# PERFORMANCE ENHANCEMENT OF A REGULATORY MODEL USING BACKGROUND CONCENTRATION AND SIMULATED METEOROLOGICAL INPUTS

**RAHUL CHAURASIA**

**CENTRE FOR ATMOSPHERIC SCIENCES**

**INDIAN INSTITUTE OF TECHNOLOGY DELHI**

**July 2025**

# PERFORMANCE ENHANCEMENT OF A REGULATORY MODEL USING BACKGROUND CONCENTRATION AND SIMULATED METEOROLOGICAL INPUTS

*by*

**RAHUL CHAURASIA**

**Centre for Atmospheric Sciences**

*Submitted*

*in fulfilment of the requirements of the degree of*

**DOCTOR OF PHILOSOPHY**

*to the*

**INDIAN INSTITUTE OF TECHNOLOGY DELHI**

**July 2025**

*Dedicated to*

**My Parents**

*(Smt. Shakuntala Chaurasia &*
*Shri Rajiv Nayan Chaurasia)*

# CERTIFICATE

This is to certify that the thesis entitled "**Performance Enhancement of a Regulatory Model using Background Concentration and Simulated Meteorological Inputs**" being submitted by **Mr. Rahul Chaurasia** to the **Indian Institute of Technology Delhi** for the award of the degree of **Doctor of Philosophy**, is a record of original bonafide work carried out by him. He has worked under my guidance and supervision and has fulfilled the requirements for the submission of this thesis.

The results presented in this thesis have not been submitted in part or full to any other University or Institute for the award of any degree or diploma.

**Professor Manju Mohan, F.N.A.Sc**
Centre for Atmospheric Sciences
Indian Institute of Technology Delhi

# ACKNOWLEDGEMENTS

Although obtaining PhD degree is an academic achievement of an individual. However, one cannot achieve it without the support of their family, teachers, friends, and colleagues. I would like to take this opportunity to extend my sincere gratitude and appreciation to all who supported me during my journey of obtaining the PhD degree. This thesis is dedicated to my beloved mother Mrs Shakuntala Chaurasia, who has tirelessly inspired me to achieve this milestone.

First and foremost, I would like to extend my deepest gratitude to my supervisor, **Prof Manju Mohan**. Her guidance, wisdom, and unwavering support have been instrumental in shaping my research and helping me navigate the complexities of this academic pursuit. Her belief in my abilities and encouragement during challenging times have been invaluable. She constantly kept me focused on achieving my goal.

I am grateful to SRC members, Prof Krishna Achuta Rao, Prof Dilip Ganguly and Prof Mukesh Khare of the Department of Civil Engineering, IIT Delhi for encouraging, guiding and supporting my research work. I also wish to the faculty members of Centre for Atmospheric Sciences (CAS), IIT Delhi, Prof Sagnik Dey and Prof Somnath Baidya Roy, for their constant scientific support, suggestions and providing the necessary resources and support throughout my research.

I would like to thank the Union Grant Commission (UGC-Net) and the Council of Scientific & Industrial Research (CSIR), for providing financial assistance as Junior and Senior Research Fellowship (JRF and SRF) during my research work. I want to acknowledge the High-Performance Computing (HPC) facility at IIT Delhi that was very useful for conducting this study. I also want to thank all the faculty and staff members involved in the administrative work at CAS for their dedication to fostering a conducive research environment that has significantly contributed to the success of my work.

To my colleagues and friends, your camaraderie and intellectual exchange have enriched my experience beyond measure. The discussions, shared challenges, and moments of joy we experienced together have made this journey more fulfilling.

My heartfelt thanks goes to my family, whose unconditional love and unwavering belief in me have been my greatest source of strength. Your sacrifices and support have been a constant source of motivation. To my grandfather (Sri Ram Kishor Chaurasia and Sri Hriday Ram Chaurasia), who never missed a single opportunity to call me, not only to inquire about the progress of my research but also to ask about my health and well-being. Their unwavering love and care have been a profound source of my emotional sustenance, providing me with an abundant reservoir of strength and comfort throughout this journey.

Lastly, to my dear friend and now my life partner, my wife, Akshita Chaudhary, your love, patience, and understanding have been my anchor throughout this journey. You have been there not only in the joyous moments but also in the difficult times, often bearing the brunt of my frustrations and bad days. Your constant support and quiet strength have been a pillar of strength, and I am deeply grateful for your presence in my life. Our shared journey through these challenges has made this achievement as much yours as it is mine.

To all who have contributed to this journey, directly or indirectly, I extend my sincerest thanks.

**Rahul Chaurasia**

# ABSTRACT

Air pollution is one of the major urban problems in both developed and developing countries. The rapid increase in urban population, industrialization, and the exponential growth in vehicular fleets collectively culminate in the emission of gaseous and particulate pollutants into the atmosphere. In order to implement pollution mitigation policies, it is imperative to study the source of emission and its dispersion in the environment, especially in developing countries where monitoring stations are not in sufficient numbers, which are economically burdensome and occasionally impractical. In this context, regulatory atmospheric dispersion models play a vital role in the assessment of ambient air quality. Dispersion modelling offers a solution by being able to estimate the impact of point, line, volume, and area sources on surface air quality in any given airshed, given accurate emission source characteristics, land use, terrain, meteorological data, and a measure of the total atmospheric concentration of the metrics in the model domain. However, previous studies have identified various irregularities in the prediction of pollutants, such as overestimation or underestimation across different scenarios. Many studies have suggested improving the performance of regulatory models for operational use by introducing improvements in various model inputs, including detailed atmospheric chemistry. The objective of this thesis is to improve the performance of the AERMOD model, a widely used time and cost-effective regulatory dispersion model.

Apart from being an important model input, emission inventories are helpful in keeping track of the most significant emission sources, facilitating the identification and prioritization of mitigation strategies, and informing policymakers and stakeholders about trends and patterns in emissions. Thus, an accurate emission inventory is a fundamental component for simulating pollutant dispersion and concentration in regulatory models. Therefore, the first objective of the thesis is to prepare a fine-resolution emission inventory for the study area, ie. Delhi NCT. The emission inventory for the year 2019-2020 has been prepared at a spatial resolution of 1km × 1km using top to bottom approach. The inventory has comprehensively accounted for the most significant sectors contributing to the highest levels of emissions within the study area, e.g., industry, transportation, household and restaurant industries, MSW burning, aircraft emissions, etc. The emission hotspots were detected for Delhi NCT, and the emission inventory was validated using the AERMOD model, whereby the model performance was assessed using various statistical parameters, and the results were found to be satisfactory. The estimated emission data were also compared with various previous studies, which are covered in Chapter 2.

To develop effective regulatory policies, it is necessary to gain a better understanding of the regional background concentrations of pollutants. The models tendency to underestimate pollutants concentration can also be attributed to unaccounted emission sources in the emission inventory. Background Concentration is also defined as the concentration of a pollutant in a given air mass when there is no mixing of impurities due to local anthropogenic sources and natural and anthropogenic sources from outside the air shed. Thus, background concentration apart from being an important model input is also a measure of the minimum pollutant concentration level to which a population is exposed to. In this study the background concentration of the study area is estimated using meteorological filtering and statistical techniques and is covered in chapter 3. The meteorological filtering factored in the phenomena involving stagnation caused by low wind speed and temperature inversion. Whereas spectral analysis and the Kolmogorov-Zurbenko (KZ) filter were used in combination to reduce the influence of synoptic fluctuation in the time series. The estimated background concentrations were compared with the concentration obtained during Covid Lockdown period.

Later in chapter 4, the background concentration estimated using statistical method was validated using WRF Chem model. The chapter also attempts to quantify the pollutants contribution due to long-range transport in a severe pollution event. Long range transport is one of the major contributors to air Pollution in Delhi National Capital region. However, limited attempts have been made to study the characteristic of the long-range transport and its contribution during severe pollution events across the seasons. In this study, the WRF Chem model was used to quantify the contribution of regional transport to severe pollution events across the seasons and estimate the background concentration. This experimental design was used to estimate the background concentration levels for the study region. This determination is a crucial aspect of environmental monitoring and research, as it establishes a baseline level for each ambient pollutant.

Finally, the last working chapter 5 compares the the AERMOD model performance using emission inventory with and without background concentration, with meteorological data prepared using WRF model and with model simulations from WRF-Chem. It was observed that the AERMOD model underpredicted the particulate pollutants and overpredicted the gaseous pollutants in default case (using high resolution emission inventory). The AERMOD model tends to overpredict pollutants under stable atmospheric conditions. Enhancements in boundary layer parameterization could improve performance during these conditions. The model's accuracy improved for particulate pollutants during summer and monsoon seasons when using estimated background concentrations. For gaseous pollutants, performance was somewhat better during monsoons. In the WRF-AERMOD coupled system, the model performed better in winter across all pollutants compared to summer and monsoon months. Using meteorological data from monitoring stations yielded results comparable to those using WRF model forecasts. The default WRF-AERMOD scenario showed promise in overcoming limitations related to unavailable meteorological parameters.

# सारांश

वायु प्रदूषण विकसित और विकासशील दोनों देशों में प्रमुख शहरी समस्याओं में से एक है। शहरी आबादी में तेजी से वृद्धि, औद्योगीकरण, और वाहनों के बेड़े में तेजी से वृद्धि सामूहिक रूप से वायुमंडल में गैसीय और कण प्रदूषकों के उत्सर्जन में परिणत होती है। प्रदूषण शमन नीतियों को लागू करने के लिए, उत्सर्जन के स्रोत और पर्यावरण में इसके फैलाव का अध्ययन करना जरूरी है, खासकर विकासशील देशों में जहां निगरानी स्टेशन पर्याप्त संख्या में नहीं हैं, जो आर्थिक रूप से बोझिल और कभी-कभी अव्यावहारिक हैं। इस संदर्भ में, नियामक वायुमंडलीय फैलाव मॉडल परिवेशी वायु गुणवत्ता के मूल्यांकन में महत्वपूर्ण भूमिका निभाते हैं। फैलाव मॉडलिंग सटीक उत्सर्जन स्रोत विशेषताओं, भूमि उपयोग, इलाके, मौसम संबंधी डेटा और माप के आधार पर किसी भी एयरशेड में सतह की वायु गुणवत्ता पर बिंदु, रेखा, मात्रा और क्षेत्र स्रोतों के प्रभाव का अनुमान लगाने में सक्षम होकर एक समाधान प्रदान करता है। मॉडल डोमेन में मेट्रिक्स की कुल वायुमंडलीय सांद्रता। हालाँकि, पिछले अध्ययनों ने प्रदूषकों के पूर्वानुमान में विभिन्न अनियमितताओं की पहचान की है, जैसे विभिन्न परिदृश्यों में अधिक अनुमान या कम अनुमान। कई अध्ययनों ने विस्तृत वायुमंडलीय रसायन विज्ञान सहित विभिन्न मॉडल इनपुट में सुधार करके परिचालन उपयोग के लिए नियामक मॉडल के प्रदर्शन में सुधार करने का सुझाव दिया है। इस थीसिस का उद्देश्य AERMOD मॉडल के प्रदर्शन में सुधार करना है, जो व्यापक रूप से उपयोग किया जाने वाला समय और लागत प्रभावी नियामक फैलाव मॉडल है।

एक महत्वपूर्ण मॉडल इनपुट होने के अलावा, उत्सर्जन सूची सबसे महत्वपूर्ण उत्सर्जन स्रोतों पर नज़र रखने, शमन रणनीतियों की पहचान और प्राथमिकता को सुविधाजनक बनाने और नीति निर्माताओं और हितधारकों को उत्सर्जन में रुझान और पैटर्न के बारे में सूचित करने में सहायक होती है। इस प्रकार, नियामक मॉडल में प्रदूषक फैलाव और एकाग्रता का अनुकरण करने के लिए एक सटीक उत्सर्जन सूची एक मौलिक घटक है। इसलिए, थीसिस का पहला उद्देश्य अध्ययन क्षेत्र के लिए एक बढ़िया-रिज़ॉल्यूशन उत्सर्जन सूची तैयार करना है, अर्थात। दिल्ली एनसीटी. वर्ष 2019-2020 के लिए उत्सर्जन सूची ऊपर से नीचे दृष्टिकोण का उपयोग करके 1 किमी x 1 किमी के स्थानिक रिज़ॉल्यूशन पर तैयार की गई है। सूची में अध्ययन क्षेत्र के भीतर उत्सर्जन के उच्चतम स्तर में योगदान देने वाले सबसे महत्वपूर्ण क्षेत्रों, जैसे, उद्योग, परिवहन, घरेलू और रेस्तरां उद्योग, एमएसडब्ल्यू दहन, विमान उत्सर्जन, आदि का व्यापक रूप से हिसाब लगाया गया है। उत्सर्जन हॉटस्पॉट का पता दिल्ली एनसीटी के लिए लगाया गया था। और उत्सर्जन सूची को AERMOD मॉडल का उपयोग करके मान्य किया गया था, जिसके तहत विभिन्न सांख्यिकीय मापदंडों का उपयोग करके मॉडल के प्रदर्शन का मूल्यांकन किया गया था, और परिणाम संतोषजनक पाए गए थे। अनुमानित उत्सर्जन डेटा की तुलना विभिन्न पिछले अध्ययनों से भी की गई, जो अध्याय 2 में शामिल हैं।

प्रभावी नियामक नीतियां विकसित करने के लिए, प्रदूषकों की क्षेत्रीय पृष्ठभूमि सांद्रता की बेहतर समझ हासिल करना आवश्यक है। प्रदूषकों की सांद्रता को कम आंकने की मॉडल की प्रवृत्ति को उत्सर्जन सूची में बेहिसाब उत्सर्जन स्रोतों के लिए भी जिम्मेदार ठहराया जा सकता है। पृष्ठभूमि सांद्रता को किसी दिए गए वायु द्रव्यमान में प्रदूषक की सांद्रता

के रूप में भी परिभाषित किया जाता है, जब स्थानीय मानवजनित स्रोतों और वायु शेड के बाहर से प्राकृतिक और मानवजनित स्रोतों के कारण अशुद्धियों का कोई मिश्रण नहीं होता है। इस प्रकार, पृष्ठभूमि सांद्रता एक महत्वपूर्ण मॉडल इनपुट होने के अलावा न्यूनतम प्रदूषक सांद्रता स्तर का एक माप भी है जिसके संपर्क में कोई आबादी आती है। इस अध्ययन में अध्ययन क्षेत्र की पृष्ठभूमि सांद्रता का अनुमान मौसम संबंधी फ़िल्टरिंग और सांख्यिकीय तकनीकों का उपयोग करके लगाया गया है और इसे अध्याय 3 में शामिल किया गया है। मौसम संबंधी फ़िल्टरिंग कम हवा की गति और तापमान उलटाव के कारण होने वाले ठहराव से जुड़ी घटनाओं में शामिल है। जबकि समय श्रृंखला में सिनॉप्टिक उतार-चढ़ाव के प्रभाव को कम करने के लिए वर्णक्रमीय विश्लेषण और कोलमोगोरोव-ज़ुर्बेंको (KZ) फ़िल्टर का संयोजन में उपयोग किया गया था। अनुमानित पृष्ठभूमि सांद्रता की तुलना कोविड लॉकडाउन अवधि के दौरान प्राप्त एकाग्रता से की गई।

बाद में अध्याय 4 में, सांख्यिकीय पद्धति का उपयोग करके अनुमानित पृष्ठभूमि एकाग्रता को डब्ल्यूआरएफ केम मॉडल का उपयोग करके मान्य किया गया था। अध्याय किसी गंभीर प्रदूषण घटना में लंबी दूरी के परिवहन के कारण प्रदूषकों के योगदान को मापने का भी प्रयास करता है। लंबी दूरी का परिवहन दिल्ली राष्ट्रीय राजधानी क्षेत्र में वायु प्रदूषण के प्रमुख योगदानकर्ताओं में से एक है। हालाँकि, लंबी दूरी के परिवहन की विशेषता और सभी मौसमों में गंभीर प्रदूषण की घटनाओं के दौरान इसके योगदान का अध्ययन करने के सीमित प्रयास किए गए हैं। इस अध्ययन में, डब्ल्यूआरएफ केम मॉडल का उपयोग सभी मौसमों में गंभीर प्रदूषण की घटनाओं में क्षेत्रीय परिवहन के योगदान को मापने और पृष्ठभूमि एकाग्रता का अनुमान लगाने के लिए किया गया था।

इस प्रायोगिक डिज़ाइन का उपयोग अध्ययन क्षेत्र के लिए पृष्ठभूमि एकाग्रता स्तर का अनुमान लगाने के लिए किया गया था। यह निर्धारण पर्यावरण निगरानी और अनुसंधान का एक महत्वपूर्ण पहलू है, क्योंकि यह प्रत्येक परिवेश प्रदूषक के लिए एक आधारभूत स्तर स्थापित करता है।

अंत में, अंतिम कामकाजी अध्याय 5 पृष्ठभूमि एकाग्रता के साथ और बिना उत्सर्जन सूची का उपयोग करते हुए, डब्ल्यूआरएफ मॉडल का उपयोग करके तैयार किए गए मौसम संबंधी डेटा और डब्ल्यूआरएफ-केम से मॉडल सिमुलेशन के साथ एईआरएमओडी मॉडल के प्रदर्शन की तुलना करता है। यह देखा गया कि AERMOD मॉडल ने कण प्रदूषकों का कम अनुमान लगाया और डिफ़ॉल्ट मामले में (उच्च रिज़ॉल्यूशन उत्सर्जन सूची का उपयोग करके) गैसीय प्रदूषकों का अधिक अनुमान लगाया। AERMOD मॉडल स्थिर वायुमंडलीय परिस्थितियों में प्रदूषकों की अधिक भविष्यवाणी करता है। सीमा परत मानकीकरण में संवर्द्धन से इन स्थितियों के दौरान प्रदर्शन में सुधार हो सकता है। अनुमानित पृष्ठभूमि सांद्रता का उपयोग करते समय गर्मी और मानसून के मौसम के दौरान कण प्रदूषकों के लिए मॉडल की सटीकता में सुधार हुआ। गैसीय प्रदूषकों के लिए, मानसून के दौरान प्रदर्शन कुछ हद तक बेहतर था। WRF-AERMOD युग्मित प्रणाली में, मॉडल ने गर्मी और मानसून के महीनों की तुलना में सर्दियों में सभी प्रदूषकों में बेहतर प्रदर्शन किया। निगरानी स्टेशनों से मौसम संबंधी डेटा का उपयोग करने से डब्ल्यूआरएफ मॉडल पूर्वानुमानों का उपयोग करने वाले परिणामों की तुलना की जा सकती है। डिफ़ॉल्ट WRF-AERMOD परिदृश्य ने अनुपलब्ध मौसम संबंधी मापदंडों से संबंधित सीमाओं पर काबू पाने का वादा दिखाया।

# TABLES OF CONTENTS

# LIST OF FIGURES

# LIST OF TABLES

# LIST OF ABBREVIATIONS

AAI : Airports Authority of India

AERMOD : American Meteorological Society-Environmental Protection Agency Regulatory Model

ARAI : Automotive Research Association of India

BC : Background Concentration

BSIV : Bharat Stage IV

CAGR : Compound Annual Growth Rate

CNG : Compressed Natural Gas

CO : Carbon Monoxide

CPCB : Central Pollution Control Board

CRB : Crop Residue Burning

EF : Emission Factor

FB : Fractional Bias

HCV : Heavy Commercial Vehicle

HSDO : High Speed Diesel Oil

IMD : Indian Meteorological Department

IOA : Index of Agreement

ISBT : Inter State Border Transport

ISCST3 : Industrial Source Complex Short Term Model 3

KZ filter : Kolmogorov-Zurbenco Filter

LCV : Light Commercial Vehicle

LDO : Light Diesel Oil

LPG : Liquified Petroleum Gas

LRT : Long Range Transport

LTO : Landing and Take off Cycle

MSW : Municipal Solid Waste

MYJ : Mellor-Yemada-Janic scheme

NCR : National Capital Region

NCT : National Capital Territory

NMSE : Normalised Mean Square Error

$NO_2$ : Nitrogen dioxide

$NO_3^-$ : Nitrates

NRMSE : Normalized Root Mean Square Error

$O_3$ : Ozone

PM : Particulate Matters

r : Correlation Coefficient

RT : Regional Transport

RMSE : Root Mean Squared Error

$SO_2$ : Sulphur dioxide

USEPA : US Environmental Protection Agency

WHO : World Health Organisation

YSU : The Yonsai University Sche