

Demande d'Attribution de Ressources Informatiques Description scientifique du projet

Titre du projet : Etude de la qualité de l'air dans un contexte d'évolution des émissions (naturelles et anthropiques) et de changement climatique.

Numéro du projet DARI : A0090107232

Responsable scientifique : Guillaume Siour

Laboratoire : *Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques (LISA).*

Nombre d'heures demandées (Cpu mono-processeur) sur le projet :

TGCC BULL Irene skl :	2.285.000 heures scalaires
TGCC BULL Irene rome :	1.705.000 heures scalaires

1. Collaborateurs

Nom	E-mail	Statut	Labo
Matthias Beekmann	Matthias.Beekmann@lisa.u-pec.fr	DR	LISA
Taos Benoussaid	Taos.Benoussaid@lisa.u-pec.fr	Doctorant	LISA
Christel Bouet	Christel.Bouet@lisa.u-pec.fr	CR	LISA
Audrey Cheiney	Audrey.Cheiney@lisa.u-pec.fr	Post Doctorant	LSCE
Arineh Cholakian	Arineh.Cholakian@lisa.u-pec.fr	IE	LMD
Adriana Coman	Adriana.Coman@lisa.u-pec.fr	IR	LISA
Gaëlle Dufour	Gaelle.Dufour@lisa.u-pec.fr	DR	LISA
Arthur Elessa	Arthur.Elessa@lisa.u-pec.fr	Post Doctorant	LISA
Maxim Eremenko	Maxim.Eremenko@lisa.u-pec.fr	IR	LISA
Gilles Foret	Gilles.Foret@lisa.u-pec.fr	MC	LISA
Mathieu Lachatre	Mathieu.Lachatre@lisa.u-pec.fr	Post Doctorant	LMD
Ines Makni	Ines.Makni@lisa.u-pec.fr	Doctorant	LISA
Dilek Savas	Dilek.Savas@lisa.u-pec.fr	Doctorant	LISA
Guillaume Siour	Guillaume.Siour@lisa.u-pec.fr	IR	LISA
Matthieu Vida	Matthieu.Vida@lisa.u-pec.fr	Doctorant	LISA

Tableau 1 : Liste des collaborateurs

2. Résumé

Dans la continuité du projet de 2019/2020, ce projet s'articule autour de travaux portant sur l'étude de la composition de l'atmosphère et de son évolution. De façon générale, nous nous intéressons aux processus physico-chimiques contrôlant les concentrations de polluants et donc la qualité de l'air. Les espèces ciblées sont à la fois sous forme gazeuse (l'ozone et ses précurseurs mais aussi l'ammoniac et le dioxyde de soufre) et sous forme particulaire (de différentes natures et origines). Les études proposées dans ce projet visent généralement à mieux comprendre et quantifier les processus qui déterminent les concentrations des polluants ciblés (projets LANDEX, WIND-O-V).

C'est le cas des travaux menés dans le cadre de l'ANR PoIEASIA qui porte sur l'étude de la pollution asiatique et de ses déterminants. Certaines applications sont

de natures plus opérationnelles puisqu'elles ont pour objectif l'amélioration des systèmes de surveillance de la qualité de l'air à travers l'assimilation des observations satellitaires, l'inversion des sources (NH₃ AMP'AIR, ARGONAUT) de polluants ou encore la mise en place de futures politiques de contrôle des émissions notamment dans les environnements urbains. Ainsi dans le cadre de l'ANR VITE I, nous avons développé un outil unique de modélisation de la pollution urbaine qui intégrerait différents scénarios (tenant compte de l'urbanisation) représentant les voies de développement de la ville du futur. Cet outil permettra d'évaluer l'ampleur des inégalités d'exposition de la population à la pollution atmosphérique dans le projet PRIMEQUAL POLL-EXPO.

Un outil de modélisation commun est utilisé dans tous ces projets : le modèle de chimie transport régional CHIMERE couplé au modèle météorologique WRF. Ce modèle est un outil national (développé par le consortium LMD/INERIS/LISA) utilisé pour des applications de recherche mais aussi pour des applications opérationnelles. Les autres codes utilisés sont également développés ou co-développés au LISA : PYVAR-CHIMERE et sa version plus évoluée CIF (Community Inversion Framework), CHIMERE-EnKF, un code d'inversion des données satellitaires de l'instrument IASI et un code multi-agents d'émissions de polluants atmosphériques et de Gaz à Effet Serre (GES) à l'échelle urbaine OLYMPUS.

3. Présentation générale

Cette demande de renouvellement se positionne donc dans la continuité du projet 2019/2020. Le contexte général reste l'étude de la pollution atmosphérique ciblée sur les bilans d'ozone et de particules, à l'échelle régionale. Plusieurs régions sont concernées. Nous nous intéressons à des régions (ou milieux) fortement anthropisées qui sont à la fois sources et réceptrices de la pollution ; c'est le cas de l'Europe, l'Asie de l'Est (et notamment la Chine, de l'Afrique de l'Est) mais également des environnements urbains de façon plus général. Dans cette optique, les projets inclus dans cette demande abordent ces aspects sous deux angles i) l'étude et la compréhension des processus qui pilote les bilans de polluants et ii) la conception de méthodes permettant un pilotage opérationnel des politiques de contrôle de la qualité de l'air. Par ailleurs, nous aborderons également le thème de l'interaction entre polluants d'origines anthropique et biogénique pour l'exemple de la forêt des Landes (interaction entre émissions biogéniques de COVB issues des forêts et NO_x et COV urbaines/trafic). Pour décliner cette demande, nous avons choisi une présentation par projets scientifiques. Ainsi, la description plus détaillée du projet proposé suit la structuration suivante :

- Etude de la pollution aux échelles continentales par synergie modélisation/observations satellitaires
- Scénarios urbains d'aménagement et de politiques énergétiques
- Modélisation des émissions d'aérosols terrigènes pour les régions semi-arides
- Etude des indicateurs d'impact sur la santé
- Simulation des sources de pollution de l'air en Afrique de l'Est
- Interaction entre émissions biogéniques et anthropiques

3.1. Etude de la pollution aux échelles continentales par synergie modélisation/observations satellitaires

L'observation de la composition atmosphérique par des instruments satellitaires s'est fortement développée depuis le début des années 2000. Le suivi d'évènements de pollution depuis l'espace est aujourd'hui possible (e.g. Dufour et *al.*, 2015 ; Cuesta et *al.*, 2018 ; Fortems-Cheiney et *al.*, 2016). De plus, les séries de données aujourd'hui disponibles sont suffisamment longues pour envisager des premières études de tendances (e.g. Dufour et *al.*, 2018). Nous développons au laboratoire un nouvel axe de recherche depuis quelques années qui visent à mettre en synergie l'observation satellitaire des polluants ou de leurs précurseurs et la modélisation atmosphérique, dans laquelle le LISA est très active avec le co-développement de CHIMERE (Menuet et *al.*, 2013 ; Mailler et *al.*, 2017), afin de mieux appréhender les problèmes de qualité de l'air aux échelles continentales. Ces activités sont développées au sein de plusieurs projets : ANR PoEASIA pour l'étude de la pollution asiatique, ADEME/PRIMEQUAL AMP'AIR pour l'étude du rôle des émissions agricoles d'ammoniac dans les pics de pollution particulaire en France et en Europe, le projet ANR ARGONAUT pour l'étude des émissions de polluants et CO₂ à haute résolution spatiale en France, les projets CNES/TOSCA IASI, IASI-NG et SURVEYOZON pour le développement d'algorithmes d'analyse des données satellitaires et leur assimilation dans les modèles. Nous présentons ci-dessous les demandes associées pour l'année 2020-2021.

3.1.1 Modélisation inverse des émissions des précurseurs de polluants photo-oxydants et particulaires

Les incertitudes sur les émissions de polluants font partie des sources principales d'erreur des modèles de chimie transport et limitent les capacités des modèles à reproduire les pics de pollution. Avec les données satellitaires, disponibles depuis une dizaine d'année et de bonne qualité, l'utilisation des méthodes d'assimilation ou de modélisation inverse, contraintes par les observations satellitaires, ouvre une nouvelle ère pour la prescription d'inventaires d'émissions « dynamiques » en entrée des modèles, du fait de leur couverture spatio-temporelle sans précédent. Cette activité de recherche prometteuse est développée depuis plusieurs années au LISA. En particulier, nous développons conjointement avec le LSCE, l'outil d'assimilation variationnelle PYVAR-CHIMERE pour les gaz réactifs (Fortems-Cheiney et *al.*, 2019). Plus récemment, cet outil a évolué vers un outil plus flexible, le CIF (Community Inversion Framework) toujours basé sur CHIMERE. Ce nouvel outil a commencé à être déployé au TGCC en juin 2020 et sera la base des activités d'inversion proposé ici. Il est à noter que nous n'avons pas encore un retour d'expérience suffisant sur les temps de calcul nécessaires pour les inversions. Ces temps de calcul ont été estimés au vu des premiers tests techniques réalisés.

Projet ANR PoEASIA

Le projet ANR PoEASIA est dédié à l'étude de la pollution en Asie et plus particulièrement en Chine et doit se terminer en mars 2021. Ce projet vise une meilleure quantification de la distribution des polluants en Chine (ozone et aérosols), de leurs sources, de leurs variabilités et de leur évolution récente et future. En effet, le développement économique et l'urbanisation rapides des dernières décennies en

Chine ont conduit à une forte hausse des émissions de polluants et ainsi à des concentrations dépassant largement les seuils de pollution recommandés par l'Organisation Mondiale de la Santé pour les polluants majeurs (O_3 , $PM_{2.5}$ et PM_{10}). Mieux connaître, comprendre et surveiller la qualité de l'air en Chine est donc indispensable pour mieux évaluer les impacts de cette pollution à l'échelle régionale mais aussi globale, améliorer les capacités de prévision et affiner les stratégies de régulation des émissions. Dans le cadre de ce projet, il était prévu de développer des approches de modélisation inverse des émissions afin d'étudier les tendances et variabilités des émissions de NO_x et possiblement de COVs en utilisant les colonnes troposphériques de NO_2 et de HCHO restituées à partir de l'instrument satellitaire OMI pour contraindre les émissions.

Comme expliqué dans la partie bilan de cette demande, nous avons rencontré des problèmes de convergence du système PYVAR-CHIMERE, dû à la non-linéarité de la chimie, qui nécessitait un tri trop sélectif des données, non rattachable directement à des critères objectifs géophysiques. Ces problèmes nous ont conduit à migrer vers le nouvel outil CIF. Des tests vont être conduits d'ici à novembre 2020 pour fixer la configuration à utiliser (spécification des matrices de covariance d'erreur). Pour la période concernant les demandes d'heures au TGCC, une année d'inversion des émissions de NO_x sera réalisée pour finaliser la contribution au projet PoLEASIA. Pour valider les émissions obtenues, nous conduirons une simulation directe avec le modèle CHIMERE et ferons des comparaisons aux données de surface disponibles. Nous estimons que 25.000 heures scalaires sont nécessaires pour cela.

→ Heures demandées : 25.000 heures sur skylake

Projet ANR ARGONAUT

Le projet ANR ARGONAUT (pollutAnts and gReenhouse Gases emissiOns moNitoring from spAce at high resOLUTion) vise à fournir des estimations des émissions anthropiques françaises à haute résolution pour les principaux polluants (oxydes d'azote - NO_x , monoxyde de carbone - CO et composés organiques volatils non méthaniques - NMVOCs) et le dioxyde de carbone (CO_2) en s'appuyant sur l'inversion atmosphérique et la nouvelle génération de satellites d'observation de la composition atmosphérique (Sentinel-5P/TROPOMI, CO2M). Nous espérons que l'ensemble des tests techniques de mise en place de l'inversion sera finalisé avant Novembre 2020. Pour la période de la demande 2020-2021, nous appliquerons le système pour étudier la période COVID et l'impact du confinement sur les émissions françaises de NO_x . Les inversions seront conduites sur la période février 2020 – mai 2020, soit 4 mois d'inversion. Dans le cadre du projet, un des objectifs est de travailler au raffinement des matrices de covariance d'erreur utilisées pour l'inversion. Plusieurs tests et jeux d'inversion devront donc être conduits, a minima : (i) une inversion avec des matrices « basiques » tirées des connaissances a priori de la littérature, (ii) une inversion dans laquelle les corrélations spatiales et temporelles et leurs amplitudes seront prescrites à partir la comparaison d'inventaires d'émissions, (iii) une inversion dans laquelle les matrices de covariance d'erreurs seront raffinées à l'aide de diagnostics statistiques avancés sur les observations. On estime le nombre d'heures nécessaires pour réaliser ces inversions à 75.000 heures scalaires.

→ Heures demandées : 75.000 heures sur skylake

Projet ADEME/PRIMEQUAL AMP'AIR

L'objectif du projet est d'améliorer la représentation spatiale et temporelle des émissions agricoles d'ammoniac afin d'améliorer les capacités de simulation et de prédiction des pics de pollution particulaire en France et plus largement en Europe. Notre participation à ce projet repose sur l'application de méthodes inverses, plus ou moins complexes, pour contraindre les émissions à partir des observations de la colonne troposphérique d'ammoniac par l'instrument satellitaire IASI. Comme précisé dans le rapport d'activité, nous avons développé une méthode simplifiée dite de « mass balance » que nous avons appliquée pour l'année culturale 2010-2011. Comme suite à ce projet, nous avons prévu d'appliquer la même méthode pour l'année culturale 2016-2017 pour laquelle des campagnes intensives de mesures d'ammoniac ont été déployées dans plusieurs régions françaises ce qui permettra de valider les inventaires d'émissions produits (ceci n'était pas possible pour 2010-2011 car aucune mesure d'ammoniac n'était disponible). Notre objectif était également de finaliser le développement d'une approche d'assimilation variationnelle pour inverser plus proprement les émissions d'ammoniac sans négliger la chimie et le transport comme dans la méthode actuelle. Cependant, compte tenu des conditions sanitaires que nous avons traversées ces derniers mois, nous n'avons pas pu recruter de stagiaire ni de doctorant pour débiter ce travail comme prévu. Nous réitérons donc la demande de l'an passé pour ce volet. Pour appliquer la méthode simplifiée, il est donc nécessaire de faire 2 simulations CHIMERE : (i) avec les émissions de référence TNO, (ii) avec les émissions optimisées NH3SAT sur les années 2016 et 2017. A la résolution spatiale 0,5x0,25°, le temps de calcul pour une simulation sur l'Europe est environ 5000 h pour une année de simulation, 20.000 heures de calcul scalaire seront donc nécessaires. Pour tester l'approche par assimilation variationnelle, nous évaluons le nombre d'heures nécessaire à environ 10.000 heures scalaires supplémentaires.

→ **Heures demandées : 30.000 heures sur skylake**

3.1.2. Modélisation atmosphérique : déterminants de la tendance d'ozone sur les régions anthropisées de l'hémisphère nord

Un rapport international récemment publié sur l'ozone troposphérique (TOAR – Tropospheric Ozone Assessment Report, <http://www.igacproject.org/activities/TOAR>) montre que la question des tendances d'ozone est une question complexe, encore ouverte. Si l'augmentation des niveaux d'ozone depuis les années 60 ne fait pas de doute, son évolution récente est plus contrastée suivant la région et la saison étudiée (Gaudel et al., 2018). De plus, la réponse apportée par les différents moyens d'observation aussi bien au sol, aéroportés ou satellitaires n'est pas univoque et soulève de nombreuses questions dans la communauté. Par exemple, dans le cadre du projet ANR PoEASIA, une étude récente (Dufour et al., 2018) a montré que les tendances d'ozone observée avec l'instrument satellitaire IASI étaient négatives dans les régions fortement urbanisées (Pékin, Shanghai) entre 2008 et 2016. Ce résultat est surprenant car en contradiction avec les tendances issues des observations de surface. Plusieurs hypothèses ont été avancées pour expliquer ces résultats dont une dérive des performances de l'instrument IASI. Mais une étude approfondie a montré la bonne stabilité des observations satellitaires sur toute la période. Une des hypothèses avancées pour expliquer cette incohérence est la

différence de régime chimique à la surface et vers 3-4 km d'altitude, là où les observations IASI sont les plus sensibles. En effet, des premiers tests de sensibilité avec le modèle CHIMERE ont montré que la réponse de l'ozone à la diminution des émissions de NO_x actuellement observée en Chine était de signe opposé : positif à la surface et négatif en altitude (voir Fig. 10 de Dufour et *al.*, 2018). Pour investiguer plus précisément cette hypothèse, nous avons conduit des simulations en utilisant un nouvel inventaire d'émissions pour la Chine disponible pour chaque année depuis 2010 et accessible sur demande depuis début 2019 (inventaire MEIC de l'université Tsinghua de Pékin). Nous avons effectué 8 années de simulations avec CHIMERE sur la Chine en utilisant ce nouvel inventaire pour couvrir la période 2010-2017 pendant l'été (voir bilan). Ces simulations seront exploitées dans le cadre de l'ANR PoIEASIA mais aussi de collaborations développées dans le cadre du TOAR. Les investigations que nous avons menées depuis montrent un impact non négligeable des conditions aux limites du domaine de simulation sur les tendances d'ozone, les régions hors du domaine pouvant contribuer à l'ozone dans le domaine. La simulation actuellement disponible a été réalisée avec des conditions aux limites climatologiques. Pour quantifier l'impact de l'évolution de l'ozone hors du domaine chinois sur l'évolution de l'ozone en Chine, il est nécessaire de conduire de nouvelles simulations avec des conditions aux limites reflétant l'évolution de l'ozone à l'échelle globale. Nous utiliserons pour cela les dernières simulations du modèle global LMDz-INCA qui incluent les inventaires d'émissions les plus récents. Le coût de calcul pour cette simulation sera similaire à celle déjà réalisée avec les conditions aux limites climatologiques, à savoir 200.000 heures

→ **Heures demandées : 200.000 heures sur skylake**

3.1.3. Processing de données satellitaires d'ozone de IASI

Nous développons au LISA des algorithmes de restitution des profils verticaux des concentrations d'ozone à partir des observations satellitaires issues des sondeurs infrarouges IASI à bord des satellites européens météorologiques Metop. Ces algorithmes sont de type « recherche » et non à visée opérationnelle et à ce titre ne sont pas éligibles à une production opérationnelle dans les centres de données nationaux. Cependant, nos produits sont utilisés dans le cadre de nos projets mais également dans le cadre de grands exercices internationaux comme le récent « assessment report » sur l'ozone troposphérique (TOAR) auquel nous avons participé (Gaudel et *al.*, 2018, Tarasick et *al.*, 2019) avec la version v2.0 de notre produit O3-IASI. Comme précisé dans le rapport d'activité, notre produit a évolué vers une version v3.0 et nous avons commencé le reprocessing des données avec cette nouvelle version pour les observations IASI de Metop-A pour la Chine et l'Europe (période 2008-2018). Ce processing des données avec la v3.0 doit être étendu aux années les plus récentes et aux observations IASI sur le satellite Metop-B (en vol depuis 2013) et le satellite Metop-C (en vol depuis 2018). On pourra ainsi évaluer la cohérence des jeux de données des différents satellites. Le Tableau 2 résume les données déjà reprocessées (ou qui le seront d'ici fin Octobre 2020) et celles que nous projetons pour l'année 2020-2021.

	Déjà traité/en cours	A traiter
Asie - MetopA	Période 2008-2019	Année 2020 (~25.000h)
Asie - MetopB	Période 2013-2019	Année 2020 (~25.000h)
Asie - MetopC	-	Période 2018-2020 (~75.000h)
Europe - MetopA	Période 2008-2019	Année 2020 (~25.000h)
Europe - MetopB	-	Période 2013-2020 (~200.000h)
Europe - MetopC	-	Période 2018-2020 (~75.000h)

Tableau 2 : ensemble des données IASI à traiter et le nombre d'heures nécessaires pour chacune des parties

→ **Heures demandées : 425.000 heures sur rome**

3.1.4. Assimilation des données IASI

Les dernières simulations d'assimilation de données effectuées (sur l'Europe et/ou sur la Chine) nous ont montré la limite du système d'assimilation, cela nous a forcé à revenir sur les observations satellitaires pour nous interroger sur leur apport en information. L'estimation des erreurs de IASI+GOME2 (le produit satellitaire utilisé dans nos simulations) fournie au système d'assimilation a été revisitée. Et un nouveau produit de niveau 3 a été mis au point par lissage et regridage des mesures IASI+GOME2 de niveau L2. Ce nouveau produit, appelé IASI+GOME3, sera aussi assimilé sur les mêmes domaines l'Europe et la Chine, fonction de la mise à disponibilité par nos collègues.

A l'heure actuelle, les données IASI+GOME3 n'étant pas disponibles pour des très longues périodes et pas pour les deux domaines d'intérêt, notre demande porte donc pour l'année prochaine uniquement sur 2 mois de simulation en utilisant le système CHIMERE-EnKF avec un ensemble de 40 membres. Pour un seul jour d'assimilation avec 64 processeurs (et 40 membres d'ensemble), le temps nécessaire sur Irene est d'approximativement 8 h. Cette demande s'élève donc à 25000 heures. Si besoin, une demande au fil de l'eau sera effectuée pour pallier le besoin en assimilation dans les projets en cours.

→ **Heures demandées : 25.000 heures sur skylake**

3.2. Scénarios urbains d'aménagement et de politiques énergétiques

Les verrous sont nombreux pour produire une analyse compréhensive poussée des problématiques actuelles de qualité de l'air. La réflexion sur la gouvernance transversale des problèmes posés par l'amélioration de la qualité de l'air et la lutte contre le changement climatique est encore émergente. Les questions d'inégalités environnementales et de santé sont des défis posés aux politiques urbaines. Et par ailleurs, les impacts de la congestion urbaine sur la qualité de l'air sont, aujourd'hui encore, relativement peu explorés. Mais le défi le plus urgent est celui du couplage et du croisement des disciplines et des démarches. La création d'interdisciplinarité doit en effet permettre de faire avancer significativement notre compréhension des liens entre les différents volets urbains. Et permettre de coupler l'analyse quantitative des bénéfices sur la qualité de l'air et la santé à une réflexion sur les conditions de réussite des politiques publiques et les inégalités sociales et environnementales. Depuis plusieurs décennies, d'importants efforts ont été menés afin d'identifier, dans

les politiques publiques et dans les actions de la transition énergétique, des leviers permettant d'agir conjointement sur l'air et le climat et d'espérer une dynamique co-bénéfique sur l'ensemble des volets de l'environnement atmosphérique. Ce sous-projet repose sur la construction commune d'une représentation de la région Île-de-France à l'horizon 2030-2050, par la mise en œuvre des différentes étapes d'une plate-forme de modélisation urbaine par des groupes thématiques transversaux. L'objectif est d'étudier l'effet de différents leviers structurels, politiques et technologiques sur la qualité de l'air et l'exposition de la population. L'un des résultats attendus est l'analyse socio-environnementale des scénarios simulés et des inégalités qu'ils mettront potentiellement en évidence. Les ambitions du projet sont présentées sous 5 grands axes : (1) analyser les effets de différents scénarios d'organisation urbaine pensés pour la transition énergétique, sur la qualité de l'air et l'exposition en zone urbaine. (2) Ouvrir une réflexion sur le paradoxe de la densité urbaine, à la fois source d'économie énergétique et à l'origine d'un confinement excessif des individus dans des espaces hautement émetteurs de polluants. (3) Proposer une analyse quantitative des impacts du transport de marchandise en ville sur la santé des populations urbaines. (4) Caractériser de l'exposition dynamique et cumulée des individus à la pollution de l'air par une approche hautement résolue (à l'échelle de quelques mètres). (5) Caractériser l'exposition dynamique et proposer une analyse socio-spatiale de l'exposition (mise en évidence des inégalités environnementales). Ces travaux se déroulent dans le cadre de l'ANR VITE !, du projet POLL-EXPO et du Labex Futurs-Urbains. Ce projet met en œuvre une plateforme de modélisation innovante et transdisciplinaire, qui vise à simuler à l'échelle de l'agglomération (résolution kilométrique) les relations entre aménagement urbain, contraintes politiques, socio-économiques et énergétiques, mobilité et pratiques de consommation et qualité de l'air à l'échelle de l'individu. Nous pourrions proposer en sortie de ce calcul une estimation de l'exposition des individus, a minima par une approche classique de croisement avec les densités de population. Notre projet s'appuie sur la mise en commun de compétences complémentaires permettant de proposer à la fois une vision systémique de l'exposition urbaine aux polluants atmosphériques, et une approche compréhensive et quantitative des déterminants de cette exposition, la plus équilibrée possible entre disciplines.

3.2.1. Analyse des impacts de planification urbaine (politiques de densification et de transport) sur la qualité de l'air en Ile de France à l'horizon 2030

Cet axe vise à apporter des éléments de diagnostic quant aux impacts de politiques d'aménagement du territoire sur la qualité de vie en Ile-de-France pour les prochaines décennies. Il propose d'analyser les effets de différents scénarios d'organisation urbaine pensés pour la transition énergétique, sur la qualité de l'air et l'exposition en zone urbaine. L'objectif ici est d'évaluer un scénario tendanciel de l'évolution de la région Ile-de-France en intégrant les principales hypothèses proposées par le SDRIF (Schéma Directeur Régional d'Île-de-France). Celles-ci renseignent sur la croissance démographique de l'Île-de-France avec un scénario bas avec 1,8 enfant par femme, un solde migratoire de plus de 50 000/an, et une mortalité haute. La composition du territoire est estimée à 12,4 millions en 2030 et 12,2 millions en 2050. Il existe également un scénario haut à 2,1 enfants par femme, un solde migratoire de plus de 150 000/an, et une mortalité basse. Les estimations de la population de la région en 2030 sont de 13,4 millions et 15,6 millions en 2060.

En termes de mobilité et de transport les principaux documents stratégiques sur lesquels repose le scénario tendanciel sont le Plan de mobilisation pour les transports en Ile de France, le Plan de Déplacements Urbain d'Ile-de-France (PDUIF), Le Schéma régional d'infrastructures de transports (SRIT) d'Ile-de-France, Le Contrat de Projet État-Région (CPER) 2015-2020. Cela se traduit par l'amélioration du réseau de transports existant et la réalisation du Grand Paris Express ; La modernisation et le développement du réseau de RER, la désaturation des lignes de métro les plus engorgées, la réalisation de 120 km de tramway et de 300 km de bus, l'aménagement d'une dizaine de grands pôles multimodaux. En termes de logements, le SDRIF propose un objectif de 70 000 nouveaux logements par an. Cet objectif sera atteint par paliers progressifs, par le biais de politiques foncières et immobilières qui s'appuieront sur la mise en cohérence de plusieurs mesures dont des politiques de densification près des pôles de gares. Pour les enjeux de l'énergie et l'adaptation au changement climatique, le scénario tendanciel intègrera les volets énergie et changement climatique sont principalement pilotés par le Schéma Régional Climat Air Énergie (SRCAE) d'Ile de France. D'un point de vue climatique les principales hypothèses sont liées à l'élévation des températures moyennes et le document fait l'hypothèse d'une augmentation des températures supérieure à 2°C. Le Tableau 3 résume l'ensemble des simulations à réaliser.

	Descriptif	Nombre d'heures
Ville tendancielle « TRENDS »	Scénario tendanciel de la région IDF en 2030	1 an : 80 000 heures
Sensibilités démographie (3) - Scénario bas - Scénario médian - Scénario haut	Projections démographiques de la région Ile de France en considérant la fécondité et le flux migratoire	3 x 1 an : 240 000 heures
Sensibilités transport (3) - Grand-paris express - Covoiturage - Télétravail	Intégration du réseau du grand Paris express, de politiques d'incitation aux pratiques de covoiturage et de télétravail	3 x 1 an : 240 000 heures
Sensibilités Logement (2) - PLU - Relocalisation emploi	Densification près des pôles de gare. Emploi rééquilibré par bassin.	2 x 1 an : 160 000 heures
Sensibilités énergie - Scénario bas - Scénario médian - Scénario haut	Projections du parc automobile roulant. Taux de pénétration des véhicules électrique. Rénovation thermique	3 x 1 an : 240 000 heures
Temps de calcul	OLYMPUS = 40kh CHIMERE = 40kh	Total : 960 000 heures

Tableau 3 : Ensemble des simulations à réaliser pour le scénario « TRENDS ».

→Heures demandées : 960.000 heures sur skylake

3.2.2. Caractérisation des liens entre la structure, l'organisation et le fonctionnement de la ville et la qualité de l'air (Scénarios de villes compactes et villes étalées)

L'études des scénarios de morphologies contrastées doit permettre de mettre en évidence l'impact de la structure urbaine sur les émissions de polluants atmosphériques qui sont un paramètre clé de la modélisation de la qualité de l'air. Dans cet axe, nous souhaitons évaluer la sensibilité des modèles à différentes morphologies urbaines, et évaluer les impacts sur la qualité de l'air. Nous avons basé notre travail sur l'analyse du GIEC, qui a identifié quatre variables clés de la forme urbaine ayant un impact spécifique et majeur sur la consommation d'énergie (Seto et al.) et, en fin de compte, sur la qualité de l'air. (1) La densité urbaine permet d'estimer les propriétés d'une unité urbaine telles que la population, l'emploi, les logements, les structures de transport. Elle renseigne partiellement sur les distances moyennes des déplacements et impacte aussi les choix de mobilités. (2) La mixité d'usage des sols, tout comme la densité, conditionne la morphologie de la ville Elle peut être quantifiée par des rapports tels que emplois/ménages, ménages/services, bâti/parc. (3) La connectivité correspond à la morphologie et à la densité des voies routières et piétonnes. (4) L'accessibilité est définie comme l'accès aux emplois, au logement, aux services. Chacune de ces variables a en effet une incidence sur les émissions, la dispersion et l'exposition. Par la suite, quatre scénarios contrastés de structures urbaines ont été simulés avec OLYMPUS. Ils ont été appelés COMPACT (ville monocentrique classique), CORRIDOR (ville basée sur des directions privilégiées pour le transport), SPRAWL (ville étalée) et STARS (ville polycentrique). Le Tableau 4 résume l'ensemble des simulations à réaliser.

	Descriptif	Nombre d'heures
COMPACT, une ville monocentrique	Ville compacte à très fortes accessibilité, connectivité, densité et mixité urbaine.	1 an : 80 000 heures
SPRAWL, une ville étalée	Ville étalée où l'accessibilité, la connectivité, la mixité et la densité sont peu marquées	1 an : 80 000 heures
STARS, une ville polycentrique	Ville multipolaire, 5 grands centres d'activités	1 an : 80 000 heures
CORRIDOR, une ville en couloir	Ville connectée selon quelques axes majeurs de transport	1 an : 80 000 heures
GREENBELT, une ville avec une ceinture verte - Fil de l'eau - Ceinture verte	IDF en 2030 avec contrainte sur l'usage des sols depuis 1960	2 x 1 an : 160 000 heures
Temps de calcul	OLYMPUS = 40kh CHIMERE = 40kh	Total : 480 000 heures

Tableau 4 : Ensemble des simulations à réaliser pour les scénarios de formes urbaine.

→Heures demandées : 480.000 heures sur rome

3.2.3. Couplage de modèles pour estimer la contribution du transport de marchandises à la dégradation de la qualité de l'air en Ile-de-France

Le transport de marchandise est une source majeure d'émissions de polluants, avec des conséquences à la fois pour l'environnement et la santé humaine. Au cours des 30 à 40 dernières années, les émissions de particules, d'oxydes d'azote, de monoxyde de carbone et d'hydrocarbures issues de l'échappement des véhicules ont considérablement diminué, du fait de technologies développées afin de répondre aux réglementations de plus en plus strictes, et ce malgré l'augmentation des déplacements motorisés.

Aujourd'hui, alors que les constructeurs automobiles et les acteurs publics cherchent des solutions pour une mobilité urbaine plus durable, la question de l'impact du transport de marchandises en ville sur la qualité de l'air, et sur l'exposition des populations urbaines aux polluants atmosphériques, reste cependant très peu traitée. Afin d'investiguer ce volet de la durabilité urbaine, nous présentons ici une approche de modélisation visant à quantifier les émissions du transport de marchandises en ville ainsi que sa contribution à l'exposition des franciliens à la pollution atmosphérique.

Le but ici est de mieux caractériser et quantifier la contribution du transport de marchandises à la qualité de l'air en Ile-de-France en situation actuelle, en développant une modélisation basée sur les trajectoires de déplacements des marchandises en ville. Ce travail sera étendu pour intégrer des scénarios modifiant la localisation des emplois et des entreprises, ou simulant les effets des politiques de transport (infrastructures dédiées, restrictions de circulation, outils de tarification, taux d'occupation, flotte, horaires...). Les scénarios seront réalisés jusqu'au calcul des émissions de polluants et de GES avec MODUS, mais aussi avec OLYMPUS pour développer une fonctionnalité « fret » et la valider par rapport à MODUS. Une sélection de scénarios sera étendue à la modélisation de la dispersion des polluants et l'exposition des populations. Le Tableau 5 résume l'ensemble des simulations à réaliser.

	Descriptif	Nombre d'heures
TMV_REF	Scénario de référence	1 an : 80 000 heures
TMV_2030	Évolution du transport de marchandise en ville en 2030	1 an : 80 000 heures
Massification	Modification de l'organisation logistique avec une massifications des marchandises	1 an : 80 000 heures
Horaires	Modification des horaires de livraisons	1 an : 80 000 heures
Temps de calcul	OLYMPUS = 40kh CHIMERE = 40kh	Total : 320 000 heures

Tableau 5 : Ensemble des simulations à réaliser pour les scénarios « TMV ».

→Heures demandées : 320.000 heures sur skylake

3.2.4. Modélisation de la pollution de proximité. Application à un quartier

La partie finale de la chaîne de modélisation développée dans le cadre de ces travaux porte sur l'évaluation des niveaux d'exposition cumulés des franciliens au cours de leurs journées afin d'apporter, finalement, une aide aux décideurs. Il a été, en effet, mis en avant dans bon nombre d'études que la qualité de l'air jouait un rôle majeur dans la santé des populations urbaines (Hoek et *al.*, 2013 ; Loomis et *al.*, 2013 ; Khreis & Nieuwenhuijsen, 2017 ; Anenberg et *al.*, 2018). Une attention particulière est donc portée à la modélisation de la qualité de l'air, dans cette chaîne de modélisation et, notamment, sur sa résolution. En effet, il a été montré que l'utilisation de données de concentrations pas assez résolues pouvait potentiellement sous-estimer l'impact de la pollution sur la santé (Thompson et *al.*, 2014). La caractérisation correcte et précise de l'exposition des individus à la pollution de l'air ne peut être faite qu'en considérant des simulations avec une résolution fine allant de l'échelle de la rue à quelques mètres.

Nous avons montré, dans les parties initiales du projet, que le modèle CHIMERE représente de manière insuffisante le cumul et la non-dispersion des concentrations de polluants issus du trafic en zone confinée, et qu'il est nécessaire d'apporter une correction à ses sorties. Ce développement recouvre un verrou méthodologique et conceptuel, car il s'agit de créer de l'information. La méthode retenue consiste à ajuster, en post-simulation, les données modélisées à l'échelle du kilomètre via des coefficients multiplicatifs représentant (1) le degré de confinement du site ainsi que (2) la surémission de polluants de combustion liée à la surreprésentation locale des flux de trafic. Cette méthode s'inspire de travaux réalisés sur des villes en Grèce, mais en propose une version plus simple et qui se veut plus transposable. Cette correction est mise en application pour les NO_x et les particules sur le domaine Île-de-France en 2009 et appliquée de manière automatisée à l'ensemble des mailles urbaines franciliennes de CHIMERE de façon à caractériser les environnements sous-maille et les gradients urbains de concentration en milieu dense pour différents scénarios. Aujourd'hui, cette approche est en cours de validation. Des simulations de la qualité de l'air ont été lancées pour l'année 2017 car (1) elle est proche de la situation actuelle, (2) de nouvelles stations de mesures du réseau Airparif ont été ouvertes ce qui permet de vérifier nos résultats sur un plus grand jeu de données.

La dernière étape du travail consiste à évaluer l'exposition des franciliens en considérant leurs déplacements quotidiens en Île-de-France. Cette étape est possible grâce aux données de mobilité générées par le modèle OLYMPUS qui seront croisées aux champs de concentrations raffinés pour en déduire les niveaux cumulés de polluants auxquels ils sont exposés au cours de leurs journées. Par soucis de précision dans les résultats, un travail d'amélioration des voiries considérées par le modèle d'émission est en cours de finalisation : (1) Le réseau routier initialement considéré par OLYMPUS voit son nombre de brins de route être

multiplié par 7 (passant de 43 819 à 313 313 brins), (2) un réseau complet de transport en commun (116 538 brins) a été généré et remplacera les statistiques qui permettaient de caractériser les déplacements des individus en transports collectifs. Initialement OLYMPUS consommait jusqu'à 60k heures de calcul et nous avons estimé que l'addition de ces réseaux demandera 80k heures de calcul (augmentation du temps dépendant principalement de l'espace de stockage sur chaque processeurs).

Ensuite, il s'agira d'appliquer l'ensemble de la chaîne de modélisation (depuis OLYMPUS jusqu'à l'évaluation de l'exposition) à des scénarios urbains prospectifs permettant l'étude et l'analyse de l'impact des nouvelles stations du Grand Paris Express sur la qualité de l'air/exposition au niveau d'un quartier du Val-de-Marne :

- Une situation de référence sera simulée : Année 2017, OLYMPUS considérant les nouveaux réseaux, WRF et CHIMERE -> Total estimé : 80 + 30 + 40 = 150 kh estimées.
- Le scénario d'évaluation de l'impact de l'ouverture d'une gare du GPE dans un quartier du Val-de-Marne : Année 2035, OLYMPUS considérant les 2 nouveaux réseaux, WRF et CHIMERE -> Total estimé : 80 + 30 + 40 = 150 kh estimées.

Le Tableau 6 résume l'ensemble des simulations à réaliser.

	Descriptif	Nombre d'heures
REF	Simulation de référence hautement résolue	1 an, sur Ile-de-France : 150 000 heures
VDM	Le scénario d'évaluation de l'impact de l'ouverture d'une gare du GPE dans un quartier du Val-de-Marne	1 an, sur Ile-de-France : 150 000 heures
Temps de calcul	OLYMPUS = 80kh WRF = 30 kh CHIMERE = 40kh	Total : 300 000 heures

Tableau 6 : Ensemble des simulations nécessaires à l'évaluation de l'exposition des individus en Ile-de-France et zoom sur un quartier du Val-de-Marne.

→Heures demandées : 300.000 heures skylake

3.2.5. Analyse socio-économique intégrée

Les liens entre exposition environnementale, formes urbaines et santé sont complexes et interagissent à de multiples échelles – interactions qui peuvent être différentes selon le statut socio-économique des populations qui résident dans les lieux d'exposition. L'hypothèse principale étant que les populations les plus défavorisées (et/ou ayant moins de facteurs protecteurs) cumulent les désavantages

sociaux et environnementaux dans leur espace d'activité (lieu de résidence, travail, lors des mobilités quotidiennes).

Ainsi, la mobilité des individus, selon le mode de transport choisi, génère des émissions et conditionne leur exposition. Le choix modal est donc un paramètre essentiel dans l'analyse et la diminution de l'exposition. Cependant, de par sa complexité (lié à la perception individuelle de l'environnement, des choix à disposition, à la capacité d'apprentissage, d'anticipation...), le comportement autour du choix modal n'est pas un levier facile à appréhender pour les politiques publiques. L'objectif poursuivi ici est de pouvoir affiner notre compréhension des comportements de mobilité en identifiant des paramètres sociodémographiques, afin de les intégrer dans le modèle pour améliorer et raffiner notre représentation des pratiques et d'en apporter une clé de lecture pour la réduction des nuisances atmosphériques. De nombreux paramètres influencent le choix modal et peuvent être regroupés en quatre sous-catégories (De Witte et *al.*, 2013) : les déterminants sociodémographiques (tels que l'âge, le revenu, la composition du ménage ou encore la catégorie socioprofessionnelle) ; les déterminants socio-psychologiques (tels que la perception d'un mode de transport, l'habitude ou encore l'expérience liée à ce mode) (Van Acker et *al.*, 2010 ; Bouscasse & Bonnel, 2016) ; les déterminants géographiques, relatifs au territoire (comme par exemple la forme urbaine, la localisation du logement et/ou du lieu de travail) (Ewing & Cervero, 2001 ; Ding et *al.*, 2017), et enfin les déterminants relatifs au déplacements en lui-même (tels que la durée, le coût ou le motif du trajet) (Schoenau & Müller, 2017). Face à cette complexité, l'objectif est d'identifier et d'intégrer dans OLYMPUS les paramètres majeurs dans le processus de décision. L'intégration des paramètres se fera dans différents modules d'OLYMPUS : les paramètres sociodémographiques seront intégrés au moment de la génération de la population, soit 12 millions d'individus, les paramètres géographiques seront intégrés au niveau du module d'accessibilité et les paramètres relatifs au parcours au moment de l'affectation de l'agenda et de la mobilité des individus. Actuellement, OLYMPUS génère pour chaque individu de la population francilienne, 3 paramètres (âge, sexe et composition du ménage) qui nécessitent 40kh pour un scénario sur une année. L'objectif étant d'étoffer le nombre de variables pour chaque individu (âge, sexe, CSP, revenu, possession d'un véhicule, diplôme, permis de conduire), le nombre d'heures de calcul estimé s'élève à 80kh pour un scénario sur une année (intégrant le réseau routier et de transport affiné). De même, les paramètres géographiques ne sont aujourd'hui pas considérés dans le modèle et la localisation des individus se fait au niveau de la commune. L'objectif poursuivi ici est d'intégrer des données spatialisées relatives au territoire (parking, densité urbaine, diversité du tissu) mais également d'affiner la localisation des individus à l'échelle de l'immeuble (pour la localisation résidentielle et des activités). L'intégration de ces paramètres dans le processus de décision et l'affectation de la mobilité des individus ainsi que l'intégration de données spatiales hautement résolues nécessiteront des ressources importantes pour une simulation

sur une année des mobilités et des émissions (parallèlement aux autres composantes ajoutées telles que l'affinement du réseau de transport et routier).

L'analyse socio-spatiale de l'exposition des franciliens repose sur le croisement des données de mobilité socio-différenciées avec les concentrations issues du couplage OLYMPUS – CHIMERE. Ce croisement permettra d'obtenir des valeurs d'exposition à l'échelle individuelle sur une année de référence mais également dans des situations hypothétiques (scénarios prospectifs). L'objectif sera ici d'évaluer les effets positifs ou négatifs des programmes/interventions développés à partir des scénarios sur la santé et la qualité de vie, ainsi que la distribution sociale de ces effets.

Deux scénarios seront simulés :

- Un scénario de référence :
 - o Modélisation des comportements de mobilité des individus et des émissions en polluants associées sur la région Île-de-France
 - o Modélisation des concentrations (couplage OLYMPUS – CHIMERE)
 - o Modélisation de l'exposition : croisement des données de mobilité socio-différenciées avec les concentrations
- Un ou 2 scénarios tendanciels : permettant d'étudier l'impact sur les comportements de mobilité et sur l'exposition (dans le cadre des politiques du climat, de l'air et l'énergie : politiques publiques de lutte contre la pollution atmosphérique, politiques d'aménagement du territoire ; ou encore changement des pratiques liées au travail.

Le Tableau 7 résume l'ensemble des simulations à réaliser.

	Descriptif	Nombre d'heures
REF	Scénario de référence sur 2009	1 an : 150 000 heures
VDM	Étudier l'impact sur les comportements de mobilité et sur l'exposition	1 an : 150 000 heures
Temps de calcul	OLYMPUS = 80 kh WRF = 30 kh CHIMERE = 40kh	Total : 300 000 heures

Tableau 7 : Ensemble des simulations nécessaires à l'analyse socio-spatiale de l'exposition des individus en Île-de-France

→Heures demandées : 300.000 heures sur skylake

3.2.6. Description des projets de recherche associés

- Projet ANR VITE !

Villes et transitions énergétiques : enjeux, leviers, processus et évaluation prospective pluridisciplinaire. Application à la région Île-de-France (VITE !) – VITE !

Le projet de recherche fondamentale VITE ! vise à apporter un éclairage prospectif sur les enjeux, le contenu et les effets sociaux, territoriaux et environnementaux de stratégies de transition énergétique mises en œuvre à l'échelle d'une région urbaine, ainsi que sur le potentiel de mobilisation des acteurs en lien avec ces stratégies, en accordant une attention particulière aux transformations interdépendantes de l'environnement construit, des infrastructures et des pratiques sociales sur lesquelles reposent (ou qu'appellent de leurs vœux) ces stratégies.

Prenant le cas de la région Île-de-France et s'appuyant sur les orientations énergétiques définies dans le cadre de la planification stratégique régionale (PDUIF, SDRIF et SRCAE notamment), le projet explorera les effets directs et indirects, intentionnels et non intentionnels, bénéfiques et néfastes des stratégies énergétiques proposées ou mises en œuvre, en termes de : flux de ressources, de matières, d'énergie, de polluants ; flux financiers ; qualité (accessibilité, nature, prix) de l'énergie fournie.

Le projet sera centré sur l'étude de la mise en œuvre de quelques-uns des principaux leviers de transition énergétique maîtrisés par les collectivités locales :

- le développement d'infrastructures urbaines de fourniture énergétique ;
- l'organisation des transports de personnes et de biens au sein de la région francilienne ;
- les projets de développement et d'aménagement urbain
- la réhabilitation du parc régional de bâtiments.

Des scénarios énergétiques contrastés (en nombre limité) seront élaborés, afin de simuler les effets de la mise en œuvre de ces leviers de transition énergétique. Les simulations s'appuieront sur une chaîne de modélisation urbaine actuellement en cours d'élaboration dans le cadre des activités du Labex Futurs Urbains, à partir de trois modèles existants déjà validés pour l'étude de la région Ile-de-France : NEDUM (interaction transports-usage des sols, CIRED) ; MODUS (calcul des flux de trafic, LVMT) ; CHIMERE (qualité de l'air, LISA).

Les effets environnementaux et sociaux-spatiaux des scénarios étudiés seront « désagrégés » de deux manières complémentaires et interdépendantes :

- en fonction de groupes sociaux définis, en première approche, par leur revenu, pour appréhender les effets socialement différenciés des mesures mises en œuvre sur les dépenses énergétiques des ménages et, le cas échéant, sur la précarité énergétique ;
- en fonction de contextes territoriaux, pour appréhender les effets spatialement différenciés des mesures mises en œuvre sur l'accès des territoires aux différentes sources et formes d'énergie, sur leur exposition aux diverses formes de nuisance et, le cas échéant, sur la vulnérabilité énergétique des territoires.

Cette désagrégation permettra, en outre, d'apporter des éclairages inédits sur :

- les tensions pouvant apparaître en un point précis du territoire régional, en fonction de la politique mise en œuvre ;
- la « profondeur » de la remise en cause des pratiques existantes, entre ajustement à la marge et remise en cause radicale, en fonction des « solutions » techniques mises en œuvre ;
- les formes d'inégalité, voire de « fracture » énergétique induites par tel ou tel choix collectif ;
- les formes possibles ou souhaitables de différenciation sociale ou socio-spatiale des politiques de transition énergétique.

La mise en œuvre du projet VITE ! s'appuiera sur une confrontation continue et organisée entre approches qualitatives et modélisatrices, ainsi que sur des interactions étroites avec un ensemble d'acteurs publics locaux avec lesquels des relations durables de collaboration ont été nouées par les partenaires du projet. Ces interactions avec les acteurs en charge de la définition et/ou de la mise en œuvre des stratégies énergétiques locales garantiront la pertinence des grandes options énergétiques prises en considération et la valorisation sociétale des résultats du projet VITE !

- Projet PRIMEQUAL POLL-EXPO

Politiques publiques, Organisation urbaine et Logistique comme Leviers de l'EXPOSITION

Ce projet propose d'évaluer l'ampleur et les inégalités d'exposition de la population urbaine à la pollution de l'air, en simulant les impacts de différents scénarios urbains. Ces scénarios visent à simuler différentes mesures de politiques publiques (schémas régionaux d'aménagement et politiques climatiques notamment), mais aussi les formes d'organisation urbaine (densité et mixité du tissu, transports de personnes et de marchandises) et la modification des comportements (pratiques de mobilité et de consommation énergétique). Ces scénarios seront mis en œuvre sur une plateforme de modélisation urbaine innovante dédiée, puis analysés. La modélisation permettra de relier la structure urbaine et la demande en transport, les impacts énergétiques et les émissions de polluants qui en résultent ainsi que la qualité de l'air et l'exposition. L'analyse portera également sur l'impact environnemental (concentrations) et sanitaire (exposition) des scénarios et sur les inégalités sociales et environnementales qu'ils génèrent ou favorisent. Les travaux seront appliqués à la région Ile-de-France, avec des points de focalisation sur le Val-de-Marne comme territoire d'expérimentation d'échelle locale avec le soutien du Conseil Général. Un travail de comparaison et d'analyse d'une possible transposabilité des résultats sera mené par la réalisation conjointe de travaux de modélisation sur la ville de Barcelone, avec des partenaires locaux.

3.3. Modélisation des émissions d'aérosols terrigènes pour les régions semi-arides

Ce sous-projet s'inscrit dans le cadre du projet WIND-O-V (WIND erOsion in presence of sparse Vegetation) financé par l'ANR (<https://www6.inra.fr/anr-windov>) et vise à quantifier les émissions d'aérosols terrigènes pour les régions semi-arides.

Les schémas d'émission d'aérosols terrigènes présents dans les modèles climatiques pour prédire le cycle de ces aérosols et leurs impacts locaux à globaux

donnent des prévisions différentes les unes des autres en raison de leur mauvaise représentation des vents et de la végétation proche de la surface. Pour surmonter ces limitations, le projet WIND-O-V tente de développer une nouvelle génération de modèles d'érosion éolienne prédisant la quantité et la composition des aérosols terrigènes émis par les surfaces végétalisées nues et clairsemées, typiques des régions semi-arides.

Pour ce faire, de nouvelles paramétrisations seront mises en place dans le modèle d'érosion éolienne et d'émission d'aérosols terrigènes développé par Marticorena and Bergametti (1995) pour les régions arides et testées à l'échelle régionale grâce au modèle de chimie-transport CHIMERE (Menut et *al.*, 2013). La région modélisée sera le sud de la Tunisie, région pour laquelle nous disposons d'une base de données des caractéristiques de la surface des sols en fonction de leur usage à une résolution horizontale de 10x10 km (Labiadh, 2011). La qualification des développements réalisés sera effectuée en utilisant (i) les mesures d'érosion éolienne acquises au cours d'un précédent projet (LEFE, 2014-2015) ainsi qu'au cours des années 2017 (Dupont et *al.*, 2018) et 2018 dans le projet WIND-O-V, (ii) les données de concentration en PM₁₀ et d'épaisseur optique disponibles sur le site de l'Institut des Régions Arides de Médenine depuis 2013, et (iii) les épaisseurs optiques MODIS. Afin de quantifier l'impact de nouvelles paramétrisations, 5 simulations seront réalisées sur les années 2013 à 2018 :

- 1) une simulation dite de référence avec le modèle CHIMERE dans sa configuration originelle (effectuée sur la demande 2019/2020),
- 2) une simulation incluant l'impact du labour pour les surfaces cultivées (Kardous et *al.*, 2005) (débutée sur la demande 2019/2020),
- 3) une simulation incluant l'impact de la croissance des céréales,
- 4) une simulation incluant à la fois l'impact du labour et l'impact de la croissance des céréales,
- 5) une simulation dans laquelle la distribution en taille du flux d'émission sera forcée par celle mesurée lors des campagnes de terrain.

La mise en place de la nouvelle base de données pour le calcul des flux d'aérosols terrigènes étant en phase de finalisation, nous demandons à nouveau les heures de calcul nécessaires à la réalisation des 5 simulations listées ci-dessus, soit 50 000 heures scalaires.

→ **Heures demandées : 50.000 heures sur skylake**

3.4. Etude des indicateurs d'impact sur la santé

La masse des particules d'un diamètre inférieur à 2,5 µm (PM_{2.5}) a été traditionnellement utilisée comme indicateur de l'impact de la pollution particulaire sur la santé. Néanmoins, il est reconnu que l'impact sanitaire de l'aérosol dépend de sa taille et de sa spéciation chimique. En particulier, des espèces carbonées à fort pouvoir oxydant et certains métaux de transition peuvent exercer ou favoriser un stress oxydant sur les cellules, et entraîner des réactions inflammatoires. Le potentiel oxydant (PO) mesure cette capacité des particules à apporter ou produire des espèces réactives oxydantes. Il peut être caractérisé dans des échantillons d'air ambiant par des tests extra cellulaires, et varie en fonction de la source de l'aérosol.

Le groupe de modélisation du LISA co-développe le modèle de qualité de l'air CHIMERE (Menut et *al.*, 2013 ; Mailler et *al.*, 2017), également utilisé pour la prévision de la qualité de l'air. Le LISA a une grande expérience de simulation des différents polluants dans un contexte de pollution urbaine ou d'échelle régionale/continentale (Zhang et *al.*, 2013 ; Cholakian et *al.*, 2018). Il a entre autres mené des travaux d'évaluation de différents modules d'aérosol organique et d'assimilation de données.

Dans ce contexte, un nouvel axe des travaux de recherche pour les prochaines années consiste à rendre ces simulations les plus pertinentes possibles pour l'évaluation de l'impact de la pollution de l'air sur la santé humaine. En parallèle, le groupe de chimie atmosphérique de l'IGE est à la pointe de l'état de l'art sur la métrique d'intérêt sanitaire du Potentiel Oxydant des aérosols (Weber et *al.*, 2018 ; Weber et *al.*, 2019). Il développe une approche multidisciplinaire aux frontières de la géochimie, de la toxicologie, de l'épidémiologie et de la modélisation visant à valider/invalidier le PO comme une nouvelle métrique de la qualité de l'air.

Dans ce contexte, un stage de Master 2 a eu lieu afin d'initier la modélisation du potentiel oxydant de l'aérosol avec le modèle CHIMERE. Les travaux de l'équipe de l'IGE ont permis d'obtenir expérimentalement des potentiels oxydants (PO) intrinsèques pour différentes sources de l'aérosol (Weber et *al.*, 2018 ; Calas et *al.*, 2019) : trafic routier, chauffage de bois, industrie, poussières, sources secondaires). Il s'agit alors de simuler ces mêmes sources avec le modèle CHIMERE, en utilisant une technique dite de coloration (« taggage »), permettant de quantifier la contribution d'une source à la concentration d'une espèce ou d'une famille chimique (Belis et *al.*, 2019). Ce développement vient d'être inclus dans la version de WRF-CHIMERE. Les premiers tests ont été réalisés sur une simulation de 25 km de résolutions pour le mois en janvier 2014. Un premier calcul de deux indicateurs représentant le Potentiel oxydant a été réalisé. L'étape suivante sera de simuler une année entière avec un nesting sur le France afin d'atteindre des résolutions spatiales plus fines nous permettant de comparer les résultats obtenus à des mesures de terrain.

→ **Heures demandées : 200.000 heures sur rome**

3.5. Simulation des sources de pollution de l'air en Afrique de l'Est

La pollution atmosphérique en Afrique est responsable d'environ 780 000 décès prématurés par an, avec une tendance croissante attendue du au développement économique du continent. Les pays en développement d'Afrique, dont certains affichent des niveaux de pollution de l'air ambiant élevés, manquent souvent des infrastructures nécessaires pour surveiller la pollution de l'air et évaluer l'efficacité des politiques d'atténuation de la pollution. Dans le cadre du projet « Make Our Planet Great Again » « Make Air Quality Great Again » (MAQGA), le lauréat R. Subramanian et son équipe ont déployé un réseau de capteurs à bas cout (LCS low cost sensors) mesurant plusieurs polluants clés (PM_{2.5}, NO₂, O₃, SO₂, CO) dans

plusieurs villes africaines (Nairobi, Kigali, Kampala, Abidjan, Accra, Niamey, Le Caire, Johannesburg). En liaison avec ce programme d'observations, l'objectif du projet est la modélisation de la qualité de l'air en Afrique de l'Est, en particulier à Nairobi, Kigali et Kampala, en utilisant le modèle CHIMERE.

Le premier objectif est de simuler numériquement la qualité de l'air pour identifier les principaux contributeurs à la pollution atmosphérique (trafic, combustions résidentiels, feux de biomasse, poussières désertiques, ...). Un deuxième objectif est de réaliser des simulations à long terme (décennales) pour estimer la future qualité de l'air sous différents scénarios de développement économique et pour des scénarios de mitigation.

Une configuration appropriée du modèle CHIMERE régional chimie-transport (www.lmd.polytechnique.fr/chimere/) sera développée et mise en œuvre. Une attention particulière sera accordée à l'évaluation et au raffinement de bases de données sur les émissions telles que DICE (<http://maraisresearchgroup.co.uk/dice-africa-data.html>). Pour les simulations urbaines, une réduction d'échelle supplémentaire pour atteindre la résolution en km sera effectuée à l'aide de traceurs tel que la densité de la population ou du trafic. Les émissions de feu et de poussières sont déjà incluses dans CHIMERE. L'évaluation du modèle CHIMERE sera effectuée avec les mesures des principaux polluants obtenues à partir du nouveau réseau LCS mis en place au sein du projet et avec des observations satellitaires (MODIS AOD, TROPOMI NO₂, etc.).

→ **Heures demandées : 200.000 heures sur rome**

3.6. Interaction entre émissions biogéniques et anthropiques

L'aérosol organique demeure l'une des composantes de l'aérosol les plus difficiles à simuler, compte tenu de la multitude de molécules et des processus de formation et d'évolution en jeu. Les mesures très détaillées de précurseurs d'aérosols (terpènes), d'aérosols organiques secondaires (AOS) et d'oxydants (OH, O₃, NO₃) obtenues lors de la campagne Landex (LANDes EXperiment, en étés 2017 et 2018) dans l'environnement assez homogène des Landes fournissent un ensemble de données complet et très original pour évaluer les modules d'aérosols organiques dans les modèles de transport chimique (CTM, ici CHIMERE). Dans la continuité du travail entamé dans le projet CHARMEX, cette évaluation se fera ici pour une région boisée avec des fortes émissions biogéniques de terpènes. Nous prendrons soin d'inclure certains cycles réactionnels couplant des composés d'origines biogénique et anthropique tels que la réaction de terpènes avec le radical NO₃, formé à partir du NO₂ et de l'ozone, et conduisant à une formation rapide d'AOS pendant la nuit. A part de la difficulté de simulation d'aérosol organique, les enjeux de changement futur, y compris climatiques, pour cette région sont potentiellement importants aussi, puisque les changements d'utilisation du sol, du type d'arbres dans la forêt et des conditions météorologiques sont très probables pour le futur de cette région. Les effets de ces changements sur la qualité de l'air de la forêt des Landes seront étudiés par des simulations de scénarios futurs en utilisant les différents forçages climatiques.

Pour la région Landaise, trois domaines sont utilisés : un domaine continental (25 km de résolution horizontale), domaine français (résolution de 5 km) et un domaine concentré sur la forêt des Landes avec une résolution d'1 km. Pour le moment, la

période des simulations reste restreinte à 40 jours d'été en 2017. Plusieurs séries de simulations météorologiques avec des paramétrisations différentes ont été effectuées, montrant qu'une des séries correspondait mieux aux mesures effectuées en 2017 pour la station à Bilos, Salles. Une série préliminaire de simulations avec le schéma standard pour la simulation d'aérosols organiques du modèle du chimie-transport CHIMERE a été effectuée, montrant la nécessité de modification des émissions biogéniques et des entrées d'utilisation du sol dans le modèle. Les tests avec les modifications pour ces deux paramètres ont été effectués, chaque fois en comparant avec les mesures. Une modification de la diffusion verticale dans la forêt (effet canopée) a également été mise en place. A la fin de cette étape, une configuration du modèle avec une météorologie, une utilisation du sol, des émissions biogéniques et anthropogéniques adaptés pour la forêt des Landes et en prenant en compte les modifications de la diffusion verticale a été mis en place. En conclusion de cette partie, la dernière configuration du modèle se montre bien supérieure à la configuration standard. Cette configuration adaptée est utilisée pour effectuer des études de l'interaction du transport, en notamment de l'effet de la brise de mer et des processus de formation d'aérosol dans la forêt des Landes. Un article décrivant ces travaux est en cours de rédaction.

L'étude sur l'effet des différents schémas de simulation d'AOS est en cours. Pour cet effet, nous avons effectué des simulations avec 3 schémas de simulation d'AOS avec toutes les modifications implémentées dans le modèle (expliqué ci-dessus). Un 4^{ème} schéma devra être testé. Les tests de sensibilité pour les différents schémas au niveau de consommation des oxydants (OH, O₃, NO₃) dans les schémas différents sont planifiés aussi. Cette partie va nous permettre de quantifier les voies de formation de l'AOS en fonction des oxydants et de lieu de formation (au sein ou à l'extérieure de la canopée). Le comportement des différents schémas par rapport à ces effets sera évalué.

La configuration optimale du modèle avec le schéma le plus approprié, notamment pour la simulation d'aérosol organique secondaire, sera utilisée pour simuler l'effet des différents forçages sur la composition de l'atmosphère régionale à l'échelle de 2050 à 2100. Différentes hypothèses sur le changement d'utilisation du sol, du type et de la densité des arbres dans la forêt sous les différents scénarios climatiques futurs seront effectuées pour cette région pour analyser les effets de chacun de ces paramètres sur la qualité de l'air régionale. Plusieurs années (au moins 5) de simulations pour chaque hypothèse sont nécessaires pour obtenir une étude statistiquement significative. Pour économiser du temps de calcul, ces simulations climatiques seront effectuées sur les grilles de résolution horizontale de 5 et 25 km (et non de 1 km). 5 séries de simulations (chacun pour 5 ans) sont envisagées : 4 séries de scénarios futurs prenant en compte les différents cas de changement d'utilisation du sol, et une série des simulations historique.

→ Heures demandées : 400.000 heures sur rome

4 Méthode

4.1 Méthode numérique

La présente demande porte donc largement sur des simulations réalisées avec le modèle CHIMERE/WRF mais également sur l'utilisation de codes développés au LISA (PYVAR-CHIMERE, CHIMERE-EnKF, un code d'inversion des données satellitaires de l'instrument IASI et un code multi-agents d'émissions de polluants atmosphériques et de GES à l'échelle urbaine OLYMPUS).

4.1.1 Le modèle CHIMERE

CHIMERE (Menut et *al.*, 2013, Mailler et *al.* 2016) est un modèle multi-échelle de chimie-transport atmosphérique qui a été conçu pour des prévisions journalières des principaux polluants, des espèces gazeuses et particulaires, ainsi que pour des simulations à long-terme. Il est continuellement développé par un consortium de trois laboratoires (LMD, INERIS et LISA). CHIMERE peut être utilisé à l'échelle spatiale de l'urbain (résolution de 1-5 km) à régionale (jusqu'à 100 km de résolution). Le modèle permet des simulations imbriquées permettant de prendre en compte l'impact des processus à l'échelle plus large sur un domaine concerné. CHIMERE a été labellisé comme un outil national du CNRS en 2007, et il est utilisé pour des prévisions opérationnelles en France et en Europe par le projet Prev'Air (www2.prevoir.org) et par des AASQA (Associations Agréées de Surveillance de la Qualité de l'Air).

Le code est écrit entièrement en Fortran90 et les scripts de lancement en shell (avec utilisation de awk pour certaines données d'entrées). Différents compilateurs peuvent donc être utilisés : g95, gfortran, ifort... La plupart des fichiers d'entrées et de sorties sont au format netcdf et au format grib pour les données d'entrée issues du modèle météorologique ECMWF.

Le modèle est parallélisé en découpant le maillage en sous domaines géographiques. Chaque sous domaine est traité par un processeur qui échange des données via la librairie MPI aux limites avec les autres processeurs. Un processeur maître supplémentaire est utilisé pour gérer les données d'entrées et l'écriture des fichiers de sorties.

Le modèle CHIMERE est déjà utilisé dans plusieurs projets GENCI et dans de nombreuses configurations et sa scalabilité reste très bonne (Colette et *al.*, 2014). Le code a été installé sur cette machine depuis plusieurs années par l'INERIS puis le LSCE, le LISA et plus récemment par le LMD et est donc largement utilisé sur les machines du TGCC par plusieurs utilisateurs.

4.1.2 Le modèle PYVAR-CHIMERE – évolution vers le CIF

La méthode inverse variationnelle utilisée dans ce projet pour inverser les sources de polluants est basée sur le système d'inversion PYVAR-CHIMERE (Fortems-Cheiney et *al.*, soumis). Lors de l'inversion, on cherche à minimiser ϵ , l'écart entre les concentrations simulées par le modèle de chimie-transport et les observations. L'expression d'un problème inverse bayésien est la recherche de la distribution spatiale et temporelle des flux qui est la plus probable compte tenu des flux a priori, des observations, du modèle utilisé et des erreurs associées, et nécessite la minimisation d'une fonction de coût.

Le système d'inversion est basé sur le modèle CHIMERE (code direct, code tangent-linéaire et code adjoint, ce dernier ayant été développé en collaboration avec le LSCE). Ce code est donc écrit en Fortran90 et les scripts de lancement en shell (avec utilisation de awk pour certaines données d'entrées). Une interface en PYTHON est également utilisée notamment pour la minimisation de la fonction de coût. La plupart des fichiers d'entrées et de sorties sont au format netcdf.

Comme CHIMERE, le système d'inversion est parallélisé en découpant le maillage en sous domaines géographiques. Chaque sous domaine est traité par un processeur qui échange des données via la librairie MPI aux limites avec les autres processeurs. Un processeur maître supplémentaire est utilisé pour gérer les données d'entrées et l'écriture des fichiers de sorties.

Les limites de cet outil ont été mises en évidence lors du projet PoIEAsia et elles ont été annoncées dans la partie bilan 2019. Pour pallier les nombreux problèmes de convergence et pour plus de flexibilité, nous avons décidé conjointement avec le LSCE de migrer vers un nouvel outil de modélisation inverse, toujours basé sur le modèle de chimie-transport CHIMERE, mais beaucoup plus flexible, l'outil CIF (Community Inversion Framework – développé au LSCE dans le cadre du projet européen VERIFY). L'outil a été porté sur les machines du TGCC au cours des 6 derniers mois mais avec quelques ralentissements compte tenu de la crise sanitaire.

Pas très différent d'un point de vue technique par rapport au PYVAR-CHIMERE (on utilise toujours fortran90 pour CHIMERE et python3 – petite évolution pour l'enveloppe d'inversion) ce nouvel outil est plus versatile, avec un nombre infini de configurations possible, faciles à tester et une optimisation en terme de temps de calcul et transfère d'informations/fichiers entre les diverses parties. Le format des fichiers reste inchangé.

4.1.3 Le modèle CHIMERE-EnKF

Le principe général de l'assimilation de données en chimie atmosphérique consiste à utiliser les observations in-situ et/ou satellitaires pour contraindre les champs simulés par un modèle de chimie-transport (champs qui peuvent être entachés d'erreurs) à rester proche de la réalité des observations.

Le système CHIMERE-EnKF (Coman *et al.*, 2012, Gaubert *et al.*, 2014), développé au LISA, combine une méthode d'assimilation de données : le Filtre de Kalman d'Ensemble avec un modèle de chimie-transport, dans notre cas le modèle CHIMERE. L'application du filtre de Kalman étendu classique étant trop coûteuse en temps de calcul pour une modélisation 3D, il est nécessaire de simplifier le calcul de la matrice de covariance de l'erreur du modèle nécessaire dans l'algorithme d'assimilation. Dans le cas du Filtre de Kalman d'Ensemble, cette matrice est calculée en utilisant une approche de type Monte-Carlo (Evensen, 1994); l'idée principale est d'utiliser un ensemble d'estimations d'état (obtenues en perturbant le champ d'ozone par exemple), à la place d'une seule, et de calculer la matrice de covariance d'erreur sur cet ensemble, en sachant que la taille de cet ensemble peut rester assez faible selon nos tests de sensibilité de l'ordre de 40 membres. On obtient de cette façon un ensemble d'états du modèle qui évoluent dans le temps. La « meilleure » estimation est calculée comme la moyenne de l'ensemble. A chaque pas de temps, (dans notre cas il s'agit d'une échelle horaire), l'ensemble est « corrigé » en utilisant l'ensemble d'observations disponibles à ce moment-là par un calcul matriciel assez complexe, produisant ainsi de champs « analysés ».

Comme le modèle CHIMERE, CHIMERE-EnKF est écrit entièrement en Fortran90 et les scripts de lancement en shell. Comme compilateur on utilise ifort et les fichiers d'entrées et de sorties sont au format netcdf. Pour les inversions matricielles et les perturbations des champs on utilise des bibliothèques comme LAPACK, BLAS et FFTW (<http://fftw.org/>).

4.1.4 Le modèle d'inversion des données IASI

Pour traiter les données satellitaire IASI et inverser les profils d'ozone, nous utilisons le code de transfert radiatif KOPRA et son module d'inversion KOPRAFIT [9] http://www.imk-asf.kit.edu/downloads/sat/kopra_docu_part01.pdf.

i) Code de transfert radiatif KOPRA

Le code de transfert radiatif KOPRA a été développé par l'IMK (Institut für Meteorologie und Klimaforschung, Karlsruhe, Allemagne). Il permet de résoudre l'équation du transfert radiatif dans le domaine spectral de l'infrarouge pour des instruments de type spectromètres et ainsi de calculer la radiance vue par ce type d'instrument pour différentes géométries d'observation (limbe, nadir). Pour le calcul du transfert radiatif, l'atmosphère est découpée en couches concentriques (100m d'épaisseur) dites homogènes, c'est-à-dire dans lesquels température, pression et concentration de chaque espèce moléculaire présente dans la couche sont considérées constantes. Les processus d'interactions matière-rayonnement (absorption, émission etc) sont résolus et la radiance à la sortie de la couche considérée est calculée en fonction du trajet optique dans cette même couche. Par une procédure itérative la radiance au niveau de l'observateur (le satellite) est ainsi calculée et convoluée par les caractéristiques instrumentales (résolution, bruit etc).

Les entrées nécessaires pour le code sont :

- Les paramètres atmosphériques : pression, température et concentrations en fonction de l'altitude
- Les paramètres géométriques : position relative de la source et de l'observateur afin de calculer le trajet optique du rayonnement
- Les paramètres instrumentaux : région spectrale, résolution et échantillonnage spectral, fonction d'appareil, bruit radiométrique, etc.
- Les paramètres spectroscopiques : position, intensité, largeur des raies pour calculer l'interaction matière-rayonnement.

En sortie du code, nous obtenons un spectre observé en radiance pour la région spectrale sélectionnée.

ii) Code d'inversion KOPRAFIT

Le code d'inversion KOPRAFIT permet via la minimisation de la distance entre le spectre observé et le spectre calculé (par KOPRA) de restituer la concentration de l'espèce cible en fonction de l'altitude. Le problème étant non linéaire, une procédure itérative est nécessaire.

Ces codes sont écrits en langage FORTRAN. Ils sont compilables avec un des compilateurs suivants (et leurs bibliothèques associées) : ifort, g95, SUN fortran. Nous disposons également d'un exécutable statique du code KOPRAFIT. Le temps de calcul estimé pour simuler une observation est d'environ 1 min. Dans le cas du traitement satellitaire, le nombre de tâches effectuées est égale au nombre d'observations à analyser. L'exécution des tâches et les interactions entre KOPRA et

KOPRAFIT sont gérées par des scripts shell qui permettent de lancer le calcul sur plusieurs processeurs en parallèle.

4.1.5 Le modèle OLYMPUS

Le modèle OLYMPUS est un modèle de modélisation numérique d'émissions de polluants atmosphériques et de gaz à effet de serre à l'échelle urbaine. Ce modèle a été développé pour la simulation de scénarios de planification urbaine. Le développement d'OLYMPUS est le fruit d'un effort d'une thèse au LISA (Elessa Etuman, 2017) ainsi que d'un projet ANR (<https://anr.fr/Projet-ANR-14-CE22-0013>) pour construire une nouvelle génération de modèle d'émissions de polluants atmosphériques à l'échelle de l'individu et faire progresser la compréhension et la prévision des impacts de politiques publiques sur les émissions de polluants en zone urbaines. OLYMPUS convient à un large éventail d'applications allant de la simulation à l'échelle d'un quartier à l'échelle de régions. Les applications d'OLYMPUS comprennent des simulations réelles sur des territoires tels que l'Île-de-France ou encore les Pays de la Loire et Barcelone, du prospectif à 10-30 ans, des études de paramétrisation et des simulations idéalisées de formes urbaines. Les principales composantes du modèle sont illustrées ci-après (Figure 1).

Structure/Modèles

Un ensemble de différents sous-modèles sont inclus dans la structure d'OLYMPUS pour saisir les l'interaction des agents (ménages, particuliers) leurs choix de mobilité et les émissions de polluants associées (Elessa Etuman & Coll, 2018). La liste de ces modèles/modules comprend :

- Modèles de génération de population synthétique : Modélisation d'une population d'agents synthétiques aux attributs sociodémographiques semblables à ceux de la population d'une agglomération.
- Modèle d'accessibilité locale et régionale : Détermine la valeur d'accessibilité de chaque quartier de la zone d'étude, en tenant compte de l'accessibilité des résidents et les employés vers leur destination (emploi, école, loisirs, achats, etc.)
- Modèles de demande de déplacements basés sur l'activité : Les modèles basés sur les activités sont basés sur des théories comportementales concernant la façon dont les gens prennent des décisions sur la participation à des activités en présence de contraintes, y compris des décisions sur le lieu de participation aux activités, le moment de la participation aux activités et la façon de se rendre à ces activités.
- Modèles mésoscopiques de trafic routier : Modélisation des flux de déplacements par catégories d'usagers, description des conditions de fonctionnement du réseau étudié (temps de parcours, vitesses, charges, niveau de saturation...)
- Demande en énergie des bâtiments : Modèles statistiques de relation entre l'utilisation finale et la consommation d'énergie, pour déterminer la consommation énergétique de bâtiments (résidentiels, tertiaire, institutionnel...).
- Modèles d'émissions de polluants atmosphériques : Quantification des émissions dues au trafic routier, à la combustion dans le secteur résidentiel/tertiaire. Intégration de paramètres clés tel que la vitesse, la pente, la flotte, la température.

Pour une métropole comme Paris, le modèle définit près de 12 millions d'agents de population synthétique et pour chaque agent, OLYMPUS pour générer la demande de mobilité journalière soit près de 40 millions de déplacements et 15 millions de déplacements pour le transport individuel motorisé. Le modèle intègre un calcul d'itinéraire pour chaque déplacement basé sur la théorie des graphes et l'algorithme de Dijkstra soit près de 2 millions de brins de routes. Les simulations de flux de trafic produisent des informations sur l'emplacement et le type d'activité de chaque agent à une heure précise. Chaque agent génère pour chacune de ses actions (début/fin d'une activité, entrée/sortie d'un lien) un événement localisé temporellement et spatialement. Le modèle intègre également un processus itératif d'optimisation de la mobilité (Wardrop & Whitehead, 1952). En fonction des trajectoires de déplacements et de l'état du réseau routier, le modèle produit des émissions de polluants qui seront utilisés dans le modèle de qualité de l'air CHIMERE. Le modèle est calibré sur la base de données historiques. La Figure 1 montre comment les sous-modèles décrits précédemment interagissent en tant que parties du système OLYMPUS.

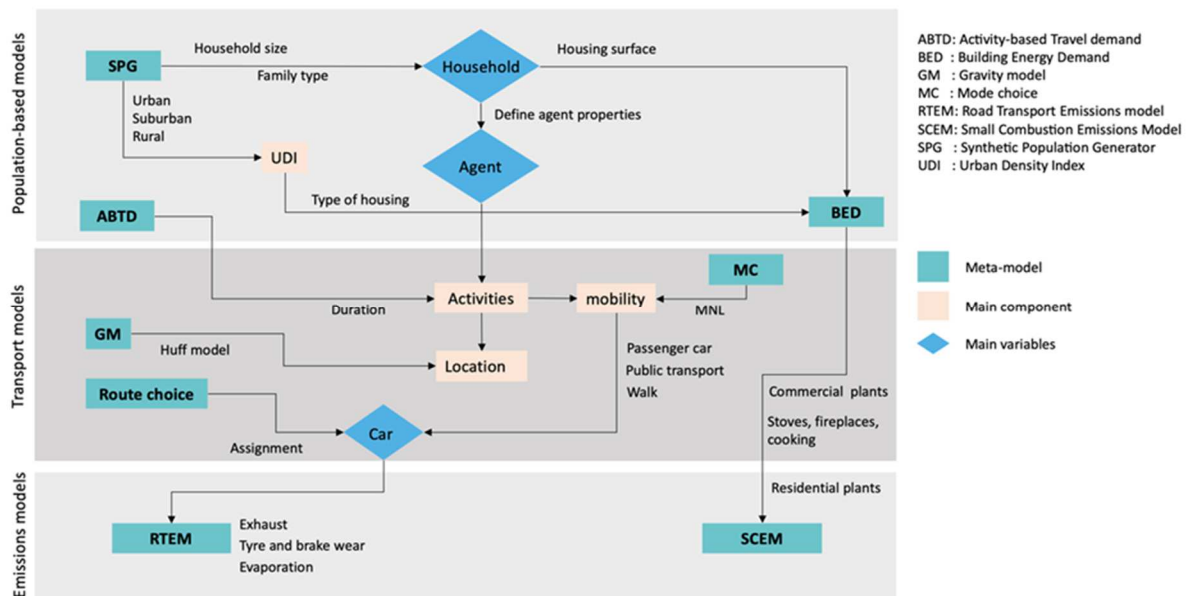


Figure 1 : Diagramme de fonctionnement de la plateforme de modélisation OLYMPUS

4.2 Justification de l'emploi de la machine demandée

Le Tableau 8 ci-dessous rappelle les caractéristiques des simulations à réaliser pour chaque projet, et le coût correspondant en heures CPU.

Thématique/Projet	Objectifs	Simulation	Coût en kh irene skylake	Coût en kh irene rome
Etude de la pollution aux échelles continentales	Modélisation inverse des émissions des précurseurs de polluants photo-oxydants et particulaires	PoIEASIA ARGONAUT AMP'AIR	25 75 30	
	Modélisation atmosphérique : déterminants de la tendance d'ozone	Chine	200	
	Reprocessing IASI	2020 MetopA Asie 2020 MeropB Asie 2018-2020 MetopC Asie 2020 MetopA Europe 2013-2020 MetopB Europe 2018-2020 Metop C Europe		25 25 75 25 200 75
	Assimilation IASI	Chine	25	
Scenarios urbains	Production, analyse et exploitation de scénarios énergétiques et d'aménagement urbains	Ile de France 2030 Villes compactes et étalées Transport de marchandises Pollution de proximité Analyse socio-économique	960 320 300 300	480
Modélisation des émissions d'aérosols terrigènes	Tester des nouvelles paramétrisations d'émissions de DUST	Tunisie	50	
Etude des indicateurs d'impact sur la santé	Simulation du potentiel oxydant	1 an simulation Europe/France		200
Simulation des sources de pollution de l'air en Afrique de l'Est	Mise en place d'une configuration de CHIMERE sur l'Est de l'Afrique	1 an de simulation sur l'Afrique		200
Interaction entre émissions biogéniques et anthropiques	Etudier la qualité de l'air future de la forêt des Landes	4 séries de scenario futurs de 5 ans		400
Total			2285	1705

Tableau 8 : Justification des heures de calcul demandées

5. Bibliographie

Anenberg, S. C., Henze, D. K., Tinney, V., Kinney, P. L., Raich, W., Fann, N., Malley, C. S., Roman, H., Lamsal, L., Duncan, B., Martin, R. V., van Donkelaar, A., Brauer, M., Doherty, R., Jonson, J. E., Davila, Y., Sudo, K., Kuylensstierna, J. C. I., 2018. Estimates of the global burden of ambient PM_{2.5}, ozone, and NO₂ on asthma incidence and emergency room visits. *Environmental Health Perspectives*, 126, 10 . DOI : 10.1289/EHP3766.

C.A. Belis, D. Pernigotti, G. Pirovano, O. Favez, J.L. Jaffrezo, J. Kuenen, H. Denier van Der Gon, M. Reizer, V. Riffault, L.Y. Alleman, M. Almeida, F. Amato, A. Angyal, G. Argyropoulos, S. Bande, I. Beslic, J.-L. Besombes, M.C. Bove, P. Brotto, G. Calori, D. Cesari, C. Colombi, D. Contini, G. De Gennaro, A. Di Gilio, E. Diapouli, I. El Haddad, H. Elbern, K. Eleftheriadis, J. Ferreira, M. Garcia Vivanco, S. Gilardoni, B. Golly, S. Hellebust, P.K. Hopke, Y. Izadmanesh, H. Jorquera, K. Krajsek, R. Kranenburg, P. Lazzeri, F. Lenartz, F. Lucarelli, K. Maciejewska, A. Manders, M. Manousakas, M. Masiol, M. Mircea, D. Mooibroek, S. Nava, D. Oliveira, M. Paglione, M. Pandolfi, M. Perrone, E. Petralia, A. Pietrodangelo, S. Pilon, P. Pokorna, P. Prati, D. Salameh, C. Samara, L. Samek, D. Saraga, S. Sauvage, M. Schaap, F. Scotto, K. Sega, G. Siour, R. Tauler, G. Valli, R. Vecchi, E. Venturini, M. Vestenius, A. Waked and E. Yubero: Evaluation of receptor and chemical transport models for PM₁₀ source apportionment, *Atmospheric Environment: X*, 5, 2019.

Bouscasse, H., Bonnel, P., 2016. Socio-psychological determinants of mode choice habits.

Calas, A.; Uzu, G, Besombes, J.; Weber S; Charron, A.; Martins, J.; Albinet, A.; Favez, O.; Brulfert, G.; Meshba, B.; Redaelli, M.; and Jaffrezo, J., Seasonal variations and chemical predictors of Oxidative Potential of PM measured with 2 different methods, for 7 urban French sites, *Atmosphere*, 2019.

Cholakian, A., Beekmann, M., Colette, A., Coll, I., Siour, G., Sciare, J., Marchand, N., Couvidat, F., Pey, J., Gros, V., Sauvage, S., Michoud, V., Sellegri, K., Colomb, A., Sartelet, K., Langley DeWitt, H., Elser, M., Prévot, A. S. H., Szidat, S., Dulac, F.: Simulation of fine organic aerosols in the western Mediterranean area during the ChArMEx 2013 summer campaign, *Atmos. Chem. Phys.*, 18, 7287-7312, 2018.

Colette, A., B. Bessagnet, F. Meleux, E. Terrenoire, and L. Rouil, *Frontiers in air quality modelling, Geoscientific Model Development*, 7, 1, 203-210, 2014.

Coman, A. G. Foret, M. Beekmann, M. Eremenko, G. Dufour, B. Gaubert, A. Ung, C. Schmechtig, J.-M. Flaud, and G. Bergametti, Assimilation of IASI partial tropospheric columns with an Ensemble Kalman Filter over Europe, *Atmos. Chem. Phys.*, 12, 2513–2532, 2012.

Cuesta, J., Y. Kanaya, M. Takigawa, G. Dufour, M. Eremenko, G. Foret, K. Miyazaki, and M. Beekmann, Transboundary ozone pollution across East Asia: daily evolution and photochemical production analysed by IASI+GOME2 multispectral satellite observations and models, *Atmos. Chem. Phys.*, 18, 9499-9525, <https://doi.org/10.5194/acp-18-9499-2018>, 2018.

De Witte, A., Hollevoet, J., Dobruszkes, F., Hubert, M., Macharis, C., 2013. Linking modal choice to motility: A comprehensive review. *Transportation Research Part A: Policy and Practice*, 49, : 329-341. DOI : 10.1016/j.tra.2013.01.009.

Ding, C., Wang, D., Liu, C., Zhang, Y., Yang, J., 2017. Exploring the influence of built environment on travel mode choice considering the mediating effects of car ownership and travel distance. *Transportation Research Part A: Policy and Practice*, 100, : 65-80. DOI : 10.1016/j.tra.2017.04.008.

Dufour G., M. Eremenko, J. Cuesta, C. Doche, G. Foret, M. Beekmann, A. Cheiney, Y. Wang, E. Cai, Y. Liu, M. Takigawa, Y. Kanaya, J-M. Flaud, Springtime daily variations in lower-tropospheric ozone over east Asia: the role of cyclonic activity and pollution as observed from space with IASI, *Atmos. Chem. Phys.*, 15, 10839-1085, doi:10.5194/acp-15-10839-2015, 2015.

Dufour, G., M. Eremenko, M. Beekmann, J. Cuesta, G. Foret, A. Fortems-Cheiney, M. Lachâtre, W. Lin, Y. Liu, X. Xu, and Y. Zhang, Lower tropospheric ozone over the North China Plain: variability and trends revealed by IASI satellite observations for 2008–2016, *Atmos. Chem. Phys.*, 18, 16439-16459, 2018.

Dupont S., J.-L. Rajot, M. Labiadh, G. Bergametti, S. Alfaro, C. Bouet, R. Fernandes, B. Khalfallah, E. Lamaud, B. Marticorena, J.-M. Bonnefond, S. Chevaillier, D. Garrigou, T. Henry-des-Tureaux, S. Sekrafi, and P. Zapf (2018), Aerodynamic parameters over an eroding bare surface: reconciliation of the Law-of-the-wall and Eddy-Covariance determinations. *Journal of Geophysical Research - Atmospheres*, 123(9), 4 490-4 508, 2018.

Elessa Etuman, A., 2017. Analyse des impacts des politiques énergétiques et de déplacements urbains sur la pollution de l'air : modélisation intégrée pour un espace urbain soutenable. These de doctorat, Paris Est.

Elessa Etuman, A. and I. Coll, OLYMPUS v1.0: development of an integrated air pollutant and GHG urban emissions model – methodology and calibration over greater Paris, *Geosci. Model Dev.*, 11, 5085–5111, <https://doi.org/10.5194/gmd-11-5085-2018>, 2018.

Ewing, R., Cervero, R., 2001. Travel and the Built Environment: A Synthesis. *Transportation Research Record*, 1780, 1 : 87-114. DOI : 10.3141/1780-10.

Evensen, G., Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using Monte Carlo methods to forecast error statistics, *J. Geophys. Res.*, (99), pp 10,143-10,162, 1994.

Fortems-Cheiney A., G. Dufour, L. Hamaoui-Laguel, G. Foret, G. Siour, M. Van Damme, F. Meleux, P.-F. Coheur, C. Clerbaux, M. Wallasch, V. Novak, and M. Beekmann, Un-accounted variability in NH₃ agricultural sources detected by IASI contributing to European spring haze episode, *Geophys. Res. Lett.*, 43, 2016.

Fortems-Cheiney, A., Pison, I., Dufour, G., Broquet, G., Berchet, A., Potier, E., Coman, A., Siour, G., and Costantino, L.: Variational regional inverse modeling of reactive species emissions with PYVAR-CHIMERE, *Geosci. Model Dev. Discuss.*, <https://doi.org/10.5194/gmd-2019-186>, in review, 2019.

Gaubert, B., A. Coman, G. Foret, F. Meleux, A. Ung, L. Rouil, A. Ionescu, Y. Candau, and M. Beekmann, Regional scale ozone data assimilation using an ensemble Kalman filter and the CHIMERE chemical transport model, *Geosci. Model Dev.*, 7, 283–302, 2014.

Gaudel, A., O. R. Cooper, G. Ancellet, B. Barret, A. Boynard, J. P. Burrows, C. Clerbaux, P. -F. Coheur, J. Cuesta, E. Cuevas, S. Doniki, G. Dufour, F. Ebojie, G. Foret, O. Garcia, M. J. Granados Muños, J. W. Hannigan, F. Hase, G. Huang, B. Hassler, D. Hurtmans, D. Jaffe, N. Jones, P. Kalabokas, B. Kerridge, S. S. Kulawik, B. Latter, T. Leblanc, E. Le Flochmoën, W. Lin, J. Liu, X. Liu, E. Mahieu, A. McClure-Begley, J. L. Neu, M. Osman, M. Palm, H. Petetin, I. Petropavlovskikh, R. Querel, N. Rappoe, A. Rozanov, M. G. Schultz, J. Schwab, R. Siddans, D. Smale, M. Steinbacher, H. Tanimoto, D. W. Tarasick, V. Thouret, A. M. Thompson, T. Trickl, E. Weatherhead, C. Wespes, H. M. Worden, C. Vigouroux, X. Xu, G. Zeng and J. Ziemke, Tropospheric Ozone Assessment Report: Present-day distribution and trends of tropospheric ozone relevant to climate and global atmospheric chemistry model evaluation, *Elem Sci Anth*, 6(1), p.39, 2018.

Hoek, G., Krishnan, R. M., Beelen, R., Peters, A., Ostro, B., Brunekreef, B., Kaufman, J. D., 2013. Long-term air pollution exposure and cardio-respiratory mortality: A review. *Environmental Health: A Global Access Science Source*, 12, 1 . DOI : 10.1186/1476-069X-12-43.

Kardous M., G. Bergametti, and B. Marticorena, Wind tunnel experiments on the effects of tillage ridge features on wind erosion horizontal fluxes, *Ann. Geophys.*, 23, 3 195-3 206, 2005.

Khreis, H., Nieuwenhuijsen, M. J., 2017. Traffic-related air pollution and childhood asthma: Recent advances and remaining gaps in the exposure assessment methods. *MDPI AG*. DOI : 10.3390/ijerph14030312.

Labiadh M. T., Quantification de l'érosion éolienne sur des surfaces anthropisées: simulations des flux en masse à l'échelle des zones arides tunisiennes, Thèse de doctorat de l'Université Paris Diderot, 2011.

Loomis, D., Grosse, Y., Lauby-Secretan, B., Ghissassi, F. El, Bouvard, V., Benbrahim-Tallaa, L., Guha, N., Baan, R., Mattock, H., Straif, K., 2013. The carcinogenicity of outdoor air pollution. *The Lancet Oncology*, 14, 13 : 1262-1263. DOI : 10.1016/S1470-2045(13)70487-X.

Mailler, S., L. Menut, D. Khvorostyanov, M. Valari, F. Couvidat, G. Siour, S. Turquety, R. Briant, P. Tuccella, B. Bessagnet, A. Colette, and F. Meleux, CHIMERE-2017: from urban to hemispheric chemistry-transport modeling, *Geosci. Model Dev.*, 10, 2397-2423, 2017.

Marticorena B., and Bergametti G.: Modeling the atmospheric dust cycle: 1. Design of a soil-derived dust emission scheme, *J. Geophys. Res.*, 100(D8), 16 415-16 430, 1995.

Menut, L., B. Bessagnet, D. Khvorostyanov, M. Beekmann, N. Blond, A. Colette, I. Coll, G. Curci, G. Foret, A. Hodzic, S. Mailler, F. Meleux, J.-L. Monge, I. Pison, G. Siour, S. Turquety, M. Valari, R. Vautard, and M. G. Vivanco, CHIMERE 2013: a model for regional atmospheric composition modeling, *Geosci. Model Dev.*, 6, 981–1028, 2013.

Ntziachristos, L., D. Gkatzoflias, C. Kouridis, and Z. Samaras, COPERT: A European road transport emission inventory model, In: Athanasiadis I.N., Rizzoli A.E., Mitkas P.A., Gómez J.M. (eds) Information Technologies in Environmental Engineering. Environmental Science and Engineering. Springer, Berlin, Heidelberg pp. 491-504, 2009.

Schoenau, M., Müller, M., 2017. What affects our urban travel behavior? A GPS-based evaluation of internal and external determinants of sustainable mobility in Stuttgart (Germany). *Transportation Research Part F: Traffic Psychology and Behaviour*, 48, : 61-73. DOI : 10.1016/j.trf.2017.05.004.

Tarasick, D., I. Galbally, G. Ancellet, T. LeBlanc, T.J. Wallington, J. Ziemke, M. Steinbacher, J. Stähelin, C. Vigouroux, J. Hannigan, O. García, G. Foret, P. Zanis, X. Liu, E. Weatherhead, I. Petropavlovskikh, H. Worden, M. Osman, J. Liu, M. Lin, O.R. Cooper, M. Schultz, Maria Granados-Muñoz, A.M. Thompson, S.J. Oltmans, J. Cuesta, G. Dufour, V. Thouret, B. Hassler and T. Trickl, Tropospheric Ozone Assessment Report: Tropospheric ozone observations – How well do we know tropospheric ozone changes?, *Elementa: Science of the Anthropocene*, accepted, 2019.

Thompson, T. M., Saari, R. K., Selin, N. E., 2014. Air quality resolution for health impact assessment: influence of regional characteristics. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 14, 2 : 969-978. DOI : 10/f5r325.

Van Acker, V., Van Wee, B., Witlox, F., 2010. When Transport Geography Meets Social Psychology: Toward a Conceptual Model of Travel Behaviour. *Transport Reviews*, 30, 2 : 219-240. DOI : 10/cf9w7c.

Wardrop, J. G., Whitehead, J. I., 1952. Correspondence. Some theoretical aspects of road traffic research. *Proceedings of the Institution of Civil Engineers*, 1, 5 : 767-768. DOI : 10/frrdcn.

Weber, S.; Uzu, G.; Calas, A.; Chevrier, F.; Besombes, J. L.; Charron, A.; Salameh, D.; Ježek, I.; Močnik, G.; Jaffrezo, J. L., An apportionment method for the oxidative potential of atmospheric particulate matter sources: application to a one-year study in Chamonix, France. *Atmos. Chem. Phys.*, 18 (13), 9617-9629, 2018.

Weber, S.; Salameh, D.; Albinet, A.; Alleman, L.Y.; Waked, A.; Besombes, J.-L.; Jacob, V.; Guillaud, G.; Meshbah, B.; Rocq, B.; Hulin, A.; Dominik-Sègue, M.; Chrétien, E.; Jaffrezo, J.-L.; Favez, O. Comparison of PM10 Sources Profiles at 15 French Sites Using a Harmonized Constrained Positive Matrix Factorization Approach. *Atmosphere* 2019, 10, 310.

Q.J. Zhang, M. Beekmann, F. Drewnick, F. Freutel, J. Schneider, M. Crippa, A. Prevot, U. Baltensperger, L. Poulain, A. Wiedensohler, J. Sciare, V. Gros, A. Borbon, A. Colomb, V. Michoud, J-F. Doussin, H. A. C. Denier van dr Gon, M. Haefelin, J.-C. Dupont, G. Siour, H. Petetin, B. Bessagnet, S.N. Pandis, A. Hodzic, O. Sanchez, C. Honoré, and O. Perrussel: Formation of organic aerosol in the Paris region during the MEGAPOLI summer campaign: evaluation of the volatility-basis-set approach within the CHIMERE model, *Atmos. Chem. Phys.*, 13, 5767-5790, 2013.