

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 : A0130107232

Responsable scientifique : Maxim Eremenko

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 : 2.620.000 heures scalaires
TGCC BULL Irene rome : 1.600.000 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 Cuesta	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	Gaelle.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 2021/2022, 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 2021/2022. 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, 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 : 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, le projet ANR ARGONAUT pour l'étude des émissions de polluants et CO₂ à haute résolution spatiale en France, le projet CNES/TOSCA ARGOS complémentaire du projet ARGONAUT en proposant l'intercomparaison des inversions avec TROPOMI et OMI, le projet ADEME/AQACIA LOCKAIR pour l'évaluation de l'impact de la crise sanitaire du COVID-19 sur la qualité de l'air. Deux projets se sont terminés en 2021 mais nous continuons à mener des études en lien : le projet ANR PolEASIA pour l'étude de la pollution asiatique et le projet ADEME/PRIMEQUAL AMP'AIR pour l'étude du rôle des émissions agricoles d'ammoniac sur les pics de pollution particulaire en France et en Europe. Nous présentons ci-dessous les demandes associées pour l'année 2022-2023.

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 les instruments IASI sur leur période d'opération sur l'Europe, la Chine et les États-Unis. Comme indiqué dans le rapport d'activité, nous avons processé les données sur l'Europe, la Chine et les États-Unis pour IASI-A (2008-2020), IASI-B (2013-2020) et IASI-C (2019-2020). Pour compléter la série de données, nous proposons de poursuivre le processing pour les années 2021 et 2022 pour IASI-B et IASI-C (IASI-A s'est arrêté en novembre 2021, les données de 2021 ne sont pas exploitables pour des tendances, des tests opérationnels sur le satellite et l'instrument

ayant été fait au cours de cette dernière année de vie de l'instrument). Pour cela, nos besoins en heures de calcul pour l'année 2022-2023 sont estimés à environ 350 kheures.

→ Heures demandées : 350.000 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-II, 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).

Par ailleurs, nous souhaiterons effectuer une activité supplémentaire liée aux données satellitaires IASI+GOME2 dans le cadre du centre de données AERIS. Il s'agit d'une intercomparaison des performances entre les IASI+GOME2 issues du satellite MetOp-B (dans l'espace depuis 2013, et qui fournit les données traitées actuellement) et celles du satellite MetOp-C (lancé 5 ans plus tard). Cela permettra d'intercomparer la qualité de ces données. Si les observations IASI+GOME2 issues du satellite plus récent sont meilleures, la production opérationnelle en quasi-temps réel chez AERIS basculera aux données de MetOp-C.

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 300 kheures pour le traitement d'un an de mesures globales IASI+GOME2 à résolution réduite. A l'heure actuelle, nous avons traité 4 ans de données (2013-2016) et nous pourrions traiter 1 an et demi de plus avec l'allocation de 2022. Nous souhaiterons traiter 6 mois de données d'intercomparaison MetOp-B et MetOp-C. Pour l'année 2022-2023, nous aurions donc besoin de 600 kheures supplémentaires afin de traiter les 2 années restantes.

→ Heures demandées : 600.000 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 plus d'une

dizaine d'années maintenant, 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 PoEASIA, 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.

Inversion des émissions de NO_x en Chine (continuité ANR PoEASIA)

Le projet PoEASIA 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 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 ces deux dernières années ouvrent cette possibilité. Comme noté dans le rapport, dans le cadre de la thèse de Dilek Savas, cofinancée par le CNES et un autre projet (ANR ARGONAUT), nous avons traité deux années 2015 et 2019. Afin de couvrir la période intéressante de forte régulation des émissions chinoises de NO_x au cours de la dernière décade et l'année de crise sanitaire 2020, nous prévoyons d'inverser les émissions de NO_x à partir des observations de NO₂ de OMI sur la période 2010-2020. Les résultats pourront être comparés à l'inventaire d'émissions chinois MEIC le plus à jour qui donnent les émissions sur 2010-2017. Neuf années sont donc à traiter pour inverser les émissions (90 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 120 kheures.

→ **Heures demandées : 120.000 heures sur skylake**

Inversion des émissions de NO_x et COVs en France et en Europe (Projets ARGONAUT, ARGOS et 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 CNES/TOSCA ARGOS est complémentaire du projet ARGONAUT : il propose de comparer les capacités d'inversion des sources à partir des données satellites TROPOMI et OMI.

Le projet LOCKAIR 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 des 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 (nouvelle version des données). 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. Nous espérons pouvoir remplir cet objectif au cours de 2022-2023. Nous développerons la stratégie suivante. Dans un premier temps, nous testons le système pour une inversion à l'échelle européenne à une résolution moyenne (50 km) en dégradant la résolution de TROPOMI pour se retrouver dans la configuration OMI mais avec une couverture spatiale nettement améliorée. Dans un deuxième temps, une inversion à 10 km de résolution sur la France sera testée.

Il était également prévu d'inverser les émissions de COVs (biogéniques) en utilisant les données formaldéhyde comme contrainte. Nous prévoyons de débiter les tests en 2023 dans le cadre d'un post-doc qui doit être recruté sur le projet ARGONAUT. N'ayant pas un système fonctionnel actuellement, il est difficile d'estimer précisément le nombre d'heures nécessaires. D'après l'expérience que nous avons sur les tests que nous avons faits, une première demande de 100 kheures nous paraît raisonnable et pourra être complétée au cours de l'année.

→ Heures demandées : 100.000 heures sur skylake

Émissions d'ammoniac : Projets AMP'AIR/LOCKAIR

Dans le cadre du projet AMP'AIR, nous avons développé une méthode simplifiée d'équilibre des masses que nous avons appliquée aux années culturelles 2010-2011 et 2016-2017 pour contraindre les émissions d'ammoniac avec les observations satellites des instruments IASI et CrIS. Au cours de 2022-2023, nous allons essayer de valoriser les résultats obtenus dans le cadre du stage de M2 de Yoan Carreira en cours. Ceci ne nécessitera pas de nouveaux calculs ou à la marge. 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 sont estimées pour cela.

Notre objectif est également de réaliser des tests pour utiliser d'autres configurations (utilisation de l'inventaire CADASTRE comme a priori) ou d'autres approches (approche d'assimilation variationnelle par exemple). Pour réaliser les tests, nous demandons également 20 kheures.

→ Heures demandées : 30.000 heures sur skylake

d) Assimilation des données IASI-GOME2

En 2021 on n'avait pas demandé des heures de calcul pour la partie assimilation d'ensemble avec EnKF/Chimere. Cette année, on va reprendre nos simulations sur le domaine Chine/Japon en ayant pris en compte le lissage effectué au niveau du couplage IASI-GOME2 pour réduire le bruit dans les données et en changeant la façon

dont on tient compte de ce lissage dans l'algorithme d'assimilation. La première étape a consisté à explorer la structure spatiale des données afin de vérifier si celles-ci sont auto-corrélées. L'outil principal permettant cette analyse est le semi-variogramme qui décrit l'évolution de la semi-variance en fonction de la distance entre les mesures (pixels satellitaires) et permet ainsi d'étudier la variabilité des données, compte tenu de la distance à laquelle elles sont situées. Cette analyse va nous permettre de remplir la matrice R avec des données non-diagonales, au lieu d'avoir uniquement une matrice diagonale caractérisée par le $R[i,i] \neq 0$, nous allons utiliser par la suite un modèle qui dépend de la distance entre les mailles/pixels, donc des valeurs non-nulles pour le $R[i,j]$ (pour $i \neq j$) estimées en utilisant le modèle sélectionné pendant la première étape (sphérique). L'année dernière on n'avait pas demandé des ressources pour effectuer l'assimilation. Les données IASI+GOME2 lissées étant maintenant disponibles et la partie développement finie, en lien direct avec le projet SURVEYPOLLUTION, notre demande porte donc 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 30000 heures.

→ **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 en lien avec les pratiques de mobilité

Au moment où la ville est devenue le modèle dominant en Europe et dans le monde, certaines métropoles s'affichent en parallèle comme des structures très consommatrices en énergies fossiles et en ressources naturelles, favorisant la concentration d'une grande variété de nuisances (bruit, stress, pollution). Un des axes de recherche du LISA porte sur l'évaluation des niveaux d'exposition cumulés à la pollution de l'air de la population urbaine au cours de leur journée. Il a été, en effet, 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 al.*, 2017 ; Anenberg Susan C. *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, l'utilisation de données de concentrations de qualité de l'air issus 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.

Les liens entre exposition environnementale, formes urbaines et santé sont complexes et interagissent à de multiples échelles – interactions qui peuvent être notamment

différentes selon les lieux de vie des populations. En effet, selon les environnements traversés, les individus sont soumis à différents niveaux de polluants (Yu & Stuart, 2013) et il est donc nécessaire de considérer à la fois les lieux de vie, la mobilité et les activités pour mieux évaluer l'exposition à la pollution (Chaix *et al.*, 2012 ; Perchoux *et al.*, 2014 ; Lu, 2021). L'objectif poursuivi ici est de pouvoir affiner notre compréhension des comportements de mobilité dans le but de mieux simuler les émissions et d'apporter une clé de lecture pour la réduction des nuisances atmosphériques. Afin de pouvoir améliorer la modélisation de la mobilité des individus et des émissions et *in fine* mieux quantifier l'exposition, nous estimons le nombre d'heures de calcul à 80kh pour un scénario sur une année (intégrant le réseau routier et de transport affiné). 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).

Ce travail se concentre sur la quantification de l'exposition des populations à la pollution urbaine. Les simulations seront réalisées pour l'Île-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. 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 des individus. Les simulations à réaliser sont reportées dans le **Error! Reference source not found.** avec les temps de calcul associés.

Le Tableau 2 résume l'ensemble des simulations à réaliser.

	Descriptif	Nombre d'heures
REF	Scénario de référence sur 2010	1 an : 50 000 heures
Scénario 2030	Étudier l'impact de la mise en place d'une ZFE sur les comportements de mobilité et sur l'exposition	1 an : 50 000 heures
Temps de calcul	CHIMERE = 50kh	Total : 100 000 heures

Tableau 2. Ensemble des simulations nécessaires à l'analyse de l'exposition des individus en Île-de-France

Heures demandées : 100.000 heures 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 suivant résume l'ensemble des simulations à réaliser. En plus des formes urbaines théoriques nous nous intéressons également à différentes formes de villes moyennes européennes.

	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 2 : 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 (NOx) 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 à la qualité de l'air en Ile-de-France en situation actuelle, en utilisant comme données d'entrées pour 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 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 3 : Ensemble des simulations à réaliser pour les scénarios « TMV ».

Heures demandées : 220.000 heures sur Rome

3.2.4. 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, CIREN) ; 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 d'un nouvel indicateur de l'impact sanitaire des particules, le potentiel oxydant

3.3.1 Modélisation empirique du potentiel oxydant

Au cours de l'année précédente, les travaux de modélisation du PO (potentiel oxydant) ont bien avancé avec le développement de 3 méthodes différentes. La première méthode (dite ADHOC) consiste à utiliser les valeurs du PO attribuées à chaque source. Cette connaissance existe et s'appuie sur les travaux de Weber et al. (2021) qui a utilisé les observations de PO et de composition des particules pour attribuer un PO aux sources déterminées par une approche de PMF (Positive Source Factorization). Nous avons alors modélisé les sources PMF avec les sources du modèle CHIMERE. Nous avons pu alors attribuer les PO (dits intrinsèques) obtenus par les observations aux sources PMF modélisées. Ensuite, une méthode statistique a également été développée pour modéliser le potentiel oxydant mais dans le but de s'affranchir de la PMF afin d'obtenir les potentiels oxydants intrinsèques des sources du modèle. Pour cela, nous avons simplement minimisé (au sens des moindres carrés) la différence entre PO observés et simulés pour obtenir les PO intrinsèques qui sont les paramètres de la régression. Enfin, la dernière méthode est une reproduction de celle issue des travaux de Daellenbach et al. (2020) qui est au final conceptuellement proche de la première méthode décrite. Les résultats de modélisation du potentiel oxydant sont assez encourageants (i.e les comparaisons aux observations montrent des scores moins bons que lors des comparaisons aux masses de PM mais qui restent dans des gammes de valeurs acceptables à ce stade de développement) ; nous avons identifié plusieurs pistes d'améliorations.

D'abord, la méthode de taggage des sources (PSAT) ne fonctionne pas encore bien et une partie de la masse de particules n'est pas conservée notamment pour les fractions secondaires. Ensuite les méthodes développées pour modéliser le PO n'ont pas pu être très bien évaluées notamment à cause du manque de données d'observations.

Pour cette nouvelle année, nous avons réussi à agréger un plus grand nombre de données d'observations grâce à notre partenaire (IGE). Nous allons donc réaliser une nouvelle simulation sur 2 années (2013, 2014) avec la même configuration que celle déjà utilisée. Nous sommes en train de corriger les problèmes identifiés sur la PSAT. Cette nouvelle simulation devrait permettre une évaluation plus complète et plus en profondeur de la modélisation du PO. Il doit être noté que ces simulations s'insèrent dans le projet européen RI-URBANS mais qu'une nouvelle période va être définie et nécessiter un temps de calcul additionnel pour une année.

En parallèle, un nouveau développement a débuté. La source d'aérosol biogénique primaire est une source importante au vu de son fort potentiel oxydant intrinsèque mais ne figure actuellement pas dans le modèle CHIMERE. Il s'agit de particules primaires libérés par les champignons présents sur la végétation (Samaké et al., 2017, 2019a, 2019b). Des paramétrisations existent pour représenter cette sources (Heald & Spracklen, 2009 ; Sesartic & Dallafior, 2011 ; Hummel et al., 2015 ; Janssen et al., 2021). Durant l'année passée, des tests d'implémentation ont pu être effectués en

utilisant l'équation de paramétrisation des émissions de Heald & Spracklen (2009). Les résultats ne sont pas ceux escomptés, et nécessitent un travail supplémentaire pour mieux comprendre les sources d'erreur et le cas échéant de modifier les paramétrisations disponibles. Pour mener ces travaux nous disposons d'une base de données d'observations unique (mannitol et arabitol qui sont les principaux sucres constituant ces spores fongiques) qui nous sera fourni par l'IGE. Ces travaux vont nécessiter de réaliser des tests sur des périodes mensuelles. Ensuite la paramétrisation sera intégrée dans la simulation des 2 années. Cela nécessite de prévoir quelques tests de sensibilités et 2 années de simulations (400 kh par année) sachant qu'il nous reste environ 400 kh sur ce projet.

Au final, le besoin en temps est :

- Complément Simulation bi-annuelle 9x9 km = 500 000 heures

→ Heures demandées : 500.000 heures sur skylake

3.3.2 Vers la modélisation déterministe 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 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 (Shiraiwa et al., 2017). Pendant la première année, deux inventaires de fer et de manganèse ont été réalisés, en examinant les différentes sources de métaux de la manière la plus fine possible. Les grands secteurs d'émission ont été étudiés : la combustion (charbon, biomasse, pétrole), les particules d'abrasion routière, les particules d'abrasion ferroviaire, l'incinération de déchets. Des corrections ont également été faites pour l'inventaire de cuivre, notamment des homogénéisations de méthodes entre différents pays. Ce travail a été fait en collaboration avec le Citepa, qui est l'organisme expert des inventaires d'émission en France. De premières simulations courtes ont été effectuées avec le modèle CHIMERE v2020r3 (Mailler et al., 2017, Menut et al., 2021) à une résolution assez large (45 km, sur deux mois), et ont montré que les inventaires ne permettaient pas à l'heure actuelle d'expliquer la totalité des concentrations de fer et de manganèse.

Un travail de recherche et de correction doit être effectué – en collaboration avec le Citepa - pour trouver une source manquante ou pour faire correspondre les émissions

aux concentrations. Pour cela, d'autres simulations seront nécessaires afin de tester de nouvelles versions des inventaires. Des données de métaux provenant d'une centaine de stations européennes (France, Royaume-Uni, Espagne, Allemagne ...) ont été collectées – s'étalant de 1990 à nos jours – et leur exploitation nous permettra d'améliorer notre compréhension des sources d'émission de métaux. Lorsque l'inventaire sera correctement calibré, nous réaliserons avec le modèle CHIMERE une simulation à l'échelle européenne sur les années 2013 et 2014, avec une résolution de 9km. Les résultats seront comparés aux données à notre disposition, provenant entre autre de la base EBAS (<http://ebas.nilu.no/>). D'après nos travaux récents, une année de simulation à cette résolution sur l'Europe représente environ 400 000 heures.

Au final, le besoin en temps est :

- Simulation bi-annuelle 9x9 km et tests de sensibilités associés = 900 000 heures

→ **Heures demandées : 900.000 heures sur skylake**

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

3.4.1 Air quality modeling over East Africa to examine source impacts and evaluate future air pollution mitigation pathways

Air pollution in the Eastern Africa region has recently risen to levels of concern to public health. In densely populated and rapidly urbanizing cities of Nairobi in Kenya, Kampala in Uganda and Kigali in Rwanda, regular monitoring of air pollution is yet to be attained. The finding from random short-term campaigns show compelling evidence of deteriorating state of air quality. However, lack of spatially resolved measurements has limited the spatial-temporal characteristics of atmospheric pollution, sources contribution, regional transport and potential mitigation pathways. For the first time, we combine synergies of datasets available from ground measurements, satellite, and modeling to advance the knowledge of air quality and examine scenarios which can lead to air pollution reduction in named cities. In this research work, we aim to assess the spatial-temporal variability of air pollution, regional pollution transport, sources contribution to observed pollution, and analysis of potential mitigation scenarios. For modelling, we use a multi-scale chemistry-transport model, CHIMERE (Menut et al., 2013). The model is fully developed to stimulate air quality at different scales and is currently under application in different research groups globally. The model has been found to reasonably predict $PM_{2.5}$ concentrations over Eastern Africa based on a recent monitoring campaign conducted in Nairobi, Kampala and Addis Ababa in Ethiopia (Mazzeo et al., 2022).

3.4.2 Air Quality Analyses

CHIMERE Simulation will be conducted for the year 2021. This period coincides to a monitoring campaign during which ground measurements of $PM_{2.5}$ and NO_2 concentrations were collected across different sites in Nairobi. A few months of ground measurements are also available in Kampala and Kigali. These measurements will

allow for detailed analysis of the model output to evaluate the diurnal and seasonal characteristics of atmospheric pollution. Application of satellite observations to study atmospheric pollution has drastically increased due to their wide spatial coverage. We target to use MODIS (Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer) Aerosol Optical Depth (AOD) and TROPOMI (TROPOspheric Monitoring Instrument) NO₂ and O₃ to compliment the model observations and ground measurements. In most developing cities, air quality is strongly influenced by pollution from the traffic, industries, domestic heating, cooking, and open burning of waste. Our research work aims to further explore sources contribution to observed pollution. Preliminary results from our test simulations indicate a strong impact of seasonal vegetation burning on air quality over the Central African belt. Furthermore, we will investigate a possible transport of air pollution to Eastern Africa owing to a complex interaction in climatology between the two regions. In this analysis, we will compare a simulation driven by both anthropogenic and fire emissions and one which only takes into account anthropogenic emissions.

Another simulation will focus on investigating secondary PM_{2.5} loading and its contribution to overall PM_{2.5}. Here, we first reduce emissions of NO_x, SO₂, NH₃, VOCs and PM_{2.5} by half (50%) and run a simulation with the new emissions. It is important to note that reduction of primary PM_{2.5} emissions affects only the primary component of PM_{2.5} while the compounds VOCs, NO_x, SO₂, and NH₃ are responsible for the formation of secondary aerosol fraction. Lastly we will evaluate different mitigation measures which can lead to improvement of air quality in the cities. The scenarios to be tested include;

- i. Setting all surface sources of emission to zero
- ii. Switching on the boundary conditions only
- iii. Switching on emissions of the city domain only

The above described simulations will require 200,000hr to be completed. That is therefore the amount of time I would like to request for.

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

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

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 et 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. Le dernier rapport IPCC AR6 (IPCC, 2022) attribue une réduction de $-0,22$ $[-0,47 \text{ à } 0,04]$ W/m² (ERFari) à cause des interactions aérosol-radiation entre la période 1750-2019. En effet, les aérosols peuvent être émis ou produits à partir de sources de nature

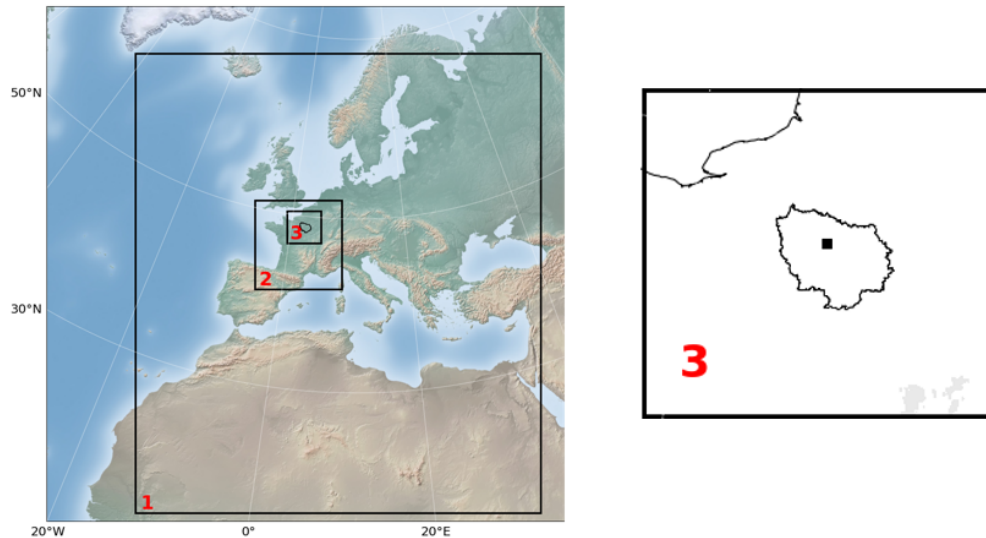


Figure 1: Case study and ACROSS configuration: 1-30kmx30km, 2-6kmx6km, 3-2kmx2km

biogénique ou anthropogénique, et leurs propriétés optiques et l'indice de réfraction changent en fonction de la nature et du pattern de formation. En particulier, ce travail s'inscrit dans le cadre et l'objectif du projet ACROSS 2022, campagne de terrain effectuée en juin-juillet 2022 dont l'objectif principal est d'étudier les effets du mélange entre les aérosols d'origine biogénique et anthropique. Cette campagne était un effort majeur de communauté française et internationale de la physico-chimie atmosphérique (participation de plusieurs dizaines laboratoires). Les mesures d'au moins de trois sites équipés pour la campagne serviront à évaluer ou contraindre les simulations avec CHIMERE : un site rural à Rambouillet, un site urbain à Paris Rive Gauche et des mesures d'avions sur toute la région parisienne. L'utilisation des données de la campagne peut non seulement être un moyen de comparer les résultats de la simulation (distribution en taille, masse...), mais aussi servir comme entrée à la simulation. En effet, l'indice de réfraction obtenu par les mesures in-situ (qui sera utilisé pour le calcul de l'AOD) permettra de réduire l'incertitude sur les calculs optiques. La Fig. 2 donne un exemple de ce qui a été fait avec les heures de l'année dernière et de ce que l'on peut aussi envisager pour la période d'ACROSS 2022 avec la contribution des données provenant de la campagne.

A cet effet, l'objectif est donc de la modéliser et d'évaluer l'effet radiatif sur la région de l'Île de France pour la période de la campagne ACROSS 2022. Au final, le besoin en temps de calcul se répartit comme suit :

- Simulation pour toute la période ACROSS Juin-Juillet (avec les 3 domaines décrits ci-dessus) et calcul off-line du forçage radiatif lié aux aérosols = 270000 heures

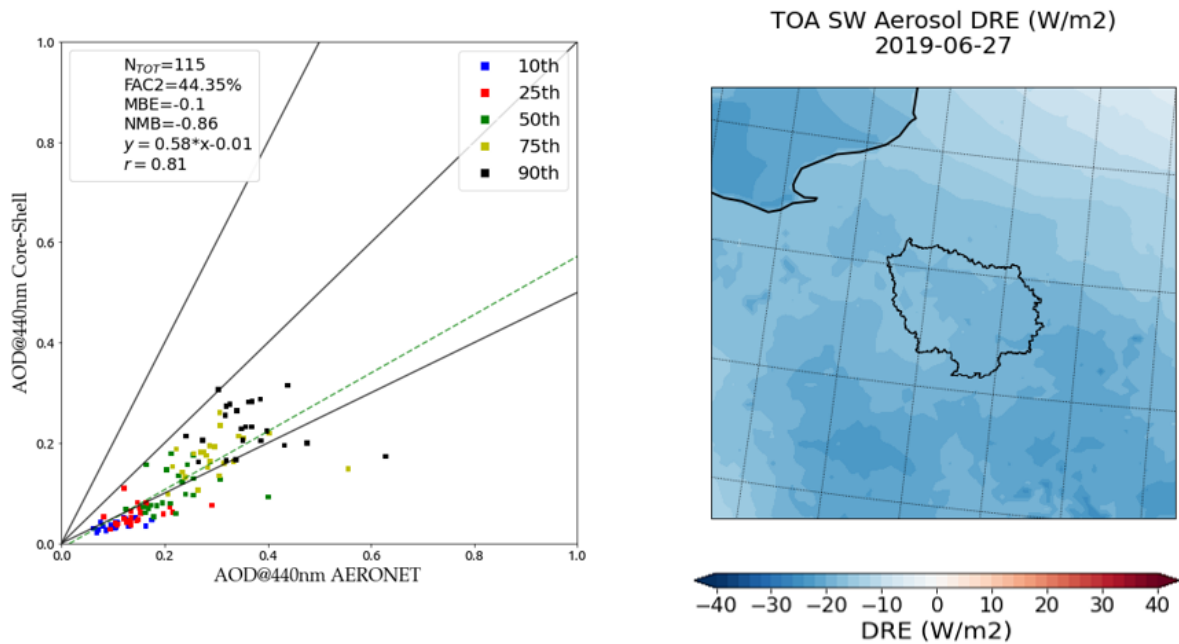


Figure 2: (left) Case study JJ 2019 validation with AERONET observations (right) TOA DRE for the 27 June 2019 over Ile de France

- Simulation pour toute la période ACROSS Juin-Juillet en utilisant le couplage WRF-CHIMERE pour l'estimation de feedbacks météorologiques (avec les 3 domaines décrits ci-dessus) = 270000 heures
 - Tests de nouvelles espèces SOA absorbantes dans le modèle (les 3 domaines décrits ci-dessus) = 200000 heures
- Heures demandées : 740.000 heures sur skylake

4. Justification de l'emploi de la machine demandée

Le Tableau 4. 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	Période 2022-2023		350
	Modélisation inverse des émissions des précurseurs de la pollution photo-oxydante à partir d'observations satellitaires	PolEASIA : Inversion des émissions de NO _x à partir de OMI sur la Chine	120	
		ARGONAUT/LOCKAIR : Inversion des émissions de NO _x à partir de TROPOMI sur l'Europe	100	
		AMPAIR/LOCKAIR : Correction des émissions de NH ₃ en Europe	30	
	IASI-GOME-2	Période 2022-2023		600

Demande d'Attribution de Ressources Informatiques
Description scientifique du projet A013017232

	Assimilation	CHIMERE-EnKF avec un ensemble de 40 membres	30		
Scénarios urbains d'aménagement et de politiques énergétiques	Évaluation de l'exposition à la pollution de l'air en lien avec les pratiques de mobilité	Scénario de référence sur 2010		50	
		Étudier l'impact de la mise en place d'une ZFE sur les comportements de mobilité et sur l'exposition		50	
	Comment la structure urbaine peut affecter la durabilité des villes du point de vue de la qualité de l'air	Ville compacte à très fortes accessibilité, connectivité, densité et mixité urbaine			55
		Ville étalée où l'accessibilité, la connectivité, la mixité et la densité sont peu marquées			55
		Ville multipolaire, 5 grands centres d'activités			55
		Ville connectée selon quelques axes majeurs de transport			55
		IDF en 2030 avec contrainte sur l'usage des sols depuis 1960			110
	Caractérisation du transport routier de marchandises en ville et son impact sur la qualité de l'air en Ile-de-France	Scénario de référence			55
		Évolution du transport de marchandise en ville en 2030			55
		Modification de l'organisation logistique avec une massifications des marchandises			55
Modification des horaires de livraisons				55	
Modélisation d'un nouvel indicateur de l'impact sanitaire des particules, le potentiel oxydant	Modélisation empirique du potentiel oxydant	Complément Simulation bi-annuelle	500		
		Vers la modélisation explicite du potentiel oxydant	Simulation bi-annuelle	900	
Simulation des sources de pollution de l'air en Afrique	Simulation des sources de pollution de l'air en Afrique de l'Est	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	Simulation ACCROSS et calcul off-line du forçage radiatif lié aux aérosols	270		
		Simulation ACROSS en utilisant le couplage WRF-CHIMER	270		
		Tests de nouvelles espèces	200		
Total			2620	1600	

5. Bibliographie

Anenberg Susan C., Henze Daven K., Tinney Veronica, Kinney Patrick L., Raich William, Fann Neal, Malley Chris S., Roman Henry, Lamsal Lok, Duncan Bryan, Martin Randall V., van Donkelaar Aaron, Brauer Michael, Doherty Ruth, Jonson Jan Eiof, Davila Yanko, Sudo Kengo, Kuystenstierna Johan C.I., 2018. Estimates of the Global Burden of Ambient PM2.5, Ozone, and NO2 on Asthma Incidence and Emergency Room Visits. *Environmental Health Perspectives*, 126, 10 : 107004. DOI : 10/gfmd2q.

Chaix, B., Kestens, Y., Perchoux, C., Karusisi, N., Merlo, J., Labadi, K., 2012. An interactive mapping tool to assess individual mobility patterns in neighborhood studies. *American Journal of Preventive Medicine*, 43, 4 : 440-450. DOI : 10/f2zp2b.

Daellenbach, K. R., Uzu, G., Jiang, J., Cassagnes, L.-E., Leni, Z., Vlachou, A., Stefanelli, G., Canonaco, F., Weber, S., Segers, A., Kuenen, J. J. P., Schaap, M., Favez, O., Albinet, A., Aksoyoglu, S., Dommen, J., Baltensperger, U., Geiser, M., El Haddad, I., Jaffrezo, J.-L., and Prévôt, A. S. H. : *Sources of particulate-matter air pollution and its oxidative potential in Europe*, *Nature*, 587, 414–419, <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2902-8>, 2020.

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.*, 21, 16001–16025, <https://doi.org/10.5194/acp-21-16001-2021>, 2021.

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 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

IPCC, 2022: Climate Change 2022: Impacts, Adaptation, and Vulnerability. Contribution of Working Group II to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change [H.-O. Pörtner, D.C. Roberts, M. Tignor,

E.S. Poloczanska, K. Mintenbeck, A. Alegría, M. Craig, S. Langsdorf, S. Lösschke, V. Möller, A. Okem, B. Rama (eds.)). Cambridge University Press. In Press.

Heald, C. L. and Spracklen, D. V.: Atmospheric budget of primary biological aerosol particles from fungal spores, *Geophys. Res. Lett.*, 36, L09806, <https://doi.org/10.1029/2009GL037493>, 2009.

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*, 12, 1 : 43. DOI : 10/gbc6fh.

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, <https://doi.org/10.5194/acp-15-6127-2015>, 2015.

Janssen, R. H., Heald, C. L., Steiner, A. L., Perring, A. E., Huffman, J. A., Robinson, E. S., Twohy, C. H., and Ziemba, L. D.: Drivers of the fungal spore bioaerosol budget: Observational analysis and global modeling. *Atmospheric Chemistry and Physics*, 21(6), 4381–4401. <https://doi.org/10.5194/acp-21-4381-2021>, 2021.

Khreis, H., May, A. D., Nieuwenhuijsen, M. J., 2017. Health impacts of urban transport policy measures: A guidance note for practice. *Journal of Transport & Health*, 6 : 209-227. DOI : 10/gcgs7k.

Loomis, D., Grosse, Y., Lauby-Secretan, B., El Ghissassi, F., Bouvard, V., Benbrahim-Tallaa, L., Guha, N., Baan, R., Mattock, H., Straif, K., International Agency for Research on Cancer Monograph Working Group IARC, 2013. The carcinogenicity of outdoor air pollution. *The Lancet. Oncology*, 14, 13 : 1262-1263. DOI : 10/f2nx3r.

Lu, Y., 2021. Beyond air pollution at home: Assessment of personal exposure to PM_{2.5} using activity-based travel demand model and low-cost air sensor network data. *Environmental Research*, 201 : 111549. DOI : 10/gmd8ns.

Mailler S. et al., CHIMERE-2017: from urban to hemispheric chemistry-transport modeling, *Geosci. Model Dev.*, 10, 2397-2423, <https://doi.org/10.5194/gmd-10-2397-2017>, 2017.

Mazzeo, A., Burrow, M., Quinn, A., Marais, E. A., Singh, A., Ng'ang'a, D., Gatari, M. J., & Pope, F. D. (2022). Evaluation of WRF-CHIMERE coupled models for the simulation of PM_{2.5} in large East African urban conurbations. *Atmospheric Chemistry and Physics Discussions*, 1–31.

Menut, L., Bessagnet, B., Khvorostyanov, D., Beekmann, M., Blond, N., Colette, A., Coll, I., Curci, G., Foret, G., & Hodzic, A. (2013). CHIMERE 2013: A model for regional atmospheric composition modelling. *Geoscientific Model Development*, 6(4), 981–1028.

Menut, L., Bessagnet, B., Briant, R., Cholakian, A., Couvidat, F., Mailler, S., Pennel, R., Siour, G., Tuccella, P., Turquety, S., Valari, M., : The CHIMERE v2020r1 online chemistry-transport model, *Geosci. Model Dev. (GMD)*, 14, pp. 6781-6811, 10.5194/gmd-14-6781-2021, 2021.

Perchoux, C., Kestens, Y., Thomas, F., Hulst, A. V., Thierry, B., Chaix, B., 2014. Assessing patterns of spatial behavior in health studies: Their socio-demographic determinants and associations with transportation modes (the RECORD Cohort Study). *Social Science & Medicine*, 119 : 64-73. DOI : 10/f6rhj9.

Samaké, 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.*, 7, 10978, <https://doi.org/10.1038/s41598-017-11178-0>, 2017.

Samaké, A., Jaffrezo, J.-L., Favez, O., Weber, S., Jacob, V., Canete, T., Albinet, A., Charron, A., Riffault, V., Perdrix, E., Waked, A., Golly, B., Salameh, D., Chevrier, F., Oliveira, D. M., Besombes, J.-L., Martins, J. M. F., Bonnaire, N., Conil, S., Guillaud, G., Mesbah, B., Rocq, B., Robic, P.-Y., Hulin, A., Le Meur, S., Descheemaeker, M., Chretien, E., Marchand, N., and Uzu, G.: Arabitol, mannitol, and glucose as tracers of primary biogenic organic aerosol: the influence of environmental factors on ambient air concentrations and spatial distribution over France, *Atmos. Chem. Phys.*, 19, 11013–11030, <https://doi.org/10.5194/acp-19-11013-2019>, 2019a.

Samaké, A., Jaffrezo, J.-L., Favez, O., Weber, S., Jacob, V., Albinet, A., Riffault, V., Perdrix, E., Waked, A., Golly, B., Salameh, D., Chevrier, F., Oliveira, D. M., Bonnaire, N., Besombes, J.-L., Martins, J. M. F., Conil, S., Guillaud, G., Mesbah, B., Rocq, B., Robic, P.-Y., Hulin, A., Le Meur, S., Descheemaeker, M., Chretien, E., Marchand, N., and Uzu, G.: Polyols and glucose particulate species as tracers of primary biogenic organic aerosols at 28 French sites, *Atmos. Chem. Phys.*, 19, 3357–3374, <https://doi.org/10.5194/acp-19-3357-2019>, 2019b.

Sesartic, A. and Dallafior, T. N.: Global fungal spore emissions, review and synthesis of literature data, *Biogeosciences*, 8, 1181–1192, <https://doi.org/10.5194/bg-8-1181-2011>, 2011.

Shiraiwa, M., K. Ueda, A. Pozzer, G. Lammel, C. J. Kampf, A. Fushimi, S. Enami, A. M. Arangio, J. Fröhlich-Nowoisky, Y. Fujitani, A. Furuyama, P. S. J. Lakey, J. Lelieveld, K. Lucas, Y. Morino, U. Pöschl, S. Takahama, A. Takami, H. Tong, B. Weber, A. Yoshino, and K. Sato, *Environmental Science & Technology* 51 (23), 13545-13567, DOI: 10.1021/acs.est.7b04417, 2017.

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.

Weber, S., Uzu, G., Favez, O., Borlaza, L. J. S., Calas, A., Salameh, D., Chevrier, F., Allard, J., Besombes, J.-L., Albinet, A., Pontet, S., Mesbah, B., Gille, G., Zhang, S., Pallares, C., Leoz-Garziandia, E., and Jaffrezo, J.-L., : *Source apportionment of*

atmospheric PM10 oxidative potential: synthesis of 15 year-round urban datasets in France, *Atmos. Chem. Phys.*, 21, 11353–11378, <https://doi.org/10.5194/acp-21-11353-2021>, 2021.

Yu, H., Stuart, A. L., 2013. Spatiotemporal distributions of ambient oxides of nitrogen, with implications for exposure inequality and urban design. *Journal of the Air & Waste Management Association*, 63, 8 : 943-955. DOI : 10/f5bkwz.