



Thèse de doctorat de l'Université Paris-Est

Présentée par

Régis Briant

pour l'obtention du diplôme de docteur
de l'Université Paris-Est

Spécialité : SIE - Sciences, Ingénierie et Environnement

Modélisation multi-échelles de l'impact du trafic routier sur la qualité de l'air

Jury composé de

P ^r émérite Robert Rosset	Laboratoire d'Aérodologie O.M.P.	président du jury & rapporteur
P ^r Akula Venkatram	University of California at Riverside	rapporteur
D ^r Lionel Soulhac	École Centrale de Lyon	examinateur
D ^r Irène Korsakissok	IRSN	examinatrice
P ^r Christian Seigneur	École des Ponts ParisTech, CEREAs	directeur de thèse

Remerciements

Je tiens à remercier tout d'abord mon directeur de thèse, Christian Seigneur, pour l'aide et le soutien qu'il m'a apportés durant ma thèse. Sa grande disponibilité et ses idées toujours pertinentes m'ont permis d'avancer sereinement tout au long de ma thèse.

Je tiens à remercier également les membres de mon jury, Robert Rosset, Akula Venkatram et Lionel Soulhac. Et plus particulièrement Irène Korsakissok, que je remercie aussi pour avoir co-dirigé mon stage de fin d'école d'ingénieur. Ce stage m'a ensuite permis de débiter cette thèse.

Je remercie les membres des différents CETE avec qui j'ai collaboré notamment Marie Gadrat et Christine Bugajny du CETE Nord Picardie.

Un grand merci à tous mes collègues pour les moments passés ensemble au CEREÀ lors de pauses café inoubliables. Mais aussi en dehors, autour d'un verre, lors de soirées, et autres excursions à vélo. Je leur suis par ailleurs reconnaissant pour l'aide qu'ils ont pu m'apporter tout au long de ma thèse. Je pense tout d'abord à Jérôme Drevêt et Nora Duhanyan arrivés juste après moi au CEREÀ. Puis à ceux qui ont soutenu leur thèse en même temps que moi, Antoine Waked, Florian Couvidat, Hilel Dergaoui et Mohammad Reza Koohkan. À ceux dont le tour viendra bientôt et à qui je souhaite bon courage, Eve Lecoœur, Nicolas Cherin, Yiguo Wang, Massoud Fallah Shorshani, Victor Winiarek, Stéphanie Deschamps et Vincent Loizeau. Et à tous les autres notamment, Yelva Roustan avec qui j'ai partagé un bureau, Laetitia Girault, Pierre Tran, Nicolas Yan, Giuliana Becerra, Youngseob Kim, Karine Sartelet, Sylvain Doré...

Je remercie également Ali Mezdoor, dont j'ai eu le plaisir de co-encadrer le stage de master, venu assister à ma soutenance.

Enfin, un grand merci à ma famille, particulièrement à mes parents qui ont fait le déplacement pour ma soutenance et à Aurélie qui m'a soutenu durant ma thèse.

Table des matières

1	Introduction	6
1.1	Modélisation de la dispersion atmosphérique	7
1.2	Modèles de chimie-transport (CTM, "Chemical-Transport Model")	8
1.3	Modèles à l'échelle locale	10
1.3.1	Modèles de mécanique des fluides numériques (CFD, "Computational Fluid Dynamics")	10
1.3.2	Modèles gaussiens	10
	(i) Source ponctuelle instantanée	12
	(ii) Source linéique instantanée	14
	(iii) Source ponctuelle continue	14
	(iv) Source linéique continue	15
1.3.3	Modèles lagrangiens à particules	16
1.3.4	Modèles de rue-canyon paramétrisés	17
1.4	Modélisation multi-échelles	18
1.4.1	Couplage off-line	18
1.4.2	Panache sous-maille stationnaire	18
1.4.3	Panache sous-maille à bouffées	19
1.4.4	Autres formulations de traitements sous-maille	19
1.4.5	Formulation utilisée dans la thèse	20
1.5	Conclusion et plan de la thèse	20
I	Modèle de panache gaussien pour sources linéiques	22
2	Modélisation de la dispersion atmosphérique de polluants issus du trafic routier	23
2.1	Abstract	26
2.2	Introduction	26
2.3	Gaussian plume formulations for line sources	27
2.4	Development of the improved line source formula	29
2.4.1	Simulation set-up	29
2.4.2	The reference solution	29
2.4.3	The model error	30
2.4.4	Correction downwind of the line source section	30
2.4.5	Correction downwind of the extremities of the line source section	31
2.4.6	Line source / discretized source combination	33
2.4.7	Overall formulation of the line source model	34

2.5	Results	34
2.5.1	Comparison of the line source models	34
2.5.2	Sensitivity	35
	(i) Different stability classes	35
	(ii) Emission height	36
2.5.3	Computational times	37
2.5.4	Comparison with near-road measurements	40
2.6	Conclusion	41
3	Évaluation du modèle de panache gaussien avec une campagne de mesure à grande échelle	42
3.1	Abstract	45
3.2	Introduction	45
3.3	Description of gaussian plume models	46
3.3.1	Line source formulation	46
3.3.2	The Horst-Venkatram formulation	46
3.3.3	The Polyphemus line source model	47
3.3.4	The Atmospheric Dispersion Modeling System (ADMS-Urban)	48
3.4	Case study	48
3.4.1	Simulation set-up	48
3.4.2	General results	50
3.4.3	Comparison to ADMS-Urban	51
3.4.4	Comparison to the HV formulation	52
3.4.5	Computational time	53
3.4.6	Sensitivity to input data	55
3.5	Conclusion	57
3.6	Acknowledgments	59
3.7	Supplementary Material	59
3.7.1	General results	59
3.7.2	Comparison to the HV formulation	61
3.7.3	Sensitivity to input data	63
II	Modèle de panache sous-maille	64
4	Modélisation multi-échelles de l'impact du trafic routier : développement et évaluation d'un modèle de panache sous-maille	65
4.1	Abstract	69
4.2	Introduction	69
4.3	Model description	70
4.3.1	Eulerian model	71
4.3.2	Gaussian plume model	71
4.3.3	Coupling of Polair3D and the Gaussian plume model	71
	(i) Overview	71
	(ii) Transfer of pollutants from the Gaussian model to the Eulerian model	74
	(iii) Parallelization	76
	(iv) Chemistry	76

(v) Gaussian and Eulerian time steps	78
4.4 Evaluation of the PinG model on a case study	78
4.4.1 Model set-up	78
4.4.2 Simulations using the three-reaction NO ₂ mechanism	80
4.4.3 Nine-reaction OH chemical scheme	83
4.5 Sensitivity studies	85
4.5.1 Sensitivity to distance D1	85
4.5.2 Sensitivity to the Gaussian time step	86
4.5.3 Comparison of PinG model simulations using puffs and line source Gaussian plumes	88
4.5.4 Computational time requirements	90
4.6 Conclusion	92
4.7 Acknowledgments	93
4.8 Supplementary Material	94
4.8.1 Concentration maps of selected VOC simulated with the nine-reactions chemical scheme for the Gaussian model.	94
5 Conclusion et perspectives	102
5.1 Conclusion	102
5.2 Perspectives	103
A Briggs coefficients	114
B Correction coefficients with a 1° resolution	115
C Performance indicators	133

Chapitre 1

Introduction

Sommaire

1.1	Modélisation de la dispersion atmosphérique	7
1.2	Modèles de chimie-transport (CTM, "Chemical-Transport Model")	8
1.3	Modèles à l'échelle locale	10
1.3.1	Modèles de mécanique des fluides numériques (CFD, "Computational Fluid Dynamics")	10
1.3.2	Modèles gaussiens	10
	(i) Source ponctuelle instantanée	12
	(ii) Source linéique instantanée	14
	(iii) Source ponctuelle continue	14
	(iv) Source linéique continue	15
1.3.3	Modèles lagrangiens à particules	16
1.3.4	Modèles de rue-canyon paramétrisés	17
1.4	Modélisation multi-échelles	18
1.4.1	Couplage off-line	18
1.4.2	Panache sous-maille stationnaire	18
1.4.3	Panache sous-maille à bouffées	19
1.4.4	Autres formulations de traitements sous-maille	19
1.4.5	Formulation utilisée dans la thèse	20
1.5	Conclusion et plan de la thèse	20

Ce chapitre s'inspire en partie de Sportisse [2007]; Korsakissok [2009]; Seinfeld et Pandis [1998] et Karamchandani *et al.* [2011].

1.1 Modélisation de la dispersion atmosphérique

La modélisation de la pollution atmosphérique est importante pour l'amélioration de la qualité de l'air car elle permet de simuler l'impact de nouvelles émissions (études d'impact) et l'effet de réduction ou d'augmentation des émissions de certaines sources (études de prospective). Par ailleurs, elle est utilisée pour la prévision de la qualité de l'air et la cartographie des concentrations de certains polluants. La prévision de la qualité de l'air est un enjeu important, notamment pour les personnes ayant des problèmes respiratoires, car elle permet de les prévenir lors de pics de pollution. En cas de rejet de polluant dans l'atmosphère, qu'il soit accidentel ou naturel, il est important de connaître les régions vers lesquels les polluants seront transportés afin que les populations puissent y être protégées si nécessaire. On pensera par exemple aux accidents nucléaires survenus à Tchernobyl en Ukraine et Fukushima au Japon ou encore à la récente éruption du volcan Eyjafjallajökull en Islande. La cartographie de la pollution est utilisée par exemple pour l'information du public et pour des études d'exposition de la population ou d'épidémiologie. Les applications sont donc variées, la liste ci-dessus étant bien entendu non exhaustive ; il convient donc de pouvoir disposer de modèles performants. La modélisation est nécessaire en raison du grand nombre de processus physico-chimiques qui sont divers et complexes. Nous nous intéresserons ici plus particulièrement aux différents modèles utilisés pour modéliser la dispersion de polluants dans l'atmosphère et, dans une moindre mesure, leurs transformations et dépôts.

De nombreux types de modèles faisant appel à des techniques de modélisation diverses ont été développés. Chacun de ces modèles est généralement adapté à des échelles spatiales bien définies, qu'elles soient locale (quelques dizaines de kilomètres environ), régionale (quelques centaines de kilomètres environ), continentale (quelques milliers de kilomètres environ) ou même globale. Le choix du modèle à utiliser dépendra donc de l'échelle spatiale à modéliser mais aussi des ressources informatiques disponibles pour le mettre en oeuvre ou encore de la résolution des données d'entrée (e.g., émissions, météorologie). Par exemple les modèles de dispersion gaussiens font l'hypothèse de données d'entrée uniformes spatialement ce qui est réaliste à petite échelle mais ne l'est plus à l'échelle d'une région ou d'un continent. À l'inverse, les modèles de chimie-transport sont fondés sur une approche eulérienne et supposent des émissions moyennées sur chaque maille (généralement plusieurs km^2). Ceci est légitime si l'on considère un domaine de plusieurs dizaines ou centaines de kilomètres mais ne l'est plus à l'échelle locale. En effet, chaque type de modèle a des spécificités qui lui sont propres qu'il faut prendre en compte. Ainsi plus l'échelle spatiale sera fine, plus les données d'entrées devront l'être aussi.

Il convient aussi de choisir un modèle en fonction des phénomènes que l'on souhaite modéliser avec plus de précision. Par exemple, si l'on souhaite estimer l'impact des rejets d'une source sur les populations alentour, un modèle local pourra convenir. Si l'on souhaite estimer la contribution de cette source à la pollution de fond dans la région, un modèle de chimie-transport à maille eulérienne sur une échelle régionale sera plus adapté. De plus, la plupart des modèles eulériens sont couplés avec des modèles de chimie et peuvent supporter des schémas chimiques complexes. Cependant, la dilution initiale des émissions aura pour effet de réduire les concentrations près des sources et de donner des valeurs de concentrations non nulles en amont des sources à cause de la diffusion numérique. Ces erreurs locales dans les concentrations sont transmises dans les réactions chimiques et peuvent mener à des différences significatives pour les concentrations régionales de certains polluants. Pour pallier ces limitations de résolution spatiale, il existe des modèles dit sous-maillages, qui permettent l'utilisation d'un modèle local en sous-maille d'un modèle eulérien. Le but est donc de mieux représenter, dans une simulation eulérienne, certains

des processus physiques se produisant à une échelle spatiale inférieure à la taille d'une maille. Le modèle local est lui aussi influencé par le modèle eulérien. Grâce à une meilleure modélisation de la dispersion initiale, ce type de modèle permet de simuler à la fois l'impact de la source sur la pollution de fond ainsi que l'impact local pour les populations alentour.

Après avoir introduit les bases des modèles de chimie-transport dans la section 1.2, les modèles couramment utilisés pour la dispersion de polluants à l'échelle locale sont présentés dans la section section 1.3. Enfin, la section 1.4 présente les modèles sous-maille qui ont déjà été développés. Il ne s'agit pas ici de décrire en détails tous les modèles existants, mais de présenter certains des plus couramment utilisés à titre d'exemple. Seuls les processus de dispersion sont décrits ci-après. Ces modèles sont souvent associés à d'autres modèles ou paramétrisation permettant de prendre en compte les autres processus pouvant influencer sur les concentrations en polluants, qui ne sont pas détaillés dans ce chapitre (e.g., chimie, dépôts secs, lessivage par les précipitations).

1.2 Modèles de chimie-transport (CTM, "Chemical-Transport Model")

Les modèles de chimie-transport (CTM, "Chemical-Transport Model") sont couramment utilisés pour des simulations à échelles régionale et continentale, la résolution spatiale horizontale pouvant descendre jusqu'à un ou quelques kilomètres. Ils adoptent une approche eulérienne pour résoudre l'équation de chimie-transport sur un maillage tridimensionnel. Le maillage peut être simple, comme une grille régulière, ou plus complexe, si l'on souhaite un maillage plus raffiné à certains endroits d'intérêt.

L'équation de transport pour des champs tridimensionnels de concentration \tilde{C} et de vent \tilde{V} , peut s'écrire :

$$\frac{\partial \tilde{C}}{\partial t} = -\text{div}(\tilde{V}\tilde{C}) \quad (1.1)$$

où le terme $\frac{\partial \tilde{C}}{\partial t}$ représente la variation du champ de concentration au cours du temps et le terme $-\text{div}(\tilde{V}\tilde{C})$ le transport des polluants.

Si l'on considère une infinité de réalisations, du fait de l'aléa dû au vent, les résultats ne seront pas identiques d'une réalisation à l'autre. Si l'on considère que les champs de vent et de concentration peuvent être représentés sous la forme d'une somme d'un terme moyen X et d'un terme de perturbation X' de moyenne nulle et en moyennant ensuite l'équation 1.1 sur l'ensemble des réalisations on obtient :

$$\frac{\partial \overline{C}}{\partial t} + \underbrace{\frac{\partial \overline{C'}}{\partial t}}_{=0} = \underbrace{-\text{div}(\overline{VC})}_{\text{advection}} - \underbrace{\text{div}(\overline{VC'})}_{=0} - \underbrace{\text{div}(\overline{V'C})}_{=0} - \underbrace{\text{div}(\overline{V'C'})}_{\text{turbulence}} \quad (1.2)$$

Le nombre d'inconnues étant supérieur au nombre d'équations, l'équation 1.2 n'est pas fermée. Le terme $\text{div}(\overline{V'C'})$ représente le terme de diffusion turbulente. En utilisant la théorie

K, on peut l'exprimer par analogie à la loi de Fick pour la diffusion moléculaire sous la forme suivante :

$$\overline{V'C'} = -\rho K \nabla \frac{C}{\rho} \quad (1.3)$$

avec ρ la densité de l'air et K la matrice de diffusion turbulente, souvent assimilée à une matrice diagonale (i.e., les termes croisés de la diffusion turbulente sont considérés comme négligeables). Les réactions chimiques entre les polluants peuvent être modélisés dans l'équation de transport par un terme, noté $\chi_i(C)$, associé aux pertes et aux productions pour chaque espèce i . On note C_i , la concentration de l'espèce chimique i . De plus, un terme S_i et un terme P_i modélisant respectivement les sources (émissions) et les processus de pertes (lessivage ou dépôt sec par exemple) peuvent être ajoutés à l'équation. L'équation générale de chimie-transport est alors donnée par l'équation 1.4.

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -\text{div}(VC_i) + \text{div}\left(\rho K \nabla \frac{C_i}{\rho}\right) + \chi_i(C_i) + S_i + P_i \quad (1.4)$$

Afin de résoudre cette équation, des champs de conditions aux limites (latérales, en haut du domaine et en bas du domaine) et initiales sont nécessaires et feront parties des données d'entrée du modèle. Le choix de la résolution spatiale et de la taille du domaine est déterminant. En effet, les processus ayant une échelle caractéristique inférieure à la taille d'une maille ou ayant une durée caractéristique inférieure au pas de temps seront par définition moyennés, il convient donc de choisir une résolution spatiale et temporelle suffisamment fine au regard de l'application voulue. D'un autre côté, les ressources de calcul nécessaires augmenteront avec le nombre de mailles du domaine et le nombre de pas de temps à simuler, imposant de fait une limitation de la taille du domaine et du pas de temps. De plus, afin d'assurer la stabilité de l'intégration numérique, le schéma d'intégration choisi pourra imposer des contraintes supplémentaires sur les résolutions spatiale et temporelle. Par exemple, la plupart des schémas numériques requièrent que la condition de stabilité de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) soit vérifiée. Cette condition (Équation 1.5) lie le pas de discrétisation spatiale et le pas de temps et assure donc une certaine cohérence entre les deux échelles en évitant d'avoir un pas de temps très long avec une discrétisation spatiale fine.

$$V \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (1.5)$$

Les modèles de chimie-transport sont très utilisés pour faire de la prévision ou encore des études d'impacts. Les modèles de climat utilisent aussi ce type d'approche en les couplant à un modèle de météo (couplage on-line). Le modèle Polair3D [Boutahar *et al.*, 2004; Sartelet *et al.*, 2007] de la plate-forme de modélisation Polyphemus [Mallet *et al.*, 2007] a été utilisé dans cette thèse (Chapitre 4). Les modèles CHIMERE [Bessagnet *et al.*, 2009], WRF-Chem [Grell *et al.*, 2005] et CMAQ [Byun et Ching, 1999] sont quelques autres exemples de modèles de chimie-transport. Une liste plus complète de modèles de qualité de l'air utilisés pour la prévision est fournie par Zhang *et al.* [2012].

1.3 Modèles à l'échelle locale

Lorsque l'on modélise la dispersion de polluants à petite échelle (inférieure à quelques kilomètres), les modèles de chimie-transport ne sont pas adaptés car ils requerreraient une résolution très fine pour tous les champs d'entrée ce qui n'est pas toujours possible. Quelques types de modèles utilisés pour des échelles locales sont présentés ici.

1.3.1 Modèles de mécanique des fluides numériques (CFD, "Computational Fluid Dynamics")

Les modèles de mécanique des fluides numériques, dits de CFD (Computational Fluid Dynamics) sont basés sur la résolution des équations de Navier-Stokes de la mécanique des fluides pour les écoulements turbulents. Ces modèles sont précis mais, en contrepartie, très coûteux en terme de temps de calcul. Ils sont donc principalement utilisés à de petites échelles. Il existe principalement 3 types de modèles de CFD :

- Les modèles de simulation numérique directe résolvent les équations de Navier-Stokes (DNS, Direct Navier-Stokes) pour toutes les échelles du mouvement.
- Les modèles de simulation des grandes échelles (LES, Large Eddy Simulation) résolvent explicitement la turbulence pour les plus grande échelles du mouvement mais utilisent des modèles simplifiés pour les plus petites échelles.
- Les modèles RANS (Reynolds Average Navier Stokes) modélisent les valeurs moyennes de l'écoulement en utilisant un modèle de fermeture pour calculer la turbulence.

L'approche DNS étant la plus précise, elle est aussi la plus coûteuse en terme de ressources informatiques. C'est pourquoi elle est jusqu'à présent réservée aux très petites échelles. L'approche LES est moins coûteuse que l'approche DNS tout en étant plus précise que l'approche RANS. L'approche RANS est la moins coûteuse et est donc aussi la plus utilisée [Milliez, 2006]. Le modèle Code-Saturne [Archambeau *et al.*, 2003] est un exemple de modèle de mécanique des fluides qui à une version atmosphérique [Milliez et Carissimo, 2007].

1.3.2 Modèles gaussiens

Les modèles gaussiens sont fondés sur l'hypothèse que la dispersion atmosphérique d'un panache issu d'une source ponctuelle peut être représentée par une distribution gaussienne des concentrations. Cette hypothèse a des bases théoriques (voir ci-dessous) et est en partie confirmée par des données expérimentales. Il convient cependant de noter que si la formulation gaussienne est une solution analytique de l'équation de dispersion atmosphérique (avec certaines hypothèses), elle n'est pas stricto sensu physiquement réaliste puisqu'elle donne des valeurs de concentrations non nulles à des distances approchant l'infini, alors qu'il n'est pas possible pour un polluant d'être transporté instantanément à de très grandes distances ; ces valeurs sont bien sûr très faibles et sans conséquence sur les champs de concentration si l'on s'intéresse à la gamme de valeurs correspondant aux applications atmosphériques. Par ailleurs, si beaucoup de données expérimentales suggèrent des profils de concentrations gaussiens, il existe des conditions météorologiques pour lesquelles de tels profils ne sont pas observés. Par exemple, la dispersion horizontale dans le cas où un fort cisaillement de vent a lieu dans la couche limite de l'atmosphère (spirale d'Ekman) ne sera pas gaussienne. Aussi, la dispersion ne mène pas à un profil gaussien dans la direction verticale pour des conditions convectives dans la mesure où les mouvements d'air ascendants ont lieu dans des zones plus limitées spatialement que les mouvements d'air descendants qui couvrent des zones plus étendues. Néanmoins, la formulation gaussienne

offre l'avantage d'être une bonne approximation pour un grand nombre de cas de conditions météorologiques et elle a été largement utilisée dans les modèles de dispersion atmosphérique à l'échelle locale.

La formulation gaussienne peut s'appliquer à des rejets instantanés (modèle à bouffées) et à des rejets continus (modèle de panache). Le modèle de panache peut être vu comme le cas limite d'une succession de rejets instantanés infiniment proches les uns des autres ; l'ensemble des bouffées constitue alors le panache (Figure 1.1). Ainsi, on peut discrétiser un rejet continu en une série de rejets instantanés ; le panache est alors représenté par un nombre limité de bouffées (plus le pas de temps entre deux rejets instantanés est court, plus le nombre de bouffées représentant le panache est grand). L'avantage d'un modèle à bouffées est que chaque bouffée peut être transportée par un champ de vent moyen tridimensionnel qui évolue en fonction du temps. Le panache constitué par ces bouffées n'est donc pas forcément rectiligne et peut représenter les changements de direction du vent dans l'espace et le temps. En revanche, un modèle de panache fait l'hypothèse de conditions météorologiques stationnaires et est rectiligne. Une mise à jour (généralement horaire) est effectuée pour refléter l'évolution des conditions météorologiques en fonction du temps. Les modèles gaussiens à bouffées incluent par exemple SCICHEM [Karamchandani *et al.*, 2000] et Polyphemus [Korsakissok et Mallet, 2009]. Les modèles gaussiens de panache incluent par exemple CALINE [Benson, 1992], ADMS [McHugh *et al.*, 2001], Polyphemus ou encore AERMOD [Cimorelli *et al.*, 2005].

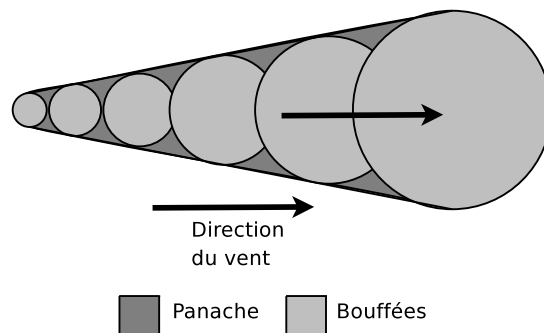


FIGURE 1.1 – Schéma de panache et de bouffées.

Pour simplifier, nous supposons ici des bouffées et panaches émis passivement et sans processus de perte. Les termes de réflexion par le sol et par le haut de la couche limite (inversion thermique) sont aussi négligés dans toutes les équations suivantes (ils sont pris en compte dans les modèles). Les modèles gaussiens font l'hypothèse que les conditions météorologiques sont uniformes spatialement ce qui est réaliste dans la mesure où les modèles gaussiens sont des modèles utilisés à l'échelle locale.

Au vu de ces hypothèses, l'équation 1.4 peut être simplifiée par l'équation 1.6.

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\text{div}(VC) + \text{div}\left(\rho K \nabla \frac{C}{\rho}\right) + S \quad (1.6)$$

où C et V sont des champs tridimensionnels de concentration et de vent et où K est la matrice de diffusion turbulente supposée diagonale :

$$K = \begin{pmatrix} K_x & 0 & 0 \\ 0 & K_y & 0 \\ 0 & 0 & K_z \end{pmatrix}$$

Pour un vent constant et homogène u orienté suivant l'axe x , l'équation précédente nous donne :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u \frac{\partial C}{\partial x} + K_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + K_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + S \quad (1.7)$$

Résoudre analytiquement l'équation 1.7 est possible en faisant des hypothèses sur la source (e.g. géométrie, localisation, intensité). Supposons tout d'abord une source ponctuelle unique et instantanée.

(i) Source ponctuelle instantanée

La quantité de matière totale émise, notée Q est émise en un seul point (coordonnées (x_s, y_s, z_s) par exemple) et est relâchée instantanément à $t = 0$. On a donc la condition initiale :

$$C(x, y, z, 0) = Q \delta(x - x_s) \delta(y - y_s) \delta(z - z_s)$$

et la condition aux limites :

$$C(x, y, z, t) = 0, \quad \text{pour } x, y, z \rightarrow \pm\infty$$

Du fait de la symétrie sphérique du problème, on obtient une solution du type :

$$C(x, y, z, t) = \frac{Q}{8(\pi t)^{\frac{3}{2}} \sqrt{K_x K_y K_z}} \exp\left(-\frac{(x - x_s - ut)^2}{4K_x t} - \frac{(y - y_s)^2}{4K_y t} - \frac{(z - z_s)^2}{4K_z t}\right) \quad (1.8)$$

avec : $Q = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} C \, dx dy dz$ la masse totale de matière dans la bouffée. Les paramètres K_i sont généralement calculés par des méthodes empiriques. Les écarts-types de la distribution gaussienne sont définis par : $\sigma_i = \sqrt{2K_i t}$ avec $i \in \{x, y, z\}$. Ils évoluent donc d'après cette formulation en fonction de la racine carré du temps (ou de la distance pour un vent constant) depuis l'émission.

Il convient cependant de noter que cette formulation qui est déduite de la représentation eulérienne de la dispersion atmosphérique fait l'hypothèse implicite que toutes les échelles spatiales de la turbulence affectent la dispersion de la bouffée. Or, près de la source, seuls les tourbillons de taille plus petite que celle de la bouffée vont la disperser ; les autres tourbillons vont seulement la déplacer de façon aléatoire. Au fur et à mesure que la bouffée croît en taille, davantage de tourbillons peuvent participer à la dispersion de cette bouffée et ses déplacements dus aux autres tourbillons plus grands en taille deviennent moindre (voir Figure 1.2). Quand la taille de la bouffée recouvre la grande majorité du spectre des tourbillons représentant la turbulence atmosphérique, l'équation 1.8 s'applique. Pour la période transitoire entre l'émission et le moment où l'équation 1.8 peut être utilisée, il convient d'utiliser une formulation lagrangienne de la dispersion atmosphérique.

La formulation lagrangienne est fondée sur l'évolution statistique de la distance entre deux éléments émis par la même source [Csanady, 1973]. Le théorème de Taylor [Taylor, 1922] donne la distribution d'éléments lors d'un processus de dispersion stationnaire :

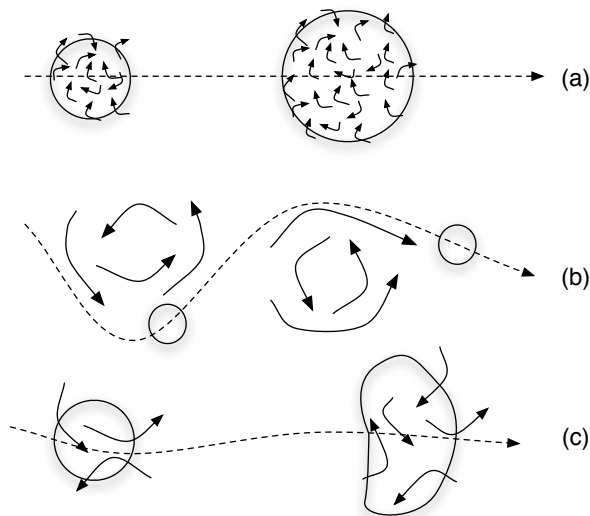


FIGURE 1.2 – Dispersion d’une bouffée de polluants, dans trois situations : (a) la taille caractéristique des tourbillons est beaucoup plus petite que celle de la bouffée, (b) la taille caractéristique des tourbillons est beaucoup plus grande que celle de la bouffée, et (c) les tailles caractéristiques des tourbillons et de la bouffée sont comparables. (Crédit : [Korsakissok, 2009], d’après [Seinfeld et Pandis, 1998]).

$$\sigma_y = 2\overline{u^2} \int_0^t (t - \tau) R(\tau) d\tau \quad (1.9)$$

où R est la fonction de corrélation Lagrangienne pour une turbulence homogène et stationnaire et ne contenant pas de mouvements périodiques organisés. Cette fonction n’a jusqu’alors pas été explicité théoriquement avec succès. Une solution acceptable, au vu des hypothèses considérées ici, est d’approximer les valeurs successives de la vitesse des éléments dispersés par un processus de Markov. La fonction R est alors une fonction exponentielle décroissante :

$$R(\tau) = \exp\left(-\frac{\tau}{t_L}\right) \quad (1.10)$$

avec t_L l’échelle de temps lagrangienne. Lorsque $t \rightarrow 0$, on a $R(\tau) \rightarrow 1$ et l’équation 1.9 mène donc à un écart-type $\sigma = 2\overline{u^2}t$, proportionnel au temps (ou de la distance pour un vent constant) écoulé depuis l’émission. La croissance de la bouffée est donc plus rapide près de la source, ce qui correspond au fait que davantage de tourbillons participent à cette croissance au fur et à mesure qu’elle croit.

Ces deux formulations, eulérienne et lagrangienne, s’appliquent pour des cas limites (loin de la source et près de la source, respectivement) et l’évolution des écarts-types dans le régime transitoire est complexe. Des représentations empiriques sont donc utilisées, qui proviennent de données expérimentales obtenues en aval des sources. Dans la suite de la thèse, la paramétrisation de Briggs a été utilisée [Briggs, 1973], dans laquelle le coefficient de dispersion horizontal σ_y est proportionnel à x , la distance entre le récepteur et la source, pour des récepteurs proches de la

source, et est proportionnel à \sqrt{x} pour des récepteurs situés loin de la source. Les coefficients de la paramétrisation de Briggs sont donnés en Annexe A.

(ii) Source linéique instantanée

Afin de modéliser un tronçon routier il est possible de le discrétiser à l'aide de sources ponctuelles. Cela est très coûteux car le temps de calcul pour les modèles gaussiens dépend linéairement du nombre de sources utilisées. Il est donc plus intéressant d'utiliser des sources linéiques, modélisant chaque tronçon routier par une source unique. On considère ici un tronçon de route orienté dans la direction y , représenté par un segment d'où est instantanément émise la bouffée. On obtient la solution analytique à l'équation 1.7 en convoluant la bouffée explicitée dans l'équation 1.8 par la source linéique, ce qui donne :

$$c(x, y, z, t) = \frac{Q}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}\sigma_x\sigma_y\sigma_z} \exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right) \int_{y_1}^{y_2} \exp\left(\frac{-y^2}{2\sigma_y^2}\right) dy \quad (1.11)$$

ce qui donne :

$$c(x, y, z, t) = \frac{Q}{4\pi\sigma_x\sigma_z} \exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right) \left[\operatorname{erf}\left(\frac{y_2-y}{\sqrt{2}\sigma_y}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y_1-y}{\sqrt{2}\sigma_y}\right) \right] \quad (1.12)$$

avec $\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-\zeta^2) d\zeta$ la fonction d'erreur de Gauss et y_1 et y_2 les deux extrémités de la source.

On se place ici dans le cas d'un régime stationnaire et il n'y a donc pas de variation entre bouffées situées aux mêmes endroits à des temps différents. Le temps apparaît dans le terme ut qui correspond à la distance parcourue depuis la source. Notons que l'on est ici dans le cas particulier où le vent est perpendiculaire à la source. Le cas plus général où le vent n'est pas perpendiculaire à la source est discuté plus bas, dans le paragraphe (iv).

(iii) Source ponctuelle continue

Les sources ponctuelles peuvent servir à modéliser des sources telles que les cheminées. Comme l'illustre la figure 1.1, en relâchant successivement des bouffées à chaque pas de temps, on crée un panache orienté dans la direction du vent.

Si l'on observe les concentrations en régime permanent, avec le pas de temps de rejet des bouffées tendant vers zéro, on a la condition :

$$C(x, y, z) = 0, \quad x, y, z \rightarrow \pm\infty$$

et l'équation 1.7 devient :

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = K \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \partial \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \partial \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + Q\delta(x)\delta(y)\delta(z) \quad (1.13)$$

En faisant l'hypothèse d'un panache étroit avec un vent u uniforme dans la direction x , la solution est :

$$C(x, y, z, t) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{(y - y_s)^2}{2\sigma_y^2} - \frac{(z - z_s)^2}{2\sigma_z^2}\right) \quad (1.14)$$

avec :

$$\sigma_i^2 = \frac{2K_i x}{u} \quad i \in \{y, z\} \quad \text{et} \quad t = \frac{x}{u}$$

L'hypothèse d'un panache étroit se traduit par $y^2 + z^2 \ll x^2$ et conduit à :

$$\sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \approx x + \left(\frac{y^2 + z^2}{2x}\right) \quad (1.15)$$

Cette hypothèse est justifiée car la dispersion transverse du panache est petite comparée à la distance parcourue dans le sens du vent. Toutefois, ceci n'est pas valable proche de la source ni pour des vents faibles. Comme dans le cas de la source ponctuelle instantanée, cette solution eulérienne correspond au cas où les bouffées (c'est à dire le panache) recouvrent la grande majorité des échelles spatiales des tourbillons. Près de la source, l'utilisation d'écart-types proportionnel à $K_i^{\frac{1}{2}}$ et $x^{\frac{1}{2}}$ ne s'applique pas et des écart-types empiriques doivent être utilisés (voir Annexe A).

(iv) Source linéique continue

De même que précédemment, on peut déduire de l'équation 1.14 la formule pour une source linéique en la convoluant par la source linéique [Yamartino, 2008] :

$$c(x, y, z, t) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right) \int_{y_1}^{y_2} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right) dy \quad (1.16)$$

et on obtient :

$$c(x, y, z) = \frac{Q}{2\sqrt{2}\pi u \sigma_z} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{y_1 - y}{\sqrt{2}\sigma_{y_1}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y_2 - y}{\sqrt{2}\sigma_{y_2}}\right) \right] \quad (1.17)$$

Dans l'équation précédente ainsi que dans le paragraphe (ii), le vent est orienté perpendiculairement à la source. Pour une direction de vent quelconque (toujours parallèle au sol) il n'existe pas de solution analytique à l'équation 1.16. En effet, la distance entre un récepteur et la source dans la direction du vent, utilisée dans le calcul des coefficients de dispersion, dépend alors de la variable d'intégration. Une approche utilisée par certains modèles comme CALINE [Benson, 1992] et ADMS [McHugh *et al.*, 2001] est de découper la source en sources plus petites orientées perpendiculairement au vent (Figure 1.3), la longueur et le taux d'émission de ces plus petites sources dépendent donc de l'angle du vent. Cette approche est intéressante mais impose un nombre de sources important lorsque le vent devient parallèle à la route.

Une autre approximation, faite par Calder [1973] et Esplin [1995] est d'utiliser la distance effective entre le récepteur et l'axe de la source dans la direction du vent ($D_{eff} = \frac{x}{\cos\theta}$) pour le calcul du coefficient de dispersion σ_z et d'utiliser la distance entre le récepteur et chaque extrémité de la source pour le calcul du coefficient de dispersion σ_y ($D_i = (x - x_i) \cos\theta + (y -$

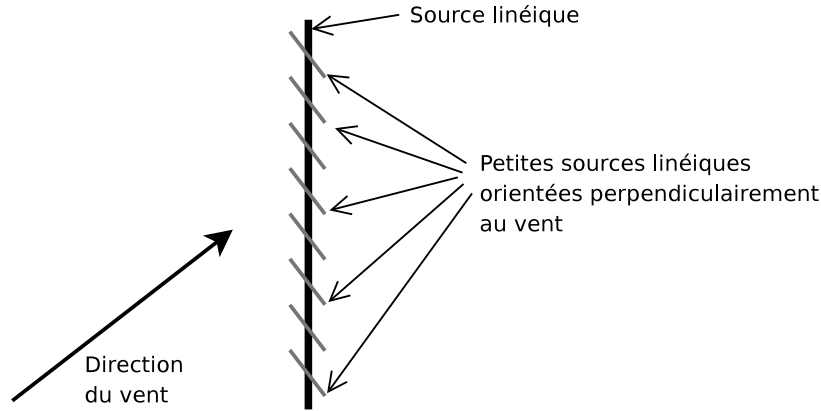


FIGURE 1.3 – Schéma de modélisation utilisé par les modèles CALINE et ADMS.

$y_i) \sin \theta$). σ_y et σ_z ne dépendent plus alors de la variable d'intégration et on peut obtenir une formule analytique :

$$c(x, y, z) = \frac{Q}{2\sqrt{2\pi}u \cos \theta \sigma_z} \exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right) \times \left[\operatorname{erf}\left(\frac{(y - y_1) \cos \theta - x \sin \theta}{\sqrt{2}\sigma_{y_1}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{(y - y_2) \cos \theta - x \sin \theta}{\sqrt{2}\sigma_{y_2}}\right) \right] \quad (1.18)$$

σ_{y_1} et σ_{y_2} sont donc calculés à partir des distances du point à chacune des deux extrémités de la source dans la direction du vent et σ_z est calculé à partir de la distance du récepteur à la source dans la direction du vent. L'angle θ est l'angle entre la direction du vent et la normale à la source. Venkatram et Horst [2006] ont amélioré la formulation précédente en excluant des calculs les parties de la source qui ne sont pas en amont du récepteur dans la direction du vent (Figure 1.4). Notons toutefois que l'utilisation de la distance D_{eff} pour le calcul du coefficient de dispersion vertical impose des concentrations nulles en amont de la source.

Cette solution donne de bons résultats mais est limitée car on remarquera que si $\theta = 90^\circ$ (i.e., vent parallèle à la source), on divise par 0 et cela engendre donc une singularité. Cette formulation est le point de départ de la thèse et donne lieu à une formulation améliorée, présentée dans le Chapitre 2. Cette formulation est ensuite utilisée dans le modèle gaussien utilisé sur le cas d'étude du Chapitre 3 et ce modèle gaussien est ensuite utilisé en sous-maille d'un modèle de chimie-transport dans le Chapitre 4.

1.3.3 Modèles lagrangiens à particules

Les modèles lagrangiens, comme HYSPLIT [Draxler et Hess, 1998], FLEXPART [Stohl *et al.*, 1998] ou encore DIFPAR [Wendum, 1998], sont souvent opposés aux modèles eulériens. En effet, dans un modèle eulérien on considère un maillage fixe dans lequel est calculée l'évolution du champ de concentration. Dans un modèle lagrangien, on calculera les trajectoires de différentes particules, définies par rapport à un système de référence en mouvement avec le vent moyen. Les trajectoires du vent moyen proviennent d'un champ de vent eulérien. Une composante stochastique peut être utilisée afin de modéliser la turbulence. Les modèles gaussiens à bouffées peuvent

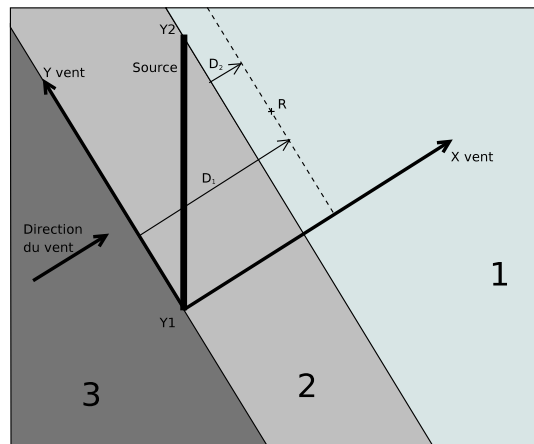


FIGURE 1.4 – La zone 1 représente l'ensemble des récepteurs R impactés par les 2 extrémités de la source (D_1 et $D_2 > 0$). La zone 2 représente l'ensemble des récepteurs R impactés uniquement par l'extrémité 1 ($D_1 > 0$ et $D_2 < 0$) de la source. La zone 3 représente l'ensemble des récepteurs R qui ne sont pas impactés par la source (D_1 et $D_2 < 0$).

être assimilés à des modèles lagrangiens simplifiés où les bouffées représentent un ensemble de particules ayant une distribution gaussienne. Un avantage des modèles lagrangiens est qu'il peuvent couvrir de grande différences d'échelles spatiales allant de la source à des distances continentales. Les inconvénients sont la difficulté de traiter des systèmes chimiques complexes et de simuler un grand nombre de sources à cause des besoins en ressources de calcul.

1.3.4 Modèles de rue-canyon paramétrisés

Les modèles de rue-canyon ont pour but de modéliser la dispersion des polluants à l'échelle d'une rue, d'un quartier ou même d'une ville. La géométrie des bâtiments va jouer un rôle important en modifiant l'écoulement du vent dans la canopée urbaine ce qui modifiera donc aussi la dispersion des polluants. Les modèles gaussiens dispersent les polluants sur un terrain plat avec des corrections possibles pour de simples obstacles (impact sur une colline par exemple) et sont donc inadaptés pour des géométries plus complexes telles que celles des rues-canyons. Les modèles de CFD utilisent une description précise de la géométrie des bâtiments dans la rue mais les temps de calcul importants limitent leurs applications à un ou quelques bâtiments et des périodes courtes. Les modèles de rue-canyon utilisent généralement une géométrie simplifiée des rues ainsi qu'une paramétrisation de la dispersion des polluants afin d'offrir la possibilité de simuler la dispersion des polluants sur des zones importantes et pour des périodes longues.

Operational Street Pollution Model (OSPM) [Hertel et Berkowicz, 1989ab,c] et SIRANE [Soulhac *et al.*, 2011, 2012] sont deux des principaux modèles de rue-canyon. Les concentrations sont calculées avec ces deux modèles comme la somme d'une composante représentant la dispersion au dessus de la canopée urbaine, calculée par un modèle de panache, et d'une composante représentant la dispersion à l'intérieur des rues (zone de recirculation), calculée par un modèle de boîtes (Figure 1.5). La différence principale entre ces deux modèles se situe dans le calcul de la dispersion à l'intérieur des rues où SIRANE utilise un réseau de routes interconnectées dans lequel un flux circule et où les échanges aux intersections sont calculés explicitement.

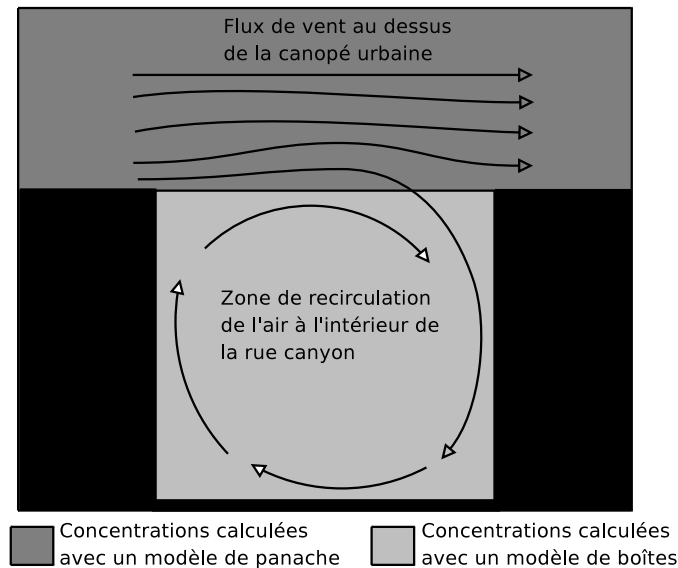


FIGURE 1.5 – Schéma de dispersion des polluants dans une rue-canyon

1.4 Modélisation multi-échelles

Il existe différentes manières de faire de la modélisation multi-échelles. Par exemple, on peut utiliser des maillages imbriqués afin d’avoir une précision plus fine pour une partie du domaine. Les valeurs simulées avec le plus grand domaine pouvant être utilisées comme conditions aux limites pour le domaine plus fin. Une autre méthode est de raffiner le maillage dans certaines régions d’intérêts (maillage adaptatif). Enfin, on peut coupler des modèles à échelle locale avec des modèles à échelle régionale (généralement des modèles de chimie-transport). L’objectif de tels modèles est d’améliorer la représentation des sources, dispersées par le modèle local, en utilisant un traitement en sous-maille de la simulation eulérienne. Dans cette section certains de ces modèles couplés sont présentés.

1.4.1 Couplage off-line

Le couplage entre deux modèles est dit off-line s’ils ne s’influencent pas l’un l’autre. En effet, le traitement sous-maille est dans ces cas simplement ajouté aux résultats du modèle eulérien et il n’y a aucune interaction entre les deux modèles couplés. Cette approche est, entre autres, utilisée par [Ching *et al.* \[2004, 2006\]](#), [Isakov *et al.* \[2007\]](#) et [Cook *et al.* \[2010\]](#). Elle est exacte pour des espèces inertes chimiquement mais elle ne permet pas de prendre en compte les interactions chimique entre le panache et la pollution de fond.

1.4.2 Panache sous-maille stationnaire

Les modèles de panaches sous-maille (Plume-in-Grid) sont basés sur la combinaison entre un modèle gaussien de panache et un modèle eulérien. Le couplage est dit on-line car le modèle de panache peut influencer sur les concentrations du modèle eulérien. La première formulation de panache sous-maille a été présentée par [Seigneur *et al.* \[1983\]](#) avec le modèle Plume Airshed Reactive Interacting System (PARIS) combinant le modèle gaussien de panache réactif développé

par [Stewart et Liu \[1981\]](#) avec le modèle eulérien "urban airshed model" [[Reynolds et al., 1973](#)]. Les panaches sont stationnaires pour des pas de temps donnés et sont dispersés par le modèle gaussien jusqu'à ce que leurs tailles atteignent la taille d'une maille eulérienne, après quoi la quantité de matière est transférée au modèle eulérien. D'autres modèles ont par la suite été développés sur le même principe comme SARMAP [[Chang et al., 1997](#)] et CMAQ [[Kumar et Russell, 1996](#); [Gillani et Godowitch, 1999](#); [Godowitch, 2004](#)].

1.4.3 Panache sous-maille à bouffées

Du fait de la représentation simple de la dispersion locale et de la stationnarité des panaches, les modèles présentés précédemment ne permettent pas de modéliser correctement certains phénomènes comme, par exemple, les changements de vents. Plus récemment, d'autres modèles ont donc été développés utilisant un modèle à bouffées comme traitement sous-maille d'un modèle eulérien. En effet, l'utilisation de bouffées évoluant indépendamment les unes des autres permet de remédier au problème de stationnarité lié aux panaches. On notera par exemple les modèles CMAQ-APT [[Karamchandani et al., 2002, 2006](#)] et CAMx [[ENVIRON., 2011](#)], utilisant le modèle SCICHEM (ou un modèle dérivé de SCICHEM) déjà mentionné dans la section 1.3.2 ou encore le modèle de panache sous-maille développé dans la plate-forme de modélisation de la qualité Polyphemus [[Korsakissok et Mallet, 2010a,b](#)] qui a servi de base au modèle développé dans cette thèse.

1.4.4 Autres formulations de traitements sous-maille

Les modèles présentés précédemment utilisent des modèles gaussiens en sous-maille dispersant les polluants issus de sources ponctuelles fixes (cheminées de centrale électrique par exemple). Cependant, d'autres méthodes existent car dans certains cas l'utilisation de sources ponctuelles fixes n'est pas pertinente.

[Jacobson et al. \[2011\]](#) ont étudié la dispersion des traînées de condensation d'avions. Le modèle de panache Subgrid Plume Model (SPM [Naiman et al., 2010](#)) a été développé spécifiquement pour cette application et est utilisé en sous-maille d'un modèle eulérien tridimensionnel. Le modèle SPM modélise les panaches, non plus avec des distributions gaussiennes, mais avec des structures elliptiques d'aspect linéique et de distribution uniforme. Chaque ellipse est supposée de superficie constante dans le temps, mais les longueurs des axes peuvent varier à cause du vent ou de la diffusion. Les longueurs initiales des axes sont définies à partir de simulations faites avec un modèle de LES (Section 1.3.1).

[Franke et al. \[2008\]](#) ont étudié la dispersion des polluants issus des bateaux en utilisant des modèles de boîtes et ont comparé deux traitements sous-maille. Le premier fait l'hypothèse que les émissions sont diluées instantanément dans une boîte et le deuxième, qu'elles sont d'abord dispersées par un modèle de panache lagrangien photochimique décrit dans [Song et al. \[2003\]](#).

Il existe d'autres méthodes offrant un traitement sous-maille. Par exemple on peut utiliser les données d'occupation des sols [[Valari et Menut, 2010](#)] ou encore des méthodes stochastiques [[Cassiani et al., 2010](#); [Galmarini et al., 2008](#)] pour représenter l'hétérogénéité des émissions à l'intérieur d'une maille. Cependant, ces méthodes ne permettent pas de traiter les interactions chimiques ayant lieu à différentes échelles.

1.4.5 Formulation utilisée dans la thèse

La construction d'une nouvelle infrastructure routière doit faire l'objet d'une étude d'impact afin d'estimer les risques sanitaires auxquels sont exposées les personnes vivant aux alentours. Ces études d'impacts sont souvent faites avec des modèles gaussiens ou des modèles de rue-canyon. Ces modèles ont prouvé être performants et permettent donc d'apprécier l'impact local. D'un autre côté, les réseaux routiers actuels sont très vastes et les émissions du trafic routier ont aussi un impact à une échelle plus large. Ces émissions sont bien sûr prises en compte dans des simulations régionales mais elles sont moyennées sur une surface de plusieurs km² et les interactions chimiques entre ces émissions et la pollution de fond sont donc traitées de manière approximative, puisque moyennées. Or, jusqu'à présent, aucun modèle sous-maille n'a été développé spécifiquement pour cette application. Cette thèse a permis de développer un modèle de panache sous-maille combinant le modèle eulérien Polair3D [Boutahar *et al.*, 2004; Sartelet *et al.*, 2007], de la plate-forme de modélisation de la qualité de l'air Polyphemus [Mallet *et al.*, 2007], avec un modèle gaussien de panache utilisant des sources linéiques développé dans cette thèse. L'utilisation de sources linéiques permet d'éviter d'avoir à discrétiser les segments de route en sources ponctuelles tandis que l'utilisation d'un modèle de panache et non pas un modèle à bouffées permet d'éviter la discrétisation temporelle de la source et de gagner considérablement en temps de calcul. La dispersion des polluants liés au trafic étant moins sujette aux changements de vent, car se faisant sur une distance plus courte que pour une cheminée où les bouffées peuvent se déplacer sur plusieurs dizaines de kilomètres avant d'être transférées au modèle eulérien, nous avons choisi un modèle de panache et non pas un modèle à bouffées.

Un des enjeux de ce couplage, détaillé dans le Chapitre 4, a été de combiner un modèle stationnaire avec un modèle dépendant du temps. La concentration finale au point de coordonnées (x, y, z) au temps t est la somme d'un terme $C_{gaussien}(x, y, z, t)$ et d'un terme $C_{eulerien}(x, y, z, t)$, définis comme suit :

- $C_{gaussien}(x, y, z, t)$ représente la somme des contributions de chaque source linéique au point de coordonnées (x, y, z) calculées avec le modèle gaussien. Le calcul, pour chaque source, est fait avec les conditions météorologiques au temps t de la maille où se trouve la source.
- $C_{eulerien}(x, y, z, t)$ représente la concentration calculée par le modèle eulérien au temps t dans la maille où se trouve le point de coordonnées (x, y, z) .

Il faut noter que la quantité de matière émise d'une source linéique, dispersée par le modèle gaussien, au temps t , est ensuite transférée au modèle eulérien au temps $t + 1$. $C_{eulerien}$ est donc aussi influencé par le modèle gaussien.

1.5 Conclusion et plan de la thèse

Les différents modèles à échelles locale et régionale, ainsi que leurs avantages et inconvénients, ont été présentés dans ce chapitre. Des modèles couplés, permettant d'atteindre une précision locale dans une simulation à échelle plus grande, ont également été présentés. Cependant, jusqu'à présent aucun modèle couplé n'a été développé pour modéliser le trafic routier de façon opérationnelle (la formulation de Karamchandani *et al.* [2009], utilisant des sources ponctuelles est trop lourde en temps de calcul). Au vu de l'importante contribution du secteur des transports aux émissions totales de polluants, il est essentiel de pouvoir modéliser finement le trafic routier dans une simulation à grande échelle. Le but de cette thèse a été de développer un cou-

plage entre un modèle de chimie-transport et un modèle local. Le modèle local que nous avons retenu est le modèle gaussien de panache utilisant des sources linéiques. En effet, un modèle CFD représenterait une demande trop importante en terme de temps de calcul. En revanche, les modèles de dispersion à bouffées gaussiennes ont déjà été utilisés dans des modèles sous-maille. Cependant l'utilisation de bouffées, plus précise qu'un panache, impose une discrétisation temporelle et donc un temps de calcul total conséquent. De même l'utilisation de sources ponctuelles et non linéiques est plus précise mais impose une discrétisation spatiale des tronçons routier. Un modèle gaussien de panache utilisant des sources linéiques est donc un bon compromis entre temps de calcul et précision.

En s'inspirant du modèle HV présenté dans la Section 1.3 une nouvelle formulation permettant de modéliser le trafic routier dans un modèle gaussien a été développée et présentée par Briant *et al.* [2011]; ce modèle fait l'objet du Chapitre 2. Cette nouvelle formulation est ensuite évaluée sur un cas réel comportant un grand nombre de tronçons routier et de points de mesures de concentrations de dioxyde d'azote (NO_2) dans le Chapitre 3 [Briant *et al.*, 2012]. Enfin, dans une deuxième partie, cette nouvelle formulation gaussienne est couplée avec le modèle eulérien de la plate-forme de modélisation de la qualité de l'air Polyphemus, Polaird3D [Boutahar *et al.*, 2004; Sartelet *et al.*, 2007]. Ce couplage est inspiré du couplage déjà effectué par Korakissok [2009] mais diffère sensiblement dans la mesure où l'on utilise ici un modèle stationnaire (gaussien de panache) avec un modèle temporel (Polaird3D). Ce couplage est détaillé dans Briant et Seigneur [2012], qui compose la Partie II, Chapitre 4. On retrouve également dans ce chapitre une comparaison entre les deux modèles (gaussien et eulérien) et le modèle couplé (panache sous-maille) et une évaluation de ces modèles avec les mesures de NO_2 du cas réel présenté dans le Chapitre 3. Des conclusions et perspectives sont présentées dans le Chapitre 5.

Première partie

Modèle de panache gaussien pour
sources linéiques

Chapitre 2

Modélisation de la dispersion atmosphérique de polluants issus du trafic routier

Les modèles de dispersion atmosphérique de polluants permettent de calculer les concentrations des polluants en aval de leurs sources d'émission, telles que des infrastructures routières. Ils sont donc utilisés pour évaluer l'impact du trafic routier sur la qualité de l'air pour des applications diverses comme l'évaluation du respect des normes réglementaires de la qualité de l'air, l'exposition de la population à la pollution atmosphérique et l'évaluation quantitative des risques sanitaires. Par ailleurs, ils peuvent être utilisés pour évaluer l'impact d'une mesure de réduction des émissions liées au trafic ou pour aider à définir le tracé d'une future route. Il est donc essentiel de pouvoir connaître avec une précision raisonnable la concentration des polluants issus des émissions du trafic routier. Pour cela, des modèles analytiques ont été développés pour simuler l'effet de la dispersion atmosphérique sur la concentration des polluants à partir des taux d'émissions de ces polluants émis par un axe routier. L'axe routier est généralement représenté par une source linéique (à laquelle on associe parfois une épaisseur correspondant à la largeur de l'axe routier). Les modèles gaussiens existants sont nombreux (e.g., ADMS, CALINE, AERMOD), mais bien que la formule analytique de dispersion gaussienne soit une solution exacte de l'équation de diffusion atmosphérique pour un polluant émis d'une source ponctuelle si l'on tient compte des hypothèses sur la stationnarité et l'homogénéité, elle n'est exacte pour un polluant émis d'une source linéique que dans le cas d'un vent perpendiculaire à la route.

Une approximation pour modéliser la dispersion atmosphérique à partir d'une source linéique en utilisant une formulation gaussienne est donc nécessaire. Plusieurs solutions sont utilisées dans les modèles gaussiens existants, comme la discrétisation de la source en sources ponctuelles ou en petites sources linéiques placées perpendiculairement au vent (voir Chapitre 1). Une autre formulation est la formulation HV de [Venkatram et Horst \[2006\]](#), qui consiste à évaluer l'intégrale en approximant l'intégrande et en excluant du calcul les portions de la source qui sont en aval, dans la direction du vent, par rapport au récepteur (voir Chapitre 1). Cette méthode est intéressante car la route n'est pas discrétisée et le temps de calcul par source est le même quelle que soit la direction du vent. En revanche, l'erreur induite par l'approximation nécessaire à l'obtention de la solution analytique augmente au fur et à mesure que le vent devient parallèle à la direction de la source, et diverge même lorsque celui-ci est exactement parallèle. L'objectif principal de cette première partie de la thèse a été d'améliorer la précision de la formulation HV tout en maintenant un temps de calcul optimal.

L'approche adoptée a été de : (1) quantifier l'erreur obtenue sur le domaine et (2) d'approcher cette erreur par une formule analytique qui est alors ajoutée aux concentrations calculées par le modèle HV comme un terme de correction. Il s'agit donc de construire des fonctions analytiques qui minimisent l'erreur du modèle HV. Une solution de référence est nécessaire afin d'estimer au mieux l'erreur de la formulation HV. Nous avons choisi une solution discrétisée avec des sources ponctuelles et avec une résolution très fine (500 sources par mètre). L'erreur du modèle apparaît sous deux aspects : (1) sous le vent par rapport à la source linéique et (2) sous le vent par rapport aux deux extrémités de la source.

La paramétrisation de l'erreur sous le vent par rapport à la source a été faite à l'aide de fonctions usuelles simples sur une demi-droite partant du centre de la source et orientée dans la direction du vent pour chaque classe de stabilité atmosphérique. Différents régimes, fonctions de l'angle du vent, ont été distingués. Un premier où aucune correction n'est nécessaire, un second où une correction avec des fonctions gaussiennes minimise au mieux l'erreur et un troisième utilisant une fonction exponentielle. Les fonctions gaussiennes et exponentielles ont été paramétrisées avec 6 coefficients pour chaque angle de vent (avec une résolution de 1°) et pour chaque classe de stabilité et ont ensuite été appliquées par translation le long de la source. Corriger l'erreur sous le vent par rapport aux extrémités de la source est essentiel car elle est plus élevée que l'erreur sous le vent par rapport à la source. Parce que son aspect est similaire à celui de la dispersion gaussienne à partir d'une source ponctuelle, nous l'avons corrigée en ajoutant deux sources ponctuelles (une à chaque extrémité de la source linéique) dont le taux d'émission est choisi de sorte qu'il minimise l'erreur pour un angle de vent et une classe de stabilité donnés. Bien que ces deux corrections soient efficaces et complémentaires, elles ne parviennent pas à corriger efficacement l'erreur induite par la singularité que l'on obtient lorsque le vent est parallèle à la route. Pour cela, nous avons choisi d'incorporer une combinaison entre la solution analytique linéique et la solution numérique (discrétisée avec des sources ponctuelles) lorsque le vent est parallèle ou presque parallèle à la source ($\pm 10^\circ$). Le pas de discrétisation de la source linéique pour la solution discrétisée a été défini à 1 source ponctuelle par mètre, ainsi le temps de calcul additionnel nécessaire au calcul de cette combinaison n'est pas trop important et l'erreur induite reste acceptable.

Une évaluation de cette formulation améliorée du modèle HV par rapport à la solution de référence a été effectuée sur des cas théoriques. Une étude de sensibilité a permis de montrer que cette formulation améliorée offre de bonnes performances quel que soit l'angle du vent et quelle que soit la classe de stabilité. La corrélation entre cette formulation et la solution de référence est toujours supérieure à 0.9. De plus, le même comportement est observé lorsque la hauteur des récepteurs varie. Le temps de calcul requis avec la formulation améliorée est supérieur au temps de calcul de la formulation HV initiale, ce qui est principalement dû à la combinaison entre la solution analytique et la solution numérique. Cependant, il reste très inférieur au temps de calcul nécessaire lorsque la route est discrétisée avec un nombre raisonnable de sources ponctuelles. Enfin, une étude a été réalisée pour évaluer ce modèle de dispersion avec des mesures de dépôt de cadmium réalisées près d'une voie d'autoroute dans l'est de la France en 1997. Les résultats permettent de conclure que ce modèle offre des performances similaires au modèle gaussien utilisant uniquement des sources ponctuelles, mais avec un temps de calcul environ 40 fois moindre. Malheureusement cette comparaison aux mesures ne permet pas de voir l'influence de la correction apportée au modèle HV car les mesures ont été faites pour seulement quelques sites et moyennées sur une longue période. Le Chapitre 3 présente une évaluation plus détaillée

du modèle sur un très grand réseau routier et avec un nombre de points de mesure conséquent.

Sommaire

2.1	Abstract	26
2.2	Introduction	26
2.3	Gaussian plume formulations for line sources	27
2.4	Development of the improved line source formula	29
2.4.1	Simulation set-up	29
2.4.2	The reference solution	29
2.4.3	The model error	30
2.4.4	Correction downwind of the line source section	30
2.4.5	Correction downwind of the extremities of the line source section	31
2.4.6	Line source / discretized source combination	33
2.4.7	Overall formulation of the line source model	34
2.5	Results	34
2.5.1	Comparison of the line source models	34
2.5.2	Sensitivity	35
	(i) Different stability classes	35
	(ii) Emission height	36
2.5.3	Computational times	37
2.5.4	Comparison with near-road measurements	40
2.6	Conclusion	41

Ce chapitre est constitué de Briant *et al.* [2011] :

- Briant, R., Korsakissok, I. and Seigneur, C. (2011). An improved line source model for air pollutant dispersion from roadway traffic. *Atmos. Environ.* 45 :4099-4107.

2.1 Abstract

Gaussian plume models, which are widely used to model atmospheric dispersion, provide an exact analytical solution for line sources such as roads only when the wind direction is perpendicular to the road. Some approximations have been developed to provide an analytical formula for a line source when the wind direction is not perpendicular to the road; however, such formulas lead to some error and the solution diverges when the wind direction is parallel to the road. A novel approach that reduces the error in the line source formula when the wind direction is not perpendicular to the road is presented here. Furthermore, a combination of analytical and numerical line source solutions is used to better represent cases where the wind direction becomes parallel to the road. The improved model was implemented in the Polyphemus modeling platform and it was successfully evaluated against a reference solution as well as observations obtained near a roadway in eastern France.

Keywords: Gaussian plume model; line source; Polyphemus

2.2 Introduction

Atmospheric dispersion models are used to estimate the air quality impacts of road traffic emissions for many purposes, such as attainment of ambient air quality standards, health risk assessment and decision support. It may be used for instance to assess the effect of emission control measures or to help select a new road location. It is thus essential to be able to predict with reasonable accuracy the pollutant concentrations associated with vehicle emissions. To that end, analytical models have been developed to simulate the effect of atmospheric dispersion on pollutant concentrations based on an emission rate from a roadway. In open terrain, Gaussian dispersion models are the most commonly used (e.g., [Levitin *et al.* \[2005\]](#); [Berger *et al.* \[2010\]](#); [Venkatram *et al.* \[2009\]](#); [Chen *et al.* \[2009\]](#)). Although the Gaussian dispersion formula provides an exact solution to the atmospheric diffusion equation for the dispersion of a pollutant emitted from a point source given some assumptions on stationarity and homogeneity [[Csanady, 1973](#)], the Gaussian dispersion formula provides an exact solution for the emissions of a pollutant from a line source only in the case where the wind is perpendicular to the line source [[Yamartino, 2008](#)]. It is, therefore, necessary to develop approximations to model atmospheric dispersion from a line source using a Gaussian formulation. Several solutions are used by state-of-the-art Gaussian models. In the CALINE series of models [[Benson, 1992](#)], the roadway is represented by a series of short road sections placed perpendicular to the wind; the number of segments (and the computational cost) increases as the wind becomes more parallel to the road. In the original formulation of the AERMOD model [[Cimorelli *et al.*, 2005](#)], no line source formulation was available and a simulation of nitrogen dioxide (NO₂) concentrations due to roadway traffic in Atlanta required the use of the area source formulation and the discretization of the roadways in a very large number of area sources [[EPA, 2008](#)], thereby leading to very large computational costs. Another similar approach consists in representing the line source by a series of point sources with initial diameters commensurate with the road width [[Karamchandani *et al.*, 2009](#)]. This approach also becomes rapidly cumbersome computationally. There is, therefore, a need to develop approximate, yet reasonably accurate formulations based on the Gaussian dispersion formula that are computationally efficient. One example of such a formulation is that of [Venkatram et Horst \[2006\]](#) (see description below). We propose here an extension of that formulation that further minimizes the error due to the Gaussian formulation for a line

source without significantly increasing the computational requirements. After a brief overview of that Gaussian formulation (Section 2.3), a description of the method used to develop the improved line source model is presented (Section 2.4). Next, a thorough comparison with an exact solution, given by a discretized source, is presented (Section 2.5). It provides a quantitative assessment of the decrease in the error obtained with the improved model as well as the remaining error. Finally, this model is included in the Gaussian plume model of Polyphemus [Korsakissok et Mallet, 2009] and the model is evaluated against measurements made in the vicinity of a roadway (Section 2.5.4).

2.3 Gaussian plume formulations for line sources

The Gaussian formulation of the concentration field for a pollutant emitted from a point source is as follows, neglecting reflexion terms for simplicity [Csanady, 1973; Arya, 1999] :

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi u \sigma_y \sigma_z} \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2} - \frac{z^2}{2\sigma_z^2}\right) \quad (2.1)$$

where C is the pollutant concentration in g m^{-3} at location (x, y, z) , x is the distance from the source along the wind direction in m, y and z are the cross-wind distances from the plume centerline in m, u is the wind velocity in m s^{-1} , Q is the emission rate in g s^{-1} , and σ_y and σ_z are the standard deviations representing pollutant dispersion in the cross-wind directions in m. They are computed here with Briggs's parameterization (Equation 2.2, Briggs [1973]) where coefficients α , β and γ depend on the Pasquill stability classes and the x parameter represents the distance from the source (Appendix A).

$$\sigma_y(x) = \frac{\alpha x}{\sqrt{1 + \beta x}} \quad ; \quad \sigma_z(x) = \alpha x (1 + \beta x)^\gamma \quad (2.2)$$

Turbulent diffusion in the downwind direction is neglected here; this slender plume approximation [Seinfeld et Pandis, 1998] is justified because the along-wind dispersion of the plume is small compared with advection, assuming that receptors are not too close to the source and the wind velocity is not too low. To obtain the concentration field due to emission from a line source, Equation 2.1 is integrated over the line source to obtain the following integral equation :

$$C(x, y, z) = \int_{y_1}^{y_2} \frac{Q}{2\pi u \sigma_y(s) \sigma_z(s)} \exp\left(\frac{-z^2}{2\sigma_z^2(s)} - \frac{(y-s)^2}{2\sigma_y^2(s)}\right) ds \quad (2.3)$$

where y_1 and y_2 the ordinates of the source extremities.

When the wind is perpendicular to the line source, the integration of Equation 2.3 leads to the following analytical solution :

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\sqrt{2\pi} u \sigma_z(x)} \exp\left(\frac{-z^2}{2\sigma_z^2(x)}\right) \times \left[\operatorname{erf}\left(\frac{y-y_1}{\sqrt{2}\sigma_y(x)}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y-y_2}{\sqrt{2}\sigma_y(x)}\right) \right] \quad (2.4)$$

Indeed, in a perpendicular wind case, both source coordinate system and wind coordinate system are identical (Figure 2.1). Therefore, the distance of the receptor from the source in the wind direction, needed to compute σ_y and σ_z , does not change with the integration variable so no additional approximation is required. For other wind directions, the dependency of standard deviations on the integration variable makes the integration impossible without approximations.

Various approximations can be made [Yamartino, 2008]; we use here a formulation recently proposed by Venkatram et Horst [2006].

The Horst-Venkatram (HV) approximation consists in evaluating the integral by approximating the integrand with its behavior near $y_{wind} = 0$ (see Figure 2.1). The effective distance d_{eff} (Equation 2.5) is used to compute σ_z and a distance d_i (Equation 2.6) from each extremity of the line source section in the wind direction for σ_y .

$$d_{eff} = x / \cos \theta \quad (2.5)$$

$$d_i = (x - x_i) \cos \theta + (y - y_i) \sin \theta \quad (2.6)$$

where x and y are the coordinates of the receptor and x_i and y_i the coordinates of the source extremity i (with $i = 1$ or 2) in the source coordinate system. The angle θ represents the angle between the normal to the line source and the wind direction.

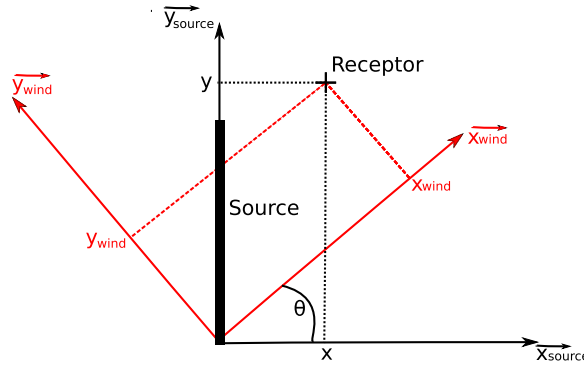


Figure 2.1: Schematic representation of the source (\vec{x}_{source} , \vec{y}_{source}) and wind (\vec{x}_{wind} , \vec{y}_{wind}) coordinate systems. The wind angle θ is the angle between the normal to the source and the wind direction.

Solving Equation 2.3 with the HV approximation leads to Equation 2.7, which provides the concentration field for all wind directions, except $\theta = 90^\circ$. The term $u \cos \theta$ represents the projection of the wind velocity onto the normal direction to the source. For $\theta = 0^\circ$, Equation 2.7 becomes identical to Equation 2.4. However, when the wind is parallel to the line source ($\theta = 90^\circ$), the term $\cos \theta$, on the denominator of the equation, makes Equation 2.7 diverge.

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\sqrt{2\pi}u \cos \theta \sigma_z(d_{eff})} \exp\left(\frac{-z^2}{2\sigma_z^2(d_{eff})}\right) \times \left[\operatorname{erf}\left(\frac{(y - y_1) \cos \theta - x \sin \theta}{\sqrt{2}\sigma_y(d_1)}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{(y - y_2) \cos \theta - x \sin \theta}{\sqrt{2}\sigma_y(d_2)}\right) \right] \quad (2.7)$$

If d_i , the distance used to compute σ_{y_i} from both extremities is negative, the receptor is not downwind of the extremity i . A receptor can be downwind of an extremity and upwind of the other. In that case, in the HV approximation, a segment of the source is excluded of the calculation by setting the term : $\operatorname{erf}\left(\frac{(y - y_i) \cos \theta - x \sin \theta}{\sqrt{2}\sigma_y(d_i)}\right)$ of Equation 2.7 to : $-\operatorname{sign}(\sin \theta)$.

This solution to the Gaussian equation for a line source has been shown to lead to small acceptable errors compared to an exact solution [Venkatram et Horst, 2006]; nevertheless, some errors remain due to the approximate nature of the solution, especially when the wind is nearly parallel to the line source. The objective of this work is to further improve this solution for the concentration field while retaining a computationally-efficient analytical formulation to the extent possible.

2.4 Development of the improved line source formula

The approach used to develop an improved version of the HV model consists of (1) quantitatively assessing the error over the modeling domain and (2) approximating this error with analytical formulas, which can then be added to the HV model as correction terms. Using analytical formulas allows us to minimize the additional computational time. The challenge is, therefore, to infer analytical functions that provide the best fit for the model error.

2.4.1 Simulation set-up

Simulations were conducted with various angles θ between 0° and 90° (results for angles in other quadrants can be obtained by symmetry). For the case $\theta = 90^\circ$, the term $\cos \theta$ has been approximated by $\cos(89^\circ)$ so that the equation does not diverge. A 20 m-long line source section was used and placed in a domain of 100 m \times 100 m (large enough to see the major influence of the source Figure 2.2) with receptors placed with a 0.1 m resolution step (the derivation of the formula is independent of the source length). The source is emitting 2 meters above the ground with an initial vertical depth characterized by $\sigma_z = 1.4$ m (70% of emission height) so that the plume is initially well mixed to the ground. Downwind concentrations are computed at ground level. The Briggs parameterization was used for the computation of standard deviations σ_y and σ_z . The formulation of the parameterization follows that of Korsakissok et Mallet [2009]. The 'D' Pasquill stability class (neutral) and a rural land category are used here for the initial derivation. Results for other stability and land use categories are summarized later.

2.4.2 The reference solution

In order to quantify the error made by the line source formula, a reference is needed. A discretized solution with a very fine discretization step was chosen, since no exact analytical solution exists, except for the case where $\theta = 0^\circ$. Figure 2.3 shows, for a perpendicular wind, the difference, averaged over all receptor points of the domain, between concentrations with a line source formula (Equation 2.4) and with a discretized source, as a function of the discretization step. Some minor oscillations occur with large numbers of point sources, which are due to the positioning of the fixed receptor points with respect to the point sources. Setting the discretization step at 500 point sources per meter is considered sufficient, since a finer discretization does not lead to any further significant reduction of the error (less than $10 \mu\text{g m}^{-3}$ when the maximum of concentrations is 2.6 g m^{-3} , with a $33 \text{ g m}^{-1} \text{ s}^{-1}$ emission rate, i.e., $< 0.4 \%$).

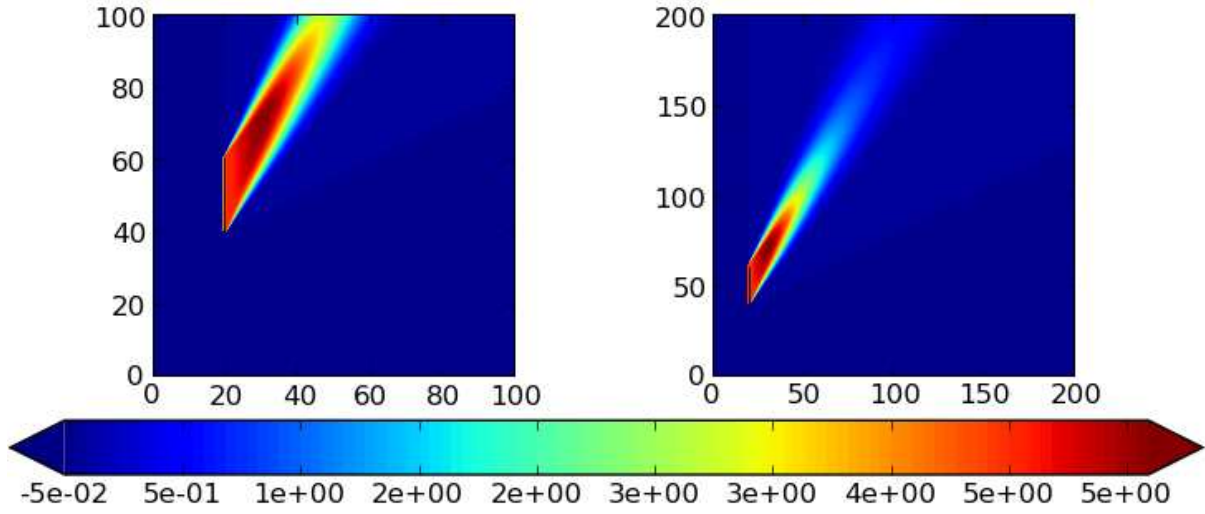


Figure 2.2: Computed concentration (line sources) with a 100 m × 100 m (left) and 200 m × 200 m domain (right)

2.4.3 The model error

A relative formulation (dimensionless) was used to display the model error (Equation 2.8), so that it does not depend on the emission rate and wind velocity, which are multiplicative factor in the Gaussian equation and, therefore, do not influence the results.

$$\text{Err}(x, y, z) = \frac{C_{\text{HV}}(x, y, z) - C_{\text{ref}}(x, y, z)}{C_{\text{ref}}(x, y, z)} \quad (2.8)$$

where Err is the relative model error, C_{HV} is the solution of the HV model (Equation 2.7) and C_{ref} is the reference solution provided by the discretized source. Figure 2.4 presents the model error for $\theta = 60^\circ$. Two distinct types of errors appear : (1) errors downwind of the extremities of the line source section and (2) errors downwind of the line source section itself (note that the error does not depend on the line source length as shown in Figure 2.5). The approaches used to minimize these two types of errors differ and are described separately below. Furthermore, as mentioned above, there is no solution of Equation 2.7 that exists for $\theta = 90^\circ$. Therefore, the numerical solution for a discretized line source, i.e., a set of point sources, must be used when the wind is parallel to the line source. To avoid any discontinuity in the improved model, a combination between the line source solution and the discretized source solution is used for cases where the wind direction becomes close to parallel to the line source, $\theta > 80^\circ$, as described below.

2.4.4 Correction downwind of the line source section

The error was computed as a function of the downwind distance from the middle of the line source section (i.e., as a function of x_{wind}) for various wind directions ($0^\circ < \theta < 90^\circ$, $\Delta\theta = 1^\circ$). A parameterization of this error as a function of the distance from the source in the wind direction was then inferred. Three different ranges of wind directions were distinguished based on the evolution of the magnitude and shape of the error curve with the wind direction

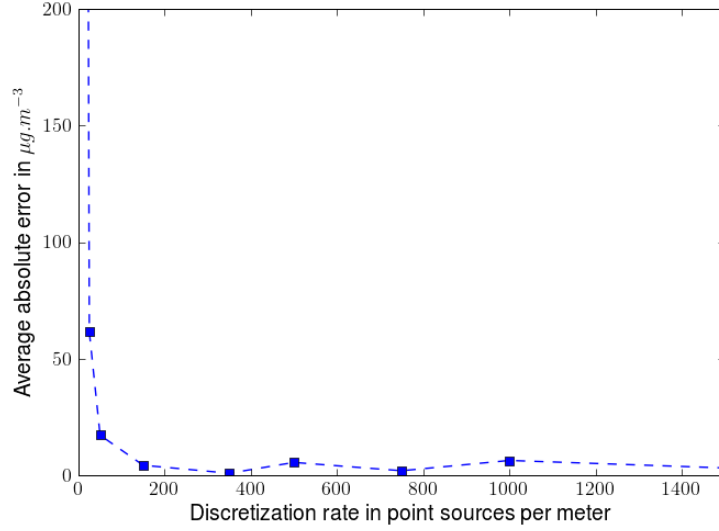


Figure 2.3: Difference of ground-level concentrations between the line source and the discretized source averaged over each point of the domain as a function of the discretization step with a perpendicular wind (in $\mu\text{g m}^{-3}$).

angle. For angles in a range of 0° to 40° , the error was not significant (less than 0.6%) and no correction needed to be applied. Then, for angles in a range of 40° to 74° , a correction of the error with two Gaussian functions (see Figure 2.6(a)) was used. The analytical function used for this correction is given by Equation 2.9 :

$$L_1(x_{wind}) = \frac{\text{Max}_1(\theta)}{\sigma_1(\theta)\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-(x_{wind} - \mu_1(\theta))^2}{2\sigma_1^2(\theta)}\right) + \frac{\text{Max}_2(\theta)}{\sigma_2(\theta)\sqrt{2\pi}} \exp\left(\frac{-(x_{wind} - \mu_2(\theta))^2}{2\sigma_2^2(\theta)}\right), x_{wind} > 0 \quad (2.9)$$

where Max_1 , μ_1 , σ_1 , Max_2 , μ_2 , σ_2 represent, respectively, the maximum value, the mean value and the standard deviation of the two Gaussian functions. Finally, for angles in a range of 75° to 90° , an exponential correction is applied (see Figure 2.6(b)).

$$L_2(x_{wind}) = \begin{cases} (a(\theta) - d(\theta))(1 - \exp(-b(\theta)x_{wind})) + d(\theta) & \text{if } 0 < x_{wind} < \mu \\ \beta(\theta)\exp(-c(\theta)(x_{wind} - \mu(\theta))) & \text{if } x_{wind} \geq \mu \end{cases} \quad (2.10)$$

It requires 6 coefficients to be defined by fitting the error curve : a , d , b , μ , β and c . These corrections can be applied along the entire line source section, i.e., the same relative error function is used at a given downwind distance over a segment parallel and of length equal to that of the line source section.

2.4.5 Correction downwind of the extremities of the line source section

Correcting the equation downwind of both extremities of the line source section is essential because the error is more important there than downwind of the line source section (see Figure 2.4). Figure 2.4 suggests a clear similarity between the shapes of the relative error field

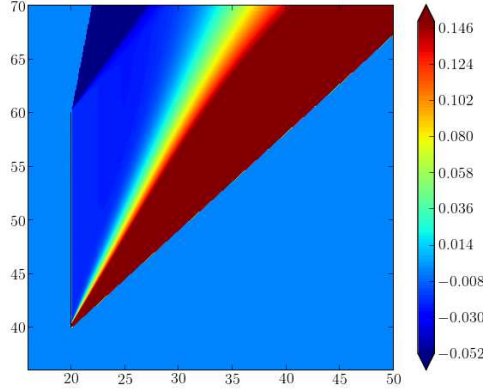


Figure 2.4: Map of the relative error at ground-level with $\theta = 60^\circ$. The color scale was adapted so that the error downwind of the source, which is significantly smaller than errors downwind of the extremities of the line section, appears clearly.

downwind of the line source extremities and those of Gaussian plumes emitted by point sources, which would be located at those extremities. Therefore, it seemed appropriate to add two point sources (one at each extremity) to correct these errors. A scaling coefficient λ , which is a function of the wind direction, was needed to fit the corresponding error. The correction is then given as follows.

$$\begin{aligned}
 E(x_{wind}, y_{wind}, z) = & \frac{\lambda(\theta)Q}{2\pi u \sigma_z(d_{eff})} \exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma_z^2(d_{eff})}\right) \\
 & \left[\frac{1}{\sigma_y(d_2)} \exp\left(-\frac{(y_{wind} - y_{2_{wind}})^2}{2\sigma_y^2(d_2)}\right) - \right. \\
 & \left. \frac{1}{\sigma_y(d_1)} \exp\left(-\frac{(y_{wind} - y_{1_{wind}})^2}{2\sigma_y^2(d_1)}\right) \right] \quad (2.11)
 \end{aligned}$$

The value of the parameter λ was estimated by minimizing the error over the whole domain. This estimation of λ was carried out for a limited set of angles only (angles $\geq 45^\circ$). The value for all angles in the range of 45° to 90° was obtained by the use of the least mean square method to fit an analytical function (polynomial exponential function, Equation 2.12) to the estimation set. Coefficients a_0, a_1, a_2, a_3, a_4 and a_5 , which are the results of the interpolation, are given in Appendix B.

$$\lambda(\theta) = \prod_{i=0}^{i=5} \exp(a_i \cos^i \theta); \quad \theta \geq \theta_{threshold} \quad (2.12)$$

The same coefficient is applied at both extremities of the line section; only the sign changes. Indeed, when two line sections are set next to each other along the same direction, there is no error remaining at the junction of the two sections, which implies necessarily that the errors at the extremities of the two adjacent sections must cancel each other exactly.

Figure 2.7 shows the error field with and without the correction at the extremities. There is some error remaining near the upper extremity of the line section. This relative error seems

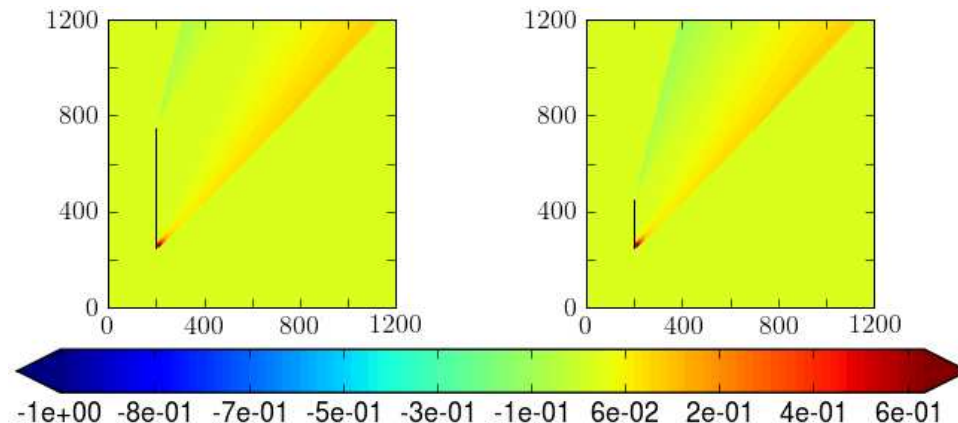


Figure 2.5: The magnitude of the error is independent of the source length. A longer road section increases the influence of the downwind part of the source and decreases the influence of the extremities: 500m line source section (left) vs. 200m line source section (right).

important but (1) near the upper extremity, the absolute error is small because of the low concentrations (less than 4 % of the maximum concentration) and (2) it will typically be balanced by the fact that there will be another road section adjacent to this one, which will partially compensate this error. Furthermore, road sections are on average longer than 20 meters (e.g. an average length of 500 meters per road section in the Paris region [LVMT, 2010]) so the errors associated with extremities will be spatially limited compared with errors downwind of the line source section.

2.4.6 Line source / discretized source combination

Both previous corrections are efficient and complementary but Equation 2.7 reaches a singularity when the wind is parallel to the line source section and another method must be used to obtain a solution. Since a discretized source (i.e., a set of point sources) provides a numerical solution for $\theta = 90^\circ$, a combination between the line source equation and the solution for a discretized source can be used for θ approaching 90° . We selected the following approach :

$$\begin{aligned} \text{Concentration} &= C_{HV} && \text{if } \theta \in [0, 80[\\ \text{Concentration} &= (1 - \alpha)C_{HV} + \alpha C_{\text{discretized}} && \text{if } \theta \in [80, 90] \end{aligned} \quad (2.13)$$

A linear combination of the analytical and discretized solutions was chosen to prevent any discontinuity at $\theta = 80^\circ$ when one switches from the analytical solution to the solution used between 80° and 90° .

The computational time increases linearly with the number of point sources used in the discretized solution, however, this approach is limited to the range of wind directions of 80° to 90° . The precision of the results and the increase in computational time depend directly on the chosen discretization step. The α coefficient varies linearly from 0 to 1 when θ vary from 80° to 90° .

The number of point sources used in this discretization was set to 1 per meter, thus the increase in computational time is not too important (C_{ref} is computed with 500 sources per meter).here and the average relative error is acceptable (see Figure 2.8).

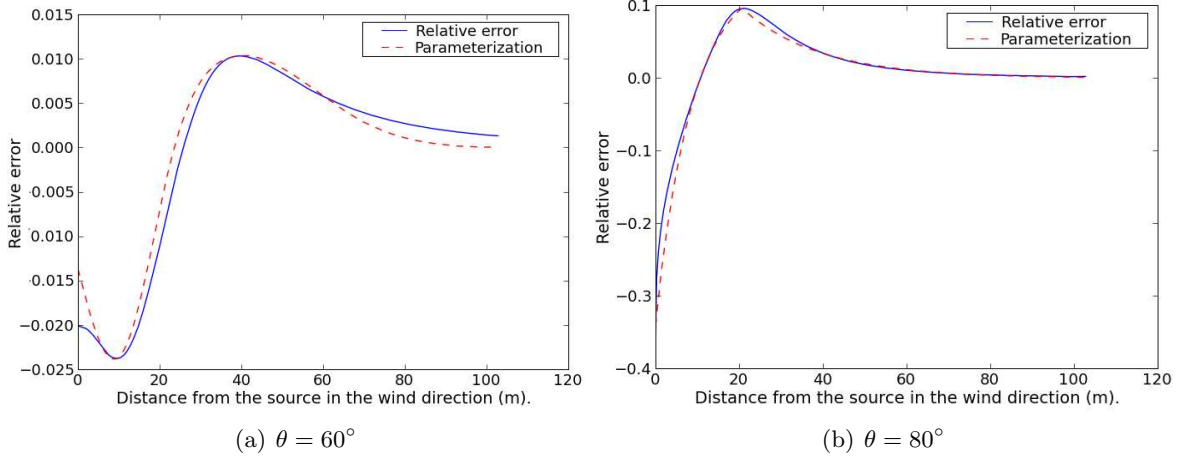


Figure 2.6: Relative error as a function of the distance from the source in the wind direction and parameterization of the error with analytical functions for two selected wind directions.

2.4.7 Overall formulation of the line source model

The final equation that takes into account those corrections is given by Equation 2.14, where C_{line} is the corrected concentration. It is based on Equation 2.7 multiplied by the line source section correction (L, see Equations 2.9 and 2.10), and the addition of the correction to the errors at both extremities (E, see Equation 2.11). In addition, the line source / discretized source combination is applied as in Equation 2.13 for $80^\circ < \theta < 90^\circ$.

$$C_{\text{line}}(x, y, z) = \frac{Q}{2\sqrt{2\pi}u \cos \theta \sigma_z(d_{\text{eff}})} \exp\left(\frac{-z^2}{2\sigma_z^2(d_{\text{eff}})}\right) \times \left[\operatorname{erf}\left(\frac{(y - y_1) \cos \theta - x \sin \theta}{\sqrt{2}\sigma_y(d_1)}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{(y - y_2) \cos \theta - x \sin \theta}{\sqrt{2}\sigma_y(d_2)}\right) \right] \times \left(\frac{1}{L(x_{\text{wind}}) + 1} \right) + E(x_{\text{wind}}, y_{\text{wind}}, z) \quad (2.14)$$

2.5 Results

2.5.1 Comparison of the line source models

Figure 2.9 shows the concentration as a function of the distance from the source along a line crossing the middle of the line source and parallel to the wind direction ($\theta = 70^\circ$) for the reference solution, Equation 2.7 and the improved model (Equations 2.13 and 2.14). The relative errors of the line source models are also shown. The improved model is closer to the reference and the error is significantly reduced, particularly near the source where concentrations are the highest: Figure 2.10 shows a comparison of the error downwind of the source with and without the correction, for the area around the middle of the line source section in order to avoid perturbations due to the extremities, which confirms that the error is reduced uniformly.

Similar results are obtained for other wind angles in the range of 0 to 89° . Figure 2.11 shows the evolution of the sum of the relative errors, averaged over each point of the domain affected by

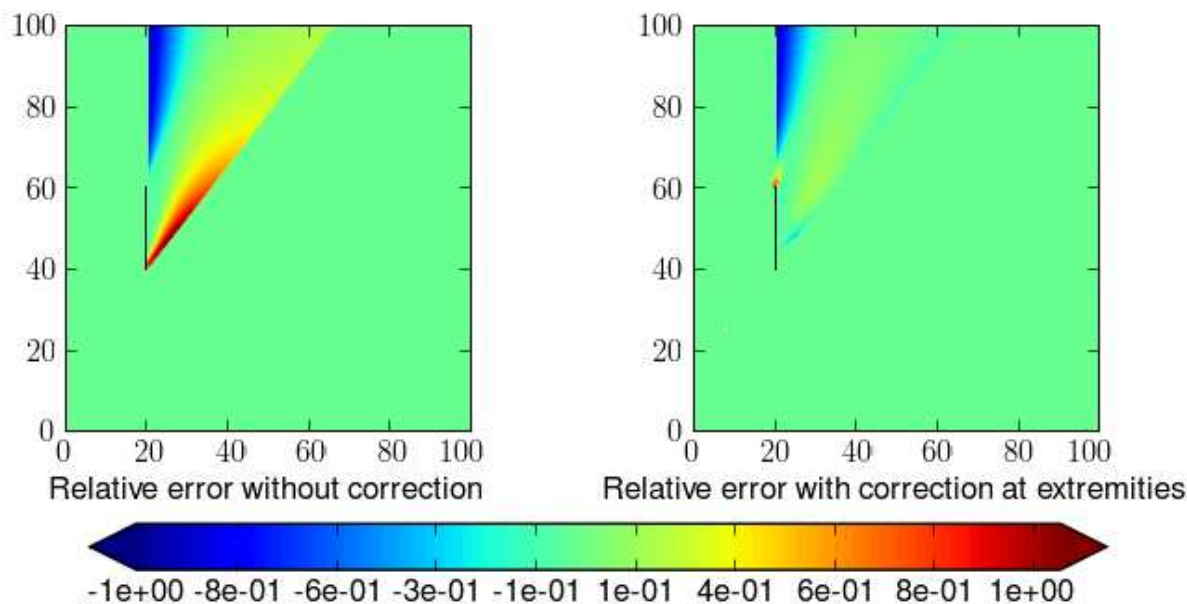


Figure 2.7: Error field at ground-level without (left) and with (right) the extremity correction ($\theta = 70^\circ$).

the correction, as a function of the wind direction, with and without each correction. Clearly, the error is small for small values of θ (exact solution when $\theta = 0^\circ$) and increases significantly when the wind becomes parallel to the line source (singularity at $\theta = 90^\circ$). The section correction does not significantly reduce the total amount of error because it is small compared to the error generated by the extremities and its impact is not visible on the figure (however, its relative impact increases with the length of the line source section). Both the extremity correction and line source / discretized source combination have a major impact on the error. For example, the error is reduced by up to 94 % when the wind angle is equal to 90° .

Figure 2.12 shows the evolution of the correlation between the line source model results and the reference results with each correction as a function of the wind direction. Without any correction, the correlation goes down to 0.48 as θ tends toward 90° , whereas, with corrections, it remains well above 0.9.

2.5.2 Sensitivity

(i) Different stability classes

The parameters used to develop the improved model, i.e., the three ranges of angles, the coefficients of the line source correction and the λ coefficient of the extremity correction were computed initially using the stability class 'D' with a rural land type. It is necessary to assess whether the general model formulation applies also to other atmospheric stability classes ('A' to 'F') and land use types (rural and urban). The coefficients of Equation 2.9, 2.10 and 2.11 were recalculated for other atmospheric stability classes and land use types. Some examples are presented in Figure 2.13, which shows that the results are similar to those presented above.

Errors are greater when using the 'A' (unstable) stability class than when using the 'F'

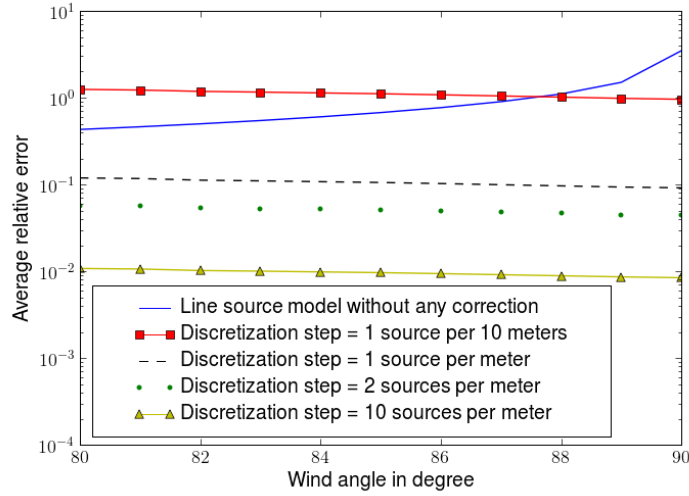


Figure 2.8: Relative error averaged over the modeling domain (logarithmic coordinates) as a function of the wind direction for the HV line source model and the discretized line source model with various discretization steps ($80^\circ < \theta < 90^\circ$).

(stable) stability class. Indeed, variations of σ with the distance from the source are more important with unstable condition and the HV approximation is then less accurate. The same phenomenon occurs when looking at land use types, errors with the rural type are less important than with the urban type.

The parameters for Equations 2.9, 2.10 and 2.11 and the angular sectors over which they apply are provided for all stability classes and land use type in Appendix B.

(ii) Emission height

Parameters for the corrections presented above were estimated for line sources with a 2 m emission height. The line section correction was implemented as a multiplicative factor and the additional point sources, added for the extremity correction, are placed at the same emission height as the line source. Therefore, those same corrections are applicable for other emission heights by adapting the initial σ_z as follows :

$$\sigma_{z_{initial}} = 0.7h \quad (2.15)$$

where h is the emission height. Figure 2.14 shows the error with several emission heights with and without corrections (concentrations are calculated at ground level). When looking at ground concentrations, the distance of the receptor to the source increases with the emission height and so does the error, which explains differences of error between these figures. Corrections perform well and the same behavior is observed with all emission heights, which implies that the improved line source model can be applied for various line source configurations to compute ground-level concentrations at grade, without having to recalculate correction coefficients.

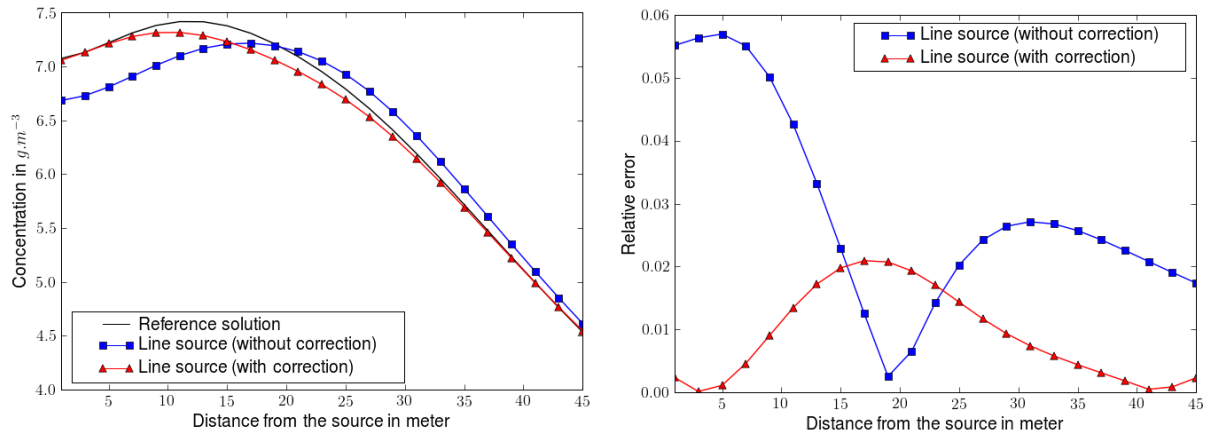


Figure 2.9: Influence of the correction on the ground-level concentrations and the relative error as a function of the distance from the source in the wind direction, in meter ($\theta = 70^\circ$).

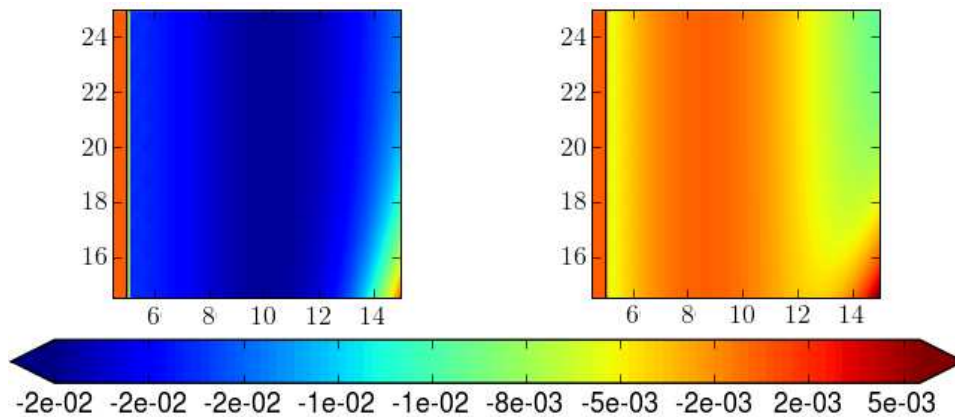


Figure 2.10: Downwind error map without (left) and with (right) the line source section correction ($\theta = 60^\circ$); the line source section is at $x = 5$; $0 < y < 80$

2.5.3 Computational times

The computational time required to perform a simulation with a line source is about equivalent to that of a simulation with two point sources when no correction is applied (i.e. Equation 2.7) (Table 2.1). When using only the line source section correction and the extremity correction (i.e., Equation 2.14 for θ in the range of 0° to 80°), the computational time required for a line source is equivalent to that of a simulation with five point sources. Therefore, the corrections presented here increase the computational time by a factor of 2.5; nevertheless, the equivalent computational cost of five point sources per line source section is fairly low, particularly when compared to that for a discretized line source. This improvement in computational cost is directly dependent on the discretization step of the line source.

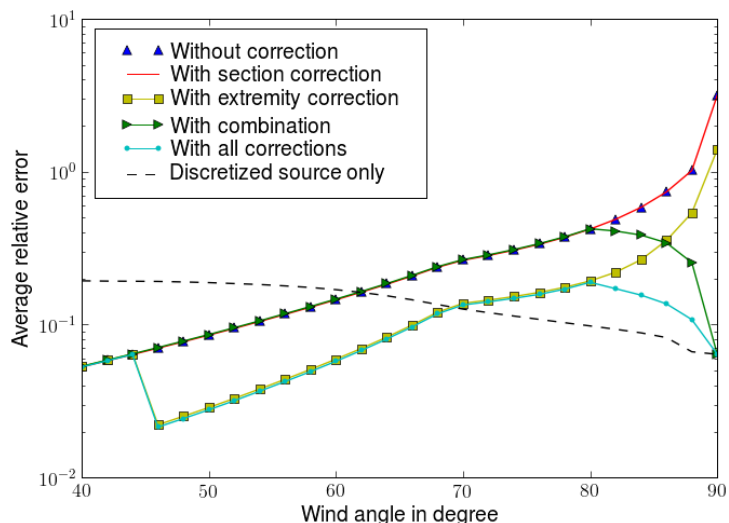


Figure 2.11: Relative error averaged over the modeling domain (logarithmic coordinates) as a function of the wind direction ($40^\circ < \theta < 90^\circ$). Without correction: Equation 2.7; with section correction: Equation 2.7, 2.9 and 2.10; with extremity correction: Equation 2.7 and 2.11; with combination: Equation 2.7 and 2.13; with all corrections Equation 2.13 and 2.14; discretized source only: Equation 2.1 with one source per meter.

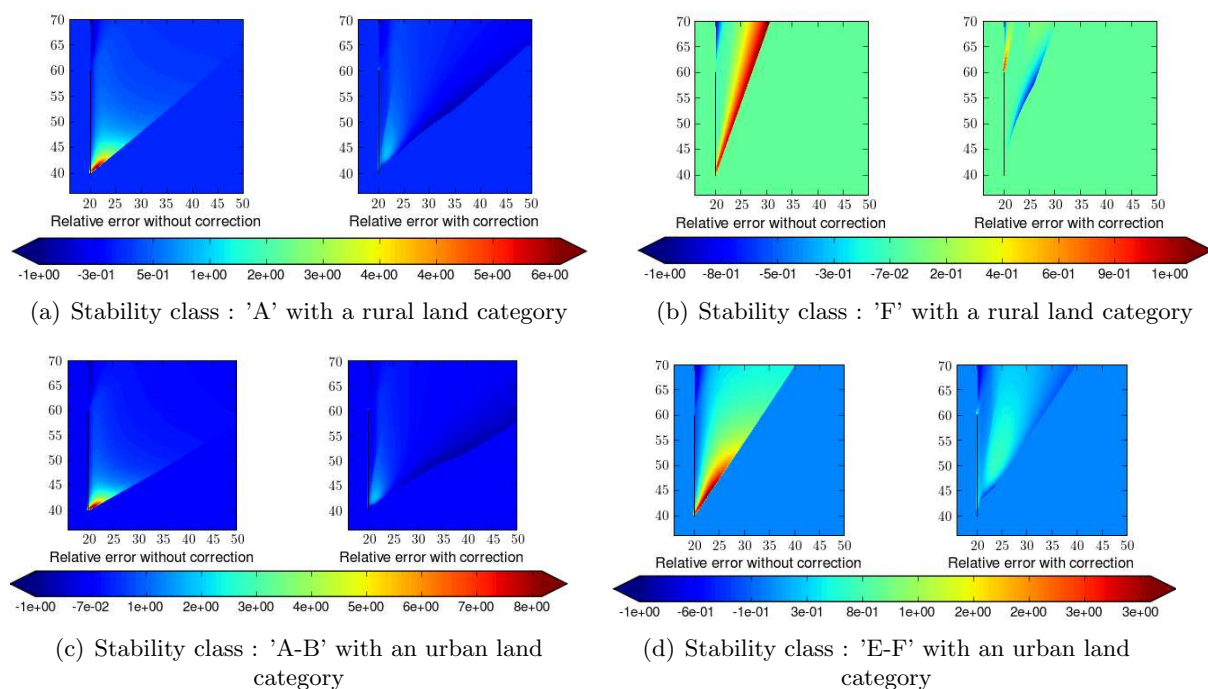


Figure 2.13: Error map without (left) and with (right) model corrections ($\theta = 80^\circ$).

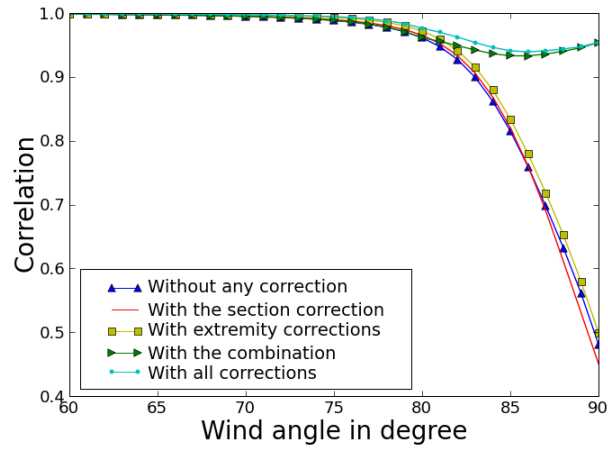


Figure 2.12: Correlation between the reference results and the line source results as a function of the wind angle. Without any correction: Equation 2.7; with section correction: Equation 2.7, 2.9 and 2.10; with extremity correction: Equation 2.7 and 2.11; with combination: Equation 2.7 and 2.13; with all corrections Equation 2.13 and 2.14

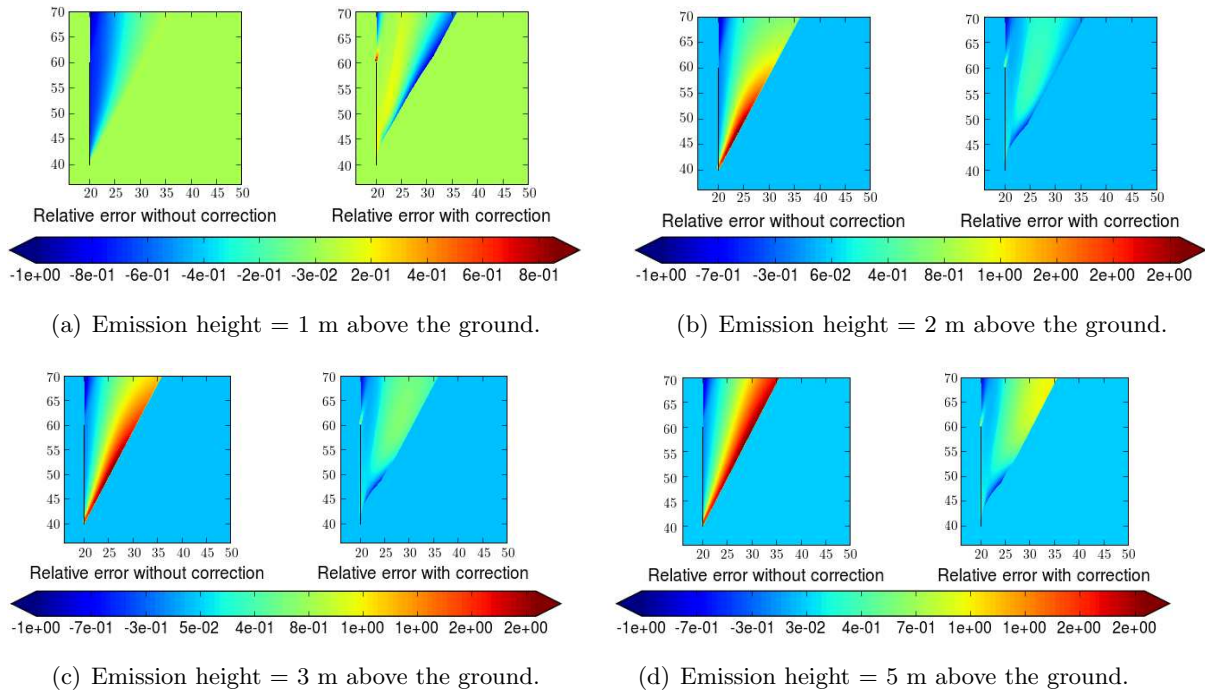


Figure 2.14: Relative errors without (left) and with (right) the corrections for several emission heights ($\theta = 80^\circ$).

When using the combination of analytical and discretized line source models (i.e., Equation 2.13 for θ in the range of 80 to 90°), the computational time for the line source is equivalent to a simulation with 25 point sources. This number is consistent with the addition of both computational times required for the analytical and discretized line sources (indeed, the

discretization step of 1 source per meter for a 20 meter long line source section leads to twenty additional point sources). However, this number will vary with the length of the line source section and the discretization step. Those computational times, which were obtained on the same computer, are summarized in Table 2.1.

Table 2.1: Computational times for different models, with different discretization steps (in second) for the discretized line source model and with different corrections for the improved line source model.

Number of road sections	1	2	10	50
2 point sources per road section	1.3	2.1	8.6	40.
10 point sources per road section	4.6	8.5	40.9	198.
50 point sources per road section	20.	40.	197.	983.
100 point sources per road section	40.	80.	395.	1956.
1000 point sources per road section	392.	795.	3966.	20146.
Line sources without any correction	1.6	2.4	9.0	41.
Line sources with corrections but without combination	2.6	4.5	19.	94.
Line sources with combination ^a	10.	20.	100.	500.

a. 20 point sources per road section

2.5.4 Comparison with near-road measurements

A recent study by [Taghavi *et al.* \[2010\]](#) used measurements of cadmium deposition [[Promeyrat-Qotbi, 2001](#)], performed in 1997 near an expressway in north-eastern France (A31, north of Metz), to evaluate several atmospheric dispersion models. One of those models, the point source Gaussian plume model of the Polyphemus modeling platform [[Korsakissok et Mallet, 2009](#); [Mallet *et al.*, 2007](#)], is equivalent to the discretized line source model mentioned above and used here when $\theta = 90^\circ$. The improved line source model, which was implemented in the Polyphemus modeling platform, was evaluated against the same measurements. Both Gaussian plume models are compared to each other as well as with observations for the month of February. The road section is 1 km long and the discretization step for the discretized Gaussian plume model was set to 1 source every 5 m [[Taghavi *et al.*, 2010](#)]. During this month, the wind direction varied from $\theta = -70^\circ$ to $\theta = 70^\circ$.

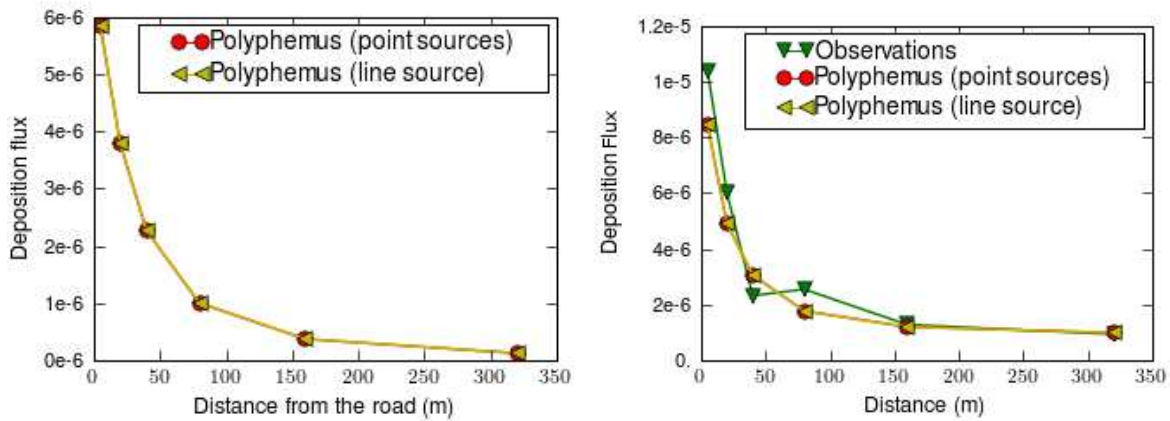
The wet deposition flux was negligible and only the dry deposition flux F_{dry} , needed to be computed using the following formulation [[Venkatram et Pleim, 1999](#)] :

$$F_{\text{dry}}(x, y) = v_d C(x, y, 0); \quad \text{with : } v_d = \frac{v_g}{1 - \exp\left(-\frac{v_g}{v'_d}\right)} \quad (2.16)$$

where v_d is the deposition velocity, v'_d is the diffusive part of the deposition velocity and v_g is the gravitational settling velocity. The emission rate was set to $1.16 \times 10^{-3} \mu\text{g s}^{-1} \text{m}^{-1}$.

Both Polyphemus Gaussian dispersion models give the same results for a one-day simulation, as shown in Figure 2.15(a) for 3 February 1997, when the wind direction was 10° . The measured deposition fluxes were averaged over the whole month and the model evaluation is shown in Figure 2.15(b) for that period.

The simulated average deposition flux over the whole month was corrected with a background deposition concentration, which was set to the value given by the receptor located farther from the road. Both Polyphemus models give the same results, which compare well to measurements, except near the road where the model underestimates the deposition flux. These results confirm that the line source model gives excellent results when compared with a reference solution and performs satisfactorily when compared to measurements. Furthermore, this line source model is about 40 times more computationally efficient than the discretized line source model in this case. Unfortunately, the measurements are not accurate enough (a few receptor points, averaged over each day for a month) to see the influence of the correction presented above (less than $10^{-8} \mu\text{g m}^{-2} \text{s}^{-1}$ for one day, i.e., on the order of 1 % of the observed flux). Future work will be conducted to evaluate the effect of the correction with more measurements near roadways.



(a) Total cadmium deposition flux on February 3rd 1997. (b) Average corrected deposition flux during 19 days in February 1997.

Figure 2.15: Cadmium deposition flux in $\mu\text{g m}^{-2} \text{s}^{-1}$

2.6 Conclusion

An improved line source model has been developed, implemented and tested against a reference solution as well as some available measurements. It provides some improvement in terms of accuracy over previous formulations of the line source Gaussian plume model without being too demanding in terms of computational resources. In the case study presented here, the largest errors were associated with the extremities of the line source section; such errors will be partly compensated by contiguous line source sections when simulating a road network. For cases where the wind is parallel to the line source, the use of the analytical / discretized line source combination, allows one to minimize the error very effectively. Because this combination is only applied for a small range of wind directions, the increase in the overall computational time is not expected to be significant. Further work will focus on the evaluation of this model against other available measurements, and to apply the model to a full road network.

Chapitre 3

Évaluation du modèle de panache gaussien avec une campagne de mesure à grande échelle

Un modèle de panache gaussien fondé sur une formulation améliorée du modèle de Horst-Venkatram (HV) a été présenté dans le chapitre 2. Ce modèle donne de bon résultats sur des cas théoriques mais n'a pas été validé sur des cas réels à l'exception de dépôts de cadmium en bordure d'une autoroute. Par conséquent, une évaluation des performances de ce modèle (appelé Polyphemus ci-après) sur un grand cas d'étude en Île-de-France est présentée dans ce chapitre. Par ailleurs, le modèle a été légèrement amélioré dans le cadre de cette étude et une intégration de Romberg est utilisée pour modéliser la largeur de la route.

Le cas d'étude comprend des mesures réalisées en région parisienne durant un mois de l'hiver 2007 et un mois de l'été 2008. Le jeu de données utilisé pour les simulations contient d'une part les coordonnées de plus de 1300 tronçons représentant plus de 800 km de routes (subdivisés en plus de 5400 tronçons, plus petits pouvant être considérés comme linéiques) auxquels sont associés un taux d'émissions d'oxydes d'azote (NO_x) et d'autre part des mesures de concentrations de dioxyde d'azote (NO_2) réalisées à l'aide de tubes à diffusion passive sur 242 sites (moyennées sur deux périodes de deux semaines pour chaque campagne). Les données météorologiques requises pour une simulation gaussienne (couverture nuageuse, vitesse et direction du vent) ont été simulées avec le modèle "Weather Research and Forecasting" (WRF). Des concentrations de fond horaires en NO_2 , monoxyde d'azote (NO) et ozone (O_3) en deux sites distincts ont été calculées avec le modèle de chimie-transport Polair3D. Les mêmes données d'entrées ont été utilisées pour les simulations avec le modèle HV et avec le modèle Polyphemus. Cependant, il faut signaler que les concentrations de fond et les taux d'émissions sont disponibles uniquement pour l'année 2005 au lieu de 2007 et 2008. De plus, les taux d'émissions sont constants sur toute la période de mesures. Il y a donc des incertitudes sur les données d'entrées ; elles sont l'objet d'une étude de sensibilité ci-dessous. Puisque NO_2 est à la fois un polluant primaire (émis directement dans l'atmosphère) et un polluant secondaire (formé dans l'atmosphère par oxydation de NO par O_3 et d'autres oxydants), il faut calculer les concentrations de NO_2 à partir de la dispersion du composé inerte ($\text{NO}_x = \text{NO} + \text{NO}_2$) et des concentrations de fond. Pour cela, nous avons implémenté un schéma chimique simple permettant de modéliser la chimie de NO_2 en faisant l'approximation de régime stationnaire pour NO, NO_2 et O_3 . Des fractions par défaut de 10% des émissions de NO_2 et de 90% des émissions de NO_x ont été utilisées initialement.

Les résultats montrent que les modèles sous-estiment les mesures pour les deux campagnes

mais que la sous-estimation est plus forte en hiver. Les différences entre les modèles HV (sans les corrections introduites au chapitre précédent) et Polyphemus (avec les corrections introduites au chapitre précédent) sont très faibles. En revanche, bien que l'erreur quadratique moyenne soit importante, due à la sous-estimation des mesures par les modèles (environ $11 \mu\text{g m}^{-3}$ pour la campagne d'été avec une valeur moyenne observée de $26 \mu\text{g m}^{-3}$ et environ $15 \mu\text{g m}^{-3}$ pour la campagne d'hiver avec une valeur moyenne observée de $40 \mu\text{g m}^{-3}$), la corrélation totale est bonne (> 0.7). Une comparaison avec le modèle européen ADMS-Urban a aussi été effectuée sur un sous-domaine plus petit. Les trois modèles présentent une bonne corrélation mais ADMS-Urban présente une moyenne plus faible que Polyphemus et que le modèle HV pour les deux campagnes. Les valeurs simulées par ADMS sont très proches des valeurs de fond, suggérant un faible impact du modèle gaussien, ceci pouvant s'expliquer par une différence dans le traitement de la chimie entre les deux modèles. Cependant des différences apparaissent aussi dans les concentrations de NO_x , de fait, impliquant aussi des différences dues à la dispersion.

En comparant spécifiquement les modèles HV et Polyphemus pour un récepteur proche d'un tronçon routier on remarque que les différences surviennent principalement lorsque le vent est parallèle à la route. Ceci est dû au fait que la différence principale entre les deux formulations est la suppression par Polyphemus de la singularité du modèle HV qui apparaît lorsque le vent est parallèle à la route. Cependant, nous ne disposons pas de mesures temporelles (uniquement des mesures moyennées sur toute la période des mesures) pour déterminer quel modèle est plus proche des mesures. Une autre différence importante entre les deux modèles réside dans le temps de calcul nécessaire. En effet, le temps de calcul est plus élevé avec Polyphemus, principalement dû à la discrétisation faite lorsque le vent est parallèle à la route. La différence est importante (facteur 10), cependant le pas de la discrétisation spatiale de la source faite par Polyphemus est un paramètre qui peut être ajusté pour d'obtenir un temps de calcul plus raisonnable. Ici nous avons choisi un pas d'une source par mètre car le temps de calcul total restait raisonnable. Pour les cas où le temps de calcul deviendrait trop important, ce pas de discrétisation pourra être plus large. Par exemple dans ce cas ci, un pas de 5 m au lieu de 1 m engendre une différence dans les résultats inférieure à 1 % pour une réduction du temps de calcul d'un facteur 3.3. Une autre méthode pour réduire le temps de calcul est de répartir les calculs sur plusieurs processeurs. En effet, chaque situation météorologique étant indépendante, elles peuvent être calculées séparément sur plusieurs processeurs. De plus, certaines situations sont identiques (à un facteur multiplicatif près pour la vitesse du vent ou le taux d'émission) et il n'est pas nécessaire de toutes les calculer.

Une étude de sensibilité sur les données d'entrées à été menée afin de tenter d'améliorer les résultats obtenus précédemment. En effet, l'ajout d'un profil temporel permet une meilleure modélisation des émissions, notamment pour les variations journalières du trafic. L'utilisation de la longueur de Monin-Obukov, calculée par WRF, à la place de la couverture nuageuse, pour définir la classe de stabilité associée à chaque situation météorologique est une méthode plus précise. Enfin une fraction de 15% de NO_2 , au lieu de 10% initialement, est une valeur plus réaliste pour le parc automobile roulant des années 2007 et 2008 dans la région Île-de-France. Bien que ces 3 corrections diminuent la sous-estimation des mesures par les modèles, elle reste toujours importante pour la campagne d'hiver. Plusieurs explications potentielles sont données, notamment l'incertitude liée aux mesures par tubes à diffusion passive qui peut être importante. Une autre explication est que les émissions pourraient être sous-estimées en hiver, potentiellement à cause de congestions du trafic liées aux intempéries qui sont plus importantes en hiver. Les émissions à froid sont aussi une source d'incertitude mais il n'a jamais été montré qu'elles aient un impact significatif sur les émissions totale de NO_x . Un cas théorique, où les

émissions du trafic on été multipliées par un facteur 2, donne des résultats plus proches des mesures. Une autre source d’incertitude est les concentrations de fond qui ont été simulées et qui sont spatialement constantes (voir chapitre 4). L’incertitude sur les données d’entrées joue donc un rôle important sur les résultats. Si l’on se réfère aux critères pour la performance des modèles de dispersion gaussiens publiés dans la littérature, au vu des résultats obtenus, la performance de Polyphemus peut être qualifiée de satisfaisante.

Sommaire

3.1	Abstract	45
3.2	Introduction	45
3.3	Description of gaussian plume models	46
3.3.1	Line source formulation	46
3.3.2	The Horst-Venkatram formulation	46
3.3.3	The Polyphemus line source model	47
3.3.4	The Atmospheric Dispersion Modeling System (ADMS-Urban)	48
3.4	Case study	48
3.4.1	Simulation set-up	48
3.4.2	General results	50
3.4.3	Comparison to ADMS-Urban	51
3.4.4	Comparison to the HV formulation	52
3.4.5	Computational time	53
3.4.6	Sensitivity to input data	55
3.5	Conclusion	57
3.6	Acknowledgments	59
3.7	Supplementary Material	59
3.7.1	General results	59
3.7.2	Comparison to the HV formulation	61
3.7.3	Sensitivity to input data	63

Ce chapitre est constitué de Briant *et al.* [2012] :

- Briant, R., Seigneur, C., Gadrat M., Bugajny C. (2012). Comparison study between measurements and roadway Gaussian plume models. *Submitted to Geosci. Model Dev.*

3.1 Abstract

Gaussian models are commonly used to simulate atmospheric pollutant dispersion near sources because they provide an efficient compromise between reasonable accuracy and manageable computational time. The Gaussian dispersion formula provides an exact solution to the atmospheric diffusion equation for the dispersion of a pollutant emitted from a point source. However, the Gaussian dispersion formula for a line source, which is convenient to model emissions from on-road traffic, is exact only when the wind is perpendicular to the line source. A novel approach that reduces the error in the line source formula when the wind direction is not perpendicular to the road was recently developed. This model, combined with a Romberg integration to account for the road width, is used to simulate NO_x concentrations in a large case study (1371 road sections representing about 831 km). NO_2 , NO and O_3 concentrations are then computed using the photostationary-state approximation. NO_2 concentrations are compared with measurements made at 242 locations in the domain area. Model performance is satisfactory with errors ranging from 24% to 31%. Results obtained here are also compared with those obtained with a previous formulation and with a standard model used for regulatory applications, ADMS-Urban. Discrepancies among the results obtained with those models are discussed.

Keywords: Gaussian plume model; line source; Polyphemus; ADMS-Urban

3.2 Introduction

Air quality modeling of the impacts of on-road mobile sources has been conducted using a variety of modeling techniques. Gaussian dispersion models are efficient to model the local impacts of road traffic emissions because they provide a good compromise between reasonable accuracy and manageable computational time. They have been used for instance to assess the effect of emission control measures on future air quality, to assess population exposure to air pollutant concentrations above air quality standards or to help select among various options for a new road location. Given usual Gaussian model assumptions (stationarity and homogeneity [Csanady, 1973]), the integration of the point source formula over a finite line is exact only for cases where the wind is perpendicular to the line source. This particularity is used in the U.S. CALINE series of models [Benson, 1992] and in the European Atmospheric Dispersion Modeling System (ADMS-Urban) [McHugh *et al.*, 2001], in which each line source is divided into elementary line sources that are assumed to be perpendicular to the wind direction. An alternative approach (i.e., non-perpendicular) has been to extend the finite line source formulation to other wind directions by derivation of the solution of an infinite line source (e.g., Calder, 1973; Esplin, 1995; Venkatram *et al.*, 2006; Briant *et al.*, 2011). The model of Briant *et al.* [2011] is an extension of the Horst-Venkatram (HV) formulation, that further minimizes the error due to the Gaussian formulation for a line source without significantly increasing the computational requirements (it is referred to hereafter as the Polyphemus line source model). In particular, it uses a numerical solution for cases where the wind becomes parallel to the line source, which prevents the solution from diverging. Although this model performs well for theoretical cases, it has not been evaluated yet with ambient concentration measurements. Here, we present a comprehensive model performance evaluation with a large case study in France. First, we briefly present this model and we combine it with a Romberg integration to take into account the road section width (Section 3.3); we also describe briefly the two other models that are included in this model performance evaluation: the HV model and

ADMS-Urban. In Section 3.4, we present the results of comparisons between model simulations and nitrogen dioxide (NO₂) concentration measurements with passive diffusion tubes [Plaisance *et al.*, 2004] conducted by the CETE Nord-Picardie in a large case study. This large case study included 1371 road sections for a total length of about 831 km. The models simulated NO_x concentrations. NO₂, NO and O₃ concentrations were then computed using the photostationary-state approximation along with the NO₂/NO_x emission fraction and background concentrations of NO₂, NO and O₃. Measurements were available at various locations of the domain area: 242 locations (Paris region). We also confronted the Polyphemus line source model on this case study to the HV formulation (with a special focus on cases where the wind is parallel to the roadway) and ADMS-Urban.

3.3 Description of gaussian plume models

3.3.1 Line source formulation

The Gaussian formulation of the concentration field for a pollutant emitted from a line source is the result of the integration of the point source solution over the line source (reflexion terms are indeed in the models but neglected here for simplicity):

$$C(x, y, z) = \int_{y_1}^{y_2} \frac{Q}{2\pi u \sigma_y(s) \sigma_z(s)} \exp\left(-\frac{z^2}{2\sigma_z^2(s)} - \frac{(y-s)^2}{2\sigma_y^2(s)}\right) ds \quad (3.1)$$

where C is the pollutant concentration in g m^{-3} at location (x, y, z) , x is the distance from the source along the wind direction in m, y and z are the horizontal and vertical cross-wind distances respectively from the plume centerline in m, u is the wind velocity in m s^{-1} , Q is the emission rate in g s^{-1} , y_1 and y_2 the ordinates of the source extremities, and σ_y and σ_z are the standard deviations representing pollutant dispersion in the cross-wind directions in m, which are derived from experimental data sets. For wind directions other than perpendicular to the line source, the dependency of standard deviations on the integration variable makes the integration impossible without approximations. Various approximations can be made [Yamartino, 2008]; we present here first the formulation recently proposed by Venkatram et Horst [2006]. Next, we describe the modifications made to the HV model, i.e., the Polyphemus line source model. Finally, we briefly describe the formulation of a standard model, ADMS-Urban, which is widely used in Europe for regulatory applications and included in this model performance evaluation.

3.3.2 The Horst-Venkatram formulation

The HV model consists in evaluating the integral by approximating the integrand and to exclude from the computation parts of the line source that are downwind of a given receptor. The effective distance d_{eff} (Equation 3.2) is used to compute σ_z and a distance d_i (Equation 3.3) from each extremity of the line source section in the wind direction for σ_y .

$$d_{\text{eff}} = x / \cos \theta \quad (3.2)$$

$$d_i = (x - x_i) \cos \theta + (y - y_i) \sin \theta \quad (3.3)$$

where x and y are the coordinates of the receptor and x_i and y_i the coordinates of the source extremity i (with $i = 1$ or 2) in the source coordinate system. The angle θ represents the angle between the normal to the line source and the wind direction.

Solving Equation 3.1 with the HV approximation leads to Equation 3.4, which provides the concentration field for all wind directions, except $\theta = 90^\circ$. The term $u \cos \theta$ represents the projection of the wind velocity onto the normal direction to the source. However, when the wind is parallel to the line source ($\theta = 90^\circ$), the term $\cos \theta$, on the denominator of the equation, makes Equation 3.4 diverge. To avoid the singularity of the HV formulation, we simply set here $\theta = 89^\circ$ instead of $\theta = 90^\circ$ when the wind is parallel to the road.

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\sqrt{2\pi}u \cos \theta \sigma_z(d_{\text{eff}})} \exp\left(\frac{-z^2}{2\sigma_z^2(d_{\text{eff}})}\right) \times \left[\operatorname{erf}\left(\frac{(y - y_1) \cos \theta - x \sin \theta}{\sqrt{2}\sigma_y(d_1)}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{(y - y_2) \cos \theta - x \sin \theta}{\sqrt{2}\sigma_y(d_2)}\right) \right] \quad (3.4)$$

If d_i , the distance used to compute σ_{y_i} from both extremities is negative, the receptor is not downwind of the extremity i . A receptor can be downwind of an extremity and upwind of the other. In that case, in the HV formulation, a segment of the source is excluded of the calculation by setting the term: $\operatorname{erf}\left(\frac{(y - y_i) \cos \theta - x \sin \theta}{\sqrt{2}\sigma_y(d_i)}\right)$ of Equation 3.4 to: $-\operatorname{sign}(\sin \theta)$.

3.3.3 The Polyphemus line source model

Equation 3.4 has been shown to give satisfactory results [Venkatram et Horst, 2006; Venkatram et al., 2007, 2009], however, the more the wind becomes parallel to the road, the greater the error and it diverges when the wind is parallel to the road. In Briant et al. [2011], this error associated with Equation 3.4 was computed by comparison to an exact solution (obtained by discretizing the line source into a very large number of point sources) and was parameterized using analytical formulas in order to improve the HV formulation :

$$C_{\text{line}}(x, y, z) = C(x, y, z) \times \left(\frac{1}{L(x_{\text{wind}}) + 1} \right) + E(x_{\text{wind}}, y_{\text{wind}}, z) \quad (3.5)$$

where C_{line} is the corrected concentration, C is the concentration given by the HV model (Equation 3.4), and L and E are correction functions from Briant et al. [2011].

For cases where the wind is parallel to the line source, the use of an analytical / discretized line source combination, allows one to minimize the error induced by the singularity very effectively (Equation 3.6). Because this combination is only applied for a small range of wind directions, the increase in the overall computational time is manageable.

$$\begin{aligned} \text{Concentration} &= C_{\text{line}} && \text{if } \theta \in [0, 80] \\ \text{Concentration} &= (1 - \alpha)C_{\text{line}} + \alpha C_{\text{discretized}} && \text{if } \theta \in]80, 90] \end{aligned} \quad (3.6)$$

This formulation performs well for all ranges of angles and it provides some improvement in terms of accuracy over previous formulations of the line source Gaussian plume model without being too demanding in terms of computational resources.

In addition to what is presented above, the model used here also includes a Romberg integration to account for the road width. This model is implemented in the Polyphemus modeling platform [Mallet et al., 2007], which is open source and distributed under GNU GPL (<http://cerea.enpc.fr/polyphemus>). For simplicity, we refer hereafter to this Polyphemus line source model as Polyphemus.

3.3.4 The Atmospheric Dispersion Modeling System (ADMS-Urban)

ADMS-Urban is an air quality modeling platform, which includes a line source Gaussian dispersion model that is widely used for regulatory applications in Europe [McHugh *et al.*, 2001]. As mentioned above, its approach is based on the fact that when the wind is perpendicular to the line source, Equation 3.1 can be solved without any additional approximation:

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\sqrt{2\pi}u\sigma_z(x)} \exp\left(\frac{-z^2}{2\sigma_z^2(x)}\right) \times \left[\operatorname{erf}\left(\frac{y - y_1}{\sqrt{2}\sigma_y(x)}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y - y_2}{\sqrt{2}\sigma_y(x)}\right) \right] \quad (3.7)$$

With ADMS-Urban, all line sources are decomposed into a maximum of 10 elementary sources that are perpendicular to the wind. The contributions of each of those elementary sources are summed to form the contribution of one finite line source.

3.4 Case study

3.4.1 Simulation set-up

This case study pertains to a very large road network in the Paris region, France. It includes concentration measurements made during winter 2007 and summer 2008. The dataset used for the simulations contains the following:

- The coordinates of 1371 road sections divided into 5425 smaller, but straight, sections representing a total of 831 km of linear road length.
- The NO_x emission rates associated to each road section computed with the CopCETE emission model, of the scientific and technical network (RST) of the French Environment Ministry, from traffic modeling results developed by the Department of Transportation for the Île-de-France region (DRE IF). CopCETE uses the European emission methodology COPERT 3 (COPERT 4 was not yet available when the original study was conducted).
- The NO₂ concentrations measured with passive diffusion tubes at 242 receptor points, averaged over each overall time period of the measurement campaign (4 campaigns : 2 × two-weeks in winter and 2 × two-weeks in summer).
- Meteorological data required for a Gaussian model: meteorological variables such as wind velocity, wind direction and cloud coverage were simulated with the Weather Research and Forecasting model (WRF) [Skamarock *et al.*, 2008] over the measurement time periods. Three nested domains were used (located over Europe, France and the Paris region) as used by Kim [2011]. The smaller domain has a resolution of 3 km. The WRF options selected for these simulations are given by Kim [2011]. Since Gaussian models use a single set of meteorological inputs for a given hour, domain-wide average values of the meteorological variables were used. In the initial simulation, the stability classes were defined according to wind speed and cloudiness. In a subsequent simulation, atmospheric stability was defined according to the Monin-Obukhov length.
- NO₂, NO and O₃ background concentrations: those were computed with the chemical-transport model Polair3D of the Polyphemus platform [Roustan *et al.*, 2010] at two specific locations : Cergy-Pontoise, which represents an urban background site, and Mantes-la-Jolie, which represents a rural background site. Values at these two locations were used to test the sensitivity of the model results to background concentrations.

We used the same dataset for the HV and Polyphemus model simulations. Background concentrations and emission rates were computed for the year 2005 instead of 2007 and 2008 because of a lack of year-specific traffic modeling data for the roads studied. Also, available emission rates were daily averaged values, which means that variation in traffic (congestion during rush hours for instance) is not taken into account. This traffic averaging induces some uncertainty in the results, which is investigated later using daily traffic profiles.

Figure 3.1 shows the road network along with NO_x emissions (in $\text{g day}^{-1} \text{m}^{-1}$) that were used. Triangles are the locations of passive diffusion tubes and black lines are road that are not included in this case study.

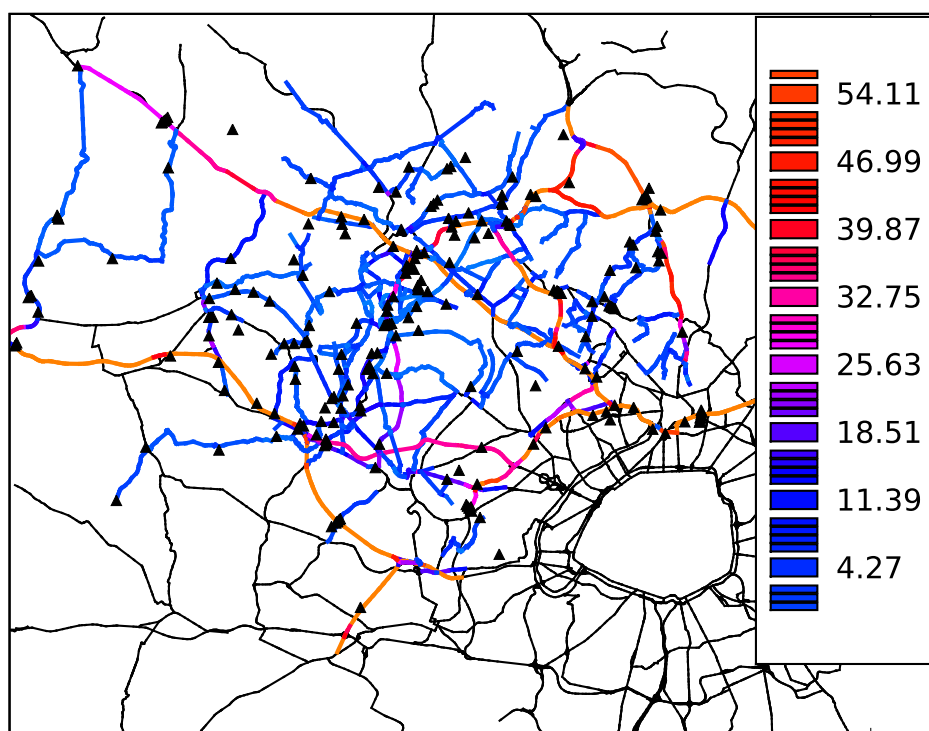
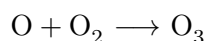
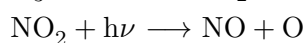
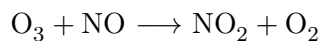


Figure 3.1: Road network used for the case study. NO_x emissions are in $\text{g day}^{-1} \text{m}^{-1}$.

The models presented above only disperse chemically inert compounds (NO_x , in this particular case, is assumed to be inert at the local scales considered here). In order to compare simulated values to measured NO_2 concentrations, some chemical reactions must be taken into account. The following simple chemical mechanism was implemented:



We invoke the photostationary-state approximation for O_3 , NO and NO_2 to solve the system and compute the NO_2 modeled concentrations. We considered a fraction of 10% of NO_2 and 90% of NO in the emissions by default. The impact of this assumption is investigated later.

3.4.2 General results

Passive diffusion tube measurements have greater uncertainty than continuous measurement methods such as the chemiluminescent technique; for example [Plaisance *et al.* \[2004\]](#) report an average error of 20% for passive diffusion tubes compared to chemiluminescence and [Soulhac *et al.* \[2012\]](#) reported a 40% overestimation of passive diffusion tubes compared to chemiluminescence. Here, the four-week averaged NO_2 concentrations (i.e., averaged value over both two-week time periods) are used for the comparison between measurements and models.

Figure 3.2 shows the comparison between NO_2 measurements and Polyphemus for all measurement sites. On average, modeled values underestimate measurements for both campaigns with a greater underestimation for the winter campaign because measured values are higher in winter than in summer but modeled values are commensurate in both seasons. The underestimation may be due to the emission rates that do not take into account daily traffic variation or to the meteorological inputs; these issues are addressed below. There is more variability in NO_2 concentrations during the summer campaign. Differences between the HV model and Polyphemus are small, therefore, the HV model results are not shown in Figure 3.2.

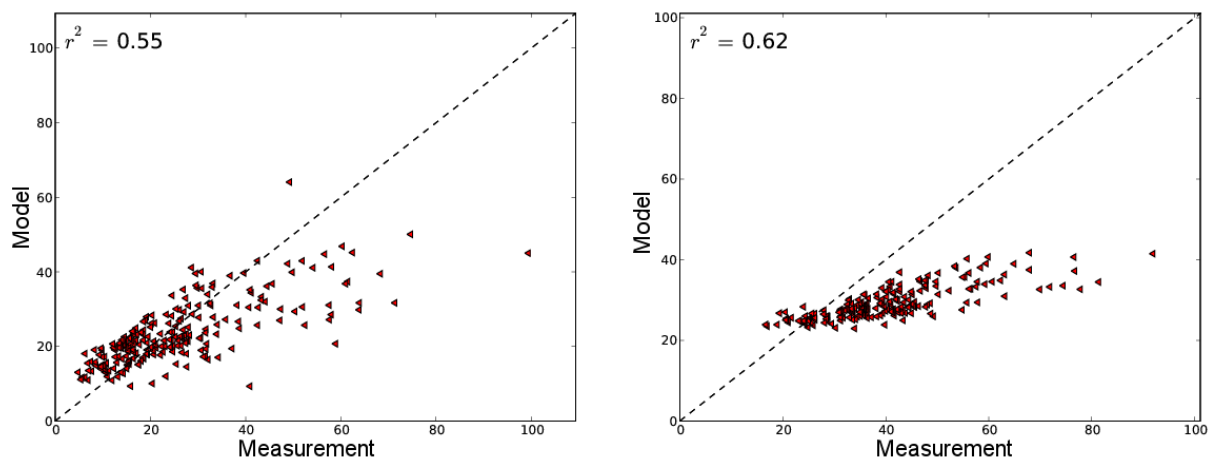


Figure 3.2: Scatter plot of measurements versus Polyphemus in $\mu\text{g m}^{-3}$ (summer campaign on the left and winter campaign on the right).

Performance statistics for the two campaigns are summarized in Table 3.1. Results are shown using the "rural" dispersion option, in the HV and Polyphemus models, and the Cergy-Pontoise urban background concentrations. Using the Mantes-la-Jolie rural background concentrations led to slightly lower NO_2 concentrations (see Supplementary Material); with the Cergy-Pontoise urban background concentrations the model error was similar but the model underestimation was slightly larger, e.g., -33% vs -10% for the summer campaign and -35% vs -28% for the winter campaign. Using the "urban" dispersion option led to poorer performance for the HV

and Polyphemus models (see Supplementary Material) as expected since the road network is located in the Paris suburbs. Differences between both models are not significant (less than $0.1 \mu\text{g m}^{-3}$). These minor differences between the HV model and Polyphemus result from cases where the wind is parallel to the road as documented below.

Compared to the mean values, the RMSE is important (around $11 \mu\text{g m}^{-3}$ for the summer campaign and around $15 \mu\text{g m}^{-3}$ for the winter campaign). However, the overall correlation is between 0.74 and 0.79, which indicates that the model explains more than half of the spatial variability observed in the NO_2 measurements.

Table 3.1: Performance indicators of Polyphemus, the HV formulation with the "rural" option with Cergy-Pontoise background concentrations. See Appendix C for the definition of the performance indicators.

Performance indicator	Summer campaign		Winter campaign	
	HV	Polyphemus	HV	Polyphemus
Measured mean value ($\mu\text{g m}^{-3}$)	26.0		40.5	
Modeled mean value ($\mu\text{g m}^{-3}$)	23.5	23.6	29.2	29.3
Correlation	0.74	0.74	0.78	0.79
RMSE ($\mu\text{g m}^{-3}$)	10.9	10.8	15.1	15.0
MNE	0.32	0.32	0.26	0.26
MNB	0.08	0.08	-0.23	-0.23
NME	0.29	0.29	0.29	0.29
NMB	-0.09	-0.09	-0.28	-0.28
MFE	0.30	0.30	0.31	0.31
MFB	0.00	0.00	-0.28	-0.28

3.4.3 Comparison to ADMS-Urban

Both four-week measurement periods were modeled by the CETE Nord-Picardie with ADMS-Urban for the same case study but on a smaller domain; 62 out of 242 measurement sites were modeled. Performance statistics are summarized in Table 3.2 for ADMS-Urban, Polyphemus and the HV model.

All 3 models show good correlations for both campaigns (i.e., greater than 0.7), which suggests good agreement among models. However, ADMS-Urban has a much lower average value than Polyphemus and the HV model for both campaigns. Therefore, ADMS-Urban underestimates measurements even more than Polyphemus and the HV model. ADMS-Urban average values are close to the background concentration (i.e., less than $1 \mu\text{g m}^{-3}$), which suggests that traffic emissions have a limited impact on the overall concentrations, therefore, suggesting that differences between models might be due in part to the chemistry scheme. ADMS-Urban uses the Generic Reaction Set (GRS) chemistry model [Azzi et Johnson, 1993] whereas Polyphemus and HV use the chemistry scheme presented above. Differences also exist in the NO_x concentrations simulated by ADMS-Urban and Polyphemus, which implies differences in the treatment of atmospheric dispersion.

Table 3.2: Performance indicators of Polyphemus, the HV model and ADMS-Urban for the smaller domain.

Summer campaign	HV formulation	Polyphemus	ADMS-Urban
Measured mean value ($\mu\text{g m}^{-3}$)	22.5		
Modeled mean value ($\mu\text{g m}^{-3}$)	19.8	20.0	9.6
Correlation	0.82	0.82	0.73
RMSE ($\mu\text{g m}^{-3}$)	9.1	9.0	17.4
MNE	0.34	0.33	0.48
MNB	0.07	0.07	-0.46
NME	0.29	0.29	0.58
NMB	-0.12	-0.11	-0.57
MFE	0.32	0.31	0.68
MFB	-0.10	-0.01	-0.66
Winter campaign	HV formulation	Polyphemus	ADMS-Urban
Measured mean value ($\mu\text{g m}^{-3}$)	35.15		
Modeled mean value ($\mu\text{g m}^{-3}$)	27.1	27.2	19.4
Correlation	0.80	0.80	0.79
RMSE ($\mu\text{g m}^{-3}$)	12.9	12.8	19.1
MNE	0.24	0.24	0.40
MNB	-0.15	-0.15	-0.39
NME	0.28	0.28	0.45
NMB	-0.23	-0.23	-0.45
MFE	0.28	0.28	0.52
MFB	-0.20	-0.20	-0.52

3.4.4 Comparison to the HV formulation

As expected, the HV model results are similar to the Polyphemus results because the two models differ significantly only in cases when the wind is close to parallel to the road [Briant *et al.*, 2011]. Indeed, because the concentration results are averaged over four-week periods, differences that occur only for a few specific hours when the wind is parallel to the road, have limited influence over the results.

To characterize those situations when the two models may differ, we computed time series for each of the 242 receptor locations and identified situations when the wind is parallel to the road. We computed differences between concentrations obtained with the HV model and with Polyphemus for meteorological situations when the wind is parallel to the road. We selected 3 receptor locations (summer campaign with "rural" option), that are located close to one specific road section each (i.e., receptors influenced by several road sections were not considered). The aim was to enhance the influence of this specific road section on the receptor while avoiding interference from other road sections that may not be parallel to the wind direction. Nevertheless, most receptors showed some similar results. Results are depicted in Figure 3.3 for one of these receptors and in the Supplementary Material for the other two.

When the wind is almost parallel to the road, the difference between both formulations is

much more important than for other meteorological situations; and the NO_2 concentrations are better correlated between both formulations when the wind is not parallel to the road ($r^2 = 0.77$ vs. $r^2 = 1.$).

We notice on Figure 3.3 that all hours with a large difference between both models occur when the wind is parallel to the road; however, there are also many points with small differences that occur when the wind is parallel to the road. Those points correspond to meteorological situations when the wind is parallel to the road but from the southeast, i.e., when most of the road is not upwind of the receptor (i.e., the receptor is impacted by a small portion of the road section). Figure 3.4 (derived from Figure 3.3) shows that most of the error between the two models occurs when most of the road is upwind of the receptor. There are still some points with a small difference that occur when most of the source is upwind of the receptor; those can be attributed to situations when the background concentration is predominant (i.e., the model contribution to the total concentration is less significant than the background contribution).

Polyphemus gives higher concentrations than the HV model on average when the wind is nearly parallel to the road. In this particular case where concentrations are underestimated (Figure 3.2), this leads to better performance by Polyphemus. However, as previously stated in Section 3.4.2, this underestimation of concentrations might come from the emissions rates that do not take into account daily traffic variation and it is not possible to say whether or not concentrations would still be underestimated with better emissions rates.

Unfortunately, there are no measurements available to determine which formulation performs better. However, from a theoretical point of view, when the wind is parallel to the road, the HV formulation diverges whereas the Polyphemus formulation uses the analytical / discretized line source combination, so we may conclude that Polyphemus is more accurate for those specific conditions. It would be interesting to conduct a specific study with hourly measurements of a traffic pollutant (NO_2 , NO_x , CO, etc.), meteorological data and well defined hourly traffic data to confirm this assessment.

3.4.5 Computational time

A major difference between the HV model and Polyphemus is the computational time. As expected, the computational time is greater with Polyphemus because of the corrections made to the HV formulation, mostly for the parallel wind cases. With a 2.67 GHz processor, the computational time required to simulate one meteorological situation for 242 receptors (i.e., the locations of the passive diffusion tubes) and for all 5425 line sources is about 5 s with the HV formulation, while it is about 50 s with Polyphemus.

The difference is important and is due to the fact that for each meteorological situation, there are some road sections parallel to the wind, which activate the analytical / discretized line source combination in the Polyphemus formulation. Here, we used a discretization step set of 1 m (i.e., 1 point source per meter for each line source) with a maximum set to 1000 point sources per line source so that the computation remained reasonable. Because the total length of all sources is important (about 831 km), the increase in computational time is important, a factor 10, as presented above.

This must be balanced by the fact that the discretization step for the combination can be adjusted to decrease the computational burden. We choose here to use a 1 m discretization step

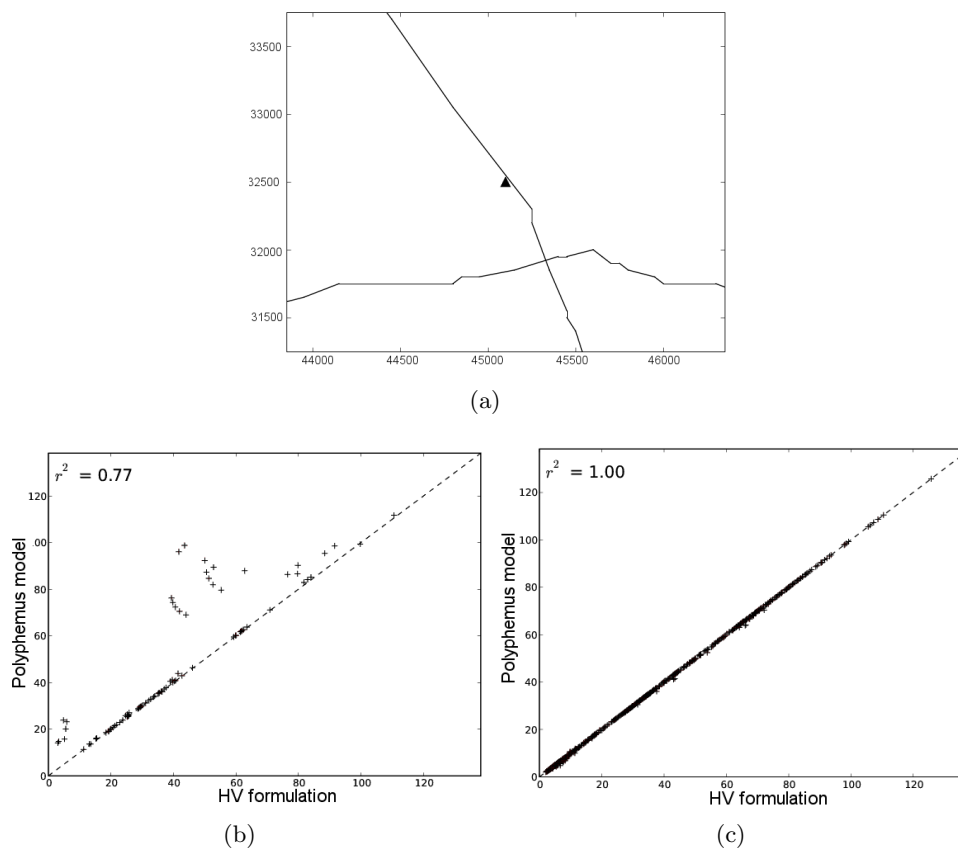


Figure 3.3: Comparison between the HV and Polyphemus models of simulated NO_2 hourly concentrations ($\mu\text{g m}^{-3}$, summer campaign). (a) : Map of the passive diffusion tube location with respect to the roads (coordinates are in meter). (b) : situations when the wind is parallel to the road ($\pm 10^\circ$). (c) : situations when the wind is not parallel to the road. The road direction is 151° (0° represent a wind coming from the north and 90° a wind coming from the east).

because the overall computational time remained manageable and because it has been shown to lead to an acceptable error [Briant *et al.*, 2011]. Note that the above simulation of one meteorological situation, computed with a discretization step of 5 m takes about 15 s instead of 50 s with a 1 m step and induces an average difference in concentration of less than 1% of the average concentration over all receptor points while the difference between Polyphemus and the HV model is still important (see Figure 3.5); therefore, a smaller discretization step would be acceptable to decrease computation burden.

If one wants to simulate a whole month, the overall computational time can be cumbersome for both formulations. However, it can be reduced easily by avoiding to compute duplicate meteorological situations. During the four-week period of simulation, there is a total of 672 hours (24 hours * 7 days * 4 weeks) while there are a maximum of 216 possible distinct meteorological situations (36 angles, with a resolution of 10° * 6 stability classes: A, B, C, D, E or F). It then requires about 3 hours to compute the whole four-week time period with the Polyphemus model. Moreover, because meteorological situations are independent, several processors can be used concurrently to decrease the computational burden further.

Note that two meteorological situations can be considered to be identical if the wind angle

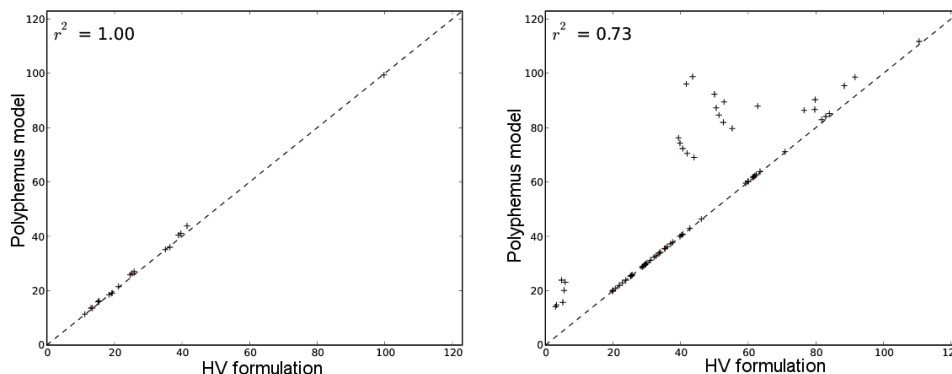


Figure 3.4: Comparison between the HV formulation and the Polyphemus formulation (summer campaign). Left side : wind angle equal to $150^\circ (\pm 10^\circ)$. Right side : wind angle equal to $330^\circ (\pm 10^\circ)$.

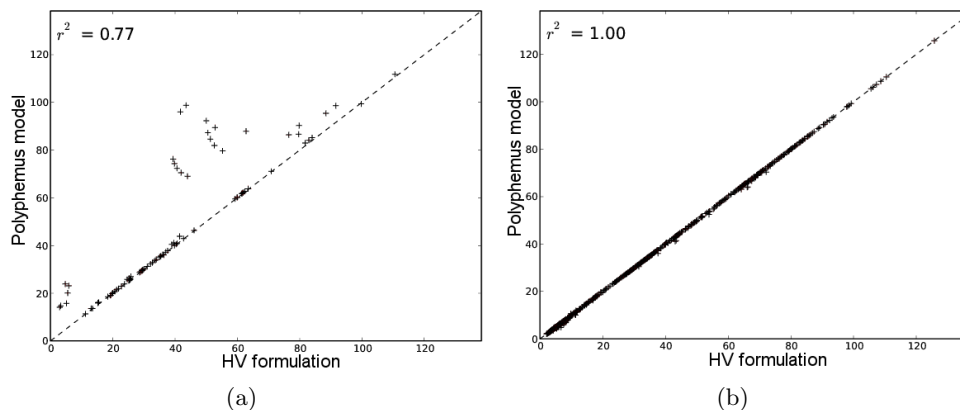


Figure 3.5: Same comparison as in Figure 3.3 but with a 5 m discretization step for Polyphemus. (a) : situations when the wind is parallel to the road ($\pm 10^\circ$). (b) : situations when the wind is not parallel to the road (summer campaign). The road direction is 151° (0° represent a wind coming from the north and 90° a wind coming from the east).

and the stability class are identical. The wind velocity does not matter because it is used as a coefficient that is adjusted in postprocessing (see Equation 3.4). The computational time of ADMS-Urban is not presented here because it was run on a different computer.

3.4.6 Sensitivity to input data

Even though performance indicators seem satisfactory according to Table 3.1, Figure 3.2 shows that the models underestimate concentrations, especially during the winter campaign. We are assuming, here, that the error is most likely due to input data rather than model formulation. As mentioned above, emissions are spatially distributed but constant in time, i.e., they do not take into account daily traffic variation. Furthermore, a 15% NO_2 fraction (instead of 10%) would be more representative of traffic conditions in the Paris region in 2007-2008 [Roustan *et al.*, 2010]. In addition the WRF output can be used to provide a more accurate representation of atmospheric conditions using the Monin-Obukhov length to characterize atmospheric stability

instead of cloud fraction and wind speed.

Figure 3.6 and Table 3.3 show simulations results for this first sensitivity case, which uses the GENEMIS [Friedrich et Reis, 2004] road traffic temporal profile, a 15% NO₂ fraction along with a better definition of stability classes using Monin-Obukhov length. The underestimation is still important for the winter campaign even though averaged concentrations have increased by 0.8 μg m⁻³ and 1.9 μg m⁻³ for the summer and the winter campaign respectively, (averaged concentration of 24.4 μg m⁻³ instead of previously 23.6 μg m⁻³ for the winter campaign and 31.2 μg m⁻³ instead of previously 29.3 μg m⁻³ for the summer campaign).

In order to evaluate the relative importance of these changes in model inputs, three simulations were ran using those three changes (i.e., the GENEMIS temporal profile, a 15% NO₂ fraction and a better definition of stability classes using Monin-Obukhov length) separately instead of combining them as in the first sensitivity case. The use of the Monin-Obukhov length and a 15% NO₂ fraction increase performance for both campaigns while the use of the GENEMIS temporal profile tends to decrease model performance slightly. Nevertheless, the use of a temporal profile for emissions was considered to be relevant despite the decrease in performance, because our purpose was to decrease the overall input data uncertainty rather than to evaluate the effect of individual changes. Therefore, performance indicators for those three cases are shown in Supplementary Material only.

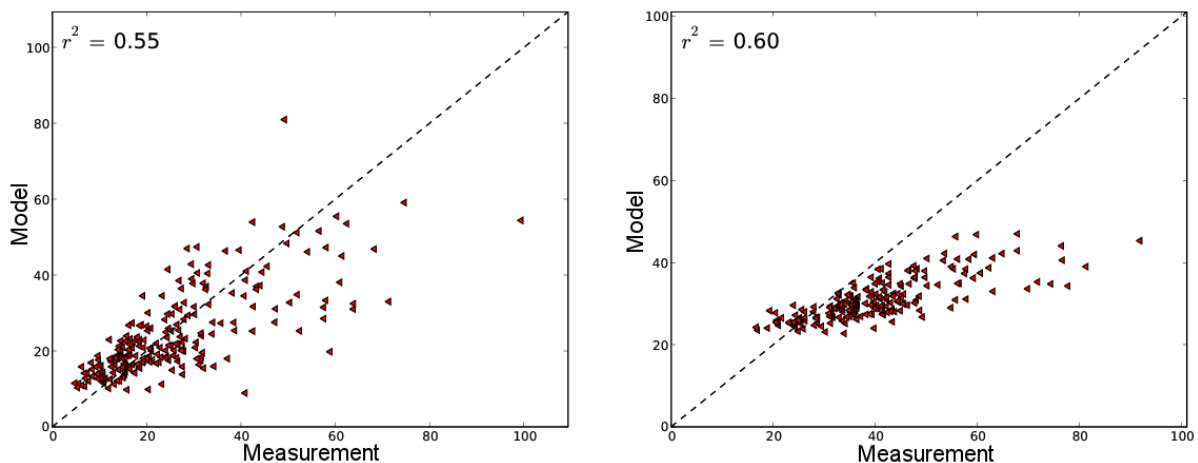


Figure 3.6: Scatter plot of measured versus Polyphemus using the "rural" option, the GENEMIS temporal profile, a 15% NO₂ fraction and stability classes based on Monin-Obukhov length (summer campaign on the left and winter campaign on the right).

Figure 3.6 shows satisfactory results for the summer campaign whereas for the winter campaign a significant model underestimation is visible.

As discussed above, the uncertainty in measurements is important (18% according to the Laboratory for environmental analysis passam ag) and depends on wind velocity and temperature [Plaisance et al., 2004]. Furthermore, Soulhac et al. [2012] concluded that passive diffusion tubes measurements are systematically overestimated by 40% compared to chemiluminescence measurements and, consequently, they applied a factor 0.69 as a correction. Such a correction factor applied to measurements would decrease measurements too much and lead to overestimations by the model, however, the fact that passive diffusion tubes measurements tend to overestimate NO₂ concentrations could explain why Polyphemus and the HV models

underestimate those measurements.

Possible sources of uncertainty include the following. Although all major road sections were modeled, some road sections were not and during winter time, there are additional emissions due to cold start because of the lower temperatures. The influence of cold start has not been shown to increase the total amount of emissions significantly in the Paris region-wide inventory; nevertheless, it is a potential source of underestimation of emissions, albeit not significant for NO_x . Furthermore, background concentrations are simulated at a single location, which adds some uncertainty. We investigate the case where NO_x emissions could be underestimated due to traffic congestion or greater emissions related to cold starts or a combination thereof. We increased NO_x emissions by a factor of two for the winter case. Results are presented in Figure 3.7 and Table 3.3 (second sensitivity case). The model results are in better agreement with the measurements, thereby suggesting a significant underestimation of NO_x emissions in the winter base inventory that could be due to a misrepresentation of traffic and / or NO_x emission factors.

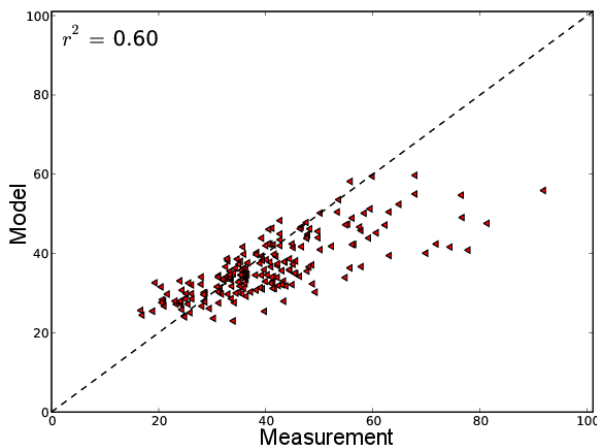


Figure 3.7: Scatter plot of measurements versus Polyphemus using corrections as in Figure 3.6 with emissions multiplied by 2 (winter campaign only).

3.5 Conclusion

The Polyphemus line source model has been presented and evaluated with a case study characteristic of a large roadway system. Uncertainties in input data (emissions, background concentrations, meteorological parameters) and in passive diffusion tube measurements have been discussed. The base simulations reflected operational input data sets and, as such, differed in their levels of detail. As a result we focused on the uncertainty in traffic emissions and meteorology.

According to Chang et Hanna [2004] a "good" model would be expected to have about 50% of the predictions within a factor of two of the observations, a relative mean bias within $\pm 30\%$, and a relative scatter of about a factor of two or three (see Appendix C for the definition of these performance indicators). Polyphemus has more than 92% of its predictions within a factor of two of the observations, a relative mean bias of 10% and 32%, respectively, for the summer and the winter campaigns, and a relative scatter of less than a factor of 1.2. With the

Table 3.3: Performance indicators of Polyphemus using the "rural" option. In the first sensitivity case, the GENEMIS temporal profile, a 15% NO₂ fraction and stability classes based on Monin-Obukhov length were used. In the second sensitivity case, the same inputs as in the first case along with doubled NO_x emissions for the winter campaign were used.

Performance indicator	First sensitivity case		Second sensitivity case
	Summer campaign	Winter campaign	Winter campaign
Measured mean value ($\mu\text{g m}^{-3}$)	26.0	40.5	
Modeled mean value ($\mu\text{g m}^{-3}$)	24.4	31.2	36.5
Correlation	0.74	0.77	0.77
RMSE ($\mu\text{g m}^{-3}$)	10.4	13.3	9.4
MNE	0.31	0.22	0.15
MNB	0.07	-0.18	-0.05
NME	0.28	0.25	0.16
NMB	-0.06	-0.23	-0.10
MFE	0.29	0.26	0.16
MFB	0.00	-0.22	-0.08

first sensitivity case, these performance criteria are met. Indeed, Polyphemus has more than 92% of its predictions within a factor of two of the observations, a relative mean bias of 0.06 for the summer campaign and 0.26 for the winter campaign and a relative scatter under 1.2. Therefore, Polyphemus fulfills the criteria to be considered as a "good" model despite the fact that emissions rates were annual averages. In addition, according to [Eskridge et Rao \[1986\]](#), a model is assumed to be "perfect" if its predicted values are within $\pm 30\%$ of the observed concentrations. Polyphemus modeled values are on average within $\pm 32\%$ and $\pm 31\%$ for the summer and the winter campaigns, respectively, in the first sensitivity case.

Polyphemus and the HV model, give similar results for the one-month average concentrations; ADMS-Urban tends to lead to lower concentrations. Although no major improvement of Polyphemus with respect to the HV model appears in the one-month averaged results, some major differences can be seen in specific situations when the wind is nearly parallel to the road. Computational time is more important with Polyphemus than with the HV formulation. However, the discretization step of the analytical / discretized line source combination can be adjusted in Polyphemus to decrease the computational time. Computations can also be parallelized easily to simulate several meteorological situations as needed for most applications. Sensitivity studies showed improvements in model performance when using realistic NO₂/NO_x emission ratios and more detailed meteorological information (e.g., Monin-Obukhov length). The results presented here also suggest the importance of temporally resolved and spatially distributed traffic inputs.

The Eulerian model Polair3D [[Boutahar et al., 2004](#)] of the modeling platform Polyphemus was applied for comparison. It showed a correlation around 0.4 and a RMSE around $17 \mu\text{g m}^{-3}$ for both time period. Polair3D performance is, therefore, poor compared to those of Gaussian plume models, because of the coarse horizontal resolution associated with Eulerian models (5 km in this application). Accordingly, future work will focus on improving Eulerian model

performance by using a the Gaussian plume model for the subgrid-scale representation of major line sources.

3.6 Acknowledgments

We acknowledge the GENEMIS project, which provides the emission temporal profile. We also acknowledge the National Centers for Environmental Prediction (NCEP) for providing initial and boundary conditions that were used for the WRF model simulations. Finally, we acknowledge the Department of Transportation for the Île-de-France region (DRE IF) for providing the traffic modeling results.

3.7 Supplementary Material

3.7.1 General results

Table 3.4: Performance indicators of Polyphemus, the HV formulation with the "urban" option with Cergy-Pontoise background concentrations.

Performance indicator	Summer campaign		Winter campaign	
	HV	Polyphemus	HV	Polyphemus
Measured mean value ($\mu\text{g m}^{-3}$)	26.0		40.5	
Modeled mean value ($\mu\text{g m}^{-3}$)	17.2	17.3	26.1	26.2
Correlation	0.75	0.75	0.79	0.79
RMSE ($\mu\text{g m}^{-3}$)	14.1	14.0	18.0	17.9
MNE	0.32	0.32	0.33	0.33
MNB	-0.22	-0.22	-0.31	-0.31
NME	0.37	0.37	0.37	0.36
NMB	-0.34	-0.34	-0.36	-0.36
MFE	0.38	0.38	0.41	0.40
MFB	-0.30	-0.30	-0.39	-0.39

Table 3.5: Performance indicators of Polyphemus, the HV formulation with the "rural" option with Mantes-la-Jolie background concentrations.

Performance indicator	Summer campaign		Winter campaign	
	HV	Polyphemus	HV	Polyphemus
Measured mean value ($\mu\text{g m}^{-3}$)	26.0		40.5	
Modeled mean value ($\mu\text{g m}^{-3}$)	22.5	22.6	25.6	25.7
Correlation	0.74	0.74	0.78	0.79
RMSE ($\mu\text{g m}^{-3}$)	11.2	11.1	17.8	17.7
MNE	0.31	0.30	0.34	0.34
MNB	0.02	0.02	-0.33	-0.33
NME	0.30	0.29	0.37	0.37
NMB	-0.13	-0.13	-0.37	-0.37
MFE	0.30	0.30	0.42	0.42
MFB	-0.05	-0.05	-0.42	-0.41

Table 3.6: Performance indicators of Polyphemus, the HV formulation with the "urban" option with Mantes-la-Jolie background concentrations.

Performance indicator	Summer campaign		Winter campaign	
	HV	Polyphemus	HV	Polyphemus
Measured mean value ($\mu\text{g m}^{-3}$)	26.0		40.5	
Modeled mean value ($\mu\text{g m}^{-3}$)	16.0	16.0	22.0	22.0
Correlation	0.75	0.75	0.79	0.79
RMSE ($\mu\text{g m}^{-3}$)	14.9	14.8	21.3	21.2
MNE	0.34	0.34	0.42	0.42
MNB	-0.28	-0.28	-0.42	-0.42
NME	0.40	0.40	0.46	0.46
NMB	-0.38	-0.38	-0.46	-0.46
MFE	0.43	0.43	0.56	0.55
MFB	-0.38	-0.38	-0.55	-0.55

3.7.2 Comparison to the HV formulation

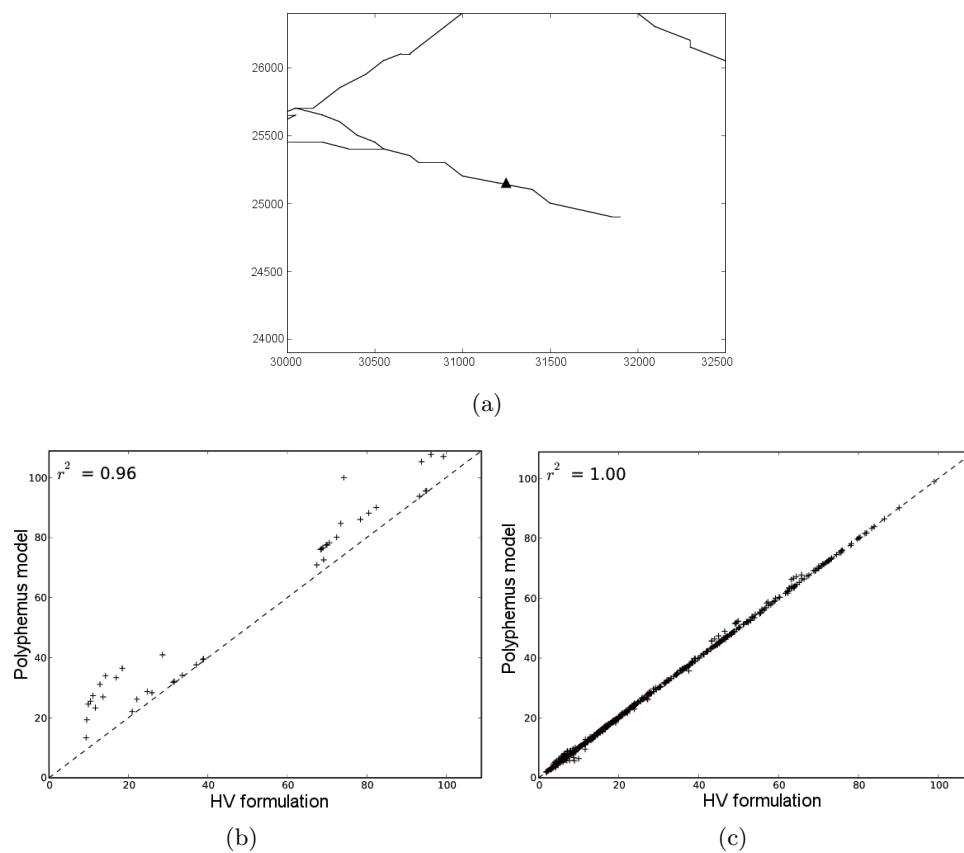


Figure 3.8: Comparison between the HV and Polyphemus models of simulated NO_2 hourly concentrations ($\mu\text{g m}^{-3}$). (a) : Map of the passive diffusion tube location with respect to the roads (coordinates are in meter). (b) : situations when the wind is parallel to the road ($\pm 10^\circ$). (c) : situations when the wind is not parallel to the road (summer campaign). The road direction is 111° (0° represent a wind coming from the north and 90° a wind coming from the east).

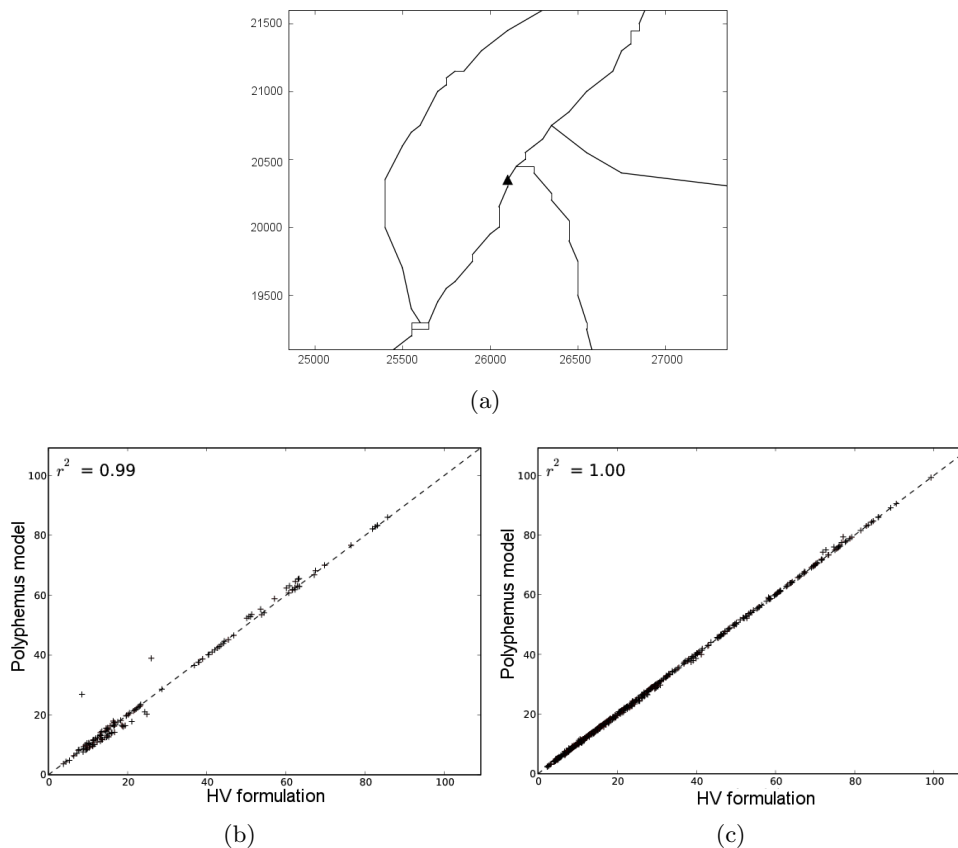


Figure 3.9: Comparison between the HV and Polyphemus models of simulated NO_2 hourly concentrations ($\mu\text{g m}^{-3}$). (a) : Map of the passive diffusion tube location with respect to the roads (coordinates are in meter). (b) : situations when the wind is parallel to the road ($\pm 10^\circ$). (c) : situations when the wind is not parallel to the road (summer campaign). The road direction is 16° (0° represent a wind coming from the north and 90° a wind coming from the east).

3.7.3 Sensitivity to input data

Table 3.7: Performance indicators of Polyphemus using the "rural" option. In the Monin-Obukhov length column stability classes are based on Monin-Obukhov length, in the GENEMIS column the GENEMIS temporal profile was used and in the NO₂ fraction column a 15% NO₂ fraction was used.

Summer campaign	Monin-Obukhov length	GENEMIS	NO ₂ fraction
Measured mean value ($\mu\text{g m}^{-3}$)	26.0		
Modeled mean value ($\mu\text{g m}^{-3}$)	26.5	21.03	24.0
Correlation	0.74	0.74	0.74
RMSE ($\mu\text{g m}^{-3}$)	10.28	11.67	10.67
MNE	0.35	0.29	0.33
MNB	0.19	-0.05	0.09
NME	0.29	0.30	0.29
NMB	0.02	-0.19	-0.07
MFE	0.31	0.31	0.30
MFB	0.10	-0.12	0.02
Winter campaign	Monin-Obukhov length	GENEMIS	NO ₂ fraction
Measured mean value ($\mu\text{g m}^{-3}$)	40.5		
Modeled mean value ($\mu\text{g m}^{-3}$)	31.5	28.4	29.9
Correlation	0.76	0.79	0.79
RMSE ($\mu\text{g m}^{-3}$)	13.3	15.79	14.4
MNE	0.22	0.28	0.25
MNB	-0.18	-0.25	-0.22
NME	0.25	0.31	0.28
NMB	-0.22	-0.30	-0.26
MFE	0.25	0.33	0.29
MFB	-0.21	-0.31	-0.26

Deuxième partie

Modèle de panache sous-maille

Chapitre 4

Modélisation multi-échelles de l'impact du trafic routier : développement et évaluation d'un modèle de panache sous-maille

Les modèles eulériens à mailles tridimensionnels sont largement utilisés pour la modélisation de la qualité de l'air à des échelles urbaine, régionale et globale. Dans ce type de modèle, les émissions sont instantanément diluées dans des mailles qui font un à plusieurs kilomètres de côté et plusieurs dizaines de mètres de hauteur et, de fait, la dispersion des polluants n'est modélisée que grossièrement près des sources. Cela peut avoir un impact important pour des récepteurs placés près des sources. De plus, dans une simulation régionale, l'approximation faite par la grille eulérienne peut aussi avoir un impact sur la formation de polluants secondaires car certaines réactions peuvent être quasiment supprimées ou au contraire fortement augmentées près de certaines sources. Par ailleurs, les modèles gaussiens, de panache ou à bouffées, sont conçus pour calculer la dispersion localement à proximité des sources. Les bouffées peuvent être utilisées pour simuler la concentration en polluants avec une chimie complexe à des distances importantes de la source mais elles sont nécessairement limitées en nombre. Les modèles gaussiens de panache sont efficaces du point de vue du temps de calcul mais ne peuvent pas être appliqués loin des sources en raison des hypothèses de stationnarité et d'homogénéité et ne peuvent pas être utilisés avec des schémas chimiques complexes en raison de leurs solutions analytiques. Il est donc intéressant de combiner un modèle local (panache ou bouffées) avec un modèle eulérien à mailles tridimensionnel afin de traiter conjointement les impacts locaux et régionaux des émissions. Une telle combinaison de modèles est appelée modèle de panache (ou à bouffées) sous-maille car un traitement de panache en sous-maille d'un modèle eulérien est utilisé pour représenter la contribution locale des sources.

Dans les modèles à bouffées sous-maille, des bouffées gaussiennes sont relâchées à une certaine fréquence afin de modéliser l'évolution de panaches dans le temps. Lorsqu'un critère prédéfini est atteint (basé sur la taille de la bouffée, sur son âge ou encore sur sa quantité de matière par rapport à la concentration de fond), elle est transférée au modèle eulérien qui continuera à la disperser à l'échelle régionale. Ces modèles sont donc capables de combiner la précision locale du modèle à bouffées avec la valeur de fond provenant du modèle eulérien. L'approche des modèles de panache sous-maille a été initialement développée pour des sources ponctuelles et est actuellement utilisée avec plusieurs modèles eulériens (voir Chapitre 1). Cependant, modéliser le trafic routier avec des panaches ponctuels oblige à une discrétisation spatiale des routes. Si,

de plus, on utilise des bouffées, il est aussi nécessaire de discrétiser temporellement la source. Le temps de calcul pour un modèle gaussien étant linéairement dépendant du nombre de bouffées, une telle approche est rédhibitoire pour la simulation d’un large réseau routier et il est important de développer pour les sources mobiles du trafic routier des techniques de modélisation en sous-maille qui soient plus efficaces en temps de calcul.

L’approche présentée ici utilise un modèle gaussien de panache linéique imbriqué dans un modèle eulérien. Le modèle gaussien utilisé a été présenté dans le Chapitre 2 et évalué avec des mesures en bord de routes dans le Chapitre 3. Le modèle eulérien hôte est Polair3D, de la plate-forme de modélisation de la qualité de l’air Polyphemus. Le couplage entre Polair3D et le modèle gaussien de panache est effectué comme suit. Après une étape d’initialisation pour les modèles eulérien et gaussien, une boucle temporelle commence. A ce moment, les concentrations du modèle gaussien calculées à l’itération précédente sont transférées au modèle eulérien. Les deux modèles effectuent ensuite chacun leur itération temporelle. Dans un premier temps, le modèle gaussien est utilisé pour calculer la dispersion à partir des sources en tous points du domaine. Dans un second temps, il est utilisé pour calculer les concentrations qui seront transférées au modèle eulérien à l’itération suivante. Enfin, le calcul de la chimie est effectué et les concentrations de sorties sont enregistrées. Chaque concentration est la somme de la valeur donnée par le modèle eulérien et de celle donnée par le modèle gaussien, calculée au temps t . Les concentrations du modèle gaussien des itérations précédentes ont été transférées au modèle eulérien et sont donc prises en compte dans la valeur donnée par le modèle eulérien au temps t . Les données des émissions linéiques sont supposées constantes dans le temps, cependant, un profil temporel peut lui être appliqué, par exemple selon la résolution temporelle du modèle eulérien.

Une étape importante de la modélisation est le transfert des polluants du modèle gaussien au modèle eulérien. Cette méthode de transfert diffère nécessairement de ce qui a pu être fait jusqu’à présent dans d’autres modèles à cause de la nature stationnaire et linéique des panaches émis par le modèle gaussien. Nous avons choisi de calculer la contribution de la source en plusieurs points (ensemble de points \mathbb{P}) d’une surface trapézoïdale S localisée à une distance $D1$ de la source. On associe ensuite à chaque point de \mathbb{P} une quantité de matière, dépendant linéairement de la concentration calculée en ce point. Cette quantité de matière sera ensuite transférée à la maille du modèle eulérien dans laquelle se trouve le point. La quantité de matière totale transférée sera égale à la quantité de matière émise par la source pendant le pas de temps courant. Les calculs du modèle gaussien étant prépondérants quand le nombre de source traitées est important, ils ont été parallélisés à l’aide de la librairie MPI. Ainsi, le calcul de chaque source étant indépendant, l’ensemble des sources est réparti sur les différents processeurs disponibles. Le pas de temps pour les modèles eulérien et gaussien peuvent être différents. En effet, le modèle eulérien nécessite un pas de temps faible pour s’assurer de sa convergence. En revanche, de part sa nature stationnaire, le modèle gaussien est numériquement stable. Utiliser un pas de temps plus grand pour le modèle gaussien permet donc de diminuer le temps de calcul total mais induit une approximation dans les résultats.

Ce modèle est évalué sur le cas d’étude présenté dans le Chapitre 3. Ce cas contient des mesures réalisées en région parisienne durant un mois de l’hiver 2007 et un mois de l’été 2008. Le jeu de données utilisé pour les simulations a été présenté dans le Chapitre 3. Le domaine de modélisation englobe l’Île-de-France et est composé de 40 mailles (est-ouest) par 35 mailles (nord-sud) de 0.07° par 0.05° et comprend 9 niveaux verticaux. Les données d’entrées sont les mêmes pour la simulation avec Polair3D que pour celle faite avec le modèle de panache sous-maille. Cela étant, les émissions des sources linéiques ont été retranchées de l’inventaire

d'émissions surfacique de la simulation faite avec le modèle de panache sous-maille, afin que les émissions totales restent inchangées pour les deux modèles. Les émissions de NO_x ont été réparties en une fraction de 15% de NO_2 et 85% de NO et nous avons utilisé le même schéma chimique que celui présenté dans le Chapitre 3 pour calculer les concentrations de NO_2 à partir de la dispersion de NO_x . Ce schéma permet de modéliser la concentration de NO_2 en faisant l'approximation de régime stationnaire pour NO , NO_2 et O_3 .

Le modèle de panache sous-maille donne des performances semblables à celles du modèle gaussien mais avec une corrélation supérieure à 0.7 et des concentrations plus élevées en moyenne, donc plus proches des valeurs moyennes mesurées. De plus, le modèle de panache sous-maille offre l'avantage important d'une meilleure performance pour la période d'hiver, due à une meilleure représentation spatiale des concentrations de fond qui sont simulées par le modèle eulérien. En effet, le modèle gaussien sous-estime les mesures pour les deux campagnes et plus particulièrement la campagne d'hiver (une sous-estimation d'environ $1.5 \mu\text{g m}^{-3}$ représentant 5.8% de la valeur moyenne pour la campagne d'été et d'environ $9.3 \mu\text{g m}^{-3}$ représentant 23% de la valeur moyenne pour la campagne d'hiver). Le modèle de panache sous-maille réduit cette sous-estimation ainsi que la disparité entre les deux campagnes (une sous-estimation d'environ $0.1 \mu\text{g m}^{-3}$ représentant 0.4% de la valeur moyenne pour la campagne d'été et d'environ $4.3 \mu\text{g m}^{-3}$ représentant 10.6% de la valeur moyenne pour la campagne d'hiver). Cependant, les diagrammes de dispersion montrent des résultats plus dispersés pour la campagne d'hiver, conduisant à une corrélation légèrement inférieure (0.77 pour le modèle gaussien et 0.72 pour le modèle de panache sous-maille).

En revanche, Polair3D montre des performances bien plus faibles car les concentrations calculées avec Polair3D sont systématiquement inférieures ou égales à celles du modèle de panache sous-maille. Cela est dû au fait qu'avec Polair3D les émissions des sources linéiques, localisées près des points de mesures, sont diluées immédiatement dans une maille de plusieurs kilomètres de côtés alors que dans la simulation faite avec le modèle de panache sous-maille, elles sont traitées de manière plus réaliste avec le modèle gaussien.

Un schéma chimique plus complet prenant en compte l'oxydation de NO_2 en acide nitrique (HNO_3), ainsi que l'oxydation de certains composés organiques volatils émis par le trafic routier a également été implémenté. Sept composés organiques volatils : formaldéhyde, 1,3-butadiène, benzène, acétylaldéhyde, acroléine, propanal et éthylbenzène, sont traités dans le modèle de panache. Ils ont aussi été ajoutés au modèle eulérien et leur chimie est traitée de manière explicite sans que cela affecte le mécanisme chimique d'origine (ici, CBO5). Des simulations supplémentaires effectuées avec les émissions de COV donnent des résultats qui présentent le même comportement pour ces COV que pour NO_2 , c'est à dire des concentrations plus élevées en proximité des routes.

Une étude de sensibilité a montré que les résultats ne sont pas très sensibles au choix de la distance à laquelle les panaches sont injectés dans le modèle eulérien et au choix du pas de temps gaussien (< 1%). Cependant, les concentrations calculées avec une résolution temporelle inférieure à 1 h peuvent induire des différences importantes pour des récepteurs situés près des sources. Une comparaison entre ce modèle de panache sous-maille utilisant un modèle gaussien de panache et un modèle de panache sous-maille utilisant un modèle gaussien à bouffées donne des résultats similaires en termes de concentrations. Cependant, le temps de calcul n'est pas le même pour les deux modèles. En effet, puisque le modèle utilisant les sources linéiques ne doit gérer qu'une seule source, le calcul se fait en quelques secondes. En revanche, le modèle utilisant des bouffées, du fait de la discrétisation en temps et dans l'espace de la source, doit gérer environ 30000 bouffées et nécessite donc plusieurs heures de calcul. La parallélisation des

calculs du modèle gaussien (ici prédominants dus au nombre important de sources) montre de bonnes performances et permet donc de gérer un nombre important de sources. Ce nouveau modèle de panache sous maille est donc un outil intéressant permettant d’atteindre la précision locale d’un modèle gaussien dans une simulation régionale. Une comparaison avec des mesures horaires serait intéressante pour compléter cette étude et permettrait d’apprécier plus en détails les performances de ce nouveau modèle de panache sous-maille. Enfin, pouvoir utiliser ce modèle pour simuler des aérosols serait une amélioration intéressante qui pourrait faire l’objet de futurs travaux.

Sommaire

4.1	Abstract	69
4.2	Introduction	69
4.3	Model description	70
4.3.1	Eulerian model	71
4.3.2	Gaussian plume model	71
4.3.3	Coupling of Polair3D and the Gaussian plume model	71
	(i) Overview	71
	(ii) Transfer of pollutants from the Gaussian model to the Eulerian model	74
	(iii) Parallelization	76
	(iv) Chemistry	76
	(v) Gaussian and Eulerian time steps	78
4.4	Evaluation of the PinG model on a case study	78
4.4.1	Model set-up	78
4.4.2	Simulations using the three-reaction NO ₂ mechanism	80
4.4.3	Nine-reaction OH chemical scheme	83
4.5	Sensitivity studies	85
4.5.1	Sensitivity to distance D1	85
4.5.2	Sensitivity to the Gaussian time step	86
4.5.3	Comparison of PinG model simulations using puffs and line source Gaussian plumes	88
4.5.4	Computational time requirements	90
4.6	Conclusion	92
4.7	Acknowledgments	93
4.8	Supplementary Material	94
4.8.1	Concentration maps of selected VOC simulated with the nine-reactions chemical scheme for the Gaussian model.	94

Ce chapitre est constitué de Briant et Seigneur [2012] :

- Briant, R. et Seigneur, C. (2012). Multi-scale modeling of roadway air quality impacts : development and evaluation of a plume-in-grid model. *Atmos. Env. In Press dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2012.11.058*

4.1 Abstract

Eulerian three-dimensional (3D) grid-based models are widely used in air quality modeling. In such models, emissions are instantaneously diluted within the grid cells and, therefore, the near-source impacts of large point and line sources cannot be properly resolved. Plume-in-Grid models (PinG) use a subgrid-scale treatment to better represent local source contributions in an Eulerian grid-based simulation. PinG models already exist for point sources. However, modeling emissions from roadway traffic with point sources implies a very large computational burden. We present here a new PinG model that uses a Gaussian line source model, better suited than point sources to model roadway traffic emissions, embedded within an Eulerian model. The model is evaluated with a large dataset of nitrogen dioxide (NO₂) concentrations over a 800 km road network. The PinG model leads to greater NO₂ concentrations and shows better performance than the Eulerian model.

Keywords: Plume-in-Grid model; line source; traffic emissions; roadway; Polyphemus; Polair3D; NO₂

4.2 Introduction

Eulerian three-dimensional (3D) grid-based models are widely used in air quality modeling at urban, regional, and global scales. In such models, emissions are instantaneously diluted within the grid cells and, therefore, the near-source impacts of large point and line sources cannot be properly resolved. Furthermore, in regional-scale simulations, the approximation made by a grid-based model on the emissions from point and line sources of precursors of secondary pollutants can have a significant impact on the concentrations of those secondary pollutants, in particular with large grid cells. On the other hand, Gaussian plume and puff models are designed to model pollutant dispersion at local scales. Puff models can be applied to simulate pollutant concentrations with complex chemistry at long distances from their sources but can treat only a limited number of sources. Analytical Gaussian plume models are computationally efficient but cannot be applied far from sources and cannot treat complex chemistry. It is, therefore, of interest to combine a "local" plume or puff model with an Eulerian grid-based model in order to treat jointly the local and regional air quality impacts of major sources. Such a combination of local and regional models is typically called Plume-in-Grid (PinG) model, because a subgrid-scale treatment (local model) is used to better represent local source contributions in an Eulerian simulation. In a standard PinG model, Gaussian puffs are released with a certain frequency to model with a time discretization the evolution of a plume. When a predefined criterion is reached (based on the number of time steps, the size of the puff or the ratio of the puff concentration to the background concentration) pollutants are transferred from the plume to the Eulerian model, which can then compute the dispersion and transformation of pollutants at the regional scale. The PinG model is thus able to combine local precision from the puff / plume model with the background information from the Eulerian grid-based model at a regional scale.

This PinG modeling approach was initially developed for point sources [Seigneur *et al.*, 1983] and it has been used for point sources in different forms in a large array of Eulerian models since then (Karamchandani *et al.*, 2011, and references therein). The current formulation of PinG models for point sources in standard Eulerian air quality models (e.g., CMAQ, AMSTERDAM, Polyphemus) uses Gaussian puffs for subgrid-scale modeling (Karamchandani *et al.*, 2006; 2010;

Korsakissok et Mallet, 2010a). Modeling roadway traffic with point sources would require to spatially discretize road sections with point sources, which would induce a significant increase of the computational burden (e.g., Karamchandani *et al.*, 2009). It is, therefore, desirable to develop efficient modeling techniques for subgrid-scale modeling of mobile sources.

Jacobson *et al.* [2011] developed a parameterization based on large-eddy simulations to represent contrails from aircraft in a global model. Simpler box-model parameterizations have typically been used to treat ship emissions in global or regional Eulerian models (e.g., Franke *et al.*, 2008; Huszar *et al.*, 2010). To date, the characterization of the local impacts of roadway emissions in air quality modeling have mostly been based on a parameterization of the subgrid-scale variability of the concentrations of the pollutants of interest obtained from a local-scale dispersion model (e.g., Touma *et al.*, 2006; Isakov *et al.*, 2007; Cook *et al.*, 2010) or land-use information (e.g., Valari et Menut, 2010). However, such approaches consist in a postprocessing of the Eulerian model output and cannot account explicitly for chemical interactions between the emission plumes and the background, including the influence of local plume chemistry on background concentrations. To account for such chemical interactions, a PinG modeling approach is needed. We present here a new PinG model that uses Gaussian line source models, better suited than point sources to model emissions from roadway traffic, embedded within an Eulerian model.

The Gaussian line source model has been presented by Briant *et al.* [2011]. It has been evaluated against near-roadway data available for a large case study and gave satisfactory performance [Briant *et al.*, 2012]. Emissions are released from the line sources and dispersed as steady-state plumes. The host Eulerian model is Polair3D [Boutahar *et al.*, 2004; Sartelet *et al.*, 2007] of the Polyphemus air quality modeling platform [Mallet *et al.*, 2007]. A challenging aspect of PinG modeling is to simulate the transfer of pollutants from the subgrid-scale model to the host model, here from the Gaussian model to the Eulerian model; this transfer differs significantly from that of a puff model because of the steady-state nature of the Gaussian model. Several additional features are also implemented: a parallelization of the model, a temporal profile for roadway traffic emissions, and a chemistry scheme in the Gaussian model to simulate near-roadway chemical transformations.

The model was developed as part of the Polyphemus modeling platform [Mallet *et al.*, 2007]. In Section 4.3, we present the Gaussian and Eulerian models and we describe in detail the implementation of the coupling between those two models. The parallelization of the new PinG model, the temporal profile option and the Gaussian chemistry scheme for traffic air pollutants are also discussed in Section 4.3. In Section 4.4, we evaluate this new model with a real-world case study and in Section 4.5 we present results of sensitivities studies, that were conducted in order to validate choices made during the implementation process.

4.3 Model description

The Polyphemus modeling platform [Mallet *et al.*, 2007] includes both the Eulerian Polair3D model and the Gaussian model for line sources. These models are described in Sections 4.3.1 and 4.3.2, respectively. The coupling of those two models as a PinG model is described in Section 4.3.3.

4.3.1 Eulerian model

Polair3D is a 3D Eulerian model that can be applied from the urban scale up to the continental scale [Boutahar *et al.*, 2004]. There are several versions of Polair3D: a passive version, a version with gas-phase chemistry and a version with gas-phase chemistry and aerosols. Polair3D performance has been evaluated extensively (e.g., Quélo *et al.*, 2007; Sartelet *et al.*, 2007; Mallet *et Sportisse*, 2004; Sartelet *et al.*, 2012). In this work, the gas-phase chemistry version is used with the CB05 chemical kinetic mechanism [Yarwood *et al.*, 2005; Kim *et al.*, 2009].

4.3.2 Gaussian plume model

The Gaussian plume model for line sources has been presented by Briant *et al.* [2011] and evaluated with passive diffusion tube measurements of nitrogen dioxide (NO₂) concentrations near roadways on a large case study by Briant *et al.* [2012].

Its formulation of the concentration field for a pollutant emitted from a line source is based on the integration of the point source solution over the line source. For wind directions other than perpendicular to the line source, the dependency of standard deviations on the integration variable makes the integration impossible without approximations [Yamartino, 2008]. Venkatram *et Horst* [2006] have presented a formulation, which consists in evaluating the integral by an approximation of the integrand and by excluding from the computation parts of the line source that are downwind of a given receptor. This formulation has been shown to give satisfactory results, however, when the wind is parallel to the line source, it diverges. In Briant *et al.* [2011], this error associated with the Host-Venkatram (HV) formulation was computed by comparison to an exact solution (obtained by discretizing the line source into a very large number of point sources) and was parameterized using analytical formulas in order to improve the HV formulation. For cases where the wind is parallel to the line source, the use of an analytical / discretized line source combination, allows one to minimize the error induced by the singularity very effectively. Because this combination is only applied for a small range of wind directions, the increase in the overall computational time is not significant. This formulation performs well for all ranges of angles and provides some improvement in terms of accuracy over previous formulations of the Gaussian line source plume model without being too demanding in terms of computational resources. The model used here also includes a Romberg integration to account for the road width.

The evaluation of the model gives satisfactory results (see Appendix C for the definition of the performance metrics): more than 92% of the predictions are within a factor of two of the observations, the relative mean bias is within $\pm 32\%$, the relative scatter is less than 1.2 and the Polyphemus modeled values are on average within $\pm 32\%$ of the observed concentrations for the case study considered [Briant *et al.*, 2012].

4.3.3 Coupling of Polair3D and the Gaussian plume model

(i) Overview

As depicted in Figure 4.1, a PinG model uses the local model to disperse pollutants from selected sources. When a criterion is reached (criterion based on the elapsed time since the emission or on the size of the plume, for instance), the plume pollutants are transferred to the Eulerian host model, which is running concurrently. Output concentrations at a given location and at a given time t are then the sum of the concentration in the corresponding grid cell of

the Eulerian model with the local model concentration at this location.

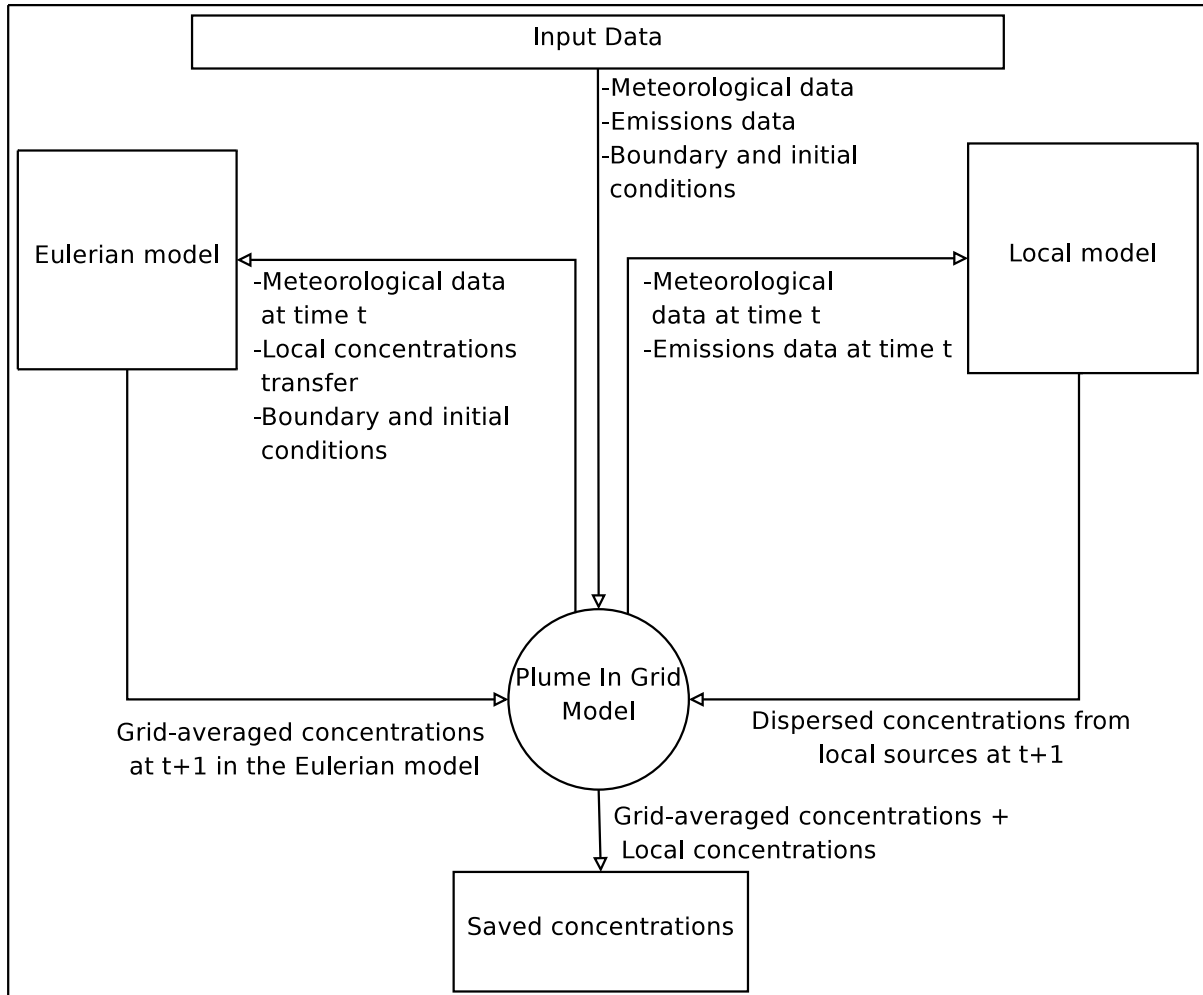


Figure 4.1: Coupling between the Gaussian model and the Eulerian model (Polair3D).

The Gaussian plume model is based on a steady-state approximation, i.e., the emission rate and meteorological conditions (wind speed and direction, atmospheric stability) are stationary and spatially uniform for a given time period (typically one hour). Therefore, there is no direct link between concentrations from the Gaussian model at time t and at time $(t + 1)$ (i.e., the concentration at time $(t + 1)$ is recalculated from the emission and meteorology at time $(t + 1)$ and not from the concentration at time t). Concentrations from the Gaussian model are transferred to the Eulerian model at every time step.

Algorithm 1 presents briefly how the model has been implemented. After a preliminary step where both models are initialized and input data are read, the time loop starts. This loop, which iterates in time with the Eulerian time step, starts with the transfer of pollutants, dispersed by the Gaussian model at the previous iteration (nothing is transferred at the first iteration), to the Eulerian model. Those transferred pollutants are then accounted for as grid-averaged concentrations and are subsequently dispersed and transformed by the Eulerian model. Then,

both Eulerian and Gaussian models iterate. For the Eulerian model, this iteration consists in a simple call to the Forward method (line 5), whereas it requires some additional implementation for the Gaussian model (lines 6 to 14). As mentioned above, the Gaussian model is a steady-state model, which does not require a time dependence. On line 6, a loop over all sources starts, in which another loop over all grid cells is embedded. Those embedded loops compute the contribution of pollutants from each source into each grid cell, which will be transferred to the Eulerian model during the following time iteration. The computation of those contributions is described in Section (ii). A second loop, over the output receptor locations, is embedded into the loop over the sources (line 10), which computes the contribution of a given source to a given location. On line 14, the Gaussian chemical kinetics is computed. It is described in Section (iv). Finally, grid-averaged concentrations, computed with the Eulerian model and the Gaussian model contribution are added and saved as the total concentrations for this time step.

The output concentration at a given point and at a given time t is computed on line 15. It is the sum of the Eulerian concentration at time t with steady-state concentrations from line sources dispersed with the Gaussian model at time t . However, receptors that are located at a distance superior to the time step (s) \times the wind velocity (m s^{-1}) to a given source are considered to be out of range of this source and, therefore, are not impacted by it (i.e., the plume is truncated far from the source). The concentrations transferred at the previous iteration (from the Gaussian model to the Eulerian model) were added to the Eulerian concentrations on line 4 and, therefore, are also accounted for in the output concentration computed on line 15.

Line source information (e.g. emission rates, coordinates) is read by the PinG model only once, at the beginning of the simulation. A temporal profile can be used to account for the variability of the line source emissions. Thus, the emission rates of all sources are multiplied by hourly coefficients before the loop over sources (line 6) and restored at the end of the loop (line 13). The temporal profile is given to the PinG model as a text file containing the hourly coefficients. It applies to all sources treated with the Gaussian model.

Algorithm 1 Implementation of the Plume-In-Grid model using the line source Gaussian plume model into the modeling platform Polyphemus.

```

1: -Initialize both models.
2: -Read input data: Meteorological parameters, Sources information, Background concentrations, Emissions, Boundary conditions.
3: for time step 0 to the end do
4:   -Transfer to the Eulerian model of Gaussian concentrations from the previous time step.
5:   -Iteration of Eulerian model.
6:   for each source do
7:     for each grid cell do
8:       -Compute contribution of the source to the grid cell.
9:     end for
10:    for each output receptor location do
11:      -Compute concentration of the source at the given location with the Gaussian model.
12:    end for
13:  end for
14:  -Compute Gaussian chemistry process.
15:  Results for this time step = Gaussian concentrations + Eulerian concentrations.
16: end for

```

In addition to this core algorithm, several additional processes are implemented in the PinG model, which are described below.

(ii) Transfer of pollutants from the Gaussian model to the Eulerian model

The transfer of pollutants from the Gaussian model to the Eulerian model is made at the beginning of each time iteration (line 4 of Algorithm 1). Pollutants dispersed by the Gaussian model at time t will be accounted for as grid-averaged concentrations at time $t + 1$. The total amount (M) of pollutant emitted from a source during a time step is given by:

$$M = \text{rate} \times \text{width} \times \text{length} \times \Delta t \quad (4.1)$$

where M is in μg , length and width are in m, the emission rate is in $\mu\text{g m}^{-2} \text{s}^{-1}$ and Δt is in s. The selection of Δt is discussed in Sections (v) and 4.5.2.

Another aspect of the transfer of pollutants from the Gaussian model to the Eulerian model is to determine for each grid cell which proportion of the amount M has to be transferred. As illustrated in Figure 4.2, pollutants are released into a volume with a trapezoidal-base S , which approximates the plume section of interest and is defined by two distances from the line source, $D1$ and $D2$, and an angle α . $D1$ is the distance between the source and the base (nearer to the road) of the trapezoid. Setting $D1 = 0$ would lead to a transfer of pollutants starting at the road, therefore, ignoring subgrid-scale transport. Measurements of traffic-related pollutants near roadways suggest that background levels are reached between 100 and 300 m [Zhu *et al.*, 2004; Viard *et al.*, 2004]. Therefore, $D1$ was set to a value of 200 m. The sensitivity to this parameter is investigated in section 4.5.1. $D2$ is the height of the trapezoidal surface. It represents the length of the plume corresponding to the distance over which the pollutant concentration decreases by 90%. Therefore, it depends on the stability class and on the land use category of the source grid cell. Results vary from 53 m for the A stability class (unstable) and the urban land use category to 744 m for the F stability class (stable) and the rural land use category.

The angle α is also defined such that the edge of the trapezoid corresponds to a 90% decrease in concentration in a direction parallel to the source direction at a given distance from the source. Results vary from 36° for the A stability class (unstable) and the urban land use category to 8° for the F stability class (stable) and the rural land use category.

To compute the contribution of the source to each grid cell, the surface S is discretized with a set \mathbb{P} of n points located onto the surface S . Those points are regularly spaced, therefore, a concentration at one point is assumed to be representative of an elementary surface that is identical for all points. Thus, the contribution of the source to the grid cell of coordinates (i, j) is given by:

$$\text{Contribution}_{i,j} = \frac{\sum_{k=0}^{n_{i,j}} C_k}{n} \times M \quad (4.2)$$

where C_i is the concentration at a given point i influenced by the source, computed with the Gaussian model with meteorological parameters of the source cell. $\sum_{k=0}^{n_{i,j}} C_k$ is the sum of

concentrations computed at all $n_{i,j}$ points of \mathbb{P} that are located into the cell of coordinate (i, j) and $\sum_{l=0}^n C_l$ is the sum of concentrations computed at all points of \mathbb{P} .

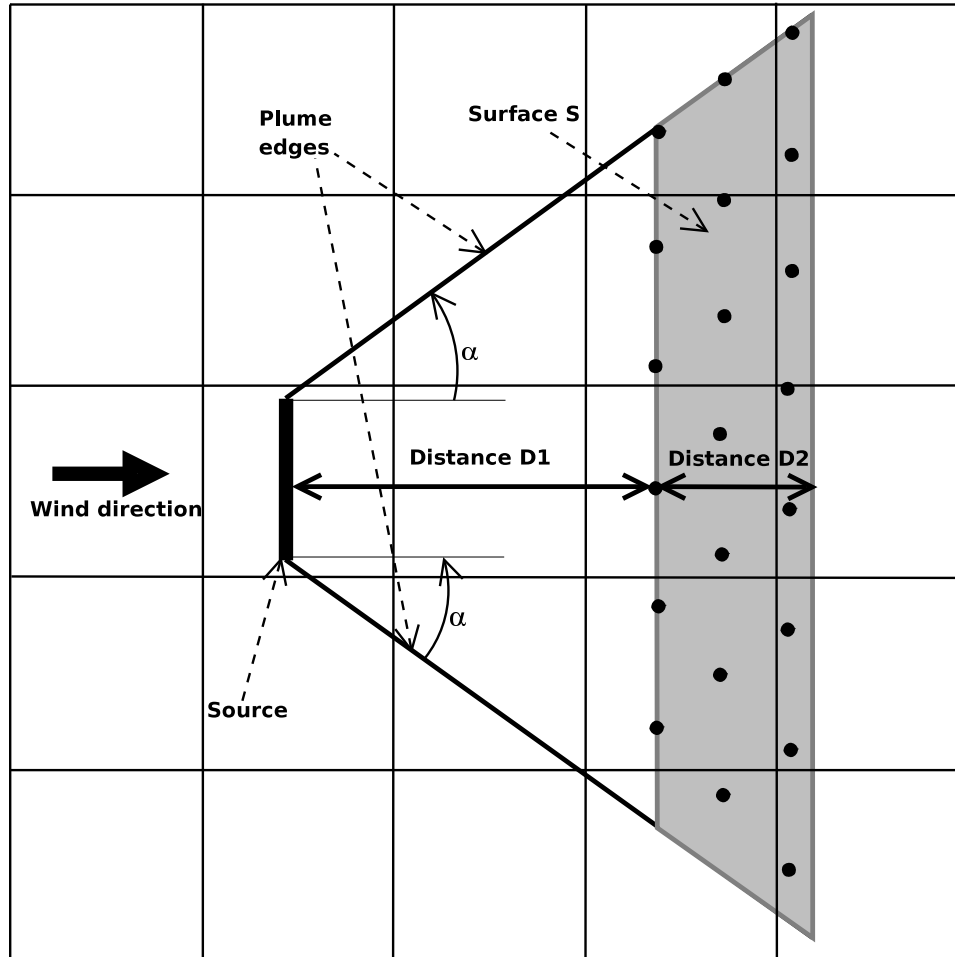


Figure 4.2: Schematic representation of the transfer of pollutants from the Gaussian model to the Eulerian model for a line source. Black dots represent the set of points \mathbb{P} . The surface area S is shown in grey. The figure is drawn for simplicity for the simple case where the wind is perpendicular to the road.

When modeling traffic emissions, pollutants are expected to remain initially near the ground, therefore, we described how the plume is horizontally discretized to compute the contribution of a source to a given grid cell. Nevertheless, concentrations are also dispersed vertically and the plume depth may cover several layers of the Eulerian model. Accordingly, the plume pollutant amount is injected over several layers, if warranted, using a column injection, computed with the vertical dispersion coefficient, as described by [Korsakissok et Mallet \[2010b\]](#).

When a line source is located over several grid cells, it is split into several source segments during the initialization of the Gaussian model (line 1 of Algorithm 1), so that one source segment is located into only one grid cell.

Note that when the wind becomes parallel to a line source, a combination between a dis-

cretized solution of point sources and a line source solution is made [Briant *et al.*, 2011]. Accordingly, we apply the same method to transfer pollutant to the Eulerian model with a point source as with a line source. Equation 4.1 then becomes:

$$M = \text{rate} \times \Delta t \tag{4.3}$$

where M is in μg , rate in $\mu\text{g s}^{-1}$ and Δt in s. Equation 4.2 remains unchanged and Figure 4.2 is equivalent (the point source is equivalent to the line source with a length equal to 0).

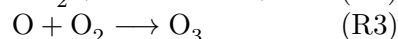
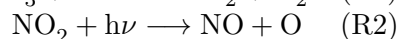
(iii) Parallelization

Computations can become cumbersome in a PinG model because two models are running concurrently. Polair3D is already parallelized and supports either shared memory with Open Multi-Processing (OpenMp: <http://openmp.org/wp/>), distributed memory with the library Message Passing Interface (MPI: <http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpi/>) or a hybrid distributed-shared memory with both openMP and MPI. However, the Gaussian model does not support any parallelization. In this work, the MPI-parallelization alone was used for the Eulerian model, along with a MPI-parallelization of the Gaussian model computations to optimize the PinG model computing.

The time needed to compute the Gaussian dispersion is directly related to the number of sources treated. To parallelize these computations, using MPI library, the source list is split into several ones that are attributed to a distinct processor. After the Gaussian dispersion computations, data are gathered onto one single processor that computes the chemistry processes described in Section (iv). This parallelization has been implemented in the Polyphemus platform and was used for all simulations presented in Sections 4.4 and 4.5. The computational gain of this parallelization is discussed in Section 4.5.4.

(iv) Chemistry

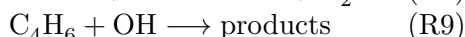
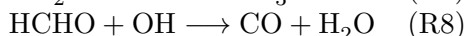
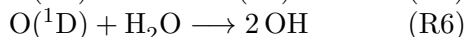
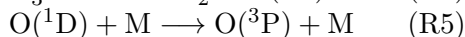
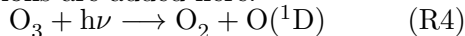
CB05 is the chemical kinetic mechanism used here in the Eulerian model. The Gaussian model does not handle CB05 as it is a steady-state model. However, some chemical reactions may affect the concentrations of pollutants such as NO_2 and possibly some volatile organic compounds (VOC) near the roadway. Therefore, a chemical scheme was implemented in the Gaussian model that is computed at each time iteration of the PinG model (line 14 of Algorithm 1). This chemical scheme updates the Gaussian concentrations for selected species, before they are added to the Eulerian concentrations. Briant *et al.* [2012] used a NO_2 chemical mechanism that takes into account the following reactions:



The photostationary-state approximation for O_3 , NO and NO_2 is used to solve the system and compute modeled concentrations for those three species. We considered here a $\text{NO}_2 / \text{NO}_x$ emission fraction of 15% and a NO / NO_x emission fraction of 85% [Roustan *et al.*, 2010]. We used this mechanism for the model performance evaluation presented in Section 4.4.

In addition, we implemented a hydroxyl radical (OH) chemical mechanism, which is computed right after the NO_2 chemistry. It is used to account for the oxidation of NO_2 to nitric acid (HNO_3) and of some VOC emitted by traffic. It is based on the RIVAD/ARM3 scheme [Scire

et al., 2000] that was first used in a plume visibility model [Bergstrom *et al.*, 1981]. The following reactions are added here:



where C_4H_6 is 1,3-butadiene. We assume steady state for $\text{O}(^1\text{D})$.

$$[\text{O}(^1\text{D})] = \frac{k_4(h\nu)[\text{O}_3]}{k_5 + k_6[\text{H}_2\text{O}]} \quad (4.4)$$

$$\frac{d[\text{OH}]}{dt} = 2k_6[\text{O}(^1\text{D})][\text{H}_2\text{O}] - k_7[\text{OH}][\text{NO}_2] - k_8[\text{OH}][\text{HCHO}] - k_9[\text{OH}][\text{C}_4\text{H}_6] \quad (4.5)$$

Combining Equations 4.4 and 4.5 and assuming steady state for OH leads to:

$$[\text{OH}] = \frac{2k_6k_4[\text{H}_2\text{O}][\text{O}_3]}{(k_7[\text{NO}_2] + k_8[\text{HCHO}] + k_9[\text{C}_4\text{H}_6])(k_5 + k_6[\text{H}_2\text{O}])} \quad (4.6)$$

where k_i is the rate constant of reaction Ri. The $[\text{OH}]$ concentration given in Equation 4.6 is then used to solve the following first-order equations:

$$-\frac{1}{[\text{X}]} \frac{d[\text{X}]}{dt} = k_i[\text{OH}] \quad (4.7)$$

where X is C_4H_6 , NO_2 or HCHO. The elapsed time, used for solving Equation 4.7 is set to the time needed to reach the center of the transfer surface S from the source:

$$\Delta t = \frac{1}{u} \times \left(\text{D1} + \frac{\text{D2}}{2} \right)$$

where D1 and D2 are the distances in m (see Figure 4.2) and u is the wind velocity (m s^{-1}). We only consider the reactions of NO_2 , C_4H_6 and HCHO with OH in the Gaussian model mechanism. Other pollutants emitted by the roadway traffic are assumed to be chemically inert during the local dispersion process because of their low reactivity for the time scales considered here. In addition to nitrogen oxides (NO_x), seven VOC considered to be potentially hazardous to human health [ANSES, 2012] are treated explicitly in the PinG model: formaldehyde, C_4H_6 , benzene, acetaldehyde, acrolein, propionaldehyde and ethylbenzene. Formaldehyde is treated explicitly in CB05 (as FORM). The other species were added with the following oxidation reaction:



Those additional species in the CB05 mechanism do not modify the computation of other species because the OH radical concentration is not affected, therefore, there is no interference with CB05. Thus, the Eulerian model is able to handle those new species as well. Only NO_2 , C_4H_6 and HCHO are impacted by the OH chemistry near the roadway; the other emitted species

are considered reactive only at the regional scale of the Eulerian model because of their slower oxidation kinetics.

This chemical mechanism is used in Section 4.4.3; it was not used for other simulations presented in Sections 4.4 and 4.5.

(v) Gaussian and Eulerian time steps

The time step for the PinG model must be set to a small value to ensure the convergence of the Eulerian model. The Gaussian model is numerically stable and can be applied with any time step as long as it is realistic and compatible with the model inputs and outputs. The Gaussian time step is selected as follows:

$$\text{Gaussian time step} = n \times \text{Eulerian time step}$$

where n is a positive integer, so that the Eulerian time step is inferior or equal to the Gaussian time step. Thus, the Gaussian computation is performed only once every n Eulerian time steps, where the Eulerian time step is Δt of Equation 4.1. During the Gaussian time step, concentrations of the Gaussian model remain unchanged and the same amount of pollutant is transferred to the Eulerian model at every Eulerian time step, i.e., n times before it is recomputed by the Gaussian model for its next time step. This approach reduces the Gaussian model precision if n is large, however, computational time can be optimized. The amount of lost precision depends on the value of those two time steps. A test simulation is presented in Section 4.5.2 to illustrate this point.

4.4 Evaluation of the PinG model on a case study

4.4.1 Model set-up

The PinG model is evaluated here with two one-month simulations over the Paris region. Measurements of NO₂ concentrations made with passive diffusion tubes are available at 242 locations, averaged over the overall time period of the measurement campaign (2 one-month campaigns : 2 × two-weeks in winter 2007 and 2 × two-weeks in summer 2008). The road network modeled at the subgrid-scale consists of 1371 road sections divided into 5425 smaller, but straight, sections representing a total of 831 km of linear road length. Emissions of NO_x were computed with the European model COPERT 3 and were provided by the French technical study and engineering center CETE Nord Picardie for the year 2005 (COPERT 4 was not available at the time of the study). The GENEMIS temporal profile [Friedrich et Reis, 2004] was used for on-road mobile sources.

The Eulerian grid consists of 40 cells (west-east) × 35 cells (south-north), which are 0.07 ° × 0.05 ° wide. There are 9 vertical levels ranging from the surface to 5000 m altitude, with the first layer being 50 m deep. The modeling domain includes Paris and the Île-de-France region completely, as well as parts of neighboring regions. Figure 4.3 presents the study domain with the contours of administrative "départements" and the road network with the corresponding NO_x emissions (g day⁻¹ m⁻¹). Triangles are the locations of the NO₂ measurement sites and black lines are roads that are not treated explicitly in this case study.

Meteorological inputs were computed with the Weather Research and Forecasting model (WRF; Skamarock et al., 2008). Results from an air quality simulation for the year 2005 over France were used as boundary conditions for the study domain. The simulation over France

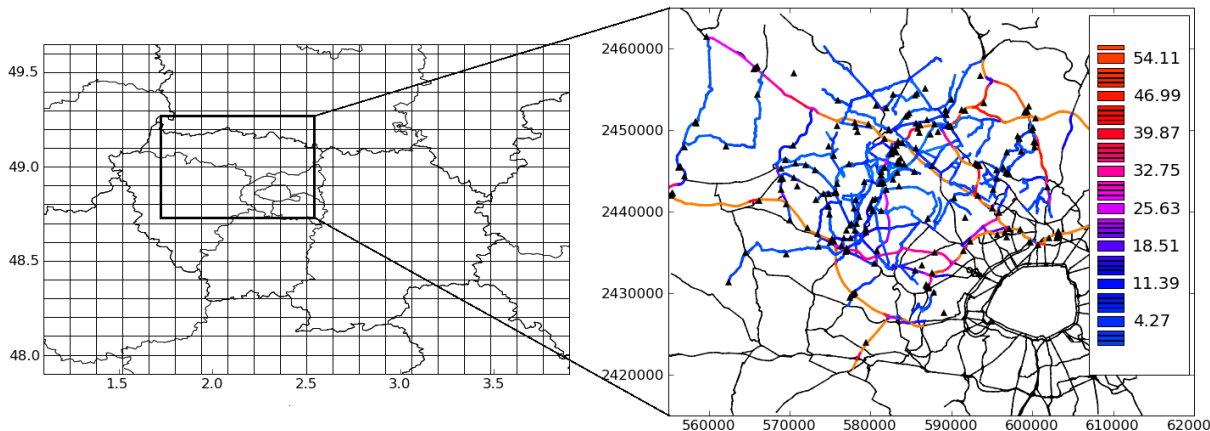


Figure 4.3: Study domain on the left and road network with NO_x emissions in $\text{g day}^{-1} \text{m}^{-1}$ on the right. (The study domain is shown in the longitude / latitude system of coordinates, while the road network is shown here in the cartesian Lambert II system, which explains the shear transformation between the two figures.)

has been presented by Roustan *et al.* [2010]; it uses outputs from the LMDzT-INCA global model [Hauglustaine *et al.*, 2004] as boundary conditions for a larger domain covering Europe. Initial conditions were obtained from the LMDzT-INCA global model, but 5 day spin-up periods were also used. The Eulerian emission inventory for the year 2005 was obtained from the Paris air quality agency for the Île-de-France region (Airparif) and from EMEP for the surrounding part [Vestreng *et al.*, 2007].

We present below simulation results obtained with the Gaussian model, the Eulerian model and the PinG model (i.e, the Gaussian model embedded within the Eulerian model). The PinG model simulation presented in Section 4.4.2 used the following gas-phase chemistry options: Polair3D used CB05 and the Gaussian model used the three-reaction NO_2 scheme. The dry deposition and wet scavenging options were activated for both the Eulerian and PinG simulations.

Apart from the emissions, Polair3D simulations use the same input data as the PinG model. In the PinG simulations, traffic emissions from the road network are treated at the subgrid scale; they are represented by line sources in the Gaussian model and other emissions are represented by surface and volume emissions in the Eulerian model.

For the Gaussian model, simulation results from Briant *et al.* [2012] were used. In those simulations, background concentrations, were computed with Polair3D [Roustan *et al.*, 2010]; they are time-dependent but were chosen to be uniform over the whole domain. Emissions from the line sources were identical to those of the PinG simulation. The Monin-Obukhov length obtained from the WRF simulation was used to define stability classes. The same temporal profile (GENEMIS) was used as for line sources in the PinG simulation. Since Gaussian models require a single set of meteorological inputs, meteorological variables of the cell where the source is located were used in the PinG simulations.

4.4.2 Simulations using the three-reaction NO₂ mechanism

Table 4.1 presents performance indicators (see Appendix C for the definition of these performance indicators), evaluating NO₂ concentrations obtained with the Gaussian model, the Eulerian model and the PinG model against passive diffusion tube measurements. NO₂ concentrations are hourly values averaged over the one-month measurement periods.

Table 4.1: Performance indicators of NO₂ concentrations for the Gaussian, Eulerian and PinG models. (mean values and RMSE are in $\mu\text{g m}^{-3}$)

	Summer campaign		
Performance indicator	Gaussian	Polair3D	PinG
Measured mean value	25.9		
Modeled mean value	24.4	15.5	25.8
Correlation	0.75	0.44	0.76
RMSE	10.2	17.4	10.0
MNE	0.30	0.36	0.31
MNB	0.07	-0.25	0.13
NME	0.28	0.45	0.28
NMB	-0.06	-0.40	0.00
MFE	0.29	0.46	0.29
MFB	0.01	-0.37	0.06
	Winter campaign		
Performance indicator	Gaussian	Polair3D	PinG
Measured mean value	40.5		
Modeled mean value	31.2	28.5	36.2
Correlation	0.77	0.43	0.72
RMSE	13.3	16.8	10.0
MNE	0.22	0.28	0.17
MNB	-0.18	-0.26	-0.08
NME	0.25	0.31	0.18
NMB	-0.23	-0.30	-0.11
MFE	0.26	0.35	0.19
MFB	-0.22	-0.33	-0.11

Polair3D shows poor performance compared with the Gaussian model, while the PinG model has similar error and bias as the Gaussian model. The difference between the Eulerian model and the other two models is particularly important for the correlations, which are less than 0.5 for the Eulerian model and greater than 0.7 for the Gaussian and PinG models. Thus, the impact of the sub-grid scale treatment of the PinG model appears clearly for those near-source concentrations. For the summer campaign, the PinG model overestimates both Gaussian and Eulerian models, and underestimates the measurement by about $0.1 \mu\text{g m}^{-3}$ on average ($\sim 0.4\%$), while the Gaussian model underestimates those measurement by $1.5 \mu\text{g m}^{-3}$ ($\sim 6\%$). Error and bias are similar for both the PinG model and the Gaussian model. However, for the winter campaign, the Gaussian model underestimates measurements by about $9 \mu\text{g m}^{-3}$ on average ($\sim 23\%$), whereas the higher concentrations of the PinG model reduce the underestimation significantly ($\sim 10\%$).

Therefore, the PinG model performs better for the winter campaign. The poorer performance of Polair3D was expected because the passive diffusion tubes are located close to the line sources at 2 m height. The PinG and the Gaussian model compute the local dispersion from line sources at those exact locations, whereas, Polair3D disperses the line source emissions immediately in one grid cell. The horizontal dilution over an area of about 35 km² and the vertical dilution over a 50 m height lead to significant underestimations of the NO₂ concentrations.

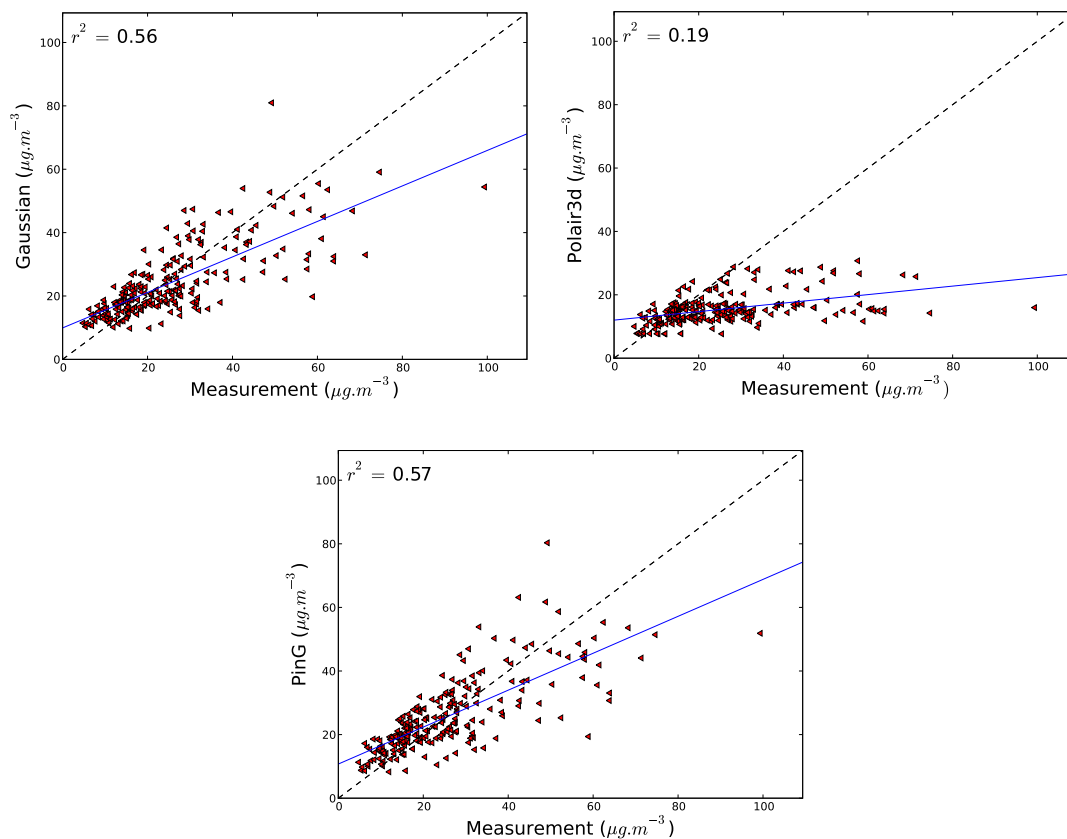


Figure 4.4: Scatter plots of modeled against measured NO₂ concentrations for the summer campaign. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

Figures 4.4 and 4.5 show scatter plots of modeled NO₂ concentrations against measurements for the Gaussian, Eulerian and PinG models. Better correlations and regression line slopes are obtained with the PinG model than with the Eulerian model. For the summer campaign, both PinG and Gaussian model results are similar. For the winter campaign, an important underestimation appears clearly for the Gaussian model. On the other hand, the PinG model shows a better slope for the regression line, but displays more scatter around the regression line compared to the Gaussian model. The significant improvement in the regression slope obtained with the PinG model results from a better representation of the background concentrations. Background concentrations were provided at a single location for the Gaussian model, whereas the PinG model uses the 3D concentrations of its Eulerian host model. The background concentrations vary significantly over the domain, as reflected in the Eulerian NO₂ concentrations (range about 40 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, see Figure 4.5). The spatial variability is less during summer due to greater vertical diffusion (range of about 20 $\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$, see Figure 4.4), which explained that the

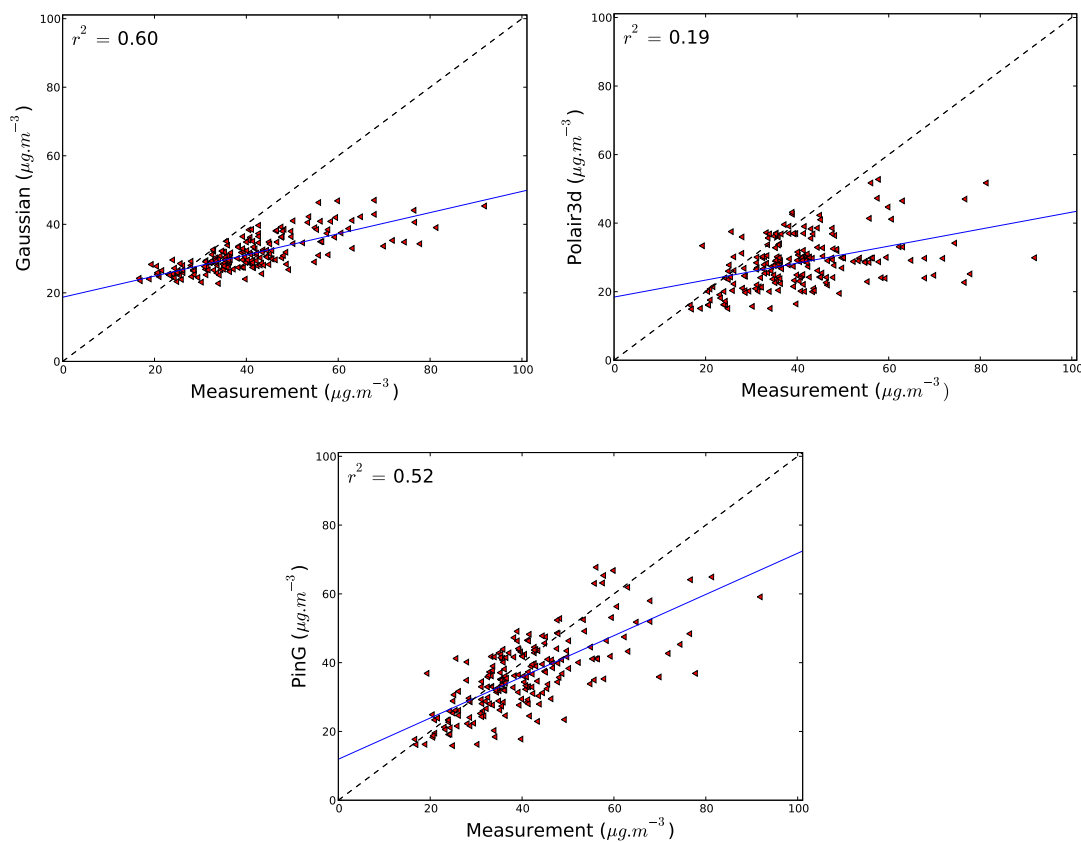


Figure 4.5: Scatter plots of modeled against measured NO_2 concentrations for the winter campaign. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

Gaussian model displays good performance in summer.

Concentrations maps of NO_2 and O_3 are shown for the summer and winter periods in Figures 4.6 to 4.9. They include the results obtained with Polair3D, the PinG model, and the difference between these two models. As expected from the results presented in Table 4.1, NO_2 concentrations are higher during winter than during summer. O_3 concentrations are lower during winter than summer, which is due to lower photochemical production of background O_3 and greater titration by NO emissions from traffic. Most of the high NO_2 concentrations are located over the Paris region, which is the main urban area of the domain. O_3 concentrations are lower over the Paris area due to its reaction with NO . The PinG line sources are located northwest of Paris, which is where the NO_2 and O_3 difference maps have their highest values. This is consistent with the interactions between NO_2 and O_3 that are treated in the Gaussian NO_2 chemical scheme.

An important result is that the PinG model gives systematically greater NO_2 concentrations than Polair3D. This result is due to the fact that all traffic line emissions are diluted into grid cells in the Polair3D simulation whereas the traffic emissions associated with the line sources selected in the PinG model are treated with the embedded Gaussian model, which results in higher concentrations in the PinG model simulation. One might expect that, because overall emission are equivalent, Polair3D should lead to higher concentrations far downwind of those line sources as a result of enhanced initial dilution followed by Eulerian advection and numerical

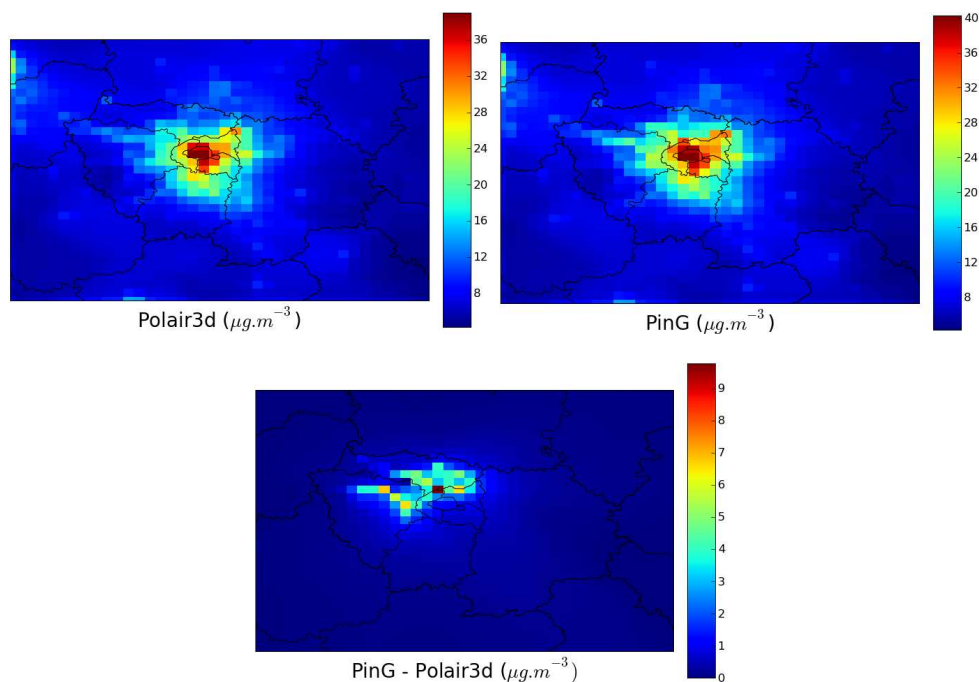


Figure 4.6: NO_2 concentration maps for the PinG simulation, Polair3D simulation and difference between PinG and Polair3D for the summer period. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

diffusion, as seen in PinG simulations for point source emissions. However this is not observed on this domain. This is due to the fact that, for line sources, the plume concentrations reach background levels relatively rapidly (within a few hundred meters from the source) and the release of the plume material within the grid system occurs in the grid cell where the source is located or in an adjacent grid cell. Since, the mass conservation principle is respected, i.e., the total amount of pollutant that is transferred to the Eulerian model by the Gaussian model (line 4 of Algorithm 1) is the exact amount of pollutant that is emitted from the source during the time step (Equations 4.1 and 4.3), the Eulerian grid-averaged concentrations do not differ much between the Polair3D and PinG model simulations. The subgrid-scale treatment of the PinG model provides finer resolution of the plume concentrations near the source but it has little effect at larger distances, which is a major differences with the PinG treatment of large elevated point sources.

4.4.3 Nine-reaction OH chemical scheme

In this section, we present results obtained with the OH chemical scheme. The same simulation set is used as in Section 4.4.2. In addition, we added line source emissions for 7 additional species (formaldehyde, 1,3-butadiene, benzene, acetaldehyde, acrolein, propionaldehyde, and ethylbenzene). The corresponding emission rates were derived from the NO_x emission rates provided by the French technical study and engineering center CETE Nord Picardie, using emission factors provided in ANSES [2012].

Line source emissions are proportional among primary pollutants, therefore, the Gaussian dispersion calculation is the same for each species at each time iteration, except for the deposi-

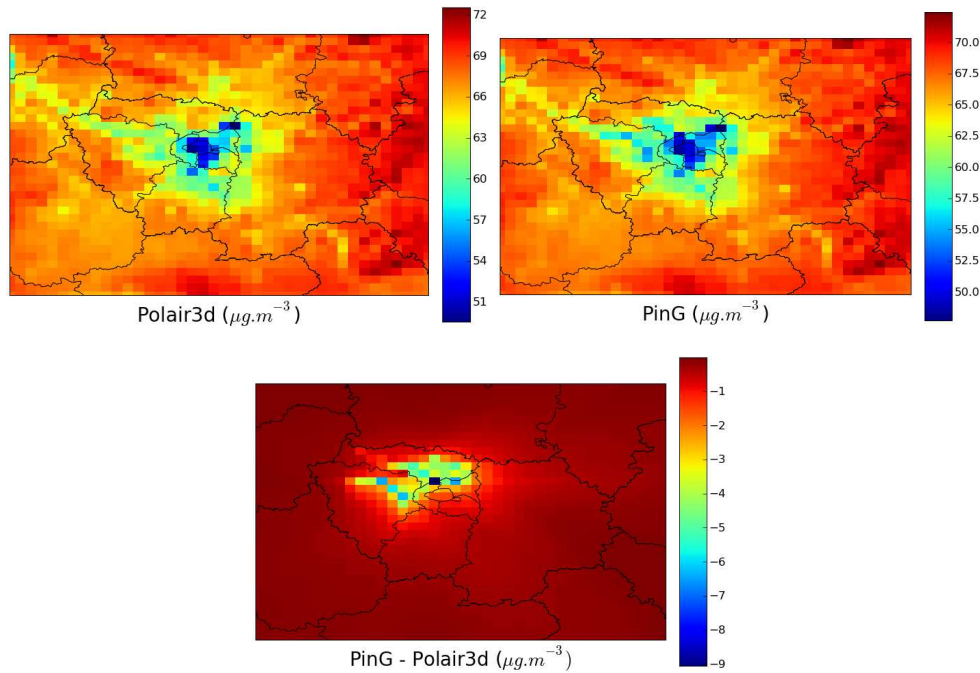


Figure 4.7: O_3 concentration maps for the PinG simulation, Polair3D simulation and difference between PinG and Polair3D for the summer period. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

tion velocity and the scavenging coefficients that can be species specific. It is, therefore, possible to spare some computational time by computing Gaussian dispersion for only one species and scaling concentrations accordingly for the others. One must assume then that both dry deposition and scavenging are identical for all species in the Gaussian dispersion, which is a reasonable assumption at the short distances considered here for the local dispersion. We use this option here, because the Gaussian model has to handle 9 species (7 VOC, NO and NO_2) compared to only 2 (NO and NO_2) in the previous simulations; the gain in computational time is, therefore, important (i.e., a factor of 9 for the Gaussian model computations).

Eulerian surface and volume emissions for these new species were derived from input data available for other species. We used the same boundary conditions for formaldehyde as for the CB05 species FORM. Boundary conditions for acetaldehyde, acroleine and propionaldehyde were derived from CB05 species ALDX and ALD2 and boundary conditions for 1,3-butadiene, benzene, and ethylbenzene were set to constant values derived for measurements made at remote sites in France [Sauvage, 2008].

Figures 4.10 and 4.11 are concentration and difference maps for formaldehyde for both summer and winter campaigns (other additional species maps along with OH maps are presented in supplementary material). Similar results are obtained for the 7 VOC and NO_2 . The PinG model shows greater concentrations than Polair3D due to a more accurate treatment of dispersion from line sources. Concentrations are higher during the winter campaign than during the summer campaign, the highest concentrations are located over Paris area, where the highest emissions occur, and the highest differences are located northwest of Paris, which is where the PinG line sources are located.

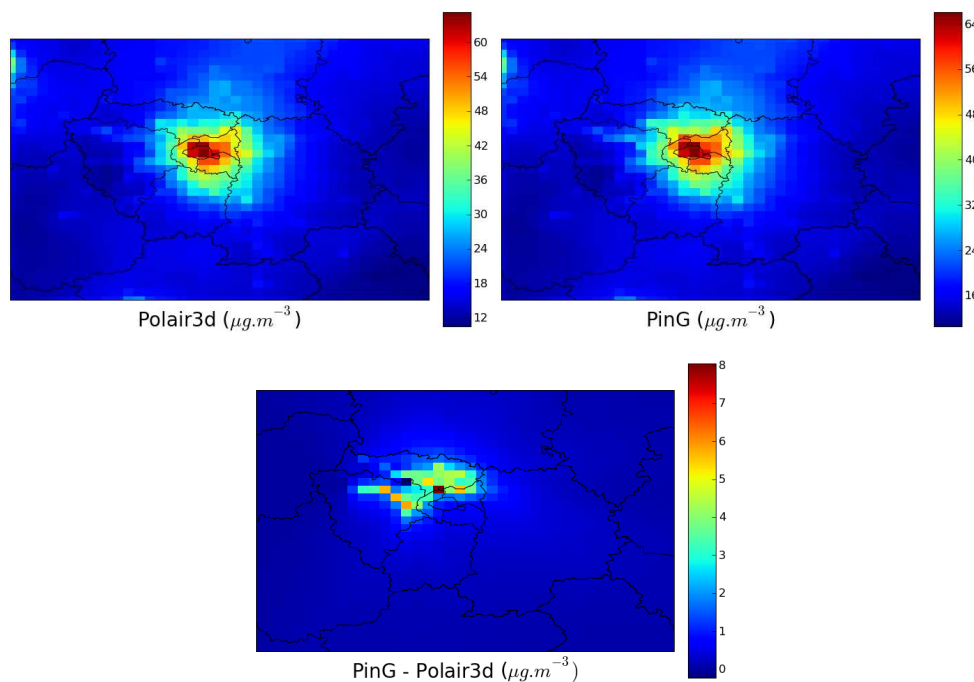


Figure 4.8: NO_2 concentration maps for the PinG simulation, Polair3D simulation and difference between PinG and Polair3D for the winter period. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

4.5 Sensitivity studies

4.5.1 Sensitivity to distance D_1

As stated in Section (ii), the distance D_1 from the line source, at which pollutants dispersed with the Gaussian model are transferred to the Eulerian model has been set to 200 m based on available experimental data. However, the distance at which pollutants emitted from a roadway reach background levels varies depending on the strength of the emission sources, meteorological conditions and background level. Therefore, we investigate here the sensitivity of the PinG modeling results to the value of D_1 . We conducted three one-week simulations for the summer case with $D_1 = 100$ m (case 1), 200 m (case 2), and 300 m (case 3).

The results are similar for the three cases ($< 1\%$). Significant differences ($< 20\%$) occur only at receptors which are located within the surface area S (see Section (ii) and Figure 4.2) for one case and not for the others. Differences in NO_2 concentrations averaged over all passive diffusion tube locations between case 2 or case 3 and case 1, are less than 1%. Furthermore, grid-cell average concentrations are not sensitive to the value of D_1 . Indeed, grid cells are about 35 km^2 in horizontal dimensions and changing the distance D_1 by 100 m has a very low impact on the transfer of pollutants from the Gaussian model to the Eulerian model because this transfer mostly occurs in the same grid cells. However, for simulations with smaller grid cells (e.g., 1 km or less), a sensitivity study should be conducted for configurations where the value of D_1 becomes commensurate with the grid size.

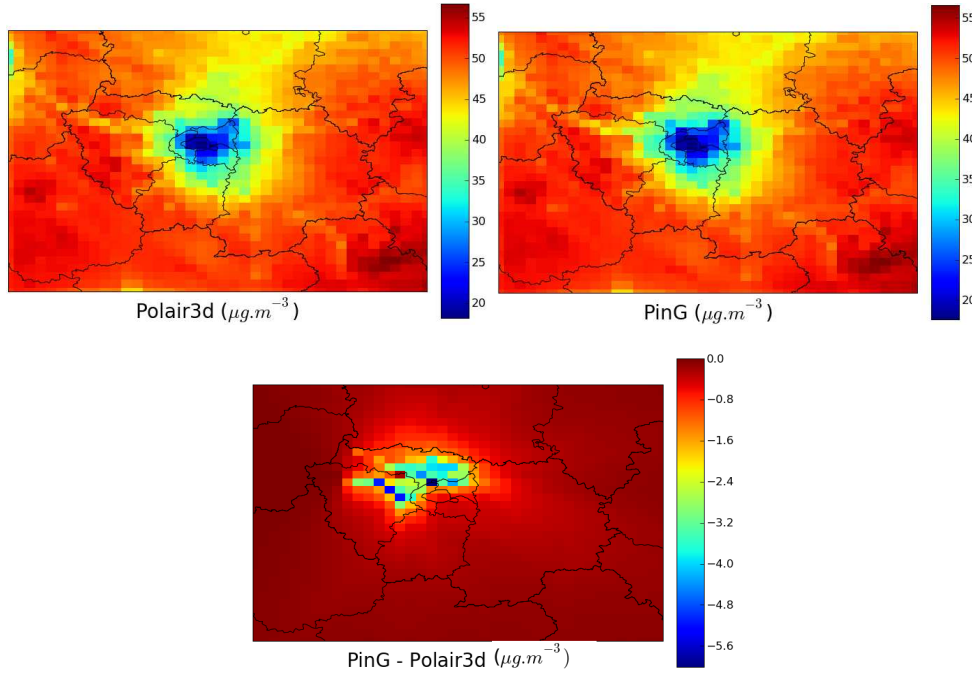


Figure 4.9: O_3 concentration maps for the PinG simulation, Polair3D simulation and difference between PinG and Polair3D for the winter period. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

4.5.2 Sensitivity to the Gaussian time step

In Briant *et al.* [2012], Gaussian simulations were conducted with 1 hour time resolution because meteorological parameters and temporal profile have that time resolution. In addition, surface and volume emissions of the Polair3D and PinG model emission inventory are also hourly values. Therefore, a 1 hour time step was used for the Gaussian time step in the PinG simulation as well. However, the Eulerian model uses shorter time steps to ensure that the chemical scheme converges. Therefore, the Gaussian and Eulerian models have different time steps in the PinG model simulations and the Gaussian dispersion is computed every 6th Eulerian iterations. Polair3D interpolates between the hourly input data to have sub-hourly values, while the Gaussian model does not. The amount of precision that we lose by using a larger time step depends on the variability of the hourly input data. In order to estimate this loss of precision, we ran 7-day simulations with several Gaussian time steps (case 1: $\Delta_t = 10$ min, case 2: $\Delta_t = 30$ min and case 3 (i.e., nominal case): $\Delta_t = 60$ min) for both winter and summer campaigns.

As explained above the output concentration at a given point and at a given time t is the sum of the Eulerian concentration, which includes the pollutants transferred from the Gaussian model from the previous iteration ($C_{transfer}$), and the concentration from the line sources at time t calculated with the Gaussian model ($C_{gaussian}$). Differences in the subhourly concentrations of the Gaussian model will occur between cases 1, 2 and 3 if the hourly wind and emission data vary significantly from one hour to the next. These differences will then be translated to the PinG model concentrations as well as to the locations where the plume material is transferred. Note that the plume length (i.e., the distance at which plumes are truncated), which intervenes

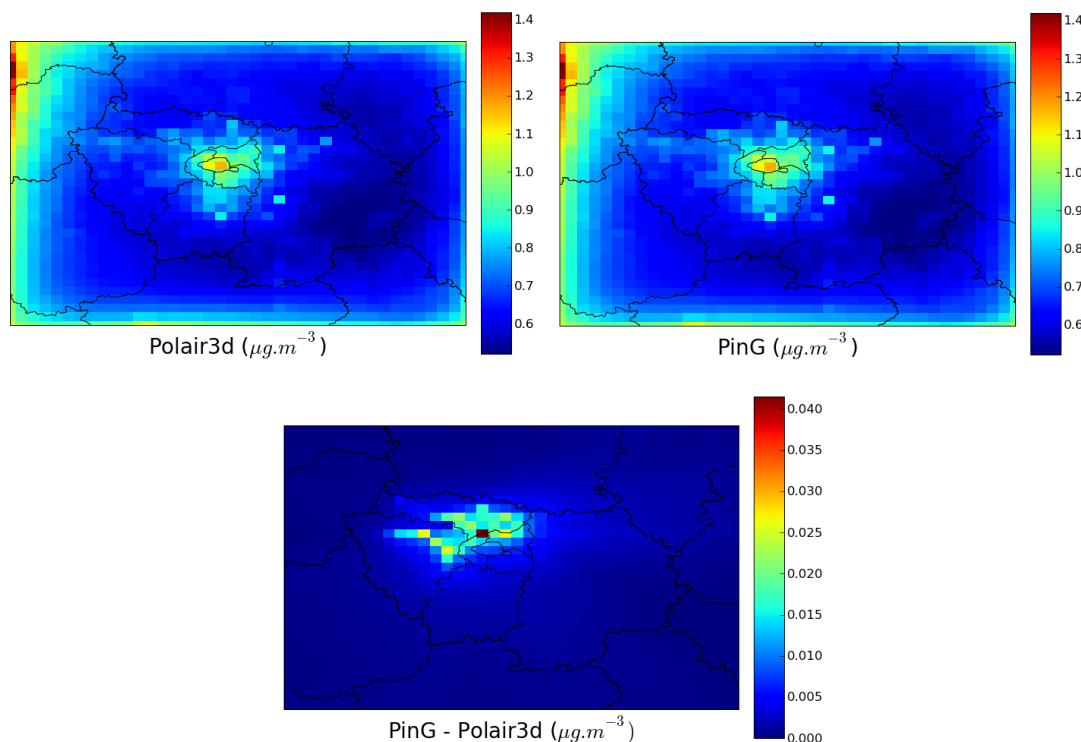


Figure 4.10: Formaldehyde concentration maps for the PinG simulation, Polair3D simulation and difference between PinG and Polair3D for the summer period. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

in the computation of $C_{gaussian}$ cannot lead to differences between cases. Indeed, it is equal to: Eulerian time step (s) \times the wind velocity (m s^{-1}), therefore, the plume is truncated at the same distance from the source for all three cases.

Figures 4.12 and 4.13 display NO_2 differences and relative differences maps between case 1 and case 2, and case 1 and case 3 for both subhourly and hourly cases (summer campaign). Differences are localized northwest of Paris (i.e., where line sources are located) which is consistent as the impact on the concentrations due to line sources, treated with the Gaussian model, is expected to be the most important around sources. Difference maps present high differences between cases, up to $78 \mu\text{g m}^{-3}$ (i.e., 314 % of the total concentration) for the subhourly output whereas it is much smaller for the hourly output, up to $9 \mu\text{g m}^{-3}$ (i.e., 54 % of the total concentration). Indeed, for cells located close to the line sources, $C_{gaussian}$ is the major contributor of the total output concentration, then, a rapidly changing wind direction creates an important variation in the concentrations. For hourly outputs, $C_{gaussian}$ is identical for all three cases and, therefore, does contribute to differences.

$C_{transfer}$ is recomputed at every Gaussian time step and is transferred to the Eulerian model at every Eulerian time step. The sub-hourly resolution used for the Gaussian model affects the value of $C_{transfer}$ at time t , except on the hour when input data are necessarily identical regardless of the sub-hourly resolution. Therefore, it is a source of differences between cases and, because it is transferred to the Eulerian model, it accumulates with time at each Eulerian iteration. However, it is rapidly dispersed with the Eulerian model (within a few Gaussian iterations) and it is much smaller than differences induced by $C_{gaussian}$.

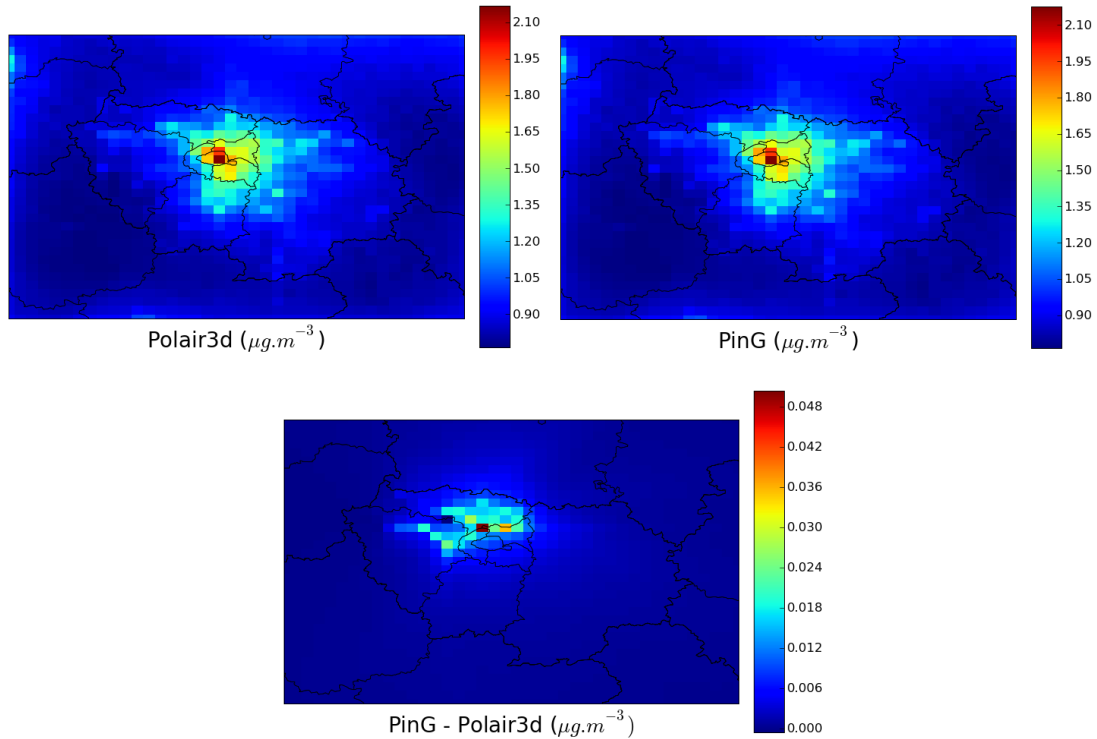


Figure 4.11: Formaldehyde concentration maps for the PinG simulation, Polair3D simulation and difference between PinG and Polair3D for the winter period. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

In the simulations presented in Section 4.4, concentrations were saved every 6th Eulerian iterations (i.e., case 3 without sub-hourly results) thereby leading to some potential errors due to the term $C_{transfer}$. However, concentrations are averaged over the measurement period, which minimizes the error. With the 7-day simulations, averaging concentrations lead to less than $0.5 \mu\text{g m}^{-3}$ differences (1 % of the total concentration), over the whole domain and over all receptor locations for both summer and winter campaigns. The error is expected to decrease even more with a 1-month simulation. By using a 1 hour time step for the Gaussian model instead of 10 min, the Gaussian computational time is divided by a factor 6, which is not negligible when simulating over 5400 line sources. The overall computational burden is discussed in Section 4.5.4. In summary, the temporal resolution of the Gaussian model computations has little effect when averaged over grid cells and long periods, but may have significant impacts for short-term concentrations at receptors located near sources. In particular, issues associated within the sub-hourly resolution of air quality models are of interest for population exposure [Seigneur et Dennis, 2011].

4.5.3 Comparison of PinG model simulations using puffs and line source Gaussian plumes

As mentioned in the introduction, line sources can be discretized and a subgrid-scale treatment can be implemented using a puff model (e.g., Karamchandani *et al.*, 2009). It is, therefore, of interest to compare both approaches: puff versus Gaussian plume. The new PinG model,

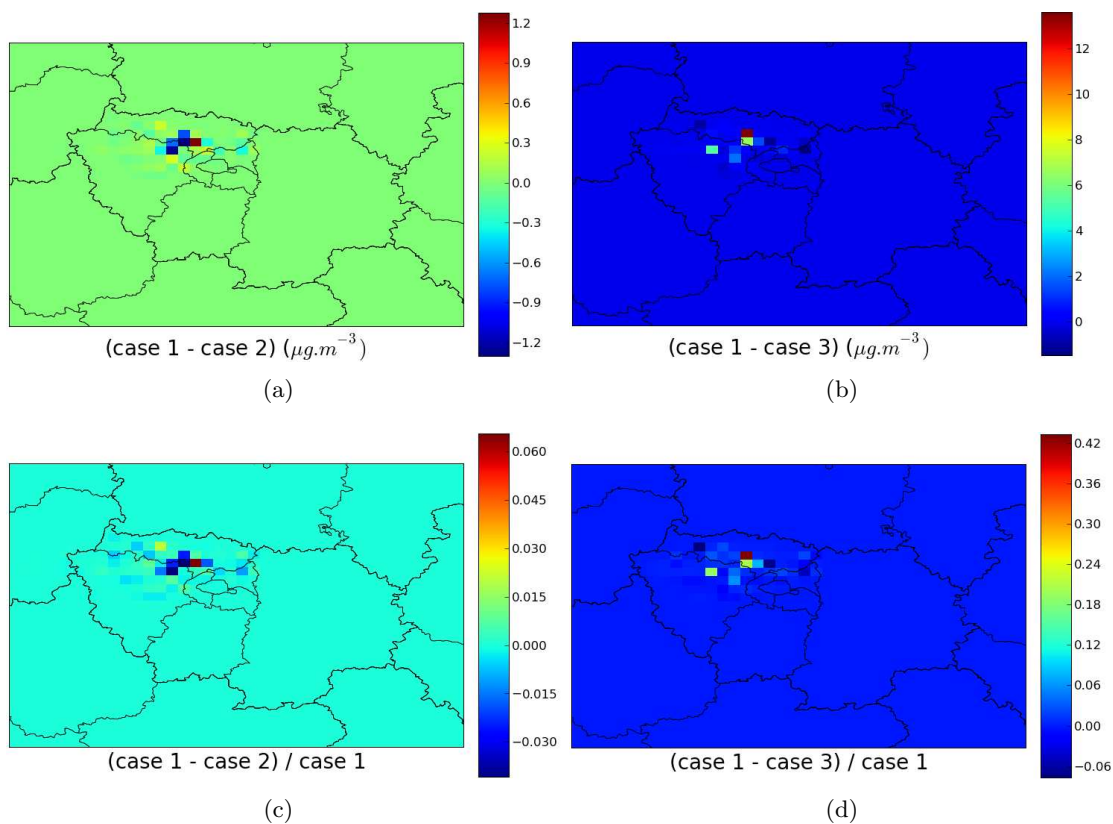


Figure 4.12: NO₂ concentration maps of differences (4.12(a) and 4.12(b)) and relative differences (4.12(c) and 4.12(d)) between case 1 and case 2, and case 1 and case 3, respectively, for a subhourly output (summer campaign).

presented here uses a Gaussian plume model (PinG Plume) as the subgrid-scale model. The Polyphemus modeling platform also includes a PinG model that uses a Gaussian puff model (PinG Puff) as the subgrid-scale model. The PinG Puff model, which has been presented and evaluated by [Korsakissok et Mallet \(2010a; 2010b\)](#) is typically used for point sources and is not convenient for roadway traffic emissions because of the associated computational burden. Indeed, modeling one road section requires to spatially discretize the road section into point sources and to temporally discretize the plumes with puffs. Therefore, to obtain equivalent results with both PinG models, the number of puffs in the PinG Puff model has to be very large.

Figure 4.14 shows results of a simulation conducted over a small domain: 22×22 cells of 0.0001° (~ 100 m) resolution, during half of an Eulerian time step (i.e., 5 min) with a 450 m source, a wind direction perpendicular to the source and a constant emission rate of $1 \text{ g m}^{-2} \text{ s}^{-1}$. Puffs were released every second and the road was discretized with a 4.5 m resolution (i.e., 100 point sources). The spatial and temporal discretization of the source is very fine, therefore, the PinG Puff model requires about 7.5 hours CPU time to performs the simulations whereas the PinG Plume model perform the simulation within a few seconds. Indeed, the PinG Puff model has to handle about 30 000 puffs while the PinG Plume has only 1 line source plume to process. A coarser discretization would lead to poorer results for the PinG Puff model simulation while our goal here is to get results that are as accurate as possible with both models.

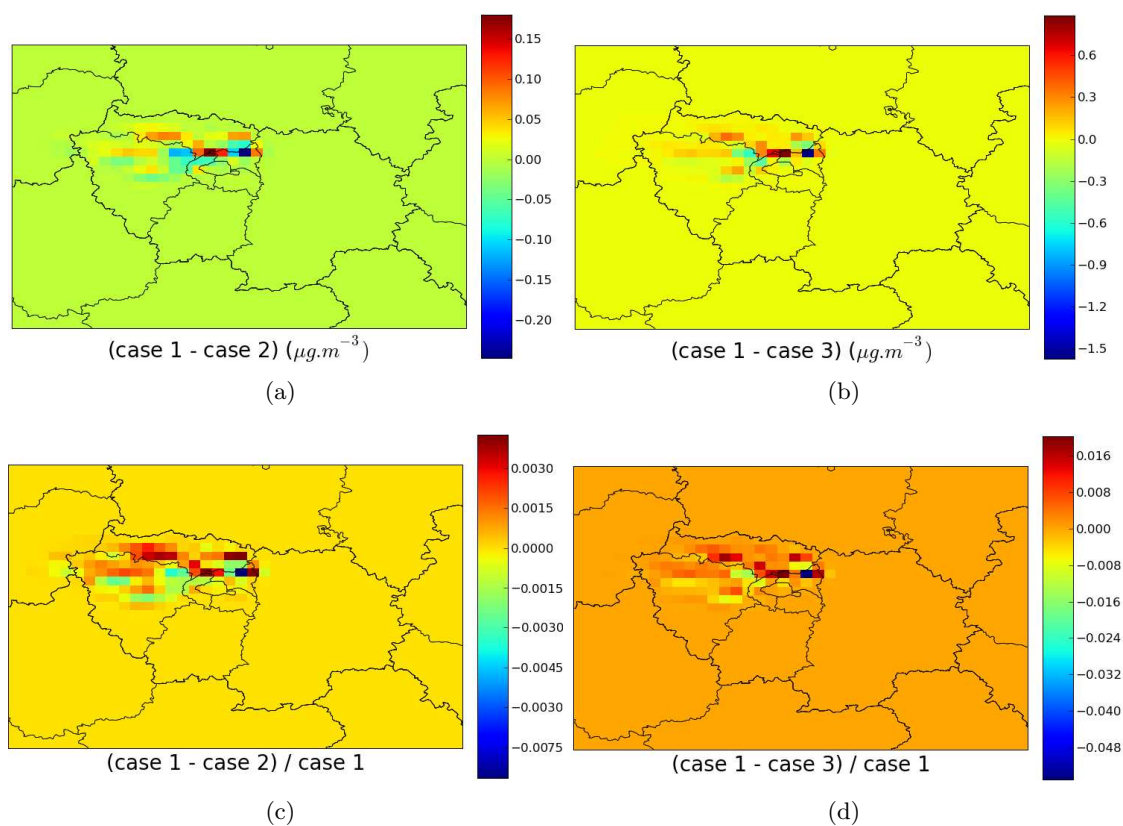


Figure 4.13: NO₂ concentration maps of differences (4.13(a) and 4.13(b)) and relative differences (4.13(c) and 4.13(d)) between case 1 and case 2, and case 1 and case 3, respectively, for an hourly output (summer campaign).

Both models show similar results with less than 8% differences in NO₂ within 200 m from the source. Higher differences (< 21%) concentrations are located far from the source where concentrations are smaller. Therefore, this comparison confirms that both approaches, puff and plume models, are feasible to simulate line sources at the subgrid scale but that the Gaussian plume model is significantly more efficient computationally.

4.5.4 Computational time requirements

Parallelization uses several processors concurrently to speed up computations. The overall computational burden is similar but it is distributed among several processors, therefore, the overall computational time is reduced. However, processors need to communicate among each other, which adds some more burden. Parallelization is then interesting only if the communication among processors is not too important (e.g., the total computational time required when using several processors is significantly inferior to the computational time required using one processor only).

As discussed above, the selection of the time steps for the Gaussian and Eulerian models impacts the computational burden. Here, the Gaussian time step is 1 hour and the Eulerian time step is 10 minutes, therefore, computing 1 or 6 Eulerian iterations takes approximately the same time with the PinG model because the computational time is dominated by the Gaussian

model calculations (a difference of about 30 seconds out of about 70 min).

Table 4.2 presents the computational times required to compute a 1 hour time step of the PinG model, i.e., 6 Eulerian time iterations and 1 Gaussian time step for a standard simulation such as presented in Section 4.4. Computational times were measured using the linux command: "time" and the inter-processor communications using the MPI command: "MPI_Wtime" before and after each MPI communication. Those measurements must be handle with caution because there is important variability from one iteration to the next. The uncertainty of those measurements is not well known due to other processes that might have been running concurrently on the computer. Accordingly, we averaged results over 1 day (i.e. 24 one-hour PinG time steps) so that the order of magnitude and the trend are assumed to be representative.

Table 4.2: Average computational time (in minutes) required to compute a one-hour time step (i.e., 6 Eulerian time iterations and 1 Gaussian time step) of a standard simulation (see Section 4.4.2), and associated percentage of the average inter-processor communication time for the PinG model. Computations were done with double hexacore computers. When 2 computers were used, computations were equally distributed among both computers.

Number of processors		1 computer					2 computers		
		1	4	8	16	24	32	40	48
PinG	Computational time	71.7	17.3	8.81	3.78	3.56	2.44	2.17	2.12
	Average inter-processor communication time (in %)	0.	4.30	4.90	9.60	7.62	10.1	12.4	13.9

Although the decrease in computational time, as the number of processors increases, is not linear due to inter-processor communication, the decrease is significant and the parallelization of the PinG model performs well. Furthermore, communication among processors increases within reasonable limits, thereby, suggesting that the number of processors could be increased further.

Those results must be balanced by the fact that the computational time required to compute 6 Eulerian time steps (i.e., one-hour of simulation) with the Eulerian model alone on one single processor is less than 4.8 minutes. The computational time required for a PinG model simulation is highly dependent on the number of sources that the Gaussian model needs to handle. Smaller cases studies would require lower computational time. Simulations presented in Section 4.4.2 were performed with about 5400 line sources. In addition, sources that are located over several grid cells must be split because meteorological variables can vary from one grid cell to the next. Furthermore, because each source emits both NO and NO₂, the number of sources processed by the Gaussian model is doubled (i.e., > 10800). Consequently, the computational time required to compute one iteration is significant and differences between the PinG and Eulerian models may be important. Computational times required to complete the one-month simulation were approximately 20 times higher with the PinG model than with Polair3D only. However, the gain in computation due to the parallelization makes the overall computational time manageable.

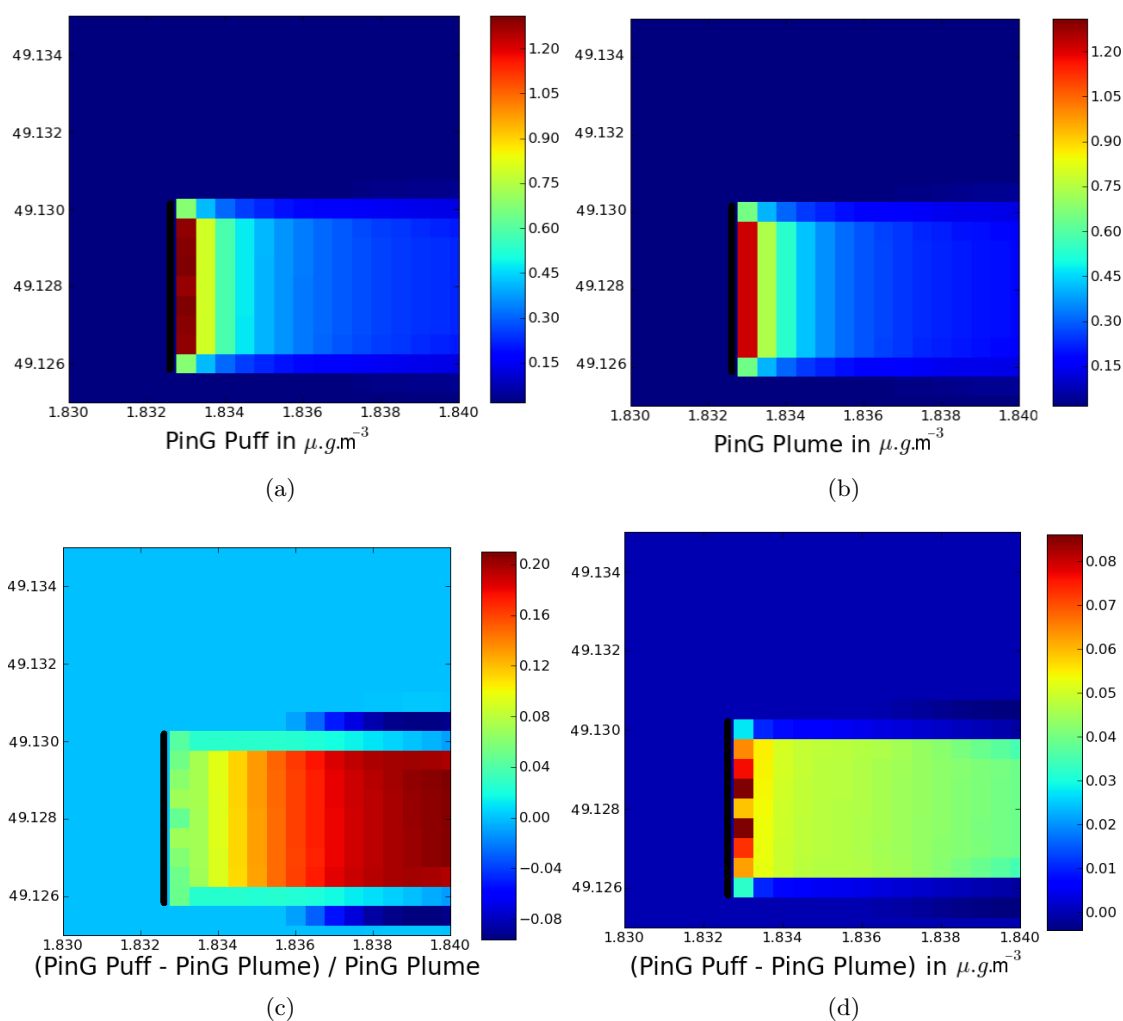


Figure 4.14: NO₂ concentration maps with the PinG Puff 4.14(a) and PinG Plume 4.14(b) models, relative difference and difference of NO₂ concentrations between models 4.14(d) (coordinates are in the longitude / latitude system of coordinates, the source has been drawn in black).

4.6 Conclusion

A new PinG model, that uses a Gaussian line source model embedded within the Eulerian model Polair3D, has been developed. The coupling between the Gaussian model and Polair3D, including the transfer of pollutants from the Gaussian model to the Eulerian model, the incorporation of a chemical scheme for NO_x and selected VOC in the Gaussian model, the parallelization process and the optimal treatment of time steps for the Eulerian and Gaussian models were presented.

The PinG model was evaluated with a large case study, which includes over 200 passive diffusion tube measurements of NO₂ performed near a 800 km roadway network in the Paris region, for two one-month periods in summer and winter, respectively. The PinG model simulations were compared with those conducted with the Gaussian and Eulerian model used independently.

The Eulerian model showed poor performance compared to the Gaussian model because it fails to simulate the subgrid scale impacts near the roadways. The PinG model showed similar error and bias to the Gaussian model, but with greater NO_2 concentrations. This is due in part to the fact that the Gaussian model uses a single background O_3 concentration whereas the PinG model uses spatially-resolved O_3 concentrations with full interactions between the local and background pollutants. A nine-reaction chemical scheme was also implemented in the Gaussian model to treat the near-source oxidation of NO_2 and some VOC. The concentrations of VOC emitted from traffic display similar patterns as the NO_2 concentrations.

Sensitivity studies showed that the PinG modeling results are not very sensitive to the choice of distance at which the plumes are injected into the Eulerian grid and the choice of the Gaussian time step ($< 1\%$). However, the use of a sub-hourly resolution for the Gaussian model may lead to some large differences at specific receptors and times, this result is of interest for population exposure applications.

A comparison of this Gaussian plume-based PinG model with a PinG model that uses Gaussian puffs showed similar results in terms of near-source concentrations, but significantly different computational requirements (three orders of magnitude greater for the puff-based PinG model).

Parallelization of the computations was shown to be an efficient approach to manage computational time. Thus, the parallelized version of the PinG model allows one to simulate a large number of roadway sections efficiently.

This PinG model for roadways should be a valuable tool to address population exposure at local and regional scales. Model performance evaluation was conducted here with measurements averaged over an entire month, it would be interesting to evaluate the model with hourly measurements of traffic-related air pollutants. The incorporation of particulate pollutants and the associated aerosol dynamics should be also the topic of further work.

4.7 Acknowledgments

We acknowledge the GENEMIS project, which provides the emission temporal profile and the Department of Transportation for the Île-de-France region (DRE IF) for providing the traffic modeling results. We also acknowledge the National Centers for Environmental Prediction (NCEP) for providing initial and boundary conditions that were used for the WRF model simulations. Thanks are due to Airparif, the air quality agency of the Paris region, and to EMEP members for providing us with their emission inventories. We also acknowledge the French technical study and engineering center CETE Nord-Picardie (Christine Bugajny and Marie Gadrat), who provided the line source NO_x emissions and the road network information that was used to conduct the above simulations. Finally, thanks are due to Jérôme Drevet for constructive discussions.

4.8 Supplementary Material

4.8.1 Concentration maps of selected VOC simulated with the nine-reactions chemical scheme for the Gaussian model.

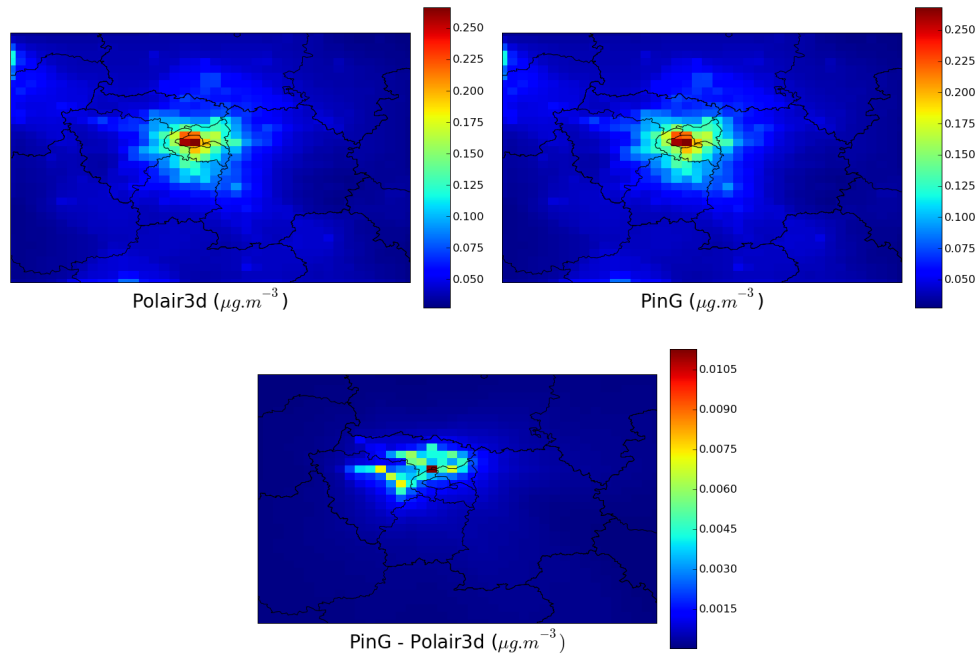


Figure 4.15: C_4H_6 concentration maps for the PinG simulation, the Polair3D simulation and difference between PinG and Polair3D for the summer period. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

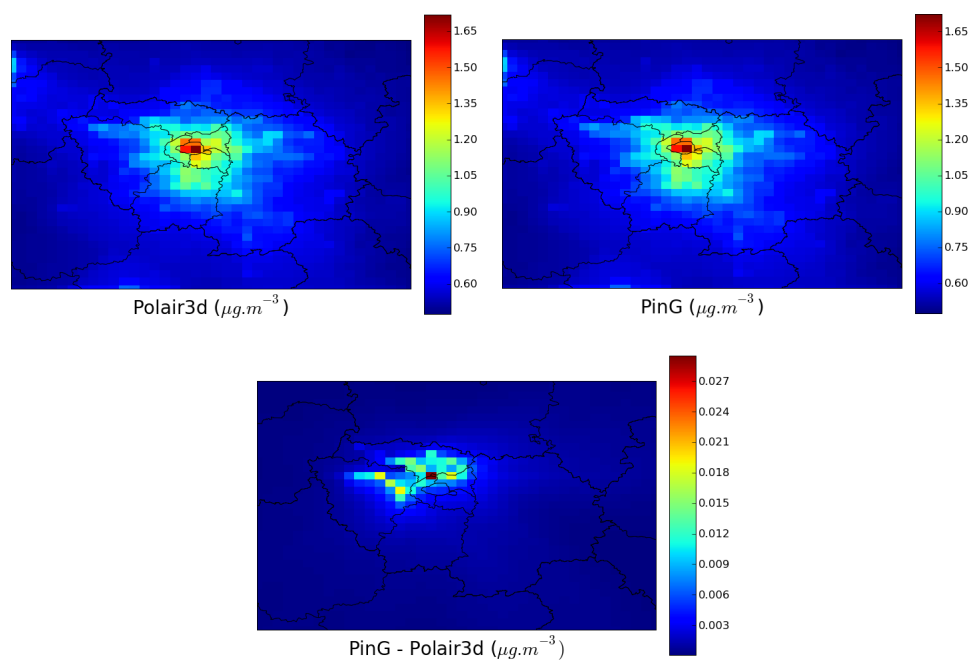


Figure 4.16: Benzene concentration maps for the PinG simulation, the Polair3D simulation and difference between PinG and Polair3D for the summer period. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

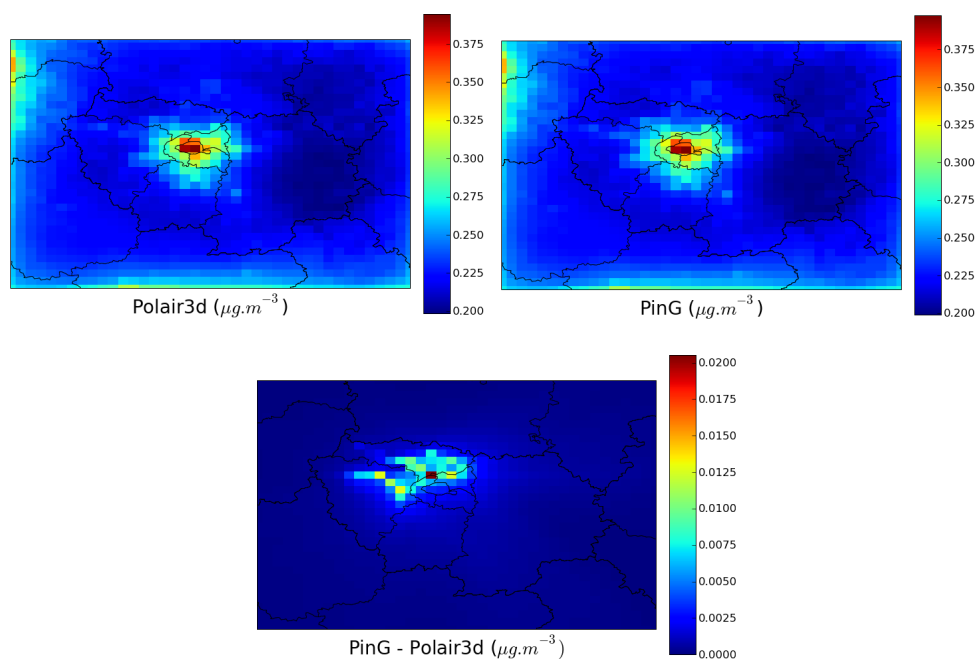


Figure 4.17: Acetaldehyde concentration maps for the PinG simulation, the Polair3D simulation and difference between PinG and Polair3D for the summer period. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

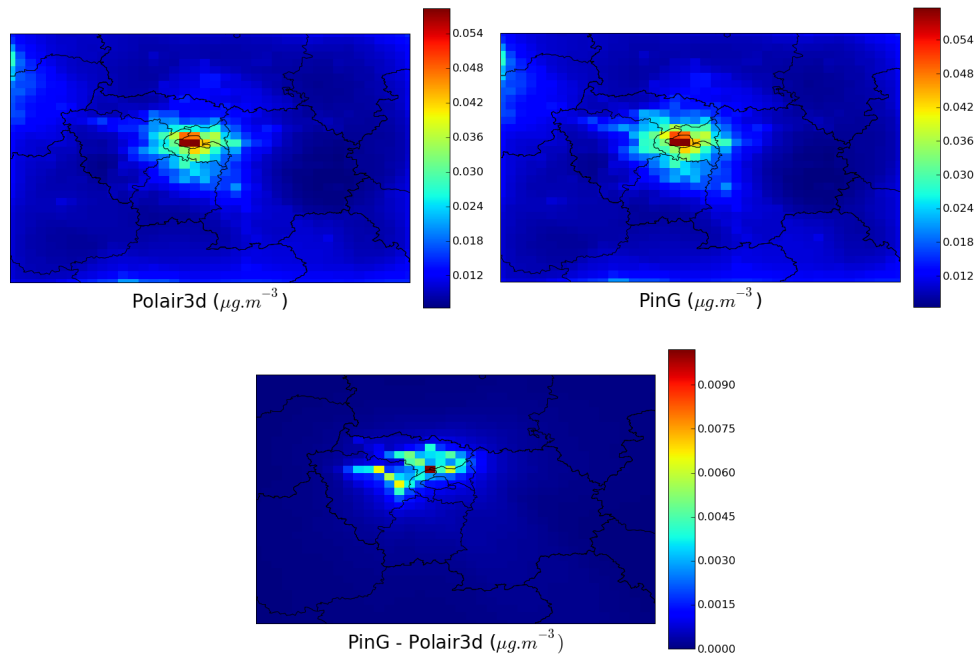


Figure 4.18: Acroleine concentration maps for the PinG simulation, the Polair3D simulation and difference between PinG and Polair3D for the summer period. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

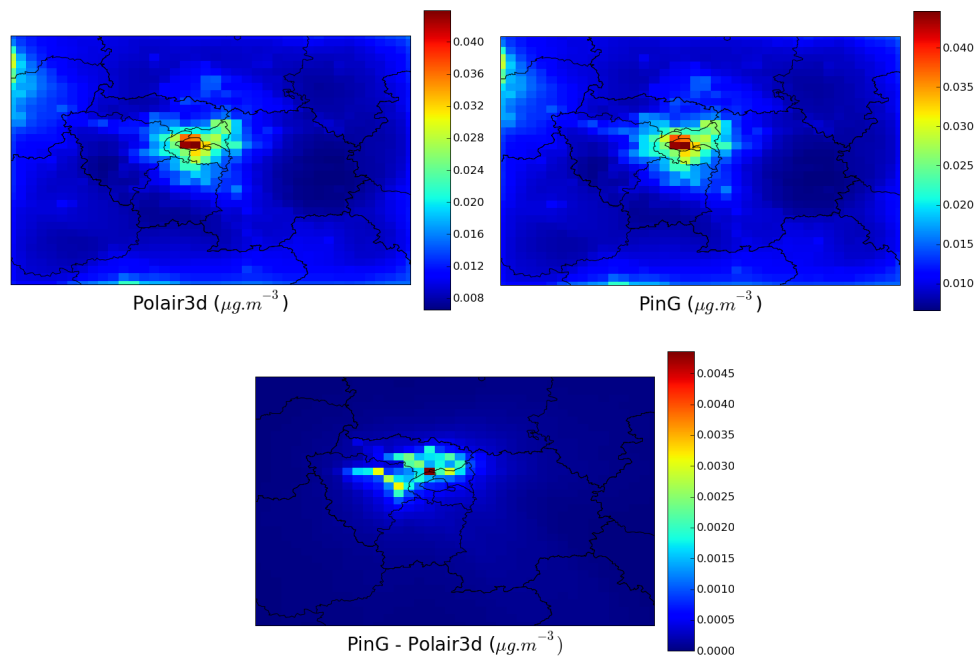


Figure 4.19: Propionaldehyde concentration maps for the PinG simulation, the Polair3D simulation and difference between PinG and Polair3D for the summer period. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

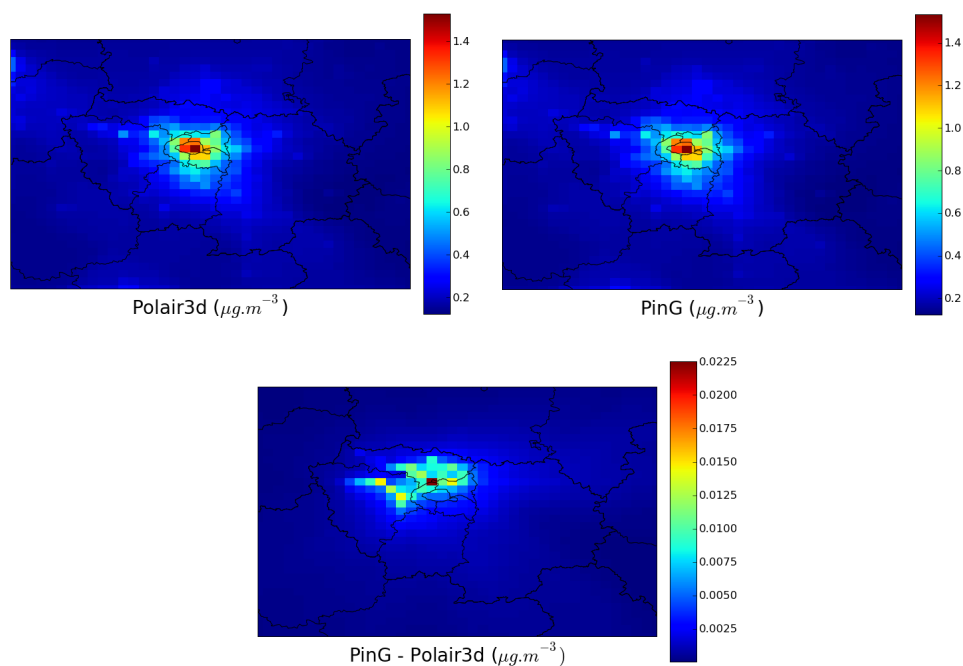


Figure 4.20: Ethylbenzene concentration maps for the PinG simulation, the Polair3D simulation and difference between PinG and Polair3D for the summer period. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

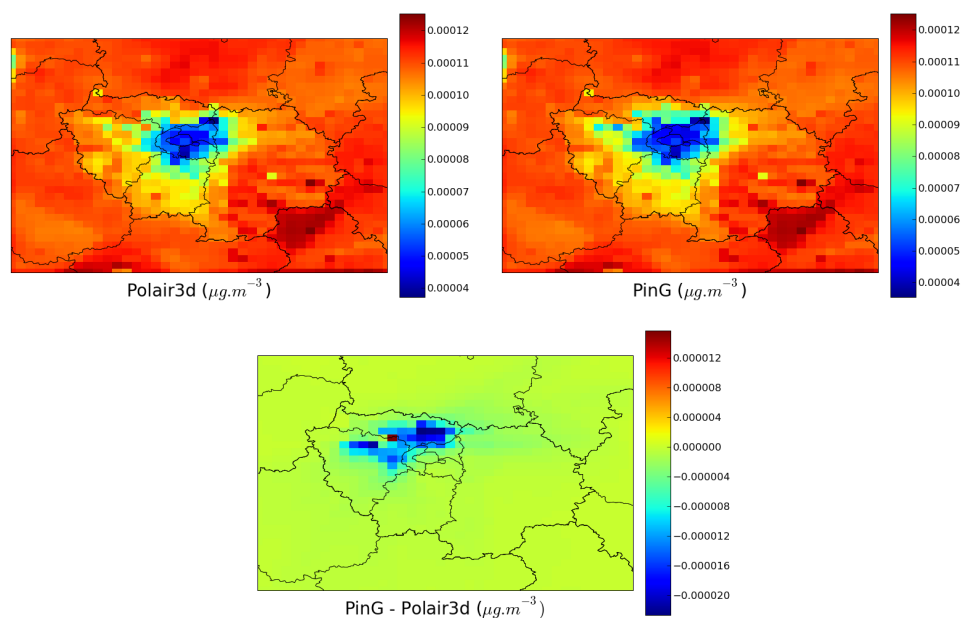


Figure 4.21: OH concentration maps for the PinG simulation, the Polair3D simulation and difference between PinG and Polair3D for the summer period. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

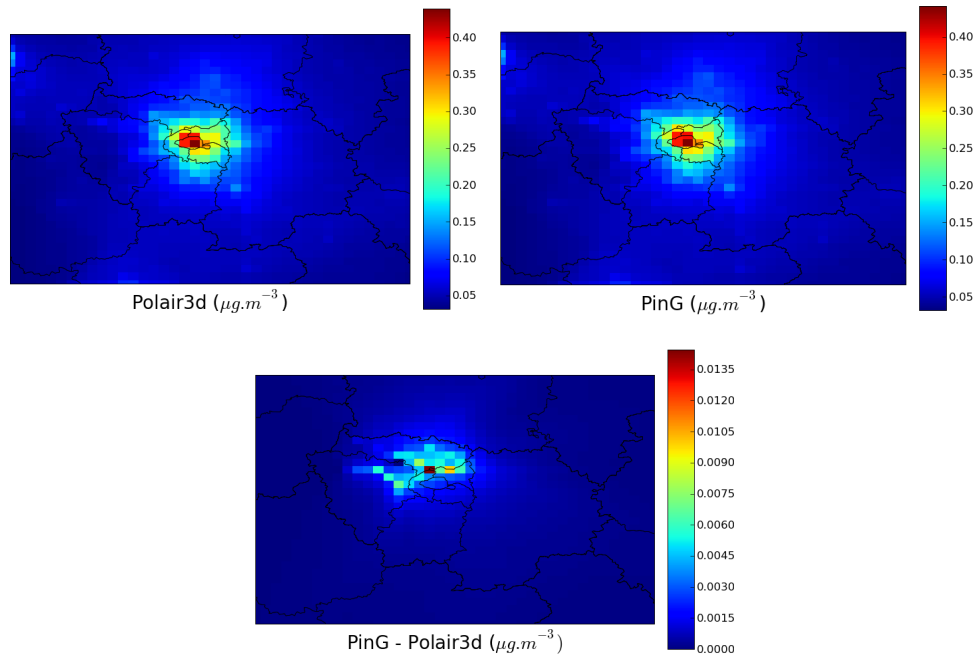


Figure 4.22: C_4H_6 concentration maps for the PinG simulation, the Polair3D simulation and difference between PinG and Polair3D for the winter period. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

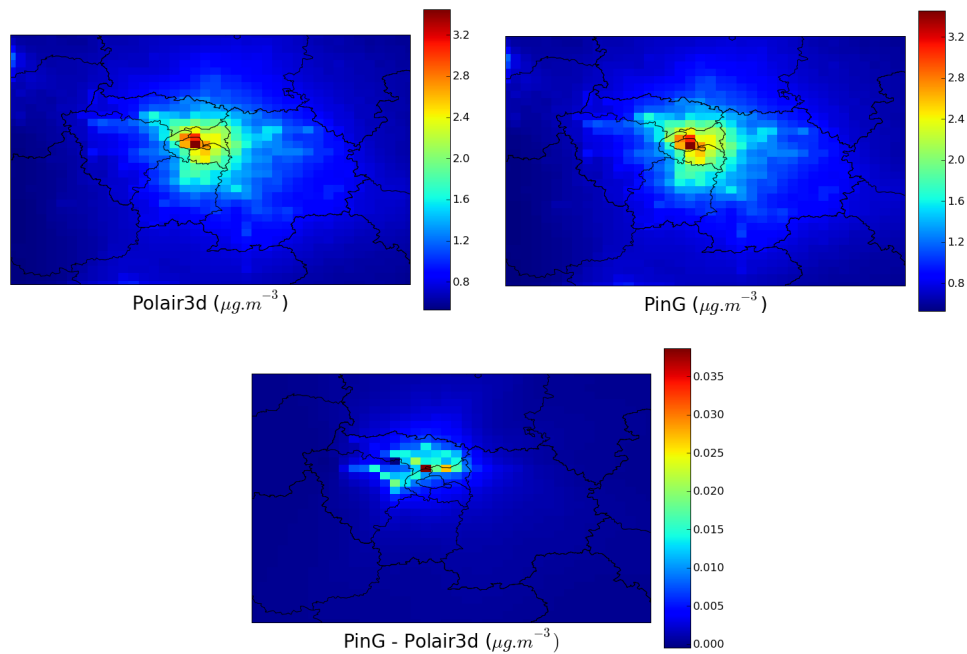


Figure 4.23: Benzene concentration maps for the PinG simulation, the Polair3D simulation and difference between PinG and Polair3D for the winter period. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

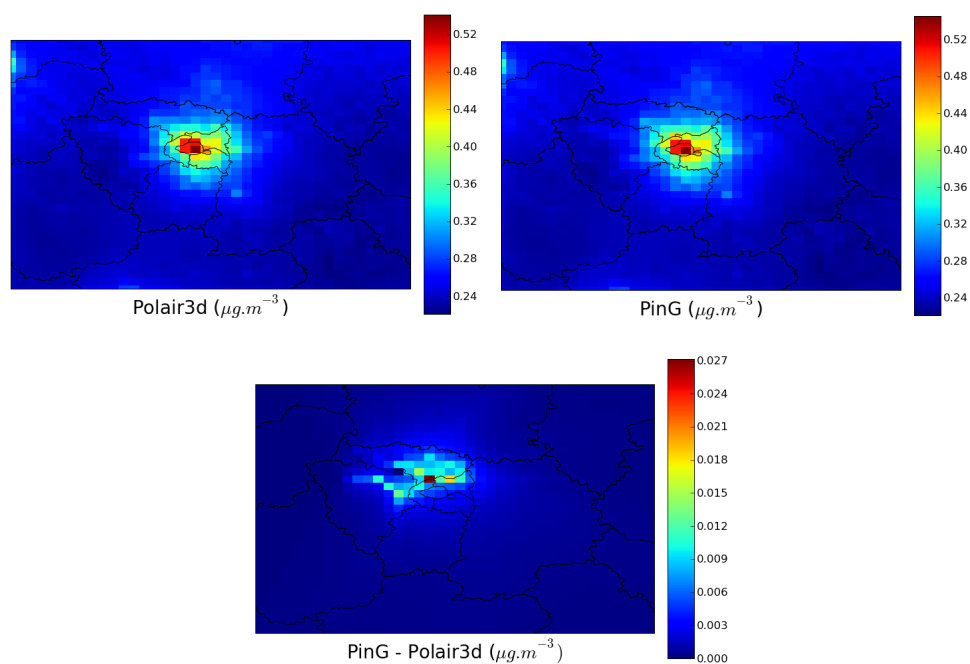


Figure 4.24: Acetaldehyde concentration maps for the PinG simulation, the Polair3D simulation and difference between PinG and Polair3D for the winter period. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

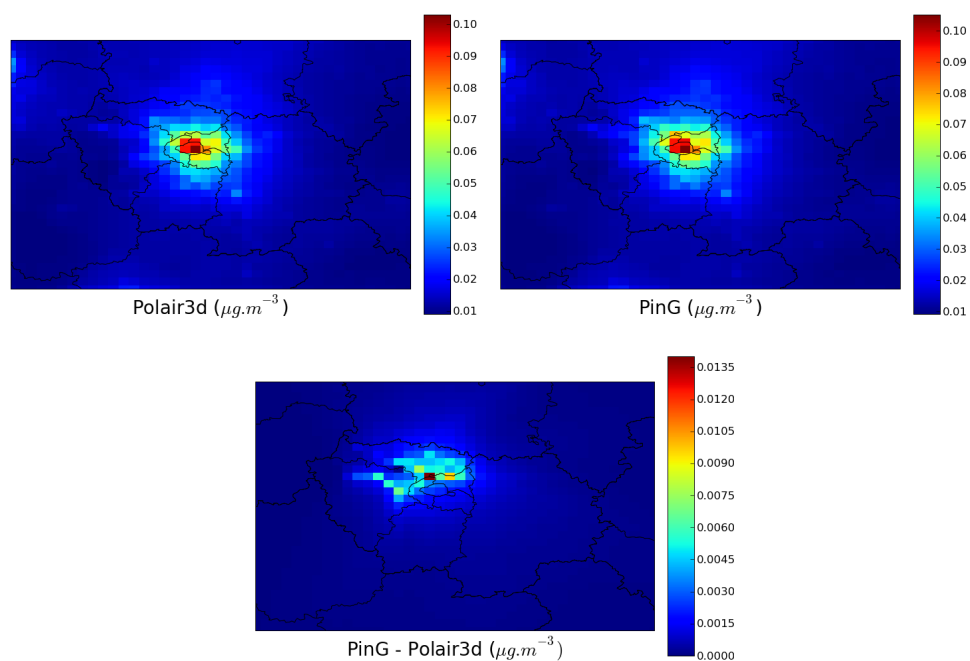


Figure 4.25: Acrolein concentration maps for the PinG simulation, the Polair3D simulation and difference between PinG and Polair3D for the winter period. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

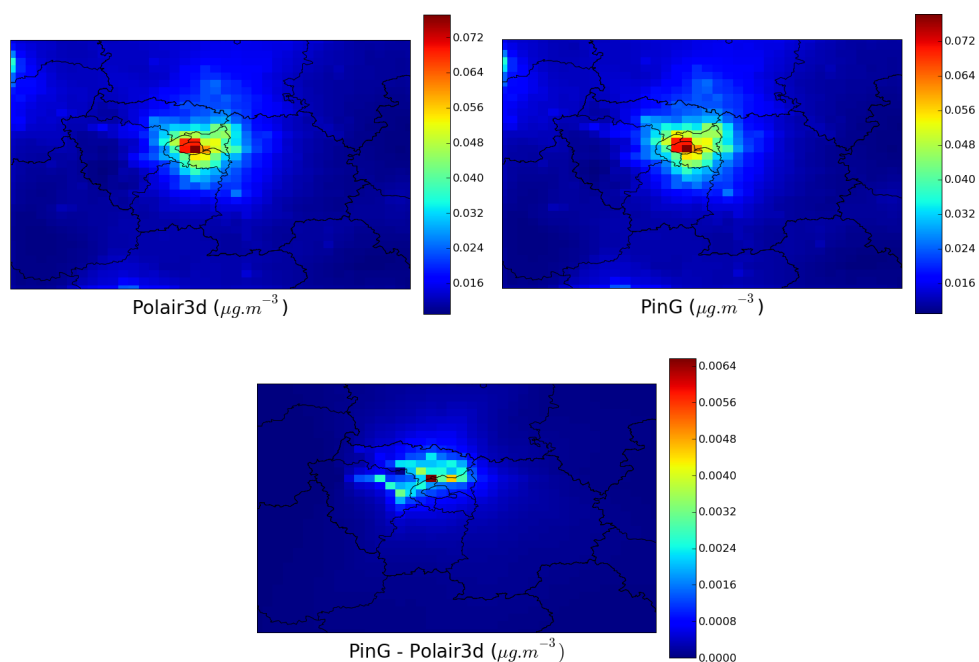


Figure 4.26: Propionaldehyde concentration maps for the PinG simulation, the Polair3D simulation and difference between PinG and Polair3D for the winter period. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

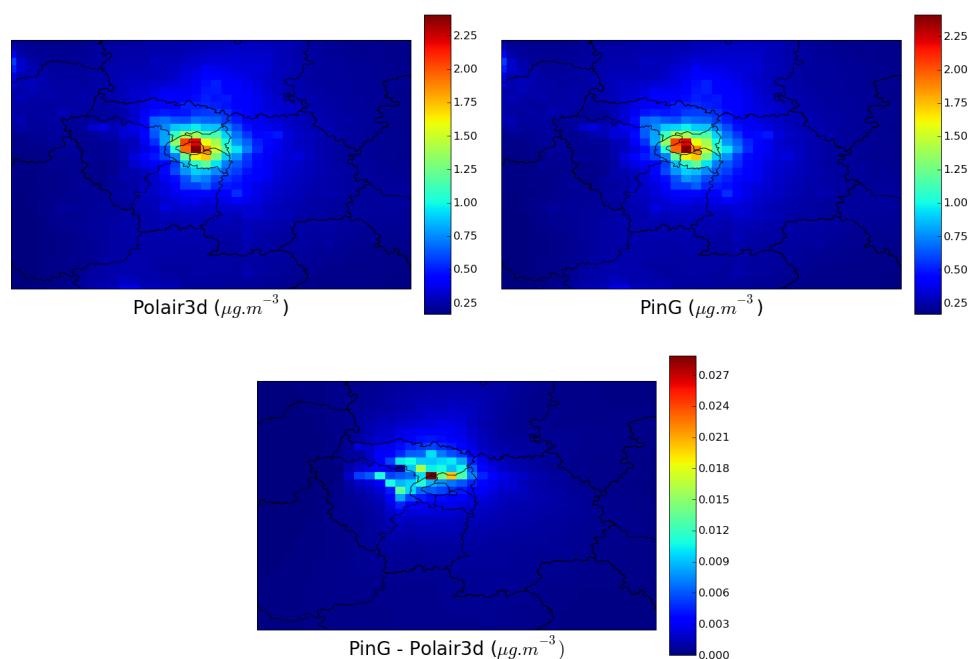


Figure 4.27: Ethylbenzene concentration maps for the PinG simulation, the Polair3D simulation and difference between PinG and Polair3D for the winter period. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

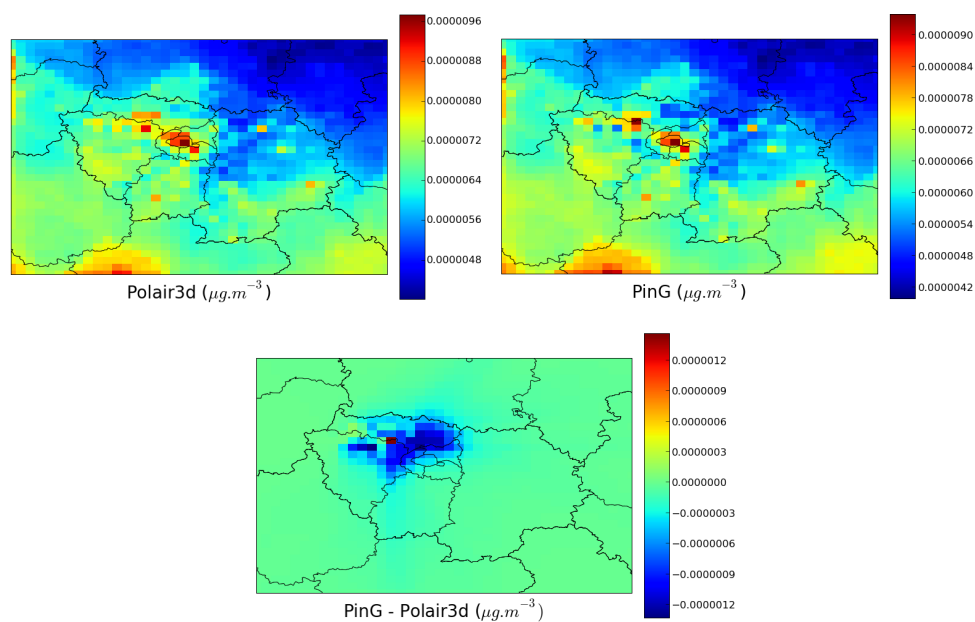


Figure 4.28: OH concentration maps for the PinG simulation, the Polair3D simulation and difference between PinG and Polair3D for the winter period. Concentrations are averaged over the one-month measurement period.

Chapitre 5

Conclusion et perspectives

5.1 Conclusion

Les polluants atmosphériques émis par le trafic routier contribuent aussi bien à des impacts sur la qualité de l'air en proximité des voies qu'à des échelles spatiales urbaine voire régionale. Or, la modélisation de ces impacts a traditionnellement été effectuée par des modèles distincts pour les échelles locale et régionale, qui ignorent par conséquent les interactions qui existent entre ces différentes échelles. L'objectif de cette thèse a été de développer une approche multi-échelles qui traite les impacts du trafic routier aux différentes échelles spatiales de manière intégrée. La première partie de la thèse a consisté à développer et évaluer le modèle de panache gaussien pour les impacts à proximité des voies ; la deuxième partie a consisté à développer et évaluer le modèle multi-échelles avec les panaches sous-mailles.

Modèle de panache gaussien

Une formulation de panache gaussien linéique a été développée, s'inspirant de la formulation HV (Horst-Venkatram) présentée dans Venkatram et Horst [2006]. Ce nouveau modèle offre en particulier une solution plus précise pour les cas où le vent est parallèle à la route. Ce modèle a été implémenté et intégré dans la plate-forme de modélisation Polyphemus.

Une comparaison entre ce modèle, la formulation HV et des mesures de concentrations de NO₂ faites en bord de route avec des tubes à diffusion passive (deux campagnes d'un mois chacune) a été effectuée. Une étude de sensibilité a permis de réduire l'incertitude liée aux données d'entrées. Le nouveau modèle de panache présente de bons résultats : plus de 92% des valeurs modélisées sont comprises entre la moitié et le double de la valeur mesurée et le biais relatif est compris entre $\pm 32\%$. Une autre étude a permis de montrer que les deux formulations (HV et Polyphemus) diffèrent le plus significativement lorsque le vent est parallèle à la route. Cependant, aucune mesure ne permet d'affirmer la précision des modèles pour ces cas particuliers. Une comparaison à des mesures ayant une résolution temporelle plus fine permettrait de mieux apprécier la précision du modèle de panache pour ces cas de figures.

À l'issue d'une collaboration entre le CEREa et le Centre d'Études Techniques de l'Équipement (CETE) Nord Picardie, le modèle gaussien de panache linéique est actuellement à l'essai dans plusieurs CETE en France. Le modèle gaussien est déjà partiellement disponible sur le site de Polyphemus (<http://cerea.enpc.fr/polyphemus/>) et sera disponible en totalité à partir de la version 1.9 de Polyphemus, prévue pour la fin de l'année 2012. Les détails sur son utilisation seront disponibles dans le guide utilisateur de Polyphemus et, de plus, une session de forma-

tion ayant pour but de faciliter la prise en main du modèle par les utilisateurs est en cours de réalisation. Cette session sera également disponible sur le site de Polyphemus et viendra compléter celles déjà existantes.

Modèle de panache sous-maille

Le modèle de panache gaussien a été intégré en sous-maille dans le modèle eulérien Polair3D [Boutahar *et al.*, 2004; Sartelet *et al.*, 2007] de Polyphemus [Mallet *et al.*, 2007]. Certains des principaux aspects qui ont dû être traités dans cette intégration incluent : (1) le transfert des polluants du modèle gaussien au modèle eulérien, (2) la parallélisation des calculs, (3) l’implémentation d’un schéma chimique prenant en compte différents COV émis par le trafic routier, et enfin (4) l’utilisation de pas de temps différents pour les deux modèles (gaussien et eulérien).

Le modèle de panache sous-maille multi-échelles a été évalué sur le même cas d’étude que celui utilisé pour l’évaluation du modèle de panache. Ainsi, le modèle est non seulement comparé aux mesures, mais aussi aux modèles gaussien et eulérien seuls. Les performances des modèles gaussien et de panache sous-maille sont nettement supérieures à celles de Polair3D. En effet, par définition, les émissions de Polair3D sont initialement diluées dans chaque maille et les résultats aux environs des sources (i.e., là où sont situés les points de mesures) sont donc moins précis. Une autre conséquence de cette dilution initiale est le fait que le modèle de panache sous-maille donne des concentrations toujours supérieures à celle de Polair3D. Par ailleurs, le modèle de panache sous-maille donne de meilleurs résultats que le modèle de panache, particulièrement pour la campagne d’hiver. Ceci est dû à la meilleure représentation de la pollution de fond dans le modèle de panache sous-maille. Les résultats, obtenus pour certains COV d’intérêt montrent des concentrations plus élevées près des axes routier avec le modèle de panache sous-maille que celles simulées par le modèle eulérien. Notons que, tout comme l’évaluation du modèle gaussien, l’évaluation du modèle de panache sous-maille sur d’autres cas, notamment avec des mesures ayant une résolution temporelle plus fine, permettrait de mieux évaluer ses performances.

Une étude de sensibilité a montré que le choix de la distance à la source à laquelle les polluants sont transférés du modèle gaussien au modèle eulérien et le choix du pas de temps gaussien n’ont que peu d’influence sur les concentrations ($< 1\%$). Une comparaison avec le modèle de panache sous-maille utilisant des bouffées, développé par Korsakissok et Mallet [2010a], montre des résultats similaires entre les deux modèles. Cependant, le temps de calcul est bien plus important (quelques milliers de fois plus important pour le cas présenté dans la thèse) avec le modèle à bouffées du fait de la discrétisation spatiale et temporelle de la source faite par le modèle à bouffées. Enfin, la parallélisation des calculs a été évaluée; elle présente de bonnes performances, ce qui permet de gérer un nombre important de sources.

Le modèle de panache sous-maille développé au cours de cette thèse est entièrement opérationnel et sera intégré à la prochaine version de Polyphemus (version 1.9, disponible pour la fin de l’année 2012). Le modèle de panache sous-maille fera l’objet également d’une session de formation.

5.2 Perspectives

Les travaux effectués lors de cette thèse ont abouti à un outil de modélisation opérationnel qui a déjà été appliqué à des cas d’étude réels. Néanmoins, des améliorations sont possibles sur plusieurs aspects de ce logiciel de modélisation de la qualité de l’air.

Optimisation du code de calcul

Une importante partie de cette thèse a été consacrée à l’implémentation des modèles. Bien que ceux-ci soient entièrement fonctionnels, des améliorations dans le code de calcul pourraient y être apportées afin d’optimiser ses performances.

Parallélisation du modèle de panache sous-maille

Les ressources informatiques nécessaires pour une simulation avec le modèle de panache sous-maille étant très supérieures à celles du modèle Polair3D, optimiser le calcul se révélera crucial pour des applications ayant un nombre de sources conséquent. Une parallélisation des calculs gaussiens du modèle de panache sous-maille qui a été présenté dans le Chapitre 4, pourrait encore être améliorée. En effet, le modèle Polair3D supporte une parallélisation hybride utilisant à la fois la librairie Message Passing Interface (MPI : <http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpi/>) et l’interface Open Multi-Processing (Open-MP : <http://openmp.org/wp/>). Cela permet notamment de limiter la mémoire nécessaire à l’exécution du programme. Cependant, le modèle de panache sous-maille ne supporte que la parallélisation utilisant la librairie MPI. Il serait donc intéressant de poursuivre cette parallélisation en utilisant aussi Open-MP et en développant une parallélisation hybride pour le modèle de panache sous-maille.

Parallélisation d’autres modèles

La parallélisation présentée dans le Chapitre 4 à été développée pour les calculs du modèle de panache sous-maille développé dans la thèse. Cependant, il n’existe pas, dans Polyphemus, de parallélisation pour le modèle de panache utilisé seul. Les simulations pour chaque situation météorologique effectuées dans le Chapitre 3 était indépendantes les unes des autres et une pseudo-parallélisation a permis d’effectuer les calculs efficacement sur plusieurs processeurs simultanément. Cependant, il pourrait être envisagé de paralléliser le modèle de panache de la même façon que cela a été fait pour le modèle de panache sous-maille, c’est à dire en divisant la liste des sources et en répartissant les sources sur les différents processeurs. Ceci pourrait d’ailleurs s’appliquer aussi au modèle à bouffées ainsi qu’au modèle de panache sous-maille utilisant des bouffées.

Calcul de la dispersion de plusieurs espèces issues d’une même source

Lorsque plusieurs espèces sont dispersées par le modèle gaussien à partir d’une même source, il est attendu qu’elles donnent des résultats strictement identiques à un facteur près, lié au taux d’émissions qui peuvent être différents (sauf pour les processus de pertes qui peuvent dépendre de l’espèce). Faire le calcul de la dispersion pour une seule espèce passive et en déduire la dispersion pour les autres pourrait se révéler intéressant car on aura sensiblement le même temps de calcul lorsque l’on disperse une espèce que lorsque l’on en disperse plusieurs.

Une telle approche à d’ailleurs été utilisée dans la Section 4.4.3 du Chapitre 4 où les émissions, sur l’ensemble des sources, étaient proportionnelles. Dans ce cas, le coefficient de proportionnalité est connu et constant dans le temps et peut donc s’appliquer, pour tous les pas de temps, sur la somme des dispersions de toutes les sources.

Il a donc été envisagé d’utiliser cette technique pour le cas plus général où les émissions ne sont pas proportionnelles sur l’ensemble des sources. Cependant, cela n’a pas abouti et il en a résulté un temps de calcul plus important. En effet, cela nécessite de connaître le coefficient de proportionnalité à associer à chaque espèce pour chaque source et à chaque pas de temps. Or, une source émettant deux espèces différentes est représentée dans le code de calcul par deux

sources distinctes et indépendantes. Le lien entre ces sources n'est donc pas évident et l'identifier nécessite de faire plusieurs parcours de la liste des sources, ce qui se révèle coûteux en temps de calcul lorsque la liste des sources est longue (ce qui est le cas dans les simulations des Chapitres 3 et 4). Notons de plus que la liste des sources change au fur et à mesure des itérations, à cause notamment de la discrétisation des sources linéiques en sources ponctuelles qui est faite lorsque le vent est parallèle à la route (i.e., des sources ponctuelles sont ajoutées à la liste au début de l'itération temporelle et enlevées à la fin de l'itération) et de l'utilisation de profils temporels (modification des taux d'émissions); il faut donc refaire ces parcours de liste plusieurs fois à chaque itération. Au final, une telle approche ne se révélerait intéressante que lorsque le nombre d'espèces dispersées est très supérieur au nombre de sources, ce qui est rarement le cas. En revanche, le concept de disperser une seule espèce et d'en déduire les autres afin d'optimiser le temps de calcul est possible mais cela requerrait des modifications importantes de la façon dont sont gérées les sources dans le modèle gaussien de panache.

Amélioration du modèle de panache sous-maille

Outre les améliorations liées à l'optimisation du code de calcul, des améliorations de la modélisation sont aussi possibles. En effet, nous avons développé ici une méthode permettant de transférer les polluants du modèle gaussien au modèle eulérien en discrétisant une surface de forme trapézoïdale située à une certaine distance de la source. D'autres méthodes peuvent être envisagées, qui pourraient par exemple être basées sur la largeur du panache relativement à la taille d'une maille ou encore sur la concentration dans le panache relativement à une valeur de fond.

Nous avons utilisé ici le schéma chimique CB05 pour le modèle eulérien et un schéma chimique stationnaire simple pour le modèle gaussien. L'utilisation d'autres schémas chimiques pourraient aussi être envisagées, surtout que de part la nature modulaire de Polyphemus, l'intégration d'autres schémas chimiques est relativement simple.

Les modèles développés au cours de la thèse dispersent uniquement des espèces gazeuses. Étendre ces modèles aux aérosols est important puisque de nombreux polluants émis par le trafic routier sont présents sous forme particulaire [ANSES, 2012].

Modélisation de la turbulence du trafic

Dans cette thèse, la dispersion liée au trafic est modélisée par une valeur initiale des coefficients de dispersion qui sont ensuite calculés en aval de la source avec la paramétrisation de Briggs [Briggs, 1973]. Cette valeur initiale, présentée dans le chapitre 2, est égale à 70% de la hauteur à laquelle les polluants sont émis.

Le travail de stage de master d'Ali Mezdour [Mezdour, 2012], réalisé grâce à une collaboration entre le CEREAs, le CETE Nord Picardie et l'Université Lille 1, a permis de prendre en compte l'effet de la turbulence liée au trafic sur la dispersion verticale initiale. Après une étude bibliographique, la paramétrisation présentée dans Kastner-Klein *et al.* [2000], initialement développée par Hertel et Berkowicz [1989c] a été choisie, puis implémentée dans le modèle de panache de Polyphemus et testée sur un cas réel avec différentes valeurs pour les paramètres d'entrées. Cette nouvelle formulation est plus réaliste que la précédente car elle fait intervenir différents paramètres qui sont le nombre de véhicules par tronçon, la vitesse des véhicules et la surface moyenne des véhicules. Ce travail s'inscrit en continuité avec le travail réalisé sur la modélisation du trafic routier au cours de cette thèse et cette paramétrisation pourra être intégré dans le modèle de panache sous-maille.

Modélisation des infrastructures urbaines

Le Réseau Scientifique et Technique Air (RST Air) du ministère chargé de l'Écologie à récemment souhaité la création d'un groupe de travail pour étudier les mesures de réduction des impacts des infrastructures urbaines. Ce groupe de travail, dont la première réunion se tiendra au mois d'octobre 2012, est piloté par le CETE Nord Picardie et fera intervenir les différents CETE ainsi que leurs partenaires. La prise en compte des infrastructures urbaines dans les simulations de dispersion de polluants est donc essentielle. En effet, bien que la structure des bâtiments soit prise en compte dans la modélisation de la dispersion des polluants avec des modèles de type CFD ou rue-canyon, les modèles gaussiens font généralement l'hypothèse d'un terrain plat, sans infrastructure pouvant modifier la dispersion des polluants. Pouvoir intégrer la structure des bâtiments à la dispersion gaussienne permettrait d'améliorer significativement la précision du modèle pour les applications urbaines ou semi-urbaines.

Les modèles de rue-canyon comme Operational Street Pollution Model (OSPM) [Hertel et Berkowicz, 1989b,a,c] et SIRANE [Soulhac *et al.*, 2011, 2012], moins coûteux que les modèles de CFD, sont intéressants car ils combinent un modèle de panache, pour représenter la dispersion des polluants au-dessus de la canopée urbaine, avec un modèle de boîtes, pour modéliser la dispersion des polluants à l'intérieur des rues-canyons. Combiner le modèle gaussien de panache linéique de Polyphemus avec un modèle de boîtes, avec des paramétrisations appropriées pour des rues-canyons permettrait d'étendre le champ d'application des modèles de panache sous-maille à des cas de pollution en milieux urbain et semi-urbain.

Bibliographie

- ANSES (2012). Sélection des polluants à prendre en compte dans les évaluations des risques sanitaires réalisées dans le cadre des études d'impact des infrastructures routières. *Rapport d'expertise collective, Saisine n°2010-SA-0283, Agence Nationale de la Sécurité Sanitaire, Maisons-Alfort, France.*
- Archambeau, F., Mechtoua, N. et Sakiz, M. (2003). Code_saturne : a finite volume code for the computation of turbulent incompressible flows - industrial applications. *International Journal on Finite Volumes.*
- Arya, S. (1999). *Air pollution meteorology and dispersion.* Oxford University press.
- Azzi, M. et Johnson, G. (1993). Airtrak : new developments. *Clean Air*, 27:191–193.
- Benson, P. (1992). A review of the development and application of the CALINE3 and 4 models. *Atmos. Env.*, 26:379–390.
- Berger, J., Walker, S.-E., Denby, B., Berkowicz, R., Løfstrøm, P., Ketzel, M., Härkönen, J., Nikmo, J. et Karppinen, A. (2010). Evaluation and inter-comparison of open road line source models currently in use in the nordic countries. *Boreal Env. Res.*, 15(319-334).
- Bergstrom, R., Seigneur, C., Babson, B., Holman, H.-Y. et Wojcik, M. (1981). Comparison of the observed and predicted visual effects caused by power plant plumes. *Atmos. Env.*, 15:2135–2150.
- Bessagnet, B., Menut, L., Curci, G., Hodzic, A., Guillaume, B., Lioussé, C., Moukhtar, S., Pun, B., Seigneur, C. et Schulz, M. (2009). Regional modeling of carbonaceous aerosols over Europe - focus on secondary organic aerosols. *J. Atmos. Chem.*, 61:175–202.
- Boutahar, J., Lacour, S., Mallet, V., Quélo, D., Roustan, Y. et Sportisse, B. (2004). Development and validation of a fully modular platform for numerical modelling of air pollution : POLAIR. *Int. J. Env. Pollut.*, 22:17–28.
- Briant, R., Korsakissok, I. et Seigneur, C. (2011). An improved line source model for air pollutant dispersion from roadway traffic. *Atmos. Env.*, 45:4099–4107.
- Briant, R. et Seigneur, C. (2012). Multi-scale modeling of roadway air quality impacts : development and evaluation of a plume-in-grid model. *Atmos. Env. In press* [dx.doi.org/10.1016/j.atmosenv.2012.11.058](https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2012.11.058).
- Briant, R., Seigneur, C., Gadrat, M. et Bugajny, C. (2012). Evaluation of roadway gaussian plume models with large-scale measurement campaigns. *Soumis à Geosci. Model Dev.*, 5:3343–3373.

- Briggs, G. (1973). Diffusion estimation for small emissions. *Report NOAA n. 79, Oak Ridge, TN (U.S.A.)*.
- Byun, D. et Ching, J. (1999). Science algorithms of the EPA models-3 community multiscale air quality (CMAQ) modeling system. *EPA/600/R-99/030. US Environmental Protection Agency, Washington, DC, United States*.
- Calder, L. (1973). On estimating air pollution concentrations from a highway in an oblique wind. *Atmos. Env.*, 7:863–868.
- Cassiani, M., Vinuesa, J., Galmarini, S. et Denby, B. (2010). Stochastic fields method for sub-grid scale emission heterogeneity in mesoscale atmospheric dispersion models. *Atmos. Chem. Phys.*, 10:167–277.
- Chang, J. et Hanna, S. (2004). Air quality model performance evaluation. *Meteorol Atmos Phys*, 87:167–196.
- Chang, J., Jin, S., Li, Y., Beauharnois, M., Lu, C.-H. et Huang, H.-C. (1997). The SARMAP air quality model; final report. *Atmospheric Sciences Research Center : Albany, NY, USA*.
- Chen, H., Bai, S., Eisinger, D., Niemeier, D. et Claggett, M. (2009). Predicting near-road PM_{2.5} concentrations : comparative assessment of CALINE4, CAL3QHC, and AERMOD. *Transportation Research Record, Journal of the Transportation Research Board*, 2123(26-37).
- Ching, J., Herwehe, J. et Swall, J. (2006). On joint deterministic grid modeling and sub-grid variability conceptual framework for model evaluation. *Atmos. Env.*, 40:4935–4945.
- Ching, J., Pierce, T., Palma, T., Hutzell, W., Tang, R., Cimorelli, A. et Herwehe, J. (2004). Application of fine scale air toxics modeling with CMAQ to HAPEM5. *In Proceedings of the 3rd Annual CMAS Models-3 Conference, Chapel Hill, NC, USA*.
- Cimorelli, A., Perry, S., Venkatram, A., Weil, J., Paine, R., Wilson, R., Lee, R., Peters, W. et Brode, R. (2005). AERMOD. : A dispersion model for industrial source applications. part I : General model formulation and boundary layer characterization,. *J. Applied Meteor.*, 44:682–693.
- Cook, R., Isakov, I., Touma, J., Benjey, W., Thurman, J., Kinnee, E. et Ensley, D. (2010). Resolving local-scale emissions for modeling air quality near roadways. *J. Air Waste Manage Assoc.*, 58:451–461.
- Csanady, G. (1973). *Turbulent Diffusion in the Environment*. D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, The Netherlands.
- Draxler, R. et Hess, G. (1998). An overview of the HYSPLIT4 modelling system for trajectories, dispersion, and deposition. *Australian Meteorological Magazine*, 47:295–308.
- ENVIRON. (2011). User’s guide, comprehensive air quality model with extensions (CAMx), version 5.40. *Available online : <http://www.camx.com>*.
- EPA (2008). Risk and exposure assessment to support the review of the NO₂ primary national ambient air quality standard. *U.S. Environmental Protection Agency, Research Triangle Park, North Carolina, USA*.

- Eskridge, R. et Rao, S. (1986). Turbulent diffusion behind vehicles : Experimentally determined turbulence mixing parameters. *Atmos. Environ.* 1967, 20 5:851–860.
- Esplin, J. (1995). Approximating explicit solution to the general line source problem. *Atmos. Env.*, 29:1459–1463.
- Franke, K., Eyring, V., Sander, R., Hendricks, J., Lauer, A. et Sausen, R. (2008). Toward effective emissions of ships in global models. *Met. Zeitschrift*, 17:117–129.
- Friedrich, R. et Reis, S. (2004). Emissions of air pollutants-measurements, calculations and uncertainties, GENEMIS, EUROTRAC-2. *Subproject Final Report, Springer Publishers, Berlin*.
- Galmarini, S., Vinuesa, J. et Martilli, A. (2008). Modeling the impact of sub-grid scale emission variability on upper-air concentration. *Atmos. Chem. Phys.*, 8:141–158.
- Gillani, N. et Godowitch, J. (1999). Plume-in-grid treatment of major point source emissions. in science algorithms of the EPA models-3 community multiscale air quality (CMAQ) modeling system. *EPA-600/R-99/030; Byun, D.W., Ching, J., Eds.; U.S. Environmental Protection Agency : Washington, DC, USA; Chapter 9*.
- Godowitch, J. (2004). Simulations of aerosols and photochemical species with the CMAQ plume-in-grid modeling system. *In Proceedings of the 3rd Annual CMAS Models-3 User's Conference, Chapel Hill, NC, USA*.
- Grell, G., Peckham, S., Schmitz, R., McKeen, S., Frost, G., Skamarock, W. et Eder, B. (2005). Fully coupled 'online' chemistry in the WRF model. *Atmos. Env.*, 39:6957–6976.
- Hauglustaine, D., Hourdin, F., Jourdain, L., Filiberti, M.-A., Walters, S., Lamarque, J.-F. et Holland, E. (2004). Interactive chemistry in the laboratoire de météorologie dynamique general circulation model : description and background tropospheric chemistry evaluation. *J. Geophys. Res.*, 109:D04314.
- Hertel, O. et Berkowicz, R. (1989a). Modelling NO₂ concentrations in a street canyon. *DMU Luft A-131*, page 31p.
- Hertel, O. et Berkowicz, R. (1989b). Modelling pollution from traffic in a street canyon. evaluation of data and model development. *DMU Luft A-129*, page 77p.
- Hertel, O. et Berkowicz, R. (1989c). Operational street pollution model (OSPM). evaluation of the model on data from st. Olavs street in Oslo. *DMU Luft A-135*.
- Huszar, P., Cariolle, D., Paoli, R., Halenka, T., Schlagerand, M. B. H., Miksovskyand, J. et Pisoft, P. (2010). Modeling the regional impact of ship emissions on NO_x and ozone levels over the eastern atlantic and western europe using ship plume parameterization. *Atmos. Chem. Phys.*, 10:6645–6660.
- Isakov, V., Irwin, J. et Ching, J. (2007). Using CMAQ for exposure modeling and characterizing the subgrid variability for exposure estimates. *J. Appl. Meteor. Climatol.*, 46:1354–1371.
- Jacobson, M., Wilkerson, J., Naiman, A. et Lele, S. (2011). The effects of aircraft on climate and pollution. part I : Numerical methods for treating the subgrid evolution of discrete size- and composition-resolved contrails from all commercial flights worldwide. *J. Comp. Phys.*, 230:5115–5132.

- Karamchandani, P., Lohman, K. et Seigneur, C. (2009). Using a sub-grid scale modeling approach to simulate the transport and fate of toxic air pollutants. *Environ. Fluid Mechanics*, 9:59–71.
- Karamchandani, P., Santos, L., Sykes, I., Zhang, Y., Tonne, C. et Seigneur, C. (2000). Development and evaluation of a state-of-the-science reactive plume model. *Environ. Sci. Technol.*, 34:870–880.
- Karamchandani, P., Seigneur, C., Vijayaraghavan, K. et Wu, S.-Y. (2002). Development and application of a state-of-the-science plume-in-grid model. *J. Geophys. Res.*, 107:4403.
- Karamchandani, P., Vijayaraghavan, K., Chen, S., Balmori-Bronson, R. et Knipping, E. (2010). Development and application of a parallelized version of the advanced modeling system for transport, emissions, reactions and deposition of atmospheric matter (AMSTERDAM) : 1. Model performance evaluation and impacts of plume-in-grid treatment. *Atmos. Pollut. Res.*, 1:260–270.
- Karamchandani, P., Vijayaraghavan, K., Chen, S., Seigneur, C. et Edgerton, E. (2006). Plume-in-grid modeling for particulate matter. *Atmos. Env.*, 40:7280–7297.
- Karamchandani, P., Vijayaraghavan, K. et Yarwood, G. (2011). Sub-grid scale plume modeling. *Atmosphere*, 2:389–406.
- Kastner-Klein, P., Berkowicz, R. et Plate, E. (2000). Modelling of vehicle-induced turbulence in air pollution studies for streets. *International Journal of Environment and Pollution*, 14:496–507.
- Kim, Y. (2011). *Modélisation de la qualité de l'air : Évaluation des paramétrisations chimiques et météorologiques*. Thèse de doctorat, Université Paris-Est, Marne-la-Vallée. <http://pastel.archives-ouvertes.fr/pastel-00667777/>.
- Kim, Y., Sartelet, K. et Seigneur, C. (2009). Comparison of two gas-phase chemical kinetic mechanisms of ozone formation over europe. *J. Atmos. Chem.*, 62:89–119.
- Korsakissok, I. (2009). *Changements d'échelles en modélisation de la qualité de l'air et estimation des incertitudes associées*. Thèse de doctorat, École nationale des ponts et chaussées.
- Korsakissok, I. et Mallet, V. (2009). Comparative study of Gaussian dispersion formulas within the Polyphemus platform : evaluation with Prairie Grass and Kincaid experiments. *J. Applied Meteor.*, 48(12):2459–2473.
- Korsakissok, I. et Mallet, V. (2010a). Development and application of a reactive plume-in-grid model : evaluation over greater paris. *Atmos. Chem. Phys.*, 10:5091–5134.
- Korsakissok, I. et Mallet, V. (2010b). Subgrid-scale treatment for major point sources in an eulerian model : A sensitivity study on the european tracer experiment (ETEX) and Chernobyl cases. *J. Geophys. Res.*, 115:D03303.
- Kumar, N. et Russell, A. (1996). Development of a computationally efficient, reactive subgrid-scale plume model and the impact in the northeastern united states using increasing levels of chemical detail. *J. Geophys. Res.*, 101:16737–16744.

- Levitin, J., Härkönen, J., Kukkonen, J. et Nikmo, J. (2005). Evaluation of the CALINE 4 and CAR-FMI models against measurements near a major road. *Atmos. Env.*, 39:4439–4452.
- LVMT (2010). Personal communication from Megan Lebacque, Laboratoire Ville Mobilité Transport. *École des Ponts ParisTech, Champs sur Marne, France*.
- Mallet, V., Quélo, D., Sportisse, B., Ahmed de Biasi, M., Debry, É., Korsakissok, I., Wu, L., Roustan, Y., Sartelet, K., Tombette, M. et Foudhil, H. (2007). Technical Note : The air quality modeling system Polyphemus. *Atmos. Chem. Phys.*, 7(20):5479–5487.
- Mallet, V. et Sportisse, B. (2004). 3-d chemistry-transport model Polair : numerical issues, validation and automatic-differentiation strategy. *Atmos. Chem. Phys. Discuss.*, 4:1371–1392.
- McHugh, C., Carruthers, D., Higson, H. et Dyster, S. (2001). Comparison of model evaluation methodologies with application to ADMS 3 and U.S. models. *Int. J. Env. Pollut.*, 16(1-6).
- Mezdour, A. (2012). Modélisation de la turbulence due au trafic routier et son impact sur la dispersion des émissions du trafic routier. *Mémoire de Stage Master CEE, Université Lille 1*.
- Milliez, M. (2006). *Modélisation micro-météorologique en milieu urbain : dispersion des polluants et prise en compte des effets radiatifs*. Thèse de doctorat, École nationale des ponts et chaussées.
- Milliez, M. et Carissimo, B. (2007). Numerical simulations of flow and pollutant dispersion in an idealized urban area, for different meteorological conditions. *Boundary-Layer Meteorol.*, 122(2):321–342.
- Naiman, A., Lele, S., Wilkerson, J. et Jacobson, M. (2010). Parameterization of subgrid plume dilution for use in large-scale atmospheric simulations. *Atmos. Chem. Phys.*, 10:2551–2560.
- Plaisance, H., Garcia-Fouque, A. P.-M. S. et Galloo, J. (2004). Influence of meteorological factors on the NO₂ measurements by passive diffusion tube. *Atmos. Env.*, 38:573–580.
- Promeyrat-Qotbi, S. (2001). *Contribution à l'étude de la pollution atmosphérique autoroutière ; caractérisation des flux de déposition et de la contamination métallique de l'environnement de proximité*. Thèse de doctorat, Université de Metz.
- Quélo, D., Krysta, M., Bocquet, M., Isnard, O., Minier, Y. et Sportisse, B. (2007). Validation of the Polyphemus platform : the ETEX, Chernobyl and Algeciras cases. *Atmos. Env.*, 41:5300–5315.
- Reynolds, S., Roth, P. et Seinfeld, J. (1973). Mathematical modeling of photochemical air pollution-I. formulation of the model. *Atmos. Environ. 1967*, 7:1033–1061.
- Roustan, Y., Pausader, M. et Seigneur, C. (2010). Estimating the effect of on-road vehicle emission controls on future air quality in paris, france. *Atmos. Env.*, 45:6828–6836.
- Sartelet, K., Couvidat, F., Seigneur, C. et Roustan, Y. (2012). Impact of biogenicemissions on airquality over Europe and North America. *Atmos. Env.*, 52:131–141.
- Sartelet, K., Debry, E., Fahey, K., Roustan, Y., Tombette, M. et Sportisse, B. (2007). Simulation of aerosols and related species over Europe with the Polyphemus system. part I : model-to-data comparison for 2001. *Atmos. Env.*, 41:6116–6131.

- Sauvage, S. (2008). *Origine et comportement des composés HydroCarbones Non Méthaniques (HCNM) en zone rurale. Sciences de la Matière, du Rayonnement et de l'Environnement*. Thèse de doctorat, Douai, École des Mines de Douai, Université des Sciences et Techniques de Lille.
- Scire, J., Strimaitis, D. et Yamartino, R. (2000). A user's guide for CALPUFF dispersion model (version 5). *Earth Tech. Inc., Concord, MA*.
- Seigneur, C. et Dennis, R. (2011). Atmospheric modeling, chapitre 9 in technical challenges of multipollutant air quality management. *G.M. Hidy, J.R. Brook, K.L. Demerjian, L.T. Molina, W.T. Pennell, R.D. Scheffe, direction d'ouvrage, Springer*.
- Seigneur, C., Tesche, T., Roth, P. et Liu, M.-K. (1983). On the treatment of point source emissions in urban air quality modeling. *Atmos. Env.*, 17:1655–1676.
- Seinfeld, J. H. et Pandis, S. N. (1998). *Atmospheric chemistry and physics : from air pollution to climate change*. Wiley-Interscience.
- Skamarock, W., Klemp, J., Dudhia, J., Gill, D., Barker, D., Duda, M., Huang, X.-Y., Wang, W. et Powers, J. (2008). A description of the advanced research WRF version 3. NCAR technical note 475+STR,. available at http://www.mmm.ucar.edu/wrf/users/docs/arw_v3.pdf.
- Song, C., Chen, G., Hanna, S., Crawford, J. et Davis, D. (2003). Dispersion and chemical evolution of ship plumes in the marine boundary layer : Investigation of O₃ NO_y HO_x chemistry version. *J. Geophys. Res.*, 108:4143.
- Soulhac, L., Salizzoni, P., Cierco, F.-X. et Perkins, R. (2011). The model SIRANE for atmospheric urban pollutant dispersion ; part I, presentation of the model. *Atmos. Env.*, 45:7379–7395.
- Soulhac, L., Salizzoni, P., Mejean, P., Didier, D. et Rios, I. (2012). The model SIRANE for atmospheric urban pollutant dispersion ; part II, validation of the model on a real case study. *Atmos. Env.*, 49:320–357.
- Sportisse, B. (2007). *Pollution atmosphérique. Des processus à la modélisation*. Springer-Verlag.
- Stewart, D. et Liu, M. (1981). Development and application of a reactive plume model. *Atmos. Env.*, 15:2377–2393.
- Stohl, A., Hittenberger, M. et Wotawa, G. (1998). Validation of the lagrangian particle dispersion model FLEXPART against large-scale tracer experiment data. *Atmos. Env.*, 32:4245–4264.
- Taghavi, S., Carissimo, B., Sartelet, K., Muller, K. et Korsakissok, I. (2010). Comparative evaluation of a eulerian CFD and gaussian plume model for roadside heavy metal deposition. *Conference HARMO 13*, H13-110, 1-4 June 2010, Paris, France.
- Taylor, G. (1922). Diffusion by continuous movements. *Proc. London Math. Soc.*, A20:196–212.
- Touma, J., Isakov, V., Ching, J. et Seigneur, C. (2006). Air quality modeling of hazardous pollutants : current status and future directions. *J. Air Waste Manag. Assoc.*, 56:547–558.

- Valari, M. et Menut, L. (2010). Transferring the heterogeneity of surface emissions to variability in pollutant concentrations over urban areas through a chemistry-transport model. *Atmos. Env.*, 44:3229–3238.
- Venkatram, A. et Horst, T. (2006). Approximating dispersion from a finite line source. *Atmos. Env.*, 40:2401–2408.
- Venkatram, A., Isakov, V., Seila, R. et Baldauf, R. (2009). Modeling the impacts of traffic emissions on air toxics concentrations near roadways. *Atmos. Env.*, 43:3191–3199.
- Venkatram, A., Isakov, V., Thoma, E. et Baldauf, R. (2007). Analysis of air quality data near roadways using a dispersion model. *Atmos. Env.*, 41:9481–9497.
- Venkatram, A. et Pleim, J. (1999). The electrical analogy does not apply to modeling dry deposition of particles. *Atmos. Env.*, 33:3075–3076.
- Vestreng, V., Mareckova, K., Kakareka, S., Malchykhina, A. et Kukharchyk, T. (2007). Inventory review 2007-emission data reported to LRTAP convention and NEC directive. *Tech. Rep. EMEP MSC-W, Oslo, Norway. ISSN, ISSN:1504–6206.*
- Viard, B., Pihan, F., Promeyrat, S. et Pihan, J. (2004). Integrated assessment of heavy metal (Pb, Zn, Cd) highway pollution : bioaccumulation in soil, graminaceae and land snails. *Chemosphere*, 55:1349–1359.
- Wendum, D. (1998). Three long-range transport models compared to the ETEX experiment : a performance study. *Atmos. Env.*, 32:4297–4305.
- Yamartino, R. (2008). *Air Quality Modeling - Theories, Methodologies, Computational Techniques, and Available Databases and Software. Vol III-Special Issues.* EnviroComp Institute and the Air & Waste Management Association.
- Yarwood, G., Rao, S., Yocke, M. et Whitten, G. (2005). Updates to the carbon bond chemical mechanism : CB05 final report to the US EPA. *RT-0400675. available at http://www.camx.com/publ/pdfs/CB05_Final_Report_120805.pdf.*
- Zhang, Y., Bocquet, M., Mallet, V., Seigneur, C. et Baklanov, A. (2012). Real-time air quality forecasting, part I : History, techniques, and current status. *Atmos. Env.*, 60:632–655.
- Zhu, Y., Hinds, W., Shen, S. et Sioutas, C. (2004). Seasonal trends of concentration and size distribution of ultrafine particles near major highways in Los Angeles. *Aerosol Sc. and Tech.*, 38:5–13.

Annexe A

Briggs coefficients

TABLE A.1 – Briggs formula for each stability classes and each land type as a function of the downwind distance along the plume centerline, x .

Land category	Stability class	σ_y	σ_z
Rural	A	$0.22x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.20x$
	B	$0.16x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.12x$
	C	$0.11x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.08x(1 + 0.0002x)^{-1/2}$
	D	$0.08x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.06x(1 + 0.0015x)^{-1/2}$
	E	$0.06x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.03x(1 + 0.0003x)^{-1}$
	F	$0.04x(1 + 0.0001x)^{-1/2}$	$0.016x(1 + 0.0003x)^{-1}$
Urban	A-B	$0.32x(1 + 0.0004x)^{-1/2}$	$0.24x(1 + 0.001x)^{1/2}$
	C	$0.22x(1 + 0.0004x)^{-1/2}$	$0.20x$
	D	$0.16x(1 + 0.0004x)^{-1/2}$	$0.14x(1 + 0.0003x)^{-1/2}$
	E-F	$0.11x(1 + 0.0004x)^{-1/2}$	$0.08x(1 + 0.0015x)^{-1}$

Annexe B

Correction coefficients with a 1° resolution

Land category : rural, stability class A :

Coefficients for the first Gaussian correction. Theta between 19 and 53
degrees.

Maximum of the first Gaussian curve.

[max_1]

-0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02,
-0.02, -0.02, -0.03, -0.03, -0.03, -0.03, -0.03, -0.04, -0.04, -0.04, -0.05,
-0.05, -0.05, -0.06, -0.06, -0.07, -0.07, -0.08, -0.08, -0.09, -0.1, -0.1,
-0.11, -0.13

Mean of the Gaussian curve.

[mu_1]

33.0, 33.0, 33.0, 33.0, 32.54, 32.53, 32.54, 32.53, 32.08, 32.07, 32.07,
32.07, 31.62, 31.62, 31.62, 31.18, 30.74, 30.74, 30.31, 29.89, 29.48, 29.07,
28.67, 27.89, 27.14, 26.41, 25.71, 25.03, 24.05, 22.81, 21.66, 20.32, 0.09,
0.09, 0.09

Standard deviation.

[sigma_1]

38.19, 38.19, 38.19, 38.19, 38.59, 38.59, 38.59, 37.43, 37.82, 37.82, 37.82,
36.68, 37.07, 37.07, 35.95, 36.33, 35.61, 35.61, 34.91, 35.27, 34.58, 34.92,
34.24, 33.91, 33.57, 33.23, 33.83, 33.47, 33.38, 32.65, 32.77, 33.07, 49.43,
47.05, 44.81

Maximum of the second Gaussian curve.

[max_2]

0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.01, 0.01, 0.01,
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.02, 0.02, 0.02,
0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.03, 0.03, 0.03

Mean of the Gaussian curve.

```

[mu_2]
208.06, 208.06, 203.41, 203.41, 203.41, 203.41, 203.41, 198.88, 198.88,
198.88, 198.88, 198.88, 194.48, 194.48, 194.48, 190.2, 190.2, 190.2, 190.2,
186.03, 186.03, 181.98, 181.98, 181.98, 178.04, 178.04, 178.04, 174.21,
174.21, 170.47, 170.47, 166.84, 166.84, 163.3, 163.3

# Standard deviation.
[sigma_2]
98.76, 90.71, 95.88, 95.88, 95.88, 95.88, 95.88, 93.09, 93.09, 93.09, 93.09,
93.09, 90.4, 90.4, 90.4, 95.16, 87.8, 87.8, 87.8, 85.3, 85.3, 89.79, 89.79,
82.87, 87.25, 87.25, 80.53, 84.79, 78.27, 82.42, 82.42, 80.12, 80.12, 77.9,
77.9

### Coefficients for the first part of the exponential correction. Theta
### between 54 and 90 degrees.
# Parameters.
[mu_]
159.86, 159.86, 156.51, 156.51, 153.24, 153.24, 150.06, 150.06, 146.96,
143.94, 143.94, 141.0, 138.13, 138.13, 135.34, 132.62, 132.62, 129.96, 127.37,
124.84, 124.84, 122.38, 119.98, 117.63, 115.34, 113.11, 110.93, 108.81,
106.73, 104.71, 102.73, 100.8, 98.91, 97.07, 93.51, 90.11

[a_]
0.06, 0.06, 0.06, 0.06, 0.06, 0.07, 0.07, 0.07, 0.08, 0.08, 0.09, 0.1, 0.11,
0.11, 0.12, 0.13, 0.15, 0.16, 0.17, 0.19, 0.21, 0.23, 0.26, 0.29, 0.32, 0.37,
0.42, 0.48, 0.55, 0.65, 0.77, 0.94, 1.19, 1.59, 2.34, 4.38

[b_]
0.01, 0.01, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02,
0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03,
0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03

[d_]
0.13, 0.15, 0.17, 0.2, 0.22, 0.22, 0.25, 0.28, 0.32, 0.35, 0.38, 0.37, 0.41,
0.44, 0.47, 0.49, 0.49, 0.51, 0.54, 0.56, 0.57, 0.58, 0.59, 0.6, 0.6, 0.6,
0.6, 0.59, 0.57, 0.55, 0.51, 0.45, 0.36, 0.2, -0.12, -1.1

### Coefficients for the second part of the exponential correction. Theta
### between 54 and 90 degrees.
# Parameters.
[beta_]
0.03, 0.04, 0.04, 0.04, 0.04, 0.05, 0.05, 0.06, 0.06, 0.07, 0.07, 0.08, 0.09,
0.09, 0.1, 0.11, 0.13, 0.14, 0.15, 0.17, 0.19, 0.21, 0.23, 0.26, 0.29, 0.33,
0.38, 0.44, 0.51, 0.6, 0.72, 0.88, 1.12, 1.5, 2.22, 4.16

[c_]
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01,

```

0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01,
0.01, 0.01, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.03, 0.04

Coefficients for the extremity correction.

[lambda]

0.93, 3.74, -18.63, 64.42, -91.65, 44.79

Land category : rural, stability class B :

Coefficients for the first Gaussian correction. Theta between 23 and 60

degrees.

Maximum of the first Gaussian curve.

[max_1]

-0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01,
-0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.03, -0.03, -0.03, -0.03,
-0.03, -0.04, -0.04, -0.04, -0.05, -0.05, -0.05, -0.06, -0.06, -0.07, -0.07,
-0.08, -0.08, -0.09, -0.09, -0.11

Mean of the Gaussian curve.

[mu_1]

55.48, 55.48, 54.58, 54.58, 54.58, 54.58, 54.58, 54.58, 54.58, 54.58, 53.71,
53.71, 53.71, 53.71, 52.85, 52.85, 52.85, 52.0, 52.0, 51.18, 51.18, 50.37,
49.57, 48.79, 48.03, 46.55, 45.83, 44.43, 43.09, 41.16, 39.94, 38.19, 36.0,
33.48, 31.18, 28.28, 0.11, 0.11

Standard deviation.

[sigma_1]

63.26, 63.26, 64.02, 61.82, 61.82, 61.82, 61.82, 61.82, 59.67, 59.67, 60.42,
60.42, 58.33, 58.33, 57.02, 57.01, 57.02, 55.74, 55.74, 54.5, 52.6, 53.29,
52.12, 50.97, 51.62, 51.12, 50.01, 49.51, 49.01, 49.05, 48.52, 48.48, 48.84,
49.52, 48.66, 49.76, 69.78, 66.13

Maximum of the second Gaussian curve.

[max_2]

0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.01, 0.01,
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.02, 0.02,
0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.04

Mean of the Gaussian curve.

[mu_2]

289.75, 289.75, 289.75, 289.75, 289.75, 282.71, 282.71, 282.71, 282.71,
275.88, 275.88, 275.89, 275.88, 269.27, 269.27, 269.27, 262.84, 262.84,
262.84, 256.61, 256.61, 250.56, 250.56, 250.56, 244.69, 244.69, 238.99,
238.99, 233.46, 233.46, 228.08, 228.08, 222.86, 222.86, 217.78, 217.78,
212.86, 208.06

Standard deviation.

```

[sigma_2]
139.92, 139.92, 127.66, 127.66, 127.67, 135.48, 135.48, 123.63, 123.63,
131.21, 131.21, 119.75, 119.75, 127.1, 116.01, 116.01, 123.14, 123.14, 112.41,
119.33, 108.95, 115.66, 115.66, 105.61, 112.13, 112.13, 108.72, 108.72,
105.44, 105.44, 102.27, 102.27, 99.22, 99.22, 96.28, 96.28, 93.44, 98.76

### Coefficients for the first part of the exponential correction. Theta
### between 61 and 90 degrees.
# Parameters.
[mu_]
208.06, 203.41, 198.88, 198.88, 194.48, 190.2, 186.03, 186.03, 181.98, 178.04,
174.21, 170.47, 166.84, 163.3, 159.86, 156.51, 150.06, 146.96, 143.94, 141.0,
135.34, 132.62, 127.37, 122.38, 117.63, 115.34, 110.94, 106.73, 102.73

[a_]
0.14, 0.13, 0.12, 0.11, 0.11, 0.12, 0.12, 0.12, 0.12, 0.13, 0.14, 0.15, 0.16,
0.18, 0.19, 0.21, 0.24, 0.27, 0.3, 0.34, 0.39, 0.45, 0.53, 0.64, 0.78, 0.97,
1.31, 1.92, 3.58

[b_]
0.0, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.02, 0.02,
0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02,
0.02, 0.02, 0.02

[d_]
0.11, 0.13, 0.15, 0.17, 0.2, 0.21, 0.24, 0.28, 0.31, 0.35, 0.36, 0.4, 0.44,
0.45, 0.48, 0.49, 0.52, 0.54, 0.56, 0.57, 0.58, 0.58, 0.57, 0.55, 0.51, 0.45,
0.34, 0.09, -0.66

### Coefficients for the second part of the exponential correction. Theta
### between 61 and 90 degrees.
# Parameters.
[beta_]
0.04, 0.04, 0.05, 0.05, 0.06, 0.06, 0.07, 0.07, 0.08, 0.09, 0.1, 0.11, 0.12,
0.13, 0.15, 0.17, 0.19, 0.21, 0.24, 0.28, 0.32, 0.38, 0.45, 0.54, 0.66, 0.85,
1.15, 1.71, 3.23

[c_]
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01,
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.02, 0.02,
0.02, 0.03, 0.05

### Coefficients for the extremity correction.
[lambda]
-1.91, 18.08, -64.41, 141.74, -151.26, 61.56

```

Land category : rural, stability class C :

```

## Coefficients for the first Gaussian correction. Theta between 30 and 67
## degrees.
# Maximum of the first Gaussian curve.
[max_1]
-0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01,
-0.01, -0.01, -0.01, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02,
-0.03, -0.03, -0.03, -0.03, -0.04, -0.04, -0.04, -0.05, -0.05, -0.05,
-0.06, -0.06, -0.07, -0.07, -0.08, -0.09

# Mean of the Gaussian curve.
[mu_1]
82.27, 82.27, 82.27, 82.27, 82.27, 82.27, 82.27, 82.27, 82.27, 82.27,
80.81, 80.81, 80.81, 80.81, 80.81, 79.37, 79.37, 77.97, 77.97, 76.6, 75.26,
75.26, 73.95, 71.42, 70.19, 67.81, 66.66, 64.43, 61.26, 58.28, 55.48, 52.0,
48.03, 43.75, 38.76, 0.17, 0.17

# Standard deviation.
[sigma_1]
95.3, 95.3, 91.66, 91.66, 91.66, 91.66, 91.66, 88.13, 88.13, 88.13, 84.69,
85.93, 85.93, 82.58, 82.58, 79.33, 80.54, 77.37, 78.56, 75.48, 73.64, 74.77,
71.85, 70.12, 69.5, 70.54, 69.86, 68.2, 67.53, 65.29, 65.45, 65.51, 66.21,
65.24, 64.74, 65.04, 94.07, 88.78

# Maximum of the second Gaussian curve.
[max_2]
0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.01,
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01,
0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.04

# Mean of the Gaussian curve.
[mu_2]
415.74, 404.71, 404.71, 404.71, 404.71, 394.04, 394.04, 394.04, 383.72,
383.72, 383.72, 373.73, 373.73, 373.73, 364.07, 364.07, 354.72, 354.72,
345.66, 345.66, 336.9, 336.9, 328.41, 328.41, 320.18, 320.18, 312.21, 312.21,
304.49, 297.0, 297.0, 289.75, 282.71, 275.88, 269.27, 269.26, 262.84, 256.61

# Standard deviation.
[sigma_2]
185.5, 197.75, 179.09, 179.09, 179.09, 190.94, 172.94, 172.94, 184.4, 167.05,
167.05, 178.14, 161.39, 161.39, 172.13, 155.97, 166.36, 150.76, 160.81,
160.81, 155.5, 155.5, 150.38, 150.39, 145.48, 145.48, 140.76, 140.76, 136.22,
131.86, 131.86, 127.67, 123.63, 131.21, 127.1, 116.01, 112.41, 119.33

### Coefficients for the first part of the exponential correction. Theta
### between 68 and 90 degrees.

```

```

# Parameters.
[mu_]
250.56, 244.69, 238.99, 233.46, 228.08, 217.79, 212.86, 208.06, 198.88,
194.48, 186.03, 178.04, 170.47, 163.3, 156.51, 146.96, 138.13, 132.62, 124.84,
117.63, 110.93, 104.71

[a_]
0.34, 0.3, 0.2, 0.16, 0.14, 0.14, 0.14, 0.14, 0.15, 0.15, 0.17, 0.19, 0.22,
0.25, 0.28, 0.34, 0.4, 0.49, 0.63, 0.86, 1.3, 2.46

[b_]
0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01,
0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02

[d_]
0.1, 0.11, 0.13, 0.16, 0.19, 0.21, 0.25, 0.28, 0.33, 0.38, 0.41, 0.44, 0.47,
0.49, 0.52, 0.55, 0.56, 0.55, 0.52, 0.45, 0.28, -0.26

### Coefficients for the second part of the exponential correction. Theta
### between 68 and 90 degrees.
# Parameters.
[beta_]
0.04, 0.04, 0.05, 0.05, 0.06, 0.07, 0.07, 0.08, 0.09, 0.11, 0.12, 0.14, 0.16,
0.19, 0.22, 0.27, 0.33, 0.41, 0.54, 0.74, 1.14, 2.22

[c_]
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01,
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.02, 0.03

### Coefficients for the extremity correction.
[lambda]
-0.88, 10.97, -48.58, 132.75, -160.96, 70.37

```

Land category : rural, stability class D :

```

## Coefficients for the first Gaussian correction. Theta between 40 and 74
## degrees.
# Maximum of the first Gaussian curve.
[max_1]
-0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01,
-0.01, -0.01, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.03, -0.03,
-0.03, -0.03, -0.04, -0.04, -0.04, -0.05, -0.05, -0.06, -0.06, -0.07, -0.08,
-0.09, -0.11

# Mean of the Gaussian curve.
[mu_1]
110.93, 110.93, 110.93, 110.93, 110.94, 110.94, 108.81, 108.81, 108.81,

```

```
108.81, 108.81, 108.81, 106.73, 106.73, 104.71, 104.71, 102.73, 100.8, 98.91,
97.07, 95.27, 91.79, 88.47, 85.3, 80.81, 76.6, 72.67, 66.66, 61.26, 54.58,
46.55, 36.53, 0.24, 0.24, 0.24

# Standard deviation.
[sigma_1]
123.73, 123.73, 118.59, 118.59, 118.59, 113.6, 115.41, 115.41, 110.57, 110.57,
105.87, 105.87, 103.06, 98.63, 100.35, 96.04, 93.53, 91.1, 92.71, 90.32, 88.0,
87.21, 82.86, 82.11, 82.58, 79.73, 79.98, 79.16, 78.12, 78.46, 80.22, 81.61,
103.74, 94.02, 83.8

# Maximum of the second Gaussian curve.
[max_2]
0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.01, 0.01, 0.01,
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02,
0.02, 0.02, 0.03, 0.03, 0.03, 0.04, 0.04

# Mean of the Gaussian curve.
[mu_2]
534.15, 519.07, 519.07, 504.52, 504.52, 504.52, 490.48, 490.48, 476.92,
476.92, 463.83, 463.83, 451.18, 451.18, 438.96, 427.16, 427.16, 415.74,
415.74, 404.71, 394.04, 383.72, 383.72, 373.73, 364.07, 354.72, 345.66, 336.9,
328.41, 320.18, 312.21, 304.49, 297.0, 282.71, 275.88

# Standard deviation.
[sigma_2]
257.55, 248.05, 248.05, 238.98, 238.98, 238.98, 230.31, 230.3, 222.0, 222.0,
214.06, 214.05, 206.44, 206.44, 199.17, 212.27, 192.18, 204.86, 185.5, 179.09,
190.94, 184.4, 167.05, 178.14, 172.12, 166.35, 160.81, 170.55, 164.92, 159.52,
154.33, 149.33, 144.53, 135.48, 131.21

### Coefficients for the first part of the exponential correction. Theta
### between 75 and 90 degrees.
# Parameters.
[mu_]
262.84, 256.61, 244.69, 233.46, 222.86, 208.06, 198.88, 186.03, 174.21,
159.86, 146.96, 135.34, 124.84, 115.35, 106.73

[a_]
0.19, 0.14, 0.13, 0.13, 0.13, 0.14, 0.16, 0.18, 0.21, 0.26, 0.32, 0.42, 0.58,
0.89, 1.76

[b_]
0.0, 0.0, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02,
0.02, 0.02

[d_]

```

0.13, 0.15, 0.19, 0.23, 0.28, 0.34, 0.39, 0.42, 0.47, 0.49, 0.53, 0.53, 0.5,
0.39, -0.02

Coefficients for the second part of the exponential correction. Theta
between 75 and 90 degrees.

Parameters.

[beta_]

0.05, 0.05, 0.06, 0.07, 0.08, 0.1, 0.11, 0.13, 0.16, 0.2, 0.26, 0.35, 0.5,
0.79, 1.6

[c_]

0.0, 0.0, 0.0, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01,
0.01, 0.03

Coefficients for the extremity correction.

[lambda]

-1.91, 18.08, -64.41, 141.74, -151.26, 61.56

Land category : rural, stability class E :

Coefficients for the first Gaussian correction. Theta between 50 and 75
degrees.

Maximum of the first Gaussian curve.

[max_1]

-0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.02,
-0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.03, -0.03, -0.03, -0.04, -0.04,
-0.04, -0.05, -0.05, -0.06

Mean of the Gaussian curve.

[mu_1]

203.41, 203.41, 198.88, 194.48, 190.2, 186.03, 181.98, 178.04, 174.21, 166.84,
163.3, 156.51, 150.06, 143.94, 135.34, 127.37, 119.98, 110.93, 100.8, 91.79,
80.81, 70.19, 57.33, 43.75, 0.32, 0.32

Standard deviation.

[sigma_1]

144.66, 144.66, 140.3, 136.1, 139.73, 135.58, 131.57, 127.71, 123.98, 123.47,
119.91, 119.32, 118.64, 117.86, 119.37, 115.06, 116.05, 113.6, 112.67, 111.32,
112.15, 109.3, 109.31, 110.8, 135.5, 121.98

Maximum of the second Gaussian curve.

[max_2]

0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01,
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.03

Mean of the Gaussian curve.

[mu_2]

```
697.87, 676.84, 676.83, 656.58, 656.59, 637.09, 637.09, 618.31, 600.22,
600.22, 582.79, 565.98, 565.98, 549.78, 534.15, 519.07, 504.52, 490.48,
476.92, 463.83, 451.18, 438.96, 415.74, 404.71, 383.72, 364.07

# Standard deviation.
[sigma_2]
328.15, 351.51, 315.25, 337.74, 302.96, 324.62, 291.24, 312.1, 300.15, 300.15,
288.75, 307.41, 277.87, 267.48, 284.84, 274.29, 264.21, 279.81, 269.63, 259.9,
250.58, 241.67, 245.8, 237.21, 221.06, 224.22

### Coefficients for the first part of the exponential correction. Theta
### between 76 and 90 degrees.
# Parameters.
[mu_]
345.66, 328.4, 304.49, 289.75, 262.84, 244.69, 222.86, 203.41, 186.03, 166.84,
150.06, 135.34, 122.38, 108.81

[a_]
0.22, 0.12, 0.11, 0.09, 0.09, 0.1, 0.11, 0.13, 0.15, 0.2, 0.27, 0.38, 0.61,
1.26

[b_]
0.0, 0.0, 0.0, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02,
0.02

[d_]
0.07, 0.08, 0.11, 0.14, 0.18, 0.24, 0.29, 0.36, 0.42, 0.45, 0.5, 0.51, 0.45,
0.15

### Coefficients for the second part of the exponential correction. Theta
### between 76 and 90 degrees.
# Parameters.
[beta_]
0.03, 0.03, 0.04, 0.04, 0.05, 0.06, 0.08, 0.09, 0.12, 0.16, 0.22, 0.33, 0.55,
1.16

[c_]
0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.02

### Coefficients for the extremity correction.
[lambda]
-5.5, 54.74, -209.23, 402.42, -369.35, 130.78
```

Land category : rural, stability class F :

```
## Coefficients for the first Gaussian correction. Theta between 71 and 81
## degrees.
```

```
# Maximum of the first Gaussian curve.
[max_1]
-0.02, -0.02, -0.02, -0.03, -0.03, -0.03, -0.04, -0.04, -0.05, -0.07, -0.09

# Mean of the Gaussian curve.
[mu_1]
141.0, 127.37, 110.93, 95.27, 79.37, 63.35, 0.53, 0.49, 0.48, 0.48, 0.48

# Standard deviation.
[sigma_1]
145.41, 144.07, 140.1, 137.03, 135.57, 135.47, 168.46, 154.15, 135.36, 114.54,
93.81

# Maximum of the second Gaussian curve.
[max_2]
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.03

# Mean of the Gaussian curve.
[mu_2]
656.59, 637.09, 600.23, 565.99, 534.15, 504.52, 476.92, 438.96, 404.71,
364.07, 336.9

# Standard deviation.
[sigma_2]
411.79, 395.64, 400.33, 403.58, 373.52, 346.12, 321.1, 311.78, 279.7, 282.33,
236.4

### Coefficients for the first part of the exponential correction. Theta
### between 82 and 90 degrees.
# Parameters.
[mu_]
304.49, 269.27, 238.99, 208.06, 181.98, 156.51, 135.34, 115.34

[a_]
0.09, 0.09, 0.09, 0.11, 0.15, 0.23, 0.38, 0.83

[b_]
0.0, 0.01, 0.01, 0.01, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02

[d_]
0.11, 0.16, 0.23, 0.31, 0.39, 0.44, 0.48, 0.31

### Coefficients for the second part of the exponential correction. Theta
### between 82 and 90 degrees.
# Parameters.
[beta_]
0.04, 0.05, 0.06, 0.08, 0.12, 0.19, 0.33, 0.75
```

```
[c_]
0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.01, 0.01, 0.02
```

```
### Coefficients for the extremity correction.
```

```
[lambda]
-5.5, 54.77, -202.49, 391.83, -365.73, 131.76
```

Land category : urban, stability class A & B :

```
## Coefficients for the first Gaussian correction. Theta between 5 and 43
## degrees.
```

```
# Maximum of the first Gaussian curve.
```

```
[max_1]
-0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01,
-0.01, -0.01, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.03, -0.03, -0.03, -0.04,
-0.04, -0.04, -0.05, -0.05, -0.05, -0.06, -0.06, -0.07, -0.07, -0.08, -0.09,
-0.09, -0.1, -0.11, -0.12, -0.14
```

```
# Mean of the Gaussian curve.
```

```
[mu_1]
27.89, 27.89, 27.51, 27.51, 27.51, 27.51, 27.51, 27.51, 27.51, 27.14, 27.14,
27.14, 27.14, 27.14, 26.77, 26.77, 26.41, 26.41, 26.05, 26.05, 25.71, 25.36,
25.03, 24.69, 24.37, 24.05, 23.42, 22.81, 22.23, 21.66, 20.84, 20.06, 19.32,
18.15, 17.29, 16.08, 0.06, 0.06, 0.06
```

```
# Standard deviation.
```

```
[sigma_1]
31.97, 31.97, 32.29, 32.29, 32.29, 32.29, 31.36, 31.36, 31.36, 31.68, 31.68,
30.76, 30.76, 30.76, 30.17, 30.17, 30.48, 29.6, 29.9, 29.04, 29.34, 28.78,
29.07, 28.53, 27.99, 27.47, 28.01, 27.74, 27.48, 27.22, 27.18, 27.13, 27.06,
27.36, 27.42, 27.79, 39.48, 37.68, 35.99
```

```
# Maximum of the second Gaussian curve.
```

```
[max_2]
0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0,
0.0, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01,
0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03
```

```
# Mean of the Gaussian curve.
```

```
[mu_2]
153.24, 153.24, 153.24, 153.24, 153.24, 153.24, 153.24, 153.24, 153.24, 153.24,
153.24, 150.06, 150.06, 150.06, 150.06, 150.06, 150.06, 150.06, 150.06, 150.06,
150.06, 146.96, 146.96, 146.96, 146.96, 146.96, 146.96, 143.94, 143.94,
143.94, 143.94, 143.94, 141.0, 141.0, 141.0, 141.0, 138.13, 138.13, 138.13,
135.34, 135.34
```

```
# Standard deviation.
```

```
[sigma_2]
```

```
66.2, 66.2, 66.2, 66.2, 66.2, 66.2, 66.2, 66.2, 66.2, 66.2, 69.73, 69.73,
69.73, 69.73, 69.73, 64.41, 64.41, 64.41, 64.41, 67.85, 67.85, 67.85, 67.85,
67.85, 62.68, 66.03, 66.03, 66.03, 66.03, 66.03, 66.03, 64.27, 64.27, 64.27, 64.27,
67.46, 67.46, 62.57, 65.67, 65.67
```

```
### Coefficients for the first part of the exponential correction. Theta
### between 44 and 90 degrees.
```

```
# Parameters.
```

```
[mu_]
```

```
135.34, 132.62, 132.61, 132.62, 129.96, 129.96, 127.37, 127.37, 124.84,
124.84, 122.38, 122.38, 119.98, 119.98, 117.63, 117.63, 115.35, 113.11,
113.11, 110.93, 110.93, 108.81, 106.73, 106.73, 104.71, 102.73, 102.73, 100.8,
100.8, 98.91, 97.07, 95.27, 95.27, 93.51, 91.79, 91.79, 90.11, 88.47, 86.87,
85.3, 85.3, 83.77, 82.27, 79.37, 77.97, 75.26
```

```
[a_]
```

```
0.05, 0.06, 0.06, 0.06, 0.06, 0.06, 0.07, 0.07, 0.07, 0.08, 0.08, 0.09, 0.09,
0.1, 0.1, 0.11, 0.12, 0.13, 0.13, 0.15, 0.15, 0.17, 0.18, 0.19, 0.21, 0.22,
0.24, 0.26, 0.28, 0.31, 0.34, 0.37, 0.41, 0.45, 0.5, 0.55, 0.63, 0.71, 0.81,
0.94, 1.11, 1.33, 1.67, 2.21, 3.2, 5.92
```

```
[b_]
```

```
0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03,
0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03,
0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.04, 0.04, 0.04, 0.04, 0.04, 0.04, 0.04,
0.04, 0.04, 0.04, 0.04, 0.04, 0.04
```

```
[d_]
```

```
0.14, 0.16, 0.18, 0.2, 0.23, 0.25, 0.28, 0.27, 0.3, 0.33, 0.36, 0.39, 0.41,
0.44, 0.46, 0.44, 0.47, 0.49, 0.51, 0.53, 0.55, 0.56, 0.58, 0.59, 0.6, 0.61,
0.62, 0.62, 0.62, 0.62, 0.62, 0.62, 0.62, 0.61, 0.6, 0.58, 0.57, 0.54, 0.51,
0.47, 0.41, 0.32, 0.19, -0.04, -0.48, -1.84
```

```
### Coefficients for the second part of the exponential correction. Theta
### between 44 and 90 degrees.
```

```
# Parameters.
```

```
[beta_]
```

```
0.03, 0.04, 0.04, 0.04, 0.04, 0.05, 0.05, 0.05, 0.06, 0.06, 0.07, 0.07, 0.08,
0.08, 0.09, 0.09, 0.1, 0.11, 0.12, 0.12, 0.13, 0.14, 0.16, 0.17, 0.18, 0.2,
0.21, 0.23, 0.25, 0.28, 0.31, 0.34, 0.37, 0.41, 0.46, 0.51, 0.58, 0.66, 0.75,
0.88, 1.04, 1.26, 1.58, 2.09, 3.05, 5.65
```

```
[c_]
```

```
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01,
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01,
```

0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.02, 0.02, 0.02,
0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.03, 0.03

Coefficients for the extremity correction.

[lambda]

11.17, -56.63, 126.89, -109.12, 10.62, 20.32

Land category : urban, stability class C :

Coefficients for the first Gaussian correction. Theta between 9 and 54

degrees.

Maximum of the first Gaussian curve.

[max_1]

-0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01,
-0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02,
-0.02, -0.03, -0.03, -0.03, -0.03, -0.04, -0.04, -0.04, -0.05, -0.05, -0.05,
-0.06, -0.06, -0.07, -0.07, -0.08, -0.08, -0.09, -0.1, -0.1, -0.11, -0.13,
-0.14

Mean of the Gaussian curve.

[mu_1]

33.48, 33.0, 33.0, 33.0, 33.0, 33.0, 33.0, 33.0, 33.0, 33.0, 33.0, 33.0,
32.53, 32.54, 32.54, 32.53, 32.54, 32.53, 32.08, 32.07, 32.07, 31.62, 31.62,
31.62, 31.18, 31.18, 30.74, 30.74, 30.31, 29.89, 29.48, 29.07, 28.28, 27.89,
27.14, 26.41, 25.71, 24.69, 23.73, 22.81, 21.66, 20.32, 0.09, 0.09, 0.09, 0.09

Standard deviation.

[sigma_1]

38.98, 39.38, 39.38, 39.38, 39.38, 39.38, 39.38, 38.19, 38.19, 38.19, 38.19,
38.19, 38.59, 38.59, 38.59, 38.59, 37.43, 37.43, 37.82, 37.82, 37.82, 37.07,
37.07, 37.07, 36.33, 36.33, 35.61, 35.61, 34.91, 35.27, 34.58, 33.9, 34.58,
33.91, 33.57, 33.23, 32.89, 33.75, 32.75, 32.65, 32.77, 33.07, 49.43, 47.05,
44.81, 42.03

Maximum of the second Gaussian curve.

[max_2]

0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0,
0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01,
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02,
0.03, 0.03, 0.03, 0.03

Mean of the Gaussian curve.

[mu_2]

212.86, 212.85, 212.85, 212.86, 212.86, 208.06, 208.06, 208.06, 208.06,
208.06, 208.06, 208.06, 203.41, 203.41, 203.41, 203.41, 203.41, 198.88,
198.88, 198.88, 198.88, 194.48, 194.48, 194.48, 194.48, 190.2, 190.2, 190.2,
186.03, 186.03, 186.03, 181.98, 181.98, 181.98, 178.04, 178.04, 178.04,

174.21, 174.21, 170.47, 170.47, 166.84, 166.84, 163.3, 163.3, 159.86

Standard deviation.

[sigma_2]

101.76, 93.44, 93.44, 93.44, 93.44, 98.76, 98.76, 98.76, 98.76, 98.76, 90.71,
90.71, 95.88, 95.88, 95.88, 95.88, 88.06, 93.09, 93.09, 93.09, 93.09, 90.4,
90.4, 90.4, 87.8, 87.8, 87.8, 92.43, 85.3, 85.3, 89.79, 82.87, 82.87,
87.25, 80.53, 80.53, 84.79, 78.27, 82.42, 82.42, 80.12, 80.12, 77.9, 77.9,
81.73

Coefficients for the first part of the exponential correction. Theta
between 55 and 90 degrees.

Parameters.

[mu_]

159.86, 156.51, 156.51, 153.24, 153.24, 150.06, 150.06, 146.96, 143.94,
143.94, 141.0, 138.13, 138.13, 135.34, 132.62, 132.62, 129.96, 127.37, 124.84,
122.38, 122.38, 119.98, 117.63, 115.34, 113.11, 110.93, 108.81, 106.73,
104.71, 102.73, 100.8, 98.91, 97.07, 93.51, 90.11

[a_]

0.06, 0.06, 0.06, 0.06, 0.07, 0.07, 0.07, 0.08, 0.08, 0.09, 0.1, 0.1, 0.11,
0.12, 0.13, 0.14, 0.16, 0.17, 0.19, 0.21, 0.23, 0.26, 0.29, 0.32, 0.36, 0.42,
0.48, 0.55, 0.65, 0.77, 0.94, 1.19, 1.59, 2.33, 4.37

[b_]

0.01, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.03,
0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03,
0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03

[d_]

0.15, 0.17, 0.2, 0.22, 0.22, 0.25, 0.28, 0.31, 0.35, 0.38, 0.37, 0.41, 0.44,
0.47, 0.49, 0.49, 0.51, 0.54, 0.56, 0.57, 0.58, 0.59, 0.6, 0.6, 0.6, 0.6,
0.59, 0.57, 0.55, 0.51, 0.45, 0.36, 0.2, -0.12, -1.1

Coefficients for the second part of the exponential correction. Theta
between 55 and 90 degrees.

Parameters.

[beta_]

0.04, 0.04, 0.04, 0.04, 0.05, 0.05, 0.06, 0.06, 0.07, 0.07, 0.08, 0.09, 0.09,
0.1, 0.11, 0.12, 0.14, 0.15, 0.17, 0.19, 0.21, 0.23, 0.26, 0.29, 0.33, 0.38,
0.44, 0.51, 0.6, 0.72, 0.88, 1.12, 1.5, 2.22, 4.16

[c_]

0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01,
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01,
0.01, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.03, 0.04

```
### Coefficients for the extremity correction.
```

```
[lambda]
```

```
1.0, 1.67, -1.64, 19.59, -44.33, 27.41
```

Land category : urban, stability class D :

```
## Coefficients for the first Gaussian correction. Theta between 13 and 62
## degrees.
```

```
# Maximum of the first Gaussian curve.
```

```
[max_1]
```

```
-0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.01, -0.01, -0.01,
-0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.02, -0.02,
-0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.03, -0.03, -0.03, -0.03, -0.03, -0.04,
-0.04, -0.04, -0.05, -0.05, -0.05, -0.06, -0.06, -0.07, -0.07, -0.08, -0.08,
-0.09, -0.09, -0.11, -0.12, -0.14
```

```
# Mean of the Gaussian curve.
```

```
[mu_1]
```

```
47.28, 47.28, 47.28, 47.28, 47.28, 47.28, 47.28, 47.28, 47.28, 47.28, 47.28,
47.28, 46.55, 46.55, 46.55, 46.55, 46.55, 46.55, 46.55, 46.55, 46.55, 46.55, 45.83,
45.83, 45.83, 45.83, 45.12, 45.12, 45.12, 44.43, 44.43, 43.75, 43.75, 43.09,
42.43, 41.79, 41.16, 40.54, 39.34, 38.19, 37.07, 36.0, 34.46, 33.0, 31.18,
29.07, 26.77, 0.11, 0.11, 0.11, 0.12
```

```
# Standard deviation.
```

```
[sigma_1]
```

```
55.91, 55.91, 55.91, 55.91, 55.91, 55.91, 55.91, 55.91, 55.91, 55.91, 55.91,
55.91, 54.68, 54.68, 54.68, 54.68, 54.68, 54.68, 54.68, 54.69, 52.88, 52.88, 53.49,
53.49, 51.73, 51.73, 52.33, 50.61, 50.61, 51.19, 49.51, 50.09, 48.45, 49.02,
47.97, 46.95, 45.95, 46.48, 46.0, 45.53, 45.05, 44.56, 44.51, 44.42, 44.67,
43.94, 44.68, 64.97, 61.63, 58.5, 53.71
```

```
# Maximum of the second Gaussian curve.
```

```
[max_2]
```

```
0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0,
0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01,
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02,
0.02, 0.02, 0.03, 0.03, 0.03, 0.03, 0.04, 0.04
```

```
# Mean of the Gaussian curve.
```

```
[mu_2]
```

```
289.75, 289.75, 289.75, 289.75, 289.75, 289.75, 289.75, 282.71, 282.71,
282.71, 282.71, 282.71, 282.71, 275.88, 275.88, 275.88, 275.88, 269.26,
269.27, 269.27, 262.84, 262.84, 262.84, 262.84, 256.61, 256.61, 256.61,
250.56, 250.56, 244.69, 244.69, 244.69, 238.99, 238.99, 233.46, 233.46,
228.08, 228.08, 222.86, 222.86, 217.78, 217.79, 212.86, 212.86, 208.06,
208.06, 203.41, 198.88, 198.88, 194.48
```

```

# Standard deviation.
[sigma_2]
139.92, 139.92, 139.92, 139.92, 139.92, 127.67, 127.67, 135.48, 135.48,
135.48, 135.48, 123.63, 123.63, 131.21, 131.21, 131.21, 119.75, 127.1, 127.1,
127.1, 123.14, 123.14, 123.14, 112.41, 119.33, 119.33, 108.94, 115.66, 115.66,
112.13, 112.13, 112.13, 108.72, 108.72, 105.44, 105.44, 111.41, 102.27,
108.07, 99.22, 104.86, 96.28, 101.76, 93.44, 98.76, 90.71, 88.06, 93.09,
85.51, 90.4

### Coefficients for the first part of the exponential correction. Theta
### between 63 and 90 degrees.
# Parameters.
[mu_]
190.2, 190.2, 186.03, 181.98, 178.04, 178.04, 174.21, 170.47, 166.84, 163.3,
159.86, 156.51, 153.24, 150.06, 146.96, 143.94, 141.0, 135.34, 132.62, 129.96,
124.84, 122.38, 117.63, 113.11, 110.94, 106.73, 102.73

[a_]
0.1, 0.09, 0.09, 0.1, 0.1, 0.1, 0.11, 0.12, 0.13, 0.14, 0.15, 0.16, 0.18, 0.2,
0.22, 0.25, 0.28, 0.33, 0.37, 0.43, 0.51, 0.61, 0.75, 0.95, 1.28, 1.89, 3.54

[b_]
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02,
0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02,
0.02

[d_]
0.15, 0.17, 0.2, 0.21, 0.24, 0.28, 0.31, 0.35, 0.36, 0.4, 0.44, 0.45, 0.48,
0.49, 0.52, 0.54, 0.56, 0.58, 0.58, 0.58, 0.57, 0.55, 0.52, 0.45, 0.34, 0.1,
-0.65

### Coefficients for the second part of the exponential correction. Theta
### between 63 and 90 degrees.
# Parameters.
[beta_]
0.04, 0.05, 0.05, 0.06, 0.06, 0.07, 0.08, 0.08, 0.09, 0.1, 0.11, 0.13, 0.14,
0.16, 0.18, 0.21, 0.24, 0.27, 0.31, 0.37, 0.44, 0.53, 0.66, 0.84, 1.14, 1.71,
3.24

[c_]
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01,
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.03,
0.05

### Coefficients for the extremity correction.
[lambda]

```

-0.41, 11.14, -41.93, 100.82, -117.84, 51.98

Land category : urban, stability class E & F :

Coeficients for the first Gaussian correction. Theta between 20 and 69
degrees.

Maximum of the first Gaussian curve.

[max_1]

-0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.0, -0.01, -0.01,
-0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01, -0.01,
-0.01, -0.01, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.02, -0.03, -0.03, -0.03,
-0.03, -0.03, -0.04, -0.04, -0.04, -0.04, -0.05, -0.05, -0.06, -0.06, -0.07,
-0.07, -0.08, -0.09, -0.1, -0.12

Mean of the Gaussian curve.

[mu_1]

82.27, 82.27, 82.27, 82.27, 82.27, 82.27, 82.27, 82.27, 82.27, 82.27, 82.27,
82.27, 82.27, 82.27, 82.27, 82.27, 82.27, 82.27, 82.27, 80.81, 80.81, 80.81,
80.81, 80.81, 80.81, 79.37, 79.37, 79.37, 77.97, 77.97, 76.6, 75.26, 73.95,
72.67, 71.42, 70.19, 67.81, 65.53, 63.35, 61.26, 58.28, 55.48, 52.0, 48.03,
43.09, 38.19, 0.17, 0.17, 0.18, 0.18

Standard deviation.

[sigma_1]

99.04, 99.04, 99.04, 99.04, 99.04, 99.04, 99.04, 99.04, 95.3, 95.3, 95.3,
95.3, 95.3, 95.3, 91.66, 91.66, 91.66, 91.66, 88.13, 89.37, 89.37, 85.93,
85.93, 85.93, 82.58, 83.8, 80.54, 80.54, 78.56, 75.48, 76.64, 74.77, 72.96,
74.05, 72.27, 70.54, 69.86, 69.16, 68.45, 67.73, 65.45, 65.51, 66.21, 65.24,
65.31, 67.47, 94.07, 88.78, 82.29, 73.63

Maximum of the second Gaussian curve.

[max_2]

0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0,
0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.0, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01,
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02,
0.02, 0.02, 0.03, 0.03, 0.03, 0.04, 0.04, 0.04

Mean of the Gaussian curve.

[mu_2]

451.18, 438.96, 438.96, 438.96, 438.96, 438.96, 427.16, 427.16, 427.16,
427.16, 415.74, 415.74, 415.74, 415.74, 404.71, 404.71, 404.71, 394.04,
394.04, 394.04, 383.72, 383.72, 373.73, 373.73, 373.73, 364.07, 364.07,
354.72, 354.72, 345.66, 345.66, 336.9, 336.9, 328.41, 328.41, 320.18, 320.18,
312.21, 304.49, 304.49, 297.0, 289.75, 282.71, 282.71, 275.88, 269.26, 262.84,
256.61, 250.56, 244.69

Standard deviation.

```

[sigma_2]
206.45, 220.01, 220.01, 220.01, 199.16, 199.16, 212.27, 212.27, 192.18,
192.18, 204.86, 204.86, 185.5, 185.5, 197.75, 197.75, 179.09, 190.94, 190.94,
172.94, 184.4, 184.4, 178.14, 178.14, 161.4, 172.13, 172.13, 166.35, 166.35,
160.81, 160.81, 155.5, 155.49, 150.39, 150.39, 145.48, 145.48, 140.76, 149.33,
136.22, 131.86, 139.92, 135.48, 123.63, 119.75, 127.1, 123.14, 119.33, 115.66,
112.13

### Coefficients for the first part of the exponential correction. Theta
### between 70 and 90 degrees.
# Parameters.
[mu_]
238.99, 233.46, 228.08, 217.79, 212.86, 208.06, 198.88, 194.48, 186.03,
178.04, 170.47, 163.3, 156.51, 146.96, 138.13, 132.62, 124.84, 117.63, 110.93,
104.71

[a_]
0.2, 0.15, 0.13, 0.14, 0.14, 0.14, 0.15, 0.15, 0.17, 0.19, 0.22, 0.25, 0.28,
0.33, 0.4, 0.49, 0.63, 0.86, 1.29, 2.46

[b_]
0.0, 0.0, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.02, 0.02,
0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02, 0.02

[d_]
0.13, 0.16, 0.19, 0.21, 0.25, 0.28, 0.33, 0.38, 0.41, 0.44, 0.46, 0.49, 0.52,
0.55, 0.56, 0.55, 0.52, 0.45, 0.28, -0.26

### Coefficients for the second part of the exponential correction. Theta
### between 70 and 90 degrees.
# Parameters.
[beta_]
0.05, 0.05, 0.06, 0.07, 0.07, 0.08, 0.09, 0.11, 0.12, 0.14, 0.16, 0.19, 0.22,
0.27, 0.33, 0.41, 0.54, 0.74, 1.13, 2.21

[c_]
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01,
0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.01, 0.02, 0.03

### Coefficients for the extremity correction.
[lambda]
-1.64, 17.95, -72.17, 164.83, -177.03, 71.61

```

Annexe C

Performance indicators

- Correlation : $r = \frac{\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})(M_i - \bar{M})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^N (M_i - \bar{M})^2}}$
- *RMSE* (root mean square error) : $RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (M_i - O_i)^2}$
- *MNE* (mean normalized error) : $MNE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{M_i - O_i}{O_i} \right|$
- *MNB* (mean normalized bias) : $MNB = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{M_i - O_i}{O_i}$
- *NME* (normalized mean error) : $NME = \frac{\sum_{i=1}^N |M_i - O_i|}{\sum_{i=1}^N O_i}$
- *NMB* (normalized mean bias) : $NMB = \frac{\sum_{i=1}^N M_i - O_i}{\sum_{i=1}^N O_i}$
- *MFE* (mean fractional error) : $MFE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|M_i - O_i|}{\frac{O_i + M_i}{2}}$
- *MFBI* (mean fractional bias) : $MFBI = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{M_i - O_i}{\frac{O_i + M_i}{2}}$
- Fraction of predictions within a factor of two of the observations :
FAC2 = fraction of data that satisfy : $0.5 \leq \frac{M_i}{O_i} \leq 2$.

- *RMB* (relative mean bias) : $RMB = \frac{(\bar{O} - \bar{M})}{0.5(\bar{O} + \bar{M})}$
- *RS* (relative scatter) : $RS = \exp[(\ln(\bar{O}) - \ln(\bar{M}))]$

where M_i and O_i are the modeled and observed values, respectively and $\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i$.

