

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 : A0110107232

Responsable scientifique : Guillaume Siour

Responsable technique : Adriana Coman

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

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

TGCC BULL Irene skl :	2.085.000 heures scalaires
TGCC BULL Irene rome :	3.025.000 heures scalaires

1. Collaborateurs

Nom	E-mail	Statut	Labo
Matthias Beekmann	Matthias.Beekmann@lisa.ipsl.fr	DR	LISA
Taos Benoussaid	Taos.Benoussaid@lisa.ipsl.fr	Doctorant	LISA
Christel Bouet	Christel.Bouet@lisa.ipsl.fr	CR	LISA
Audrey Cheiney	Audrey.Cheiney@lisa.ipsl.fr	Post Doctorant	LSCE
Arineh Cholakian	Arineh.Cholakian@lisa.ipsl.fr	IE	LMD
Isabelle Coll	Isabelle.Coll@lisa.ipsl.fr	Professeur	LISA
Adriana Coman	Adriana.Coman@lisa.ipsl.fr	IR	LISA
Juan Custa	Juan.Cuesta@lisa.ipsl.fr	MC	LISA
Ludovico Di Antonio	Ludovico.DiAntonio@lisa.ipsl.fr	Doctorant	LISA
Nicolas Dubois	Nicolas.Dubois@lisa.ipsl.fr	Doctorant	LISA
Gaëlle Dufour	Gaëlle.Dufour@lisa.ipsl.fr	DR	LISA
Arthur Elessa	Arthur.Elessa@lisa.ipsl.fr	Post Doctorant	LISA
Maxim Eremenko	Maxim.Eremenko@lisa.ipsl.fr	IR	LISA
Gilles Foret	Gilles.Foret@lisa.ipsl.fr	MC	LISA
Sunny Kumar	Sunny.Kummar@lisa.ipsl.fr	Doctorant	LISA
Ines Makni	Ines.Makni@lisa.ipsl.fr	Doctorant	LISA
Waiguru Ezekiel Njaga	Waiguru.Njaga@lisa.ipsl.fr	Doctorant	LISA
Dilek Savas	Dilek.Savas@lisa.ipsl.fr	Doctorant	LISA
Guillaume Siour	Guillaume.Siour@lisa.ipsl.fr	IR	LISA
Sachiko Okamoto	Sachiko.Okamoto@lisa.ipsl.fr	IR CDD	LISA
R. Subramanian	subu@lisa.ipsl.fr	Chercheur Invité	LISA/OSU EFLUVE
Matthieu Vida	Matthieu.Vida@lisa.ipsl.fr	Doctorant	LISA

Tableau 1 : Liste des collaborateurs

2. Résumé

Dans la continuité du projet de 2020/2021, 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 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 et leurs impacts sur le climat (projet MOPGA ACROSS) et la santé.

C'est le cas des travaux menés dans le cadre de l'ANR PoEASIA qui porte sur l'étude de la pollution asiatique et de ses déterminants. Certaines applications sont de natures plus opérationnelles. Elles ont pour objectif d'améliorer les systèmes de surveillance de la qualité de l'air à travers l'assimilation des observations satellitaires, l'inversion des sources (ARGONAUT, LOCKAIR et AMPAIR) de polluants ou encore la mise en place de futures politiques de contrôle des émissions dans les environnements urbains (ANR VITE!)

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 : 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 à l'échelle urbaine OLYMPUS.

3. Présentation générale

Cette demande de renouvellement se positionne donc dans la continuité du projet 2020/2021. 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, ii) l'interaction de l'impact radiatif des aérosols, iii) la conception de méthodes permettant un pilotage opérationnel des politiques de contrôle de la qualité de l'air et enfin iv) la modélisation de l'impact de la pollution sur la santé. 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 d'un nouvel indicateur de l'impact sanitaire des particules, le potentiel oxydant
- Simulation des sources de pollution de l'air en Afrique
- Interaction entre émissions biogéniques et anthropiques – impact de l'aérosol sur le bilan radiatif

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 avec des séries de données aujourd'hui disponibles suffisamment longues pour envisager des premières études de tendances (e.g. Dufour et al., 2018 ; Dufour et al., 2021). Au laboratoire, nous travaillons sur 3 axes pour exploiter ces données :

- nous développons des produits satellitaires spécifiques pour l'étude de la pollution, notamment pour l'ozone avec les instruments IASI à bord des satellites Metop.
- nous mettons en œuvre le modèle de chimie-transport CHIMERE, co-développé au LISA (Menut et al., 2013 ; Mailler et al., 2017), afin de mieux appréhender les problèmes de qualité de l'air aux échelles continentales et d'interpréter les observations satellitaires.
- nous développons l'assimilation de données, en particulier l'inversion atmosphérique des sources d'émissions, approches mettant en synergie la modélisation et les observations satellitaires.

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. Récemment, nous nous intéressons également à l'évaluation des impacts de la crise sanitaire du COVID-19 sur la qualité de l'air en réorientant certains objectifs de projets en cours (ANR ARGONAUT et PoEASIA) ainsi que dans le cadre d'un nouveau projet (ADEME/AQACIA LOCKAIR). Nous présentons ci-dessous les demandes associées pour l'année 2021-2022.

a) Tendances d'ozone avec les instruments IASI

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. La phase 2 de cette étude internationale a débuté en janvier 2021. Notre contribution consiste à fournir notre produit ozone pour l'instrument IASI-A sur toute la période d'opération 2008-2021 sur l'Europe, la Chine et les États-Unis. Comme indiqué dans le rapport d'activité, nous avons traité les données pour la période 2008-2020 sur l'Europe et la Chine. Pour compléter notre contribution, nous devons fournir l'ensemble de l'archive sur les États-Unis (14 ans) et l'année 2021 pour la Chine et l'Europe. Nos premières estimations montrent qu'une année pour traiter les États-Unis représenterait 42 heures, une

année pour l'Europe 15 kheures et pour la Chine 20 kheures. Nos besoins pour l'année 2021-2022 sont donc estimés à environ 625 kheures.

→ **Heures demandées : 625.000 heures sur rome**

- b) Distribution globale de l'ozone dans la très basse troposphère par restitution multispectrale IASI+GOME2

Dans le cadre du projet de grande envergure internationale TOAR, des nombreux produits à l'état de l'art de l'ozone troposphérique sont intercomparés afin d'analyser les tendances de l'ozone aux échelles régionales et globale. Cette intercomparaison est une référence très importante pour la communauté scientifique internationale étudiant l'ozone troposphérique. Dans ce contexte, le produit IASI+GOME2 est une contribution française très originale et il offre une sensibilité à l'ozone dans la très basse troposphère (vers 2 km d'altitude) inédite depuis l'espace (quand les produits classiques sont sensibles au-dessus de 3 km d'altitude). Pour contribuer à ce projet, nous avons été sollicités pour fournir la base de données complète de la distribution globale de l'ozone issue de l'approche IASI+GOME2 depuis la mise en orbite des instruments satellitaires en 2009). Or, seules les données globales IASI+GOME2 depuis 2017 sont produites en routine au centre de données atmosphériques ESPRI du portail AERIS (www.aeris-data.fr).

Les heures de calcul demandées permettront de compléter la base de données de IASI+GOME-2 à l'échelle globale, entre 2009 et 2016 (7 ans). La chaîne de production IASI+GOME2 a été adaptée et mise en place au TGCC. Les traitements IASI+GOME2 ont commencé cet été. Les estimations actuellement indiquent le besoin de 240 kheures pour le traitement d'un an de mesures globales IASI+GOME2 à résolution réduite. Nous avons donc traité 2 ans de données avec l'allocation complémentaire de 2021. Pour l'année 2021-2022, nous aurions besoin de 1.200 kheures supplémentaires afin de traiter les 5 années restantes.

→ **Heures demandées : 1.200.000 heures sur rome**

- c) Modélisation inverse des émissions des précurseurs de la pollution photo-oxydante et particulaire à partir d'observations satellitaires

Les incertitudes sur les émissions de polluants font partie des sources principales d'erreur des modèles de chimie transport et limitent leurs capacités à reproduire certains pics de pollution. Avec les données satellitaires, disponibles depuis une bonne dizaine d'années maintenant et de bonne qualité, leur utilisation pour contraindre les émissions de polluants ouvre une nouvelle ère pour la prescription d'inventaires d'émissions « dynamiques » en entrée des modèles, grâce à leur couverture spatio-temporelle sans précédent. Cette activité de recherche prometteuse est développée depuis plusieurs années au LISA en appliquant soit des approches d'assimilation de données variationnelles pour l'inversion des émissions de NO_x (projets PoLEASIA, ARGONAUT et LOCKAIR), soit des approches simplifiées d'équilibre de masse par exemple pour les émissions agricoles d'ammoniac (projets AMPAIR, LOCKAIR). Les approches développées sont toutes basées sur le modèle de chimie-transport CHIMERE. Pour l'assimilation variationnelle, nous utilisons le système d'inversion CIF (Community Inversion Framework) et l'adjoint de CHIMERE (voir la partie rapport).

Nous détaillons ci-dessous les besoins en heures de calcul par projet ou groupe de projets.

Projet PolEASIA

Le projet PolEASIA a pris officiellement fin en mars 2021. Les activités de modélisation inverse constituaient un point novateur du projet, dédié à l'étude de la pollution en Asie et plus particulièrement en Chine. Dans ce cadre, le LISA était engagé à fournir des inventaires d'émissions optimisés de NO_x à partir des observations OMI sur la décade récente (2007-2017) afin d'étudier les tendances et variabilités de ces émissions et les conséquences en termes de qualité de l'air. Les difficultés rencontrées avec les différents outils de modélisation inverse au cours du projet n'ont pas permis d'atteindre cet objectif. Cependant, les avancées de cette dernière année avec la mise en place du système et l'inversion d'une année test (voir rapport) sont très encourageantes. Dans le cadre de la thèse de Dilek Savas, cofinancée par le CNES et un autre projet (ANR ARGONAUT), nous avons décidé de poursuivre cette activité pour la valoriser. Afin de couvrir la période intéressante de forte régulation des émissions chinoises de NO_x au cours de la dernière décade, nous prévoyons d'inverser les émissions de NO_x à partir des observations de NO₂ de OMI sur la période 2010-2017. Les résultats pourront être comparés à l'inventaire d'émissions chinois MEIC le plus à jour qui donnent les émissions sur la même période. Le test effectué sur l'année 2015 montre qu'il faut 10 kheures pour traiter une année. Sept années supplémentaires sont à traiter (70 kheures). Des simulations directes sont nécessaires pour la préparation des entrées du système d'inversion et pour l'évaluation des émissions optimisées. Cela représente 30 kheures supplémentaires. Notre demande pour cette activité est de 100 kheures.

→ **Heures demandées : 100.000 heures sur skylake**

Projets ARGONAUT/LOCKAIR

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 (10 km) 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 (CO₂) en s'appuyant sur l'inversion atmosphérique et la nouvelle génération de satellites d'observation de la composition atmosphérique (Sentinel-5P/TROPOMI). Le projet LOCKAIR, récemment accepté, s'appuie sur les approches développées dans ARGONAUT en se focalisant sur la période COVID.

Nous avons expliqué dans le rapport d'activité que nous rencontrons quelques difficultés pour les inversions utilisant les données du nouvel instrument TROPOMI. Plusieurs pistes sont explorées : la dimension du problème à inverser, la qualité des données TROPOMI (reprocessing de l'ESA prévu début 2022 pour améliorer les données), les méthodes de tri des données pour écarter les attracteurs. Nous espérons avancer dans les prochains mois et être en capacité de réaliser des inversions de manière beaucoup plus systématiques et opérationnelles. Initialement dans le cadre du projet, il était prévu d'inverser deux années de données TROPOMI. Les premiers tests réalisés sur quelques jours avec convergence du système montrent

qu'un jour d'inversion demande environ 200 heures, soit 146 kheures pour 2 années d'inversion. Par ailleurs, la préparation des entrées en incluant le prétraitement du grand flux d'observations demande également des heures (environ 25kheures pour une année). Notre besoin est donc estimé à 200 kheures pour cette activité.

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

Projets AMPAIR/LOCKAIR

L'objectif du projet AMPAIR 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 mesurée par l'instrument satellitaire IASI. Comme précisé dans le rapport d'activité, nous avons développé une méthode simplifiée d'équilibre des masses que nous avons appliquée aux années culturales 2010-2011 et 2016-2017. Pour cette dernière période la méthode a été appliquée à IASI mais également à l'instrument américain CrIS qui mesure également des colonnes d'ammoniac. Les résultats sont prometteurs (voir rapport). Après échanges avec les producteurs des données CrIS, une nouvelle version est disponible qui permet de réduire le bruit des observations et potentiellement de résoudre le problème que nous avons observé avec l'instrument en hiver quand peu d'ammoniac est présent dans l'atmosphère. Nous prévoyons donc d'appliquer la méthode d'inversion sur la nouvelle version des produits pour 2016-2017 (10 kheures). Dans le cadre du projet LOCKAIR, nous sommes engagés à fournir les émissions de NH₃ corrigées avec IASI et/ou CrIS pour la période de crise sanitaire de 2020. Pour cela, 10 kheures supplémentaires sont nécessaires.

Notre objectif est 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. Pour réaliser les tests, nous demandons également 10 kheures.

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

3.2. Scénarios urbains d'aménagement et de politiques énergétiques

3.2.1. Évaluation de l'exposition à la pollution de l'air des populations d'une mégapole.

Au moment où la ville est devenue un modèle dominant en Europe et dans le monde, certaines métropoles s'affichent en parallèle comme des structures très consommatrices en énergie fossile et en ressources naturelles, favorisant la concentration d'une grande variété de nuisances (bruit, stress, pollution). Un des axes de recherche au LISA porte sur l'évaluation des niveaux d'exposition cumulés à la pollution de l'air de la population urbaine et ce, au cours du temps. En effet, il a été mis en avant dans un grand nombre d'études que l'impact de la qualité de l'air jouait un rôle non négligeable sur la santé des populations urbaines (Hoek et al., 2013 ; Loomis et al., 2013 ; Khreis et Nieuwenhuijsen, 2017 ; Anenberg et al., 2018). Une attention particulière est donc portée à la modélisation de la qualité de l'air dans ces travaux et, notamment, sur la résolution des simulations. En effet, il a été montré que l'utilisation de données de concentrations issues de modèles méso-échelle conduisait à des sous-estimations de l'impact de la pollution sur la santé car les niveaux moyens simulés étaient trop bas par rapport à la mesure (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 à l'échelle des individus.

Ce travail se concentre sur la quantification de l'exposition des populations à la pollution urbaine. Les simulations seront réalisées pour l'Ile-de-France. Le modèle méso-échelle de chimie-transport CHIMERE sera appliqué pour simuler la qualité de l'air urbain sur plusieurs années. Les concentrations de polluants modélisées seront par la suite corrigées statistiquement par une approche qui intègre l'environnement urbain. Ces concentrations raffinées seront croisées à des données de mobilité pour évaluer l'exposition des populations urbaines. Les simulations à réaliser sont reportées dans le Tableau 2 avec les temps de calcul associés.

	Descriptif	Nombre d'heures
REF_IDF	Simulation de référence hautement résolue (année 2017)	10 ans, sur Ile-de-France : 550 000 heures
REF_VDM	Simulation sur un département de l'Ile-de-France	1 an, sur Ile-de-France : 50 000 heures
GPE_IDF	Scénario prospectif 2040	1 an, sur Ile-de-France : 50 000 heures
Temps de calcul	OLYMPUS = 5kh CHIMERE = 50kh	Total : 650 000 heures

Tableau 2 : 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 : 650.000 heures sur rome.

3.2.2. Comment la structure urbaine peut affecter la durabilité des villes du point de vue de la qualité de l'air (caractérisation des liens entre la structure, l'organisation et le fonctionnement de la ville et la qualité de l'air)

Malgré les améliorations significatives en matière de lutte contre la pollution atmosphérique, les zones urbaines sont toujours des espaces où le stress environnemental et la qualité de l'air sont parmi les principales préoccupations. L'étude de 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 de chimie-transport 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. 2014) 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 mobilité. (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.

Ce travail se concentre sur les impacts potentiels de différentes modélisations de l'usage des sols sur la qualité de l'air urbain. Plusieurs structures urbaines ont été créées, sur la base de stratégies d'urbanisme alternatives, en tenant compte de différents schémas d'utilisation des sols : COMPACT (ville monocentrique classique), CORRIDOR (ville basée sur des directions privilégiées pour le transport), SPRAWL (ville étalée) et STARS (ville polycentrique). Le modèle CHIMERE sera appliqué pour évaluer la qualité de l'air urbain dans chacune des structures urbaines idéalisées. Le Tableau 3 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 : 55 000 heures
SPRAWL, une ville étalée	Ville étalée où l'accessibilité, la connectivité, la mixité et la densité sont peu marquées	1 an : 55 000 heures
STARS, une ville polycentrique	Ville multipolaire, 5 grands centres d'activités	1 an : 55 000 heures
CORRIDOR, une ville en couloir	Ville connectée selon quelques axes majeurs de transport	1 an : 55 000 heures
GREENBELT, une ville avec une ceinture verte <ul style="list-style-type: none"> • - Fil de l'eau • - Ceinture verte 	IDF en 2030 avec contrainte sur l'usage des sols depuis 1960	2 x 1 an : 110 000 heures
Temps de calcul	OLYMPUS = 5kh CHIMERE = 50kh	Total : 330 000 heures

Tableau 3 : Ensemble des simulations à réaliser pour les scénarios de formes urbaine

→ **Heures demandées : 330.000 heures sur rome**

3.2.3. Caractérisation du transport routier de marchandises en ville et son impact sur 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 diminuées, du fait de technologies développées afin de répondre aux réglementations de plus en plus strictes, et ce malgré l'augmentation des déplacements motorisés. Le parc de véhicules diesel dans les villes se compose de voitures particulières, de bus, de véhicules utilitaires et de poids lourds. Bien que les voitures particulières représentent la majorité du parc roulant, elles engendrent relativement moins d'émissions. Les poids lourds et les véhicules utilitaires légers sont les principaux émetteurs d'oxydes d'azote (NO_x) et de particules primaires fines (PM_{2.5}) dans le secteur du transport routier. Le but ici est de mieux caractériser et quantifier la contribution du transport de marchandises en ville (TMV) à la qualité de l'air en Ile-de-France en situation actuelle, en utilisant comme données d'entrées pour le modèle CHIMERE, des données de simulations issues d'un modèle de logistique urbaine et d'un modèle de trafic. Nous simulerons une situation de référence pour l'année 2015 qui servira de support pour évaluer des scénarios dans l'optique de quantifier les impacts du transport de marchandise en ville. Le Tableau 4 suivant résume l'ensemble des simulations à réaliser.

	Descriptif	Nombre d'heures
TMV_REF	Scénario de référence	1 an : 55 000 heures
TMV_2030	Évolution du transport de marchandise en ville en 2030	1 an : 55 000 heures
Massification	Modification de l'organisation logistique avec une massifications des marchandises	1 an : 55 000 heures
Horaires	Modification des horaires de livraisons	1 an : 55 000 heures
Temps de calcul	OLYMPUS = 5kh CHIMERE = 50kh	Total : 220 000 heures

Tableau 4 : Ensemble des simulations à réaliser pour les scénarios « TMV ».

→ **Heures demandées : 220.000 heures sur rome**

3.3. Modélisation d'un nouvel indicateur de l'impact sanitaire des particules, le potentiel oxydant

3.3.1 Modélisation empirique du potentiel oxydant

La masse des particules d'un diamètre inférieur à $2,5 \mu\text{m}$ ($\text{PM}_{2.5}$) 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 de façon intégrative cette capacité des particules à apporter ou produire des espèces réactives oxydantes. L'objectif du projet qui fait l'objet de la présente demande est d'implanter ce nouvel indicateur dans le modèle CHIMERE (Menut et al., 2013 ; Mailler et al. 2017).

L'année passée a permis de mettre en place et d'évaluer la simulation des particules à l'échelle d'une année. Les performances du modèle sont suffisamment bonnes pour passer à l'étape suivante qui vise à simuler les sources des particules par la méthode du « taggage » qui consiste à ajouter des traceurs spécifiques pour chaque espèce (particulaire ou gazeuse) et pour chaque source primaire (trafic routier, feux de bois, industrie ...). Nous avons utilisé une centaine de traceurs pour simuler les 14 sources du modèle. Les premiers résultats montrent que la reconstruction des concentrations de particules par la somme des sources n'est pas assurée pour les espèces secondaires ce qui nécessite d'améliorer notre « taggage ». Il sera donc nécessaire de réaliser des tests de simulation aux modifications apportées et de refaire une simulation annuelle « propre ». Ensuite nous pourrons utiliser ces sources du modèle pour reconstruire les sources obtenues à partir d'une PMF (Positive Matrix Factorization) basée sur des observations et assigner un potentiel oxydant empirique aux particules pour le cartographier.

Afin d'améliorer cette modélisation, nous commencerons également à travailler sur une source manquante, la source d'aérosol organique primaire biogénique (BPOA). Pour cela, on se basera sur les travaux de Samake et al., 2017 concernant les mesures et d'Hummel et al., 2015 pour la partie modélisation. D'après les travaux de Weber et al., 2018, cette source a une influence importante sur le potentiel oxydant en période estivale. L'objectif est donc de la modéliser et d'évaluer son impact sur le PO obtenu à partir du modèle. Cela nous amènera à réaliser quelques mois de simulations supplémentaires.

Au final, le besoin en temps de calcul se répartit comme suit :

- Tests amélioration taggage et modèle (plusieurs mois à 9km) = 100 000 heures
- Simulation annuelle « propre » pour publication PO à 9km = 300 000 heures
- Tests modélisation source BPOA (plusieurs mois à 9km) = 100 000 heures

→ Heures demandées : 500.000 heures sur skylake

3.3.2 Vers la modélisation explicite du potentiel oxydant

Une autre approche est possible pour modéliser le potentiel oxydant. Elle consiste à simuler explicitement la chimie du fluide épithélial pulmonaire en simulant le dépôt des particules dans le système respiratoire et notamment leur fraction redox (Fe, Cu, Mn, SOA, HAP/Quinones) qui va générer la formation des espèces réactives de l'oxygène appelées ERO (OH, H₂O₂, O₂⁻). Ces ERO vont ensuite « consommer » les antioxydants (c'est cette consommation que mesure le PO) et éventuellement conduire à du stress oxydant et de l'inflammation. La première étape est donc de simuler le cycle des métaux impliqués (majoritairement Fe, Cu, Mn) depuis leurs émissions jusqu'à leur dépôt. La deuxième étape est de simuler les HAP et leurs produits d'oxydation tels que les quinones et les SOA. La dernière étape permettant de quantifier l'impact sanitaire repose sur l'utilisation des modèles de dépôts pulmonaires et de chimie du fluide épithélial qui pourraient être couplés au modèle CHIMERE.

Dans le cadre de ce projet, nous nous intéressons à la modélisation de trois métaux de transition, le fer, le cuivre et le manganèse qui semblent jouer un rôle important pour le PO (Shiraïwa et al., 2017). Pour cela nous devons dans un premier temps construire les inventaires d'émissions (anthropiques) de ces éléments qui sont soit partiels, soit inexistantes. Ces inventaires une fois construits seront pris en compte dans le modèle CHIMERE (Menut et al., 2013 ; Mailler et al., 2017), et permettront de réaliser des simulations (2 années) à l'échelle européenne (probablement avec une résolution de 9km). Ces simulations seront évaluées par comparaison aux observations disponibles (<http://ebas.nilu.no/>). Ce travail sera réalisé dans le cadre de la thèse de Nicolas Dubois (début Octobre 2021) et en collaboration avec le CITEPA (Centre Interprofessionnel Technique d'Études de la Pollution Atmosphérique) qui est l'organisme expert des inventaires d'émission en France. D'après nos travaux récents, une année de simulation à 9km sur l'Europe représente environ 200 000 heures.

→ **Heures demandées : 400.000 heures sur skylake**

3.4 Simulation des sources de pollution de l'air en Afrique

3.4.1 Simulation des sources de pollution de l'air en Afrique de l'Est

Nous reprenons ici la proposition de l'année dernière qui n'a pas pu être réalisée suite au retard du début de la thèse Waiguru Ezekiel Njaga. Le début de thèse est maintenant prévue pour le 1 septembre 2021 (le contrat de travail est en préparation, visa obtenu, etc.).

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 coût (LCS low cost sensors) mesurant plusieurs polluants clés ($PM_{2.5}$, NO_2 , O_3 , SO_2 , 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, ...). Le 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 dits de mitigation.

Une configuration appropriée du modèle CHIMERE régional chimie-transport 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 NO_2 , etc.).

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

3.4.2 Simulation de la qualité de l'air en Afrique du Sud

L'Afrique du Sud possède une économie développée avec des activités industrielles intensives concentrées dans la région de Highveld du Vaal Triangle, définie par les recherches par satellite les plus modernes comme l'un des « hot spots » mondiaux de la pollution atmosphérique. Les autres régions sources majeures comprennent les grandes zones urbaines de Johannesburg, Le Cap, Rustenburg, Richards Bay,

Durban et Port Elizabeth, où la densité de la population, leurs pratiques domestiques et l'omniprésence du trafic routier contribuent à maintenir des concentrations élevées de polluants (DEAT, 2009 ; Gaustella and Knudsen, 2007 ; Bonjour et al., 2013). En outre, le brûlage saisonnier de la végétation génère ponctuellement des densités optiques très élevées, affectant le climat et contribuant à une dégradation majeure de la qualité de l'air locale. Pour s'attaquer à ces problèmes et pour réduire la vulnérabilité environnementale et sanitaire des citoyens, il est fondamental de bien décrire, quantifier et hiérarchiser les problématiques propres à la région.

Nous développons ces travaux au LISA dans le cadre de la thèse de Sunny Kumar (début octobre 2020), financée par l'Ecole Universitaire de Recherche LIVE de l'UPEC portant sur les vulnérabilités environnementales, et en collaboration avec le Pr Stuart Pikheth (North-West University of South Africa, Unit for Environmental Sciences and Management). Le projet de doctorat porte sur deux axes de travail :

- D'une part, le modèle de chimie transport CHIMERE sera mis en place et exploité, afin de fournir des champs chimiques de qualité de l'air. Le pourcentage de la population concernée par le dépassement de la concentration de polluants ainsi que la géographie de la pollution, en relation avec la répartition des individus sur le territoire, seront étudiés. Nous visons la réalisation d'une simulation sur une année, sur l'agglomération de Johannesburg à haute résolution ($1 \times 1 \text{ km}^2$), forcé par un domaine national de résolution intermédiaire ($15 \times 15 \text{ km}^2$), lui-même imbriqué dans un domaine semi-continental de résolution horizontale $50 \times 50 \text{ km}^2$. Ces domaines sont représentés sur la Figure 1.

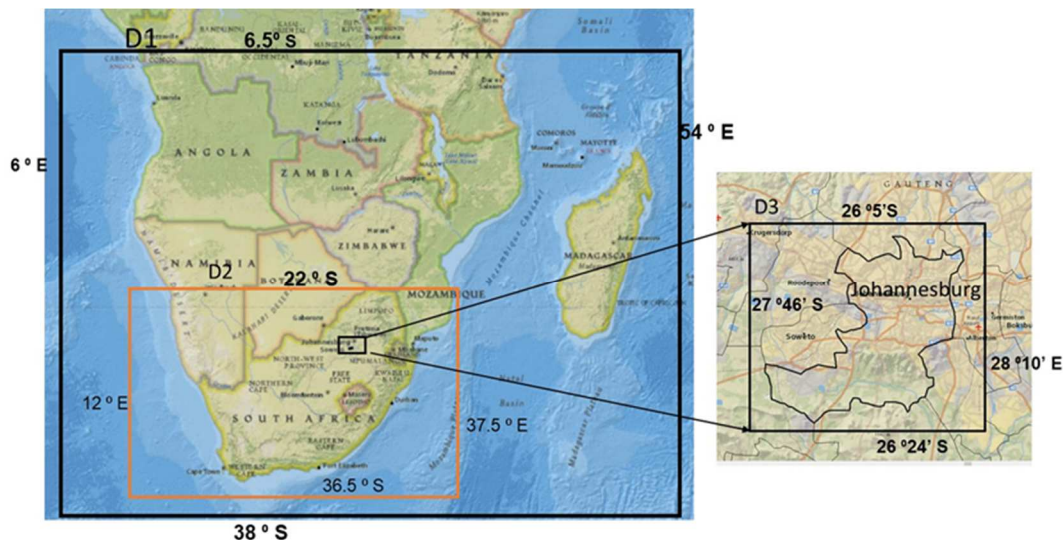


Figure 1 : Configuration de la simulation : D1- $50 \times 50 \text{ km}^2$, D2 $15 \times 15 \text{ km}^2$, D3 $1 \times 1 \text{ km}^2$

- En second lieu, la question de l'impact climatique régional des aérosols sera abordée en sortie de CHIMERE. CHIMERE sera ainsi couplé avec le module radiatif RRTM, un outil pour les modèles climatiques de pointe, pour évaluer l'effet radiatif des aérosols dans les situations de pollution grave sous divers régimes météorologiques. L'effet radiatif atmosphérique sera évalué en fonction de la qualité des aérosols, et en particulier de leurs propriétés d'absorption, qui peuvent influencer la hauteur de la couche limite, favorisant ou inhibant ainsi la dispersion des panaches de pollution, affectant en retour la qualité de l'air.

La première année de thèse a permis de définir le positionnement des domaines de calcul, et d'identifier / récupérer les données nécessaires pour la modélisation. Une première simulation test a été réalisée sur le cluster du LISA afin de vérifier que la chaîne d'utilisation des données était opérationnelle. Cette deuxième année de thèse sera consacrée à la mise en œuvre et l'optimisation des simulations avec pour objectif la description de la qualité de l'air dans la région de Johannesburg, et la production de champs d'aérosols pour de premiers tests de calcul de l'effet radiatif des aérosols dans différents régimes météorologiques, dans cette zone du globe. En particulier, nous testerons plusieurs configurations du modèle (résolution du domaine intermédiaire, travail sur les émissions, schémas chimiques...) que nous évaluerons par rapport aux données de terrain (projet EUCAARI 2009 - 2011, projet AEROCLO-sA en 2017, données satellite - POLDER, MODIS, OMI, Sentinels...).

Notre estimation des besoins en temps de calcul est la suivante :

- Tests résolution / validation / optimisation de CHIMERE sur la zone = 70 000 heures
- Simulations finalisées pour publication (au moins 1 année + périodes spécifiques) = 35 000 heures

→ Heures demandées : 105 000 heures sur skylake

3.5. Interaction entre émissions biogéniques et anthropiques - impact de l'aérosol sur le bilan radiatif

Les aérosols atmosphériques sont des particules solides ou liquides en suspension dans l'atmosphère, dont la taille varie entre quelques dizaines de nanomètres et quelques dizaines de micromètres. L'interaction entre les aérosols, le rayonnement solaire et infrarouge (effets directs et semi-directs des aérosols) et le rôle des aérosols dans la formation et les propriétés des nuages (effet indirect) restent parmi les principales incertitudes dans la compréhension du système climatique au niveau régional et mondial (e.g. IPCC 2013).

Par conséquent, dans ce projet, l'intérêt principal est accordé à l'étude des propriétés optiques des aérosols d'origine primaire et secondaire et leur contribution à l'effet radiatif dans la région d'Ile de France. En effet, l'interaction entre les aérosols d'origine anthropique et biogénique n'est pas encore complètement élucidée (interaction via l'initiation des chaînes d'oxydation par les oxydants OH, O₃ et NO₃, interaction via les mécanismes de formation d'AOS – implication du H₂SO₄, interaction via l'aérosol hôte) et sa contribution aux propriétés optiques reste incertaine. Une simulation correcte des propriétés optiques permet d'estimer efficacement l'effet radiatif des aérosols sur le climat.

En utilisant les heures complémentaires de l'année précédente, une simulation de contrôle avec le modèle de chimie-transport CHIMERE, couplé au modèle météorologique méso-échelle WRF, a déjà été réalisée avec 3 domaines imbriqués (Figure 2, résolutions horizontales de 30, 6 et 2 km respectivement). Cette simulation vise à tester le modèle avec une configuration qui voit l'Ile De France au centre du domaine de plus haute résolution. Dans ce contexte, une ville aussi densément peuplée que la ville de Paris constitue une situation unique en raison de sa proximité avec de grandes forêts nationales (par exemple Fontainebleau et Rambouillet) pour étudier l'interaction entre l'aérosol d'origine biogénique et anthropique. C'est d'ailleurs dans le but d'améliorer la compréhension de cette interaction qu'est né le projet ACROSS (qui prévoit une campagne de mesure intensive dans la forêt de Rambouillet en juillet 2022), dans lequel s'inscrit cette thèse, et dont les mesures seront largement utilisées pour améliorer les schémas numériques du modèle.

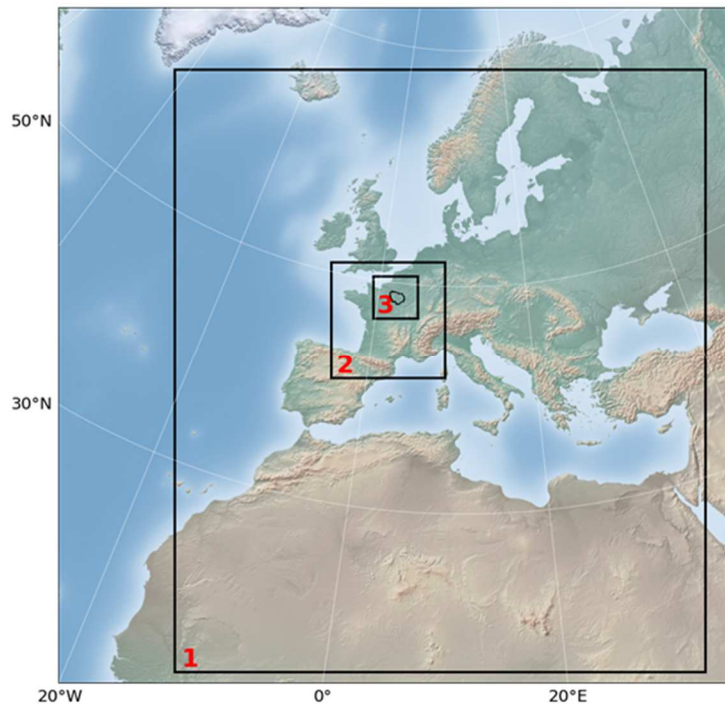


Figure 2 : Configuration des domaines utilisés pour simuler la campagne ACROSS : 1 - 30x30 km², 2 - 6x6 km², 3 - 2x2 km²

En outre, une attention particulière sera nécessaire pour configurer le modèle dans les meilleures conditions possibles afin de pouvoir simuler le cadre de la campagne ACROSS, en commençant par l'ajustement des émissions jusqu'à l'utilisation des schémas les plus appropriés, et enfin exploiter le couplage WRF-CHIMERE pour calculer les effets radiatifs directement à partir de la simulation. Donc, l'évaluation des simulations sera effectuée avec les nombreuses mesures de la campagne ACROSS et les nombreuses ressources de données déjà disponibles : AERONET, pour les propriétés optiques, des concentrations en espèces gazeuses à partir des réseaux EEA, EBAS, AIRPARIF, et des distributions en taille obtenues via des mesures optiques sur le Ballon de Paris, les observations AERONET et des granulométries GRIMM.

L'objectif est donc de la modéliser et d'évaluer l'effet radiatif sur la région de l'Ile de France en configurant le modèle dans les meilleures conditions possibles. Au final, le besoin en temps de calcul se répartit comme suit :

- Amélioration des émissions biogénique MEGAN (les 3 domaines décrits ci-dessus) ~ 150 000 heures
- Intégration de nouvelles espèces SOA absorbantes dans le modèle (les 3 domaines décrits ci-dessus) ~ 200 000 heures
- Calcul de l'effet radiatif directement avec le WFR-CHIMERE couplé (les 3 domaines décrits ci-dessus) ~ 200 000 heures

→ Heures demandées : 550.000 heures sur skylake

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 PoEAsia 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 de chimie-transport CHIMERE a besoin d'intégrer des émissions anthropiques en données d'entrée. OLYMPUS est préprocesseur pour les émissions anthropiques à l'échelle urbaine. Il permet de modéliser les émissions de polluants atmosphériques et de gaz à effet de serre à l'échelle urbaine. L'approche de génération des émissions est une approche dite « bottom-up » où, à partir d'une population artificielle on recrée les émissions anthropiques d'une ville (Elessa et Coll, 2018). Le code comprend plusieurs méta-modèles/modules (Figure 3) dont :

- Des modèles de génération de population synthétique : Modélisation d'une population d'agents artificiels aux caractéristiques semblables à ceux de la population d'une agglomération.
- Des modèles de transport : Modélisation des flux de déplacements par catégories d'utilisateurs, description des conditions de fonctionnement du réseau étudié (temps de parcours, vitesses, charges, niveau de saturation...)
- Des modèles de 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.

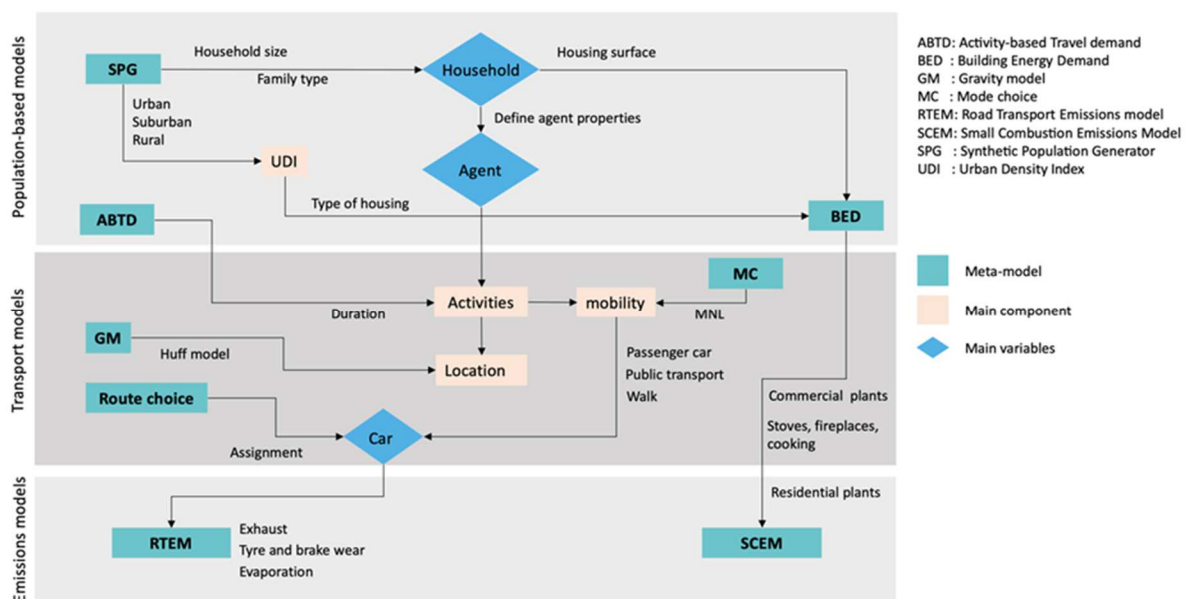


Figure 3 : Diagramme de fonctionnement de la plateforme de modélisation OLYMPUS

4.2 Justification de l'emploi de la machine demandée

Le Tableau 5 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 par synergie modélisation/observations satellitaires	Tendances d'ozone avec les instruments IASI	Etats unis (2008-2021) Europe (2021) Chine (2021)		590 15 20
	Modélisation inverse des émissions des précurseurs de la pollution photo-oxydante et particulaire à partir d'observations satellitaires	PolEASIA : Inversion des émissions de NO _x à partir de OMI sur la Chine	100	
		ARGONAUT/LOCKAIR : Inversion des émissions de NO _x à partir de TROPOMI sur l'Europe	200	
		AMPAIR/LOCKAIR : Correction des émissions de NH ₃ en Europe	30	
	IASI-GOME-2			1200
Scénarios urbains d'aménagement et de politiques énergétiques	Évaluation de l'exposition à la pollution de l'air des populations d'une mégapole	Référence Ile-de-France (10 années)		550
		Val de Marne (1 an)		50
		Ile-de-France 2040		50
	Caractérisation des liens entre la structure, l'organisation et le fonctionnement de la ville et la qualité de l'air)	Ville compacte (COMPACT)		55
		Ville étalée (SPRAWL)		55
		Ville multipolaire (STARS)		55
		Ville connectée (CORRIDOR)		55
	Caractérisation du transport routier de marchandises en ville et son impact sur la qualité de l'air en Ile-de-France	IDF en 2030 avec contrainte sur l'usage des sols depuis 1960 (GREENBELT)		110
Référence			55	
Évolution du transport de marchandise en ville en 2030			55	
Modélisation d'un nouvel indicateur de l'impact sanitaire des particules, le potentiel oxydant	Modélisation empirique du potentiel oxydant	Modification de l'organisation logistique avec une massifications des marchandises		55
		Modification des horaires de livraisons		55
	Vers la modélisation explicite du potentiel oxydant	amélioration taggage Simulation annuelle « propre » pour publication Tests modélisation source BPOA	100 300 100	
Simulation des sources de pollution de l'air en Afrique	Simulation des sources de pollution de l'air en Afrique de l'Est	2 années de simulation sur l'Europe	400	
	Simulation de la qualité de l'air en Afrique du Sud	Simulations sur l'Afrique de l'Est	200	
Interaction entre émissions biogéniques et anthropiques	Interaction entre émissions biogéniques et anthropiques - impact de l'aérosol sur le bilan radiatif	Simulations sur l'Afrique du sud	105	
		Amélioration des émissions biogéniques MEGAN	150	
		Intégration de nouvelles espèces SOA absorbantes	200	
		Calcul de l'effet radiatif directement avec le WFR-CHIMERE	200	
Total			2085	3025

Tableau 5 : 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., Kuylenstierna, 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.

Bonjour, S., Adair-Rohani, H., Wolf, J., Bruce, N. G., Mehta, S., Prüss-Ustün, A., ... & Smith, K. R. (2013). Solid fuel use for household cooking: country and regional estimates for 1980–2010. *Environmental health perspectives*, 121(7), 784-790.

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.

DEAT, 2009. Vaal Triangle Airshed Priority Area, Air Quality Management Plan.

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.

Dufour, G., Hauglustaine, D., Zhang, Y., Eremenko, M., Cohen, Y., Gaudel, A., Siour, G., Lachatre, M., Bense, A., Bessagnet, B., Cuesta, J., Ziemke, J., Thouret, V., and Zheng, B.: Recent ozone trends in the Chinese free troposphere: role of the local emission reductions and meteorology, *Atmos. Chem. Phys. Discuss.* [preprint], <https://doi.org/10.5194/acp-2021-476>, in review, 2021.

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.

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.

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. Ebojje, G. Foret, O. Garcia, M. J. Granados Muñoz, 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

Gaustella, L., Knudsen, S., 2007. South Durban Basin Multi-Point Plan: Case Study Report. October 2007. Governance Information Publication, Series C, Book 12.

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.

Hummel, M., Hoose, C., Gallagher, M., Healy, D.A., Huffman J.A., O'Connor D., Pöschl U., Pöhlker C., Robinson N.H., Schnaiter M., Sodeau J.R., Stengel M., Toprak E., and Vogel H., Regional-scale simulations of fungal spore aerosols using an emission parameterization adapted to local measurements of fluorescent biological aerosol particles, *Atmos. Chem. Phys.*, 15, 6127–6146, 2015

IPCC, 2013: Climate Change 2013: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change [Stocker, T.F., D. Qin, G.-K. Plattner, M. Tignor, S.K. Allen, J. Boschung, A. Nauels, Y. Xia, V. Bex and P.M. Midgley (eds.)]. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA, 1535 pp, doi:10.1017/CBO9781107415324

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

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. Khvorostiyarov, 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.

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.

Samake, A., Uzu, G., Martins, J. M. F., Calas, A., Vince, E., Parat, S., and Jaffrezo, J. L., The unexpected role of bioaerosols in the Oxidative Potential of PM, *Sci. Rep.-UK*, 7, 10978, 2017.

Manabu Shiraiwa, Kayo Ueda, Andrea Pozzer, Gerhard Lammel, Christopher J. Kampf, Akihiro Fushimi, Shinichi Enami, Andrea M. Arangio, Janine Fröhlich-Nowoisky, Yuji Fujitani, Akiko Furuyama, Pascale S. J. Lakey, Jos Lelieveld, Kurt

Lucas, Yu Morino, Ulrich Pöschl, Satoshi Takahama, Akinori Takami, Haijie Tong, Bettina Weber, Ayako Yoshino, and Kei Sato : Aerosol Health Effects from Molecular to Global Scales, *Environmental Science & Technology* 2017 51 (23), 13545-13567

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.