metropolitana de Buenos Aires (AMBA). Los resultados obtenidos indican un buen desempeño del modelo con una leve tendencia a subestimar las concentraciones de NO₂ y sobreestimar las de O₃.

Palabras clave: modelos de calidad del aire, dióxido de nitrógeno, ozono

ABSTRACT

Different human activities emit to the atmosphere nitrogen oxides (NO_x) and organic volatile compounds (VOC), which are the main precursor species of nitrogen dioxide (NO₂) and ozone (O₃) in the urban atmosphere. NO₂ and O₃ are important air pollutants since at elevated concentrations they can cause adverse impacts on the human health and the natural environment. Even though there exist complex atmospheric dispersion models to estimate their atmospheric concentrations, its application is frequently constrained by the lack of detailed information on the chemical species involved in the photochemical mechanisms. An internationally used alternative is given by the Generic Reaction Set (GRS), a simplified scheme of those mechanisms which allow to obtain reliable results of the concentrations of both species while requiring less input information. Recently, the GRS photochemical scheme has been coupled to the DAUMOD atmospheric dispersion model. The developed model (DAUMOD-GRS) allow to estimate the atmospheric NO₂ and O₃ concentrations at ground-level, generated by the great number of NO_x and VOC emission sources that exist in urban areas. In this work, the main features of the DAUMOD-GRS are

described. The results of its performance evaluation considering hourly observations of NO₂ and O₃ from different campaigns carried out in the Metropolitan Area of Buenos Aires (MABA) are presented. The results obtained indicate a good model performance with a slight tendency of the model to underestimate the concentrations of NO₂ and overestimate those of O₃.

Keywords: air quality models, nitrogen dioxide, ozone

1) INTRODUCCIÓN

Uno de los grandes problemas que genera el creciente desarrollo socio-económico en áreas urbanas es la contaminación atmosférica causada por los óxidos de nitrógeno (NO_x=NO+NO₂) y los compuestos orgánicos volátiles (COV). Estas especies son emitidas a la atmósfera por diversas actividades humanas y, en presencia de luz solar, dan lugar a la formación fotoquímica de dióxido de nitrógeno (NO₂) y ozono (O₃), que son importantes contaminantes de la atmósfera urbana dado que en altas concentraciones pueden producir impactos adversos en la salud humana y el ambiente. Por lo tanto, la estimación de las concentraciones de NO₂ y O₃ en aire a nivel del suelo, resultantes de las emisiones de NO_x y COV, constituye una parte importante en los estudios de evaluación de la contaminación atmosférica en zonas urbanas. Para ello se recomienda la aplicación de *Modelos de Calidad del Aire (MCA)* que incluyan procesos fotoquímicos. Estos modelos pueden dividirse en simples y complejos, y la elección de uno u otro dependerá principalmente de su aplicación específica y de la información disponible sobre el dominio de interés. Por ejemplo, los *MCA complejos* (e.g., Yamartino et al., 1992) incluyen esquemas fotoquímicos detallados, con cientos de especies químicas y reacciones cuyas ecuaciones requieren grandes recursos computacionales para ser resueltas (Venkatram et al., 1994, Hurley et al., 2003). Por esta razón, en general son utilizados para evaluar las concentraciones de contaminantes atmosféricos en periodos de tiempo cortos (episodios) y/o empleando una resolución espacial relativamente baja (~5 km). Además, los modelos con mecanismos químicos detallados requieren información precisa de las especies involucradas (sus emisiones y concentraciones de fondo), lo que constituye una limitación importante en muchas ciudades del mundo, particularmente en lo que refiere a las especies desagregadas de COV. Los *MCA simples* que incluyen esquemas químicos altamente simplificados (e.g., McHugh et al., 1997; Hurley et al., 2005), proveen una alternativa aceptable cuando la información disponible es limitada y permiten estimar las concentraciones de NO₂ y O₃ resultantes del gran número de fuentes de emisión de NO_x y COV que existen en áreas urbanas, en alta resolución espacial (1 km²) y temporal (1 h), y en periodos de tiempo largos.

El modelo DAUMOD (Mazzeo y Venegas, 1991) es un modelo de dispersión atmosférica urbana simple, que fue originalmente desarrollado para estimar las concentraciones de contaminantes inertes. Este modelo y sucesivas versiones han sido ampliamente utilizados para estudiar la calidad del aire en el Área Metropolitana de Buenos Aires (AMBA) y su impacto en aguas costeras del Río de la Plata (e.g., Venegas y Mazzeo, 2006; Pineda Rojas y Venegas, 2009; Mazzeo et al., 2010; Venegas et al., 2011). Por otro lado, el esquema químico simplificado GRS (Azzi et al., 1992) ha sido incorporado en varios modelos de dispersión atmosférica debido a su simplicidad y a su habilidad para reproducir las interacciones COV-NO_x-O₃ en la escala urbana (e.g., Zlatev et al., 1992; Venkatram et al., 1994; Lashmar y Cope, 1995; McHugh et al., 1997; Kim et al., 2005; Hurley et al., 2005). Con el objeto de incluir la formación fotoquímica de NO₂ y O₃ en el modelo DAUMOD, recientemente ha sido acoplado con el esquema GRS (Pineda Rojas y Venegas, 2013a). En este trabajo se describen las principales características del modelo desarrollado DAUMOD-GRS y se presentan los resultados obtenidos de la evaluación de su desempeño, comparando las concentraciones horarias de NO₂ y O₃ estimadas con las observadas en distintos sitios del AMBA.

2) BREVE DESCRIPCIÓN DEL MODELO DESARROLLADO

Una descripción detallada del desarrollo del DAUMOD-GRS se encuentra en Pineda Rojas y Venegas (2013a). A continuación se describen sus principales componentes: los módulos físico y químico, y el acople entre ambos.

2.1. Módulo físico (DAUMOD)

El modelo de dispersión atmosférica DAUMOD (Mazzeo y Venegas, 1991) fue originalmente desarrollado para estimar las concentraciones de fondo de contaminantes inertes que son emitidos a la atmósfera desde fuentes areales en una zona urbana. Este modelo se basa en la ecuación bidimensional de difusión atmosférica y la de conservación de masa, y considera al eje x en la dirección del viento medio, al eje z vertical, y que no existe transporte de masa a través del límite superior de la pluma de contaminantes. La concentración en aire a nivel del suelo ($z=0$), debida a una fuente areal de intensidad uniforme Q_i que se encuentra entre las posiciones $x=x_{i-1}$ y $x=x_i$, a una distancia x viento abajo de la fuente, está dada por:

$$C_i(x,z=0) = a Q_i [(x-x_{i-1})^b - (x-x_i)^b] / (|A_1| k z_0^b u^*) \quad (1)$$

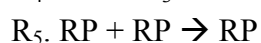
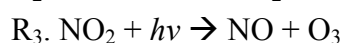
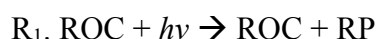
donde z_0 es la longitud de rugosidad de la superficie, a , b y A_1 son coeficientes que dependen de la estabilidad atmosférica, k es la constante de von Karman (=0.41) y u^* es la velocidad de fricción. La expresión que utiliza el DAUMOD para estimar la concentración debida a una distribución horizontal de N fuentes areales ubicadas viento arriba del receptor, es:

$$C(x,z=0) = a [Q_0 x^b + \sum_{i=1}^N (Q_i - Q_{i-1})(x-x_i)^b] / (|A_1| k z_0^b u^*) \quad (2)$$

donde Q_0 es la emisión del contaminante en el receptor. Este modelo ha sido validado con observaciones de concentraciones de monóxido de carbono (CO) y óxidos de nitrógeno en diferentes ciudades de Estados Unidos, Alemania, Dinamarca y en la ciudad de Buenos Aires (Mazzeo y Venegas 1991; Venegas y Mazzeo, 2002, 2006). Los resultados de estas evaluaciones muestran que la habilidad del modelo DAUMOD para estimar concentraciones de contaminantes en periodos de tiempo cortos (horario y diario) es buena y mejora cuando se consideran periodos de tiempo más largos (mensual y anual).

2.2. Módulo químico (GRS)

El esquema GRS (Azzi et al., 1992) fue desarrollado por la 'Division of Coal & Energy Technology, Commonwealth Scientific and Industrial Research Organisation (CSIRO), Australia' con el objeto de obtener un esquema fotoquímico simplificado que redujera el enorme tiempo computacional que requieren los mecanismos más detallados. El GRS representa las miles de reacciones que intervienen en el subsistema COV-NO_x-O₃ con sólo siete reacciones:



donde ROC es una pseudo-especie que representa a todas las especies de COV reactivas, RP representa a todos los radicales, SGN a las especies de nitrógeno gaseosas estables y SNGN a las especies de nitrógeno en aerosol estables. De esta forma, todas las reacciones, salvo R₃ y R₄ que son exactas, son pseudo-reacciones.

De acuerdo con el mecanismo GRS, las ecuaciones de velocidad de las reacciones R₁-R₇ son de la forma:

$$dC_s/dt = p_s - q_s C_s \quad (3)$$

donde C_s es la concentración de la especie s , y p_s y $q_s C_s$ son sus tasas de producción y pérdida, respectivamente. Las siete ecuaciones dadas por (3) forman un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias acoplado (dado que p_s y q_s son funciones de las concentraciones de otras especies del esquema) donde las constantes de velocidad k_n asociadas a cada reacción R_n dependen de variables atmosféricas tales como la temperatura (T) y la radiación solar (TSR).

El esquema GRS ha sido validado con datos de cámaras de smog, empleando una variedad de mezclas de hidrocarburos y de fracciones ROC/NO_x (Hess et al., 1992). Además, distintas aplicaciones de modelos de calidad del aire que incluyen al GRS en sus algoritmos (e.g., ADMS-Urban, CIT, SEGRS, SOMS, TAPM) han mostrado que el esquema es adecuado para simular las concentraciones de NO₂ y O₃ observadas en áreas urbanas (e.g., Lashmar y Cope, 1995; Owen et al., 2000; Hurley et al., 2003; Kim et al., 2005), superando en algunos casos a mecanismos de mayor complejidad (e.g., Venkatram et al., 1994; Anh et al., 1998).

2.3. Acople del modelo DAUMOD con el esquema GRS

Una vez emitidas las especies precursoras, NO_x y COV, son transportadas por el viento y dispersadas por la turbulencia atmosférica [ecuación (2)], y pueden luego reaccionar de acuerdo con el esquema GRS. En cada receptor, el tiempo de reacción (Δt_r) es estimado en función de las edades medias (τ) de ambas especies como:

$$\Delta t_r = \min[\tau(\text{NO}_x), \tau(\text{ROC})] \quad (4)$$

$$\tau = \frac{\sum_{i=1}^N \tau_i C_i}{\sum_{i=1}^N C_i} \quad (5)$$

donde τ_i es el tiempo que le lleva al contaminante proveniente de la fuente i llegar al receptor [calculado como L_i/U , siendo L_i la distancia fuente-receptor y U la velocidad del viento] y C_i es la concentración en el receptor debido a la contribución de la fuente i [ecuación (1)].

En el DAUMOD-GRS, el sistema de ecuaciones dado por (3) es resuelto aplicando la Aproximación de Estado Quasi-Estacionario (QSSA) (e.g., Yamartino et al., 1992), que asume que existe un intervalo temporal δt en el cual p_s y q_s pueden ser considerados constantes, de forma tal que dichas ecuaciones pueden ser integradas fácilmente para dar soluciones de la forma:

$$C_s = (p_s/q_s) + [C_{s0} - (p_s/q_s)] \exp(-q_s \delta t) \quad (6)$$

donde δt es estimado por (Yamartino et al., 1992):

$$\delta t = \varepsilon \min[C_{s0} / (p_{s0} - q_{s0} C_{s0})] \quad \forall s \quad (7)$$

ε representa un cambio fraccional aceptable en la concentración durante δt y el subíndice “0” indica el valor de la variable al comienzo de δt . De esta forma, el set de ecuaciones dado por (6) es integrado numéricamente durante Δt_c , con un paso temporal variable δt . Por otro lado, en la literatura existen distintas expresiones para estimar las constantes de velocidad k_n en función de variables atmosféricas. En el DAUMOD-GRS, k_1 es estimada en función de T y k_3 , k_3 en función de TSR, k_2 y k_4 de T y el resto son consideradas constantes (ver Pineda Rojas y Venegas, 2013a).

3) EVALUACIÓN DEL DESEMPEÑO DEL DAUMOD-GRS EN EL AMBA

3.1. Concentraciones observadas de NO₂ y O₃

Para evaluar el desempeño del DAUMOD-GRS en el AMBA, se utilizaron dos sets de datos de concentraciones horarias de NO₂ y O₃. El primero proviene de una campaña realizada en un parque urbano de la Ciudad de Buenos Aires (CBA) entre el 11 de agosto y el 17 de septiembre de 2001. El lugar de observación se encuentra a 800 m del Aeropuerto Jorge Newbery, dista 2 km de dos centrales termoeléctricas, 1 km del Río de la Plata, y está cerca de dos avenidas cuyas distancias al sitio varían entre 80-900 m y 180-800 m, respectivamente. Un análisis detallado de estas observaciones se encuentra en Mazzeo et al. (2005). El segundo set de datos incluye las concentraciones horarias provenientes de varias campañas de monitoreo realizadas en distintos sitios cercanos a las principales autopistas del Gran Buenos Aires (GBA) entre 2007 y 2008. Estas mediciones se realizaron a distancias variables dentro de los 50 m de la línea de tráfico, durante diferentes periodos de 1 a 2 semanas de duración. Ambos sets suman un total de 2909 observaciones de NO₂ y 3100 de O₃, registradas en 20 sitios del AMBA (ver Figura 1).

3.2. Condiciones de las simulaciones y datos de entrada

El DAUMOD-GRS fue aplicado en el área de la Figura 1, en los periodos de las observaciones, considerando una resolución espacial de 1 km² y una resolución temporal de 1 h.

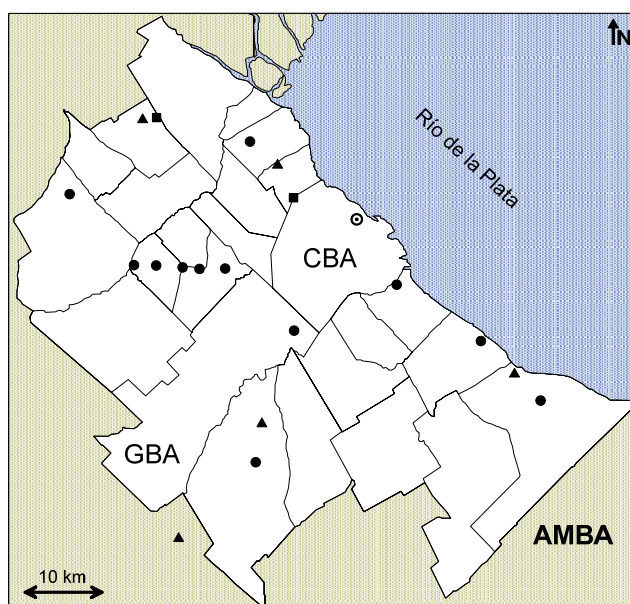


Figura 1. Sitios de medición de NO₂ (■), O₃ (▲) y ambas especies (●) dentro del AMBA [Ciudad de Buenos Aires (CBA) + Gran Buenos Aires (GBA)]. El sitio urbano está indicado (⊙).

Los datos de entrada necesarios para correr el modelo se dividen en: i) datos meteorológicos, ii) datos de emisiones de NO_x y COV, y iii) datos de concentraciones de fondo regional de las especies involucradas. La información meteorológica horaria de superficie corresponde a la Estación Meteorológica Aeroparque Aero. Estos datos incluyen: intensidad y dirección de viento, temperatura del aire y nubosidad. La información aerológica proviene de los sondeos realizados en la Estación Ezeiza. Los datos de emisiones de NO_x desde fuentes areales provienen del inventario de emisiones de alta resolución (1 km², 1h) desarrollado para el AMBA (Venegas et al., 2011), que incluye las siguientes categorías: transporte vehicular, movimiento de aviones en los principales aeropuertos, y actividades residenciales, comerciales y de pequeñas industrias. Se considera una especiación de NO_x en las emisiones de 90% de NO y 10% de NO₂. Por otro lado, las emisiones de COV estimadas para aplicar el DAUMOD-GRS en el AMBA, se basan en las mismas actividades consideradas para el inventario de NO_x con los factores de emisión correspondientes. Se asume una especiación de COV característica de las emisiones vehiculares dado que constituyen la fuente dominante en la zona urbana. Luego, para estimar las emisión de ROC (requerida por el GRS) en función de la de COV, se aplica la metodología propuesta por Venkatram et al. (1994). Finalmente, como concentraciones de fondo regional, se considera un valor constante de 20 ppb para el O₃ y niveles de aire “limpio” para el resto de los contaminantes (ver Pineda Rojas y Venegas, 2013a).

3.3. Resultados obtenidos

Distintas evaluaciones del modelo DAUMOD-GRS considerando las observaciones antes mencionadas, se encuentran en Pineda Rojas y Venegas (2013a, 2013b) y en Pineda Rojas (2014). Para cada especie, la comparación se hace entre la concentración observada y el valor estimado “en el mismo retículo” donde se hizo la medición y para el momento de la observación.

Para evaluar el desempeño del modelo DAUMOD-GRS en la estimación de las concentraciones horarias de NO₂ y O₃ en el AMBA se evaluaron los siguientes parámetros estadísticos: el error cuadrático medio normalizado (NMSE), la fracción de valores estimados que están dentro de un factor dos de los observados (FA2) y el error fraccional (FB). Para que el desempeño de un modelo pueda ser considerado aceptable deben satisfacer: $NMSE < 1.5$, $FA2 > 0.5$ y $-0.3 < FB < 0.3$ (Chang y Hanna, 2005).

La Tabla I incluye los valores de estos parámetros obtenidos de la comparación estadística de las concentraciones horarias de NO₂ y O₃ estimadas por el DAUMOD-GRS con las observaciones descritas en la Sección 3.1. Se consideraron todos los resultados debido a que el número de casos por campaña es relativamente bajo para poder obtener una evaluación estadística representativa. Los resultados obtenidos muestran que el DAUMOD-GRS representa bien las concentraciones de ambas especies, con una leve tendencia a subestimar las concentraciones de NO₂ (FB=0.024) y a sobreestimar las de O₃ (FB=-0.053). Se observa que el 57.4% de las concentraciones horarias estimadas de NO₂ y el 81.6% de las de O₃ se encuentran dentro de un factor de dos de las observadas (Figura 2).

		Media	Sigma	NMSE	FA2	FB
NO ₂	Observada	16.9	13.6			
N=2909	DAUMOD-GRS	16.5	12.7	0.820	0.574	0.024
O ₃	Observada	12.8	4.4			
N=3100	DAUMOD-GRS	13.5	6.1	0.220	0.816	-0.053

Tabla I. Medidas estadísticas obtenidas de la comparación de las concentraciones de NO₂ y O₃ observadas y modeladas con DAUMOD-GRS. [N: cantidad de datos, Sigma: desvío estándar (ppb), NMSE: error cuadrático medio normalizado, FA2: fracción de estimaciones del DAUMOD-GRS dentro de un factor dos de las observaciones, FB: error fraccional].

Por otra parte, la evaluación del modelo considerando las concentraciones horarias de ambos contaminantes registradas en diferentes regiones circulares concéntricas a la CBA (Pineda Rojas, 2014) permite concluir que el DAUMOD-GRS reproduce bien los gradientes urbano-suburbano de las concentraciones medias: los valores observados muestran que el NO₂ disminuye un 27.8% (5 ppb) desde la ciudad a través del AMBA y que el O₃ aumenta un 37.1% (4 ppb) en la misma dirección (radial), alcanzando el máximo nivel medio a 30 km de distancia a la ciudad. El modelo estima una disminución del 29.6% en la concentración media de NO₂ y un aumento del 38.6% en la del O₃ en las mismas distancias.

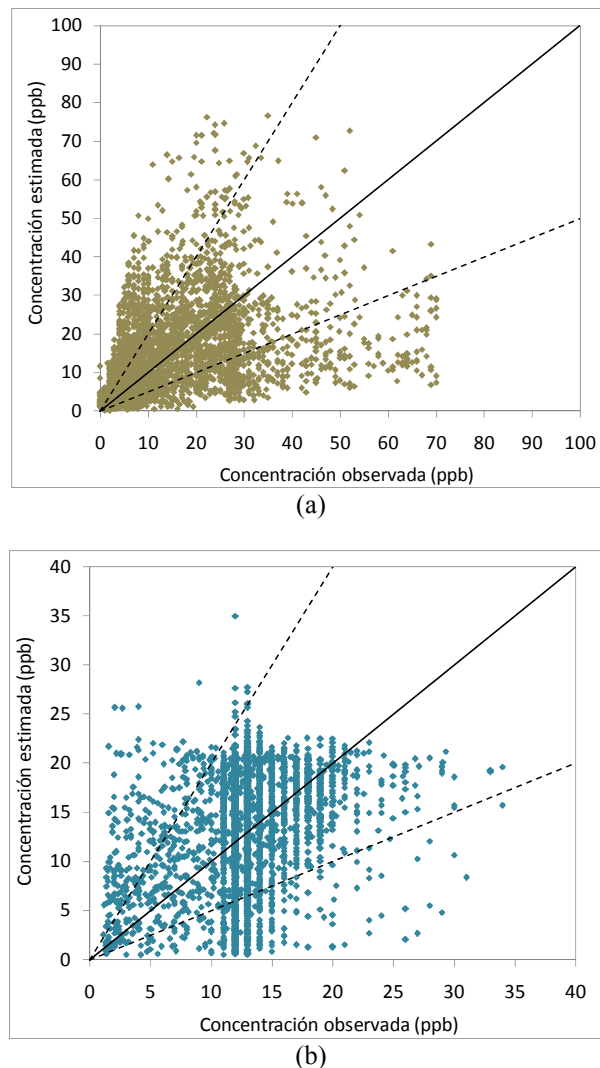
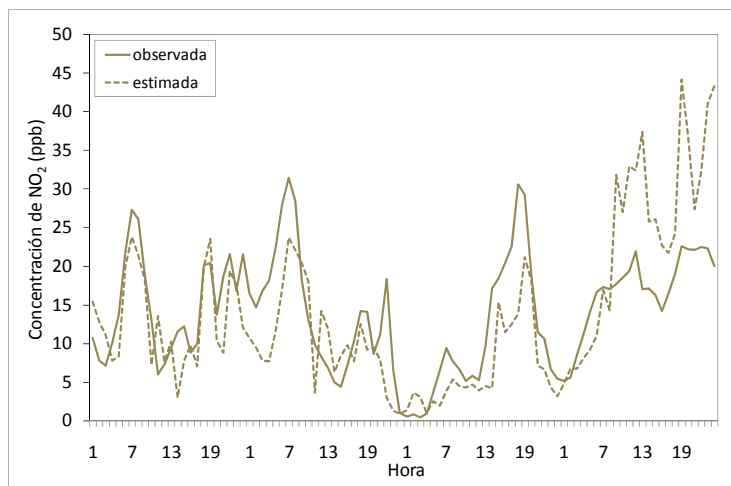


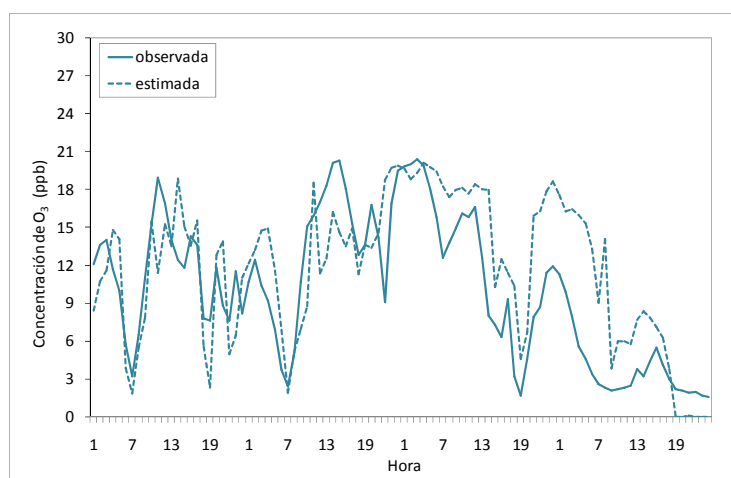
Figura 2. Diagrama de dispersión de las concentraciones horarias de (a) NO₂ [N=2909] y (b) O₃ [N=3100] observadas y estimadas con el DAUMOD-GRS. Se incluyen las líneas 2:1, 1:1 y 1:2.

Los resultados para la CBA (Pineda Rojas y Venegas, 2013a) muestran que las distribuciones de frecuencias observadas y estimadas son, en general, similares; con una frecuencia algo mayor de valores estimados en los rangos de concentración de NO₂ bajos (≤ 10 ppb) y altos (> 30 ppb), e intermedios de O₃ (15-25 ppb). Un ejemplo de cómo el modelo representa la variación horaria de ambas especies en este sitio, se muestra en la Figura 3. Las concentraciones estimadas siguen la variación general de las observadas. Los mínimos y máximos están en general bien representados por el modelo, salvo en algunas horas que los picos de NO₂ son subestimados.

Asimismo, la evaluación estadística de la habilidad del DAUMOD-GRS para estimar las máximas concentraciones horarias de O₃ en verano en el AMBA (Pineda Rojas y Venegas, 2013b) reveló que que el 97.6% de los picos diarios estimados se encuentra dentro de un factor de 2 de los niveles observados, con un NMSE de 0.11 y un FB de -0.139.



(a)



(b)

Figura 3. Series temporales de las concentraciones de (a) NO_2 y (b) O_3 estimadas y observadas en el sitio urbano de la CBA durante entre el 4-7 de Septiembre de 2001.

3.4. Discusión

Los estadísticos presentados en la Sección 3.3 proveen una medida de la diferencia entre las concentraciones estimadas y observadas y son considerados como una medida del error del modelo. Sin embargo, las observaciones constituyen una representación imperfecta del sistema (dado que tienen su propio error de medición), y además proveen los valores de concentración en un lugar determinado; mientras que el modelo estima la concentración media en un área de 1 km^2 conteniendo dicho sitio. Estas diferencias deben ser tenidas en cuenta cuando se analizan dichos estadísticos, dado que no es posible esperar una evaluación “perfecta” del modelo.

Por otro lado, en los valores estimados de las concentraciones horarias de NO_2 y O_3 existen distintas *fuentes de error*: las del modelo en sí y las relacionadas a las aproximaciones hechas en su aplicación. Las primeras incluyen: la ausencia de procesos de depósito, la simulación de las reacciones fotoquímicas de manera muy simplificada y la omisión de otros mecanismos de transporte que podrían ser importantes en ciudades que se encuentran sobre terreno complejo (i.e., con topografía irregular). Entre las aproximaciones hechas para aplicar el DAUMOD-GRS en el AMBA se encuentran: la omisión de emisiones de COV desde áreas verdes y las relacionadas con el uso de solventes, la omisión de emisiones de NO_x y COV de las fuentes puntuales, y la suposición

de homogeneidad horizontal de las variables atmosféricas. Todas ellas contribuyen de distinta forma al “error total” del modelo. Los resultados de la Tabla 1 indican que la representación de las concentraciones de NO₂ y O₃ en el AMBA por el modelo es aceptable (i.e., el “error” es aceptable), pero no dicen nada acerca de las contribuciones relativas de las diferentes *fuentes de error*. Para ello se requieren otros estudios tales como el análisis de incertidumbre y sensibilidad, y más evaluaciones del modelo desarrollado (en otras ciudades y/o en relación a otros modelos de calidad de aire). En este caso, dicha información ayudaría a determinar si las aproximaciones hechas son adecuadas o si existe una compensación de errores de distintas fuentes.

4) CONCLUSIONES

El DAUMOD-GRS es un modelo de dispersión atmosférica simple que permite estimar las concentraciones de fondo de NO₂ y O₃ en un área urbana con una alta resolución espacial (1 km²) y temporal (1 h), cuando la información sobre el dominio de interés es limitada. Esto es particularmente importante en megaciudades como el AMBA donde existe un gran número de fuentes de emisión de NO_x y COV (cuyo detalle es necesario tener en cuenta si se quiere reproducir la variación espacial que existe en las concentraciones), y cuando se requiere hacer un gran número de simulaciones (como por ejemplo, en evaluaciones estadísticas del modelo o en estudios de impacto de distintos escenarios) dado que la demanda computacional del modelo es relativamente baja. Entre las limitaciones del modelo se encuentran que el mismo ha sido desarrollado para terreno llano y que no incluye procesos de depósito que podrían ser importantes en las zonas de AMBA que están cubiertas con vegetación (principalmente en el conurbano).

Distintas evaluaciones del desempeño del DAUMOD-GRS muestran que el modelo es adecuado para estimar las concentraciones horarias de NO₂ y O₃ en el AMBA. Los estadísticos obtenidos a partir de la comparación entre las concentraciones estimadas y observadas son para el NO₂ (N=2909): NMSE=0.82, FA2=0.574, FB=0.024; y para el O₃ (N=3100) NMSE=0.22, FA2=0.816, FB=-0.053. Estos resultados sugieren que las aproximaciones realizadas en su aplicación (tales como la omisión de las emisiones de la vegetación y de las fuentes puntuales, o la suposición de homogeneidad horizontal de las variables atmosféricas) podrían ser consideradas aceptables. Futuras evaluaciones del DAUMOD-GRS tales como la comparación de sus resultados con los de un modelo de mayor complejidad o su aplicación en otras ciudades, contribuirán a confirmar dicha hipótesis.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo ha sido financiado por el Proyecto PIP-CONICET 0304: “Estudio de la Calidad del Aire en Áreas Urbanas”. Se agradece al Servicio Meteorológico Nacional por la información meteorológica y al Órgano de Control y Concesiones Viales por los datos de calidad del aire, utilizados en la realización del presente trabajo.

REFERENCIAS

- Anh V.V., Azzi M., Duc H., Johnson G.M. y Tieng Q., 1998: A reactive state-space model for prediction of urban air pollution. *Environmental Modelling and Software* 13, 239–246.
- Azzi M., Johnson G. y Cope M., 1992: An introduction to the Generic Reaction Set Photochemical Smog Model. *Proceedings of the 11th International Clean Air Conference*, 451-462.
- Chang J.C. y Hanna S.R., 2005: *Technical Descriptions and User’s Guide for the BOOT Statistical Model Evaluation Software Package, Version 2.0.* pp. 64.

- Hess G.D., Carnovale F., Cope M. y Johnson G.M., 1992:** The evaluation of some photochemical smog reaction mechanisms-I. Temperature and initial composition effects. *Atmospheric Environment* 26A, 625–641.
- Hurley P.J., Manins P., Lee S., Boyle R., Ng Y.L. y Dewundegé P., 2003:** Year-long, high-resolution, urban airshed modelling: verification of TAPM predictions of smog and particles in Melbourne, Australia. *Atmospheric Environment* 37, 1899–1910.
- Hurley P.J., Physick W.L. y Luhar A.K., 2005:** TAPM: a practical approach to prognostic meteorological and air pollution modelling. *Environmental Modelling and Software* 20, 737-752.
- Kim C-H., Park S-U. y Song C-K., 2005:** A simple semi-empirical photochemical model for the simulation of ozone concentration in the Seoul metropolitan area in Korea. *Atmospheric Environment* 39, 5597–5607.
- Lashmar M. y Cope M., 1995:** Development of a Photochemical Airshed Model for Sydney, New South Wales, Australia. *Mathematical and Computer Modelling* 21, 9, 85-97.
- Mazzeo N.A., Pineda Rojas A.L. y Venegas L.E., 2010:** Carbon monoxide emitted from the city of Buenos Aires and transported to neighbouring districts. *Latin American Applied Research* 40, 267-273.
- Mazzeo N.A., Venegas L.E. y Choren H., 2005:** Analysis of NO, NO₂, O₃ and NO_x concentrations measured at a green area of Buenos Aires City during wintertime. *Atmospheric Environment* 39, 3055–3068.
- Mazzeo N.A. y Venegas L.E., 1991:** Air pollution model for an urban area. *Atmospheric Research* 26, 165–179.
- McHugh C.A., Carruthers D.J. y Edmunds H.A., 1997:** ADMS-Urban: an air quality management system for traffic, domestic and industrial pollution. *International Journal of Environment and Pollution* 8, 3-6.
- Owen B., Edmunds H.A., Carruthers D.J. y Singles R.J., 2000:** Prediction of total oxides of nitrogen and nitrogen dioxide concentrations in a large urban area using a new generation urban scale dispersion model with integral chemistry model. *Atmospheric Environment* 34, 397-406.
- Pineda Rojas A.L. y Venegas L.E., 2009:** Atmospheric deposition of nitrogen emitted in the Metropolitan Area of Buenos Aires to coastal waters of de la Plata River. *Atmospheric Environment* 43, 1339-1348.
- Pineda Rojas A.L. y Venegas L.E., 2013a:** Upgrade of the DAUMOD atmospheric dispersion model to estimate urban background NO₂ concentrations. *Atmospheric Research* 120-121, 147-154.
- Pineda Rojas A.L. y Venegas L.E., 2013b:** Spatial distribution of ground-level urban background O₃ concentrations in the Metropolitan Area of Buenos Aires, Argentina. *Environmental Pollution* 183, 159-165.
- Pineda Rojas A.L., 2014:** Simple atmospheric dispersion model to estimate hourly ground-level nitrogen dioxide and ozone concentrations at urban scale. *Environmental Modelling & Software* 59, 127-134.
- Venegas L.E. y Mazzeo N.A., 2002:** An evaluation of DAUMOD model in estimating urban background concentrations. *Water, Air and Soil Pollution Focus* 2, 5-6, 433-443.
- Venegas L.E. y Mazzeo N.A., 2006:** Modelling of urban background pollution in Buenos Aires city (Argentina). *Environmental Modelling and Software* 21, 4, 577-586.
- Venegas L.E., Mazzeo N.A. y Pineda Rojas A.L., 2011:** Evaluation of an emission inventory and air pollution in the metropolitan area of Buenos Aires. In: Popovic, D. (Ed.), *Air Quality - Models and Applications*. InTech Pub., Croatia, pp. 261-288.
- Venkatram A., Karamchandani P., Pai P. y Goldstein R., 1994:** The development and application of a simplified ozone modelling system (SOMS). *Atmospheric Environment* 28, 22, 3665-3678.
- Yamartino R.J., Scire J.S., Carmichael G.R. y Chang Y.S., 1992:** The CALGRID mesoscale photochemical grid model-I. Model formulation. *Atmospheric Environment* 26A, 8, 1493-1512.
- Zlatev Z., Christensen J. y Hov Ø., 1992:** An Eulerian air pollution model for Europe with non-linear chemistry. *Journal of Atmospheric Chemistry* 15, 1–37.