

## 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 :** A0150107232

**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 : 2.430.000 heures scalaires  
TGCC BULL Irene rome : 1.500.000 heures scalaires

### 1. Collaborateurs

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

Tableau 1 : Liste des collaborateurs

### 2. Résumé

Dans la continuité du projet de 2022/2023, 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 2022/2023. 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
- 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. Étude 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 CO<sub>2</sub> 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. Nous présentons ci-dessous les demandes associées pour l'année 2023-2024.

#### a) Tendances d'ozone avec les instruments IASI

Le dernier rapport international 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, avec plusieurs études en cours d'intercomparaison et de validation des données qui devraient donner lieu à des publications dans la Community Special Issue du TOAR-2 (voir rapport). 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 (2013-2022) et IASI-C (2019-2022). Pour compléter la série de données, nous proposons de poursuivre le processing pour l'année 2023 pour IASI-B et IASI-C (IASI-A s'est arrêté en novembre 2021). Pour cela, nos besoins en heures de calcul pour l'année 2023-2024 sont estimés à environ 300 kheures.

→ **Heures demandées : 300.000 heures sur rome**

b) 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<sub>x</sub> (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.

*Inversion des émissions de NO<sub>x</sub> 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<sub>x</sub>, monoxyde de carbone - CO et composés organiques volatils non méthaniques - NMVOCs) et le dioxyde de carbone (CO<sub>2</sub>) 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.

Comme expliqué dans le rapport d'activité, nous sommes en phase de production de données pour inverser les émissions de NO<sub>x</sub> sur l'Europe à moyenne résolution et sur la France à haute résolution pour la période du premier confinement (avril-juin 2020 et année de référence avril-juin 2019). Nous espérons que la production sera terminée d'ici à fin octobre 2023 et que le nombre d'heures allouées sera suffisant.

Pour la demande 2023-2024, nous nous concentrons donc sur une demande d'heures pour l'inversion des émissions de COVs à partir des observations de HCHO de TROPOMI sur le domaine Europe et des tests sur le domaine France. Nous espérons avoir fait les tests et développements nécessaires pour passer en mode production d'ici la fin de l'année 2023. A ce jour, nous n'avons pas encore fait de tests spécifiques d'inversion pour HCHO. Nous nous basons donc sur notre expérience avec les inversions de NO<sub>x</sub> pour estimer le nombre d'heures nécessaires. Dans le cadre du projet ARGONAUT, nous prévoyons d'analyse deux périodes estivales où les fortes chaleurs sont propices aux émissions biogéniques de COVs : le mois d'août 2019 et l'été 2022 (juin, juillet notamment).

Nous estimons à 200000 heures cette activité.

**→ Heures demandées : 200.000 heures sur skylake****Préparation de base de données d'apprentissage pour un nouveau système de modélisation inverse**

Nous avons un nouveau projet en gestation, qui sera soumis à l'appel d'offre en cours du PNTS et à un appel d'offre du diiP (Data Intelligence Institute of Paris – Université Paris Cité) pour tester les approches de deep learning pour réaliser les inversions des émissions de polluants. En effet, avec l'outil d'assimilation de données variationnel CIF et le modèle CHIMERE nous sommes confrontés à des temps de calcul très importants si l'on veut accéder à la haute résolution (exemple du projet ARGONAUT, inversion à 10 km sur la France) qui ne permettent pas d'envisager une production d'inversion sur plusieurs années avec des temps de calcul raisonnable sans sacrifier la précision des inversions. De plus, l'adjoint du modèle CHIMERE n'est disponible que pour une ancienne version du modèle qui n'est plus maintenue et sur la partie gaz du modèle (les aérosols sont négligés), ce qui limite les applications possibles et induit des incertitudes supplémentaires. Pour contrer ces difficultés et limitations, nous souhaitons explorer les approches de deep learning. Les bases de données d'apprentissage reposeront sur des sorties de simulations du modèle CHIMERE qui permettent de faire le lien entre émissions et concentrations de polluants, lien qui pourra être appris par les systèmes d'apprentissage développés. Pour pouvoir tester ces approches, nous avons besoin de créer les bases de données d'apprentissage adéquates. Nous devons donc faire des simulations directes avec le modèle CHIMERE sur plusieurs années (5 ans minimum) avec potentiellement des jeux d'émissions différents en entrée pour avoir une base d'apprentissage suffisante.

Dans un premier temps les domaines que nous voulons considérer sont le domaine Chine et le domaine Europe, à résolution modérée ( $0.5^\circ \times 0.5^\circ$ ) pour lesquels nous avons des inversions variationnelles (voir rapport et ci-dessus) pour comparer les méthodes. Cinq années de simulation (environ 150000 heures par domaine) pour deux jeux de données d'émissions sont envisagées pour chaque domaine.

Le besoin en heures de calcul pour l'ensemble de ces simulations est estimé à 600.000 heures

**→ Heures demandées : 600.000 heures sur rome**

- c) Évolution de méthodes d'analyse de mesures satellitaires de composition atmosphérique

**Préparation de base de données d'apprentissage pour un modèle d'émulation de régularisation dans le traitement des données satellitaires**

Un des problèmes de traitement des mesures satellitaires est le fait que le problème est défini comme 'mal posé' dans les termes mathématiques – ce qui veut dire que le système d'équations à résoudre dans le cadre de traitement peut avoir plusieurs solutions et nécessite l'ajout d'une contrainte pour obtenir une solution optimale. Cette contrainte appelée 'régularisation' est définie par la nature de la mesure et le comportement statistique de valeurs inconnues. Elle est habituellement fixe et non dépendante de la mesure particulière qui est en train d'être analysée. Cette approche s'avère efficace pour restituer un état de l'atmosphère dans le cadre bayésien de l'estimation optimale de variables compte tenu de la connaissance a priori moyenne de ces variables. Dans le cadre des observations satellitaires d'ozone que nous

utilisons, la sensibilité de la mesure va dépendre de la scène observée (température, contraste thermique, émissivité, etc). Pour aller plus loin que l'estimation d'un état moyen de l'atmosphère, on peut imaginer adapter la régularisation appliquée aux conditions de la scène observée pour extraire le maximum d'information de la mesure. On projette de développer une telle approche permettant de rendre cette régularisation variable et ajustable à la mesure et de sélectionner la régularisation la plus adaptée grâce à un modèle émulé de régularisation.

Pour construire ce modèle, nous avons besoin de générer la base d'apprentissage. Les conditions atmosphériques (champs 3D de température, pression, ozone) seront issues des sorties ECMWF. Ces champs seront transformés en pseudo-observations satellites en utilisant la géométrie de mesure et l'échantillonnage connus de l'instrument IASI et le modèle de transfert radiatif KOPRA sera utilisé pour calculer les spectres correspondant à chaque pseudo-observation et son bruit de mesure associé. Chacun de ces spectres sera traité pour inverser le profil d'ozone en utilisant différentes formes et forces de contraintes (voir Eremenko et al., 2019 pour la génération de ces contraintes). Cette approche nécessite donc un nombre important de calculs utilisant différentes formes de contrainte. La comparaison du profil d'ozone restitué au profil donné par les champs ECMWF permettra de déterminer pour chaque pseudo-observations la meilleure contrainte, régularisation à utiliser. L'ensemble des meilleures régularisations servira de base d'apprentissage d'un modèle de deep learning permettant une émulation de la meilleure régularisation en fonction conditions atmosphériques de la mesure satellitaire. Pour générer cette base de données, une journée d'observation faite par l'instrument satellitaire IASI constituée de 1.200.000 mesures et couvrant la plupart des situations atmosphériques sera utilisée. Compte tenu des performances du modèle de transfert radiatif KOPRA et du module d'inversion KOPRAFIT, la génération de cette base de données de contraintes prédéfinies nécessite 600.000 heures de calcul. L'apprentissage du modèle de deep learning utilisera les résultats de ces calculs par la suite mais ne fait pas partie de cette demande.

→ **Heures demandées : 600.000 heures sur rome**

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

Cette dernière année, la thèse de M. Vida (Vida et al, 2023) a permis des progrès significatifs pour la modélisation du Potentiel oxydant (PO). Un des points clés de ces développements est la possibilité de confronter les méthodes développées à de plus grand volumes d'observations. Dans le cadre des projets Poparts (programme AQACIA, 2024-2026) et RI-URBANS (H2020 green deal, 2021-2025), nous planifions de simuler des périodes sur lesquelles de nouvelles observations seront disponibles. Ce sera notamment le cas de la période 2022-2023 pour laquelle en plus des données disponibles sur différentes stations européennes (Barcelone, Zurich, Athènes, Grenoble ...) nous disposerons des données de la station « Châtelet-les-Halles » à Paris. Cette série sera la première disponible sur la capitale française et nous prévoyons de réaliser une simulation à haute résolution (1 x 1 km<sup>2</sup>) sur la région Ile-de-France en complément (et à partir) des simulations réalisées sur le domaine européen.

Pour rappel, le PO est un indicateur qui permet d'estimer le stress oxydant induit par les particules dans les poumons et qui pourrait être un meilleur indicateur de l'effet des particules atmosphériques sur la santé que les indicateurs actuels basés sur les concentrations en masse ( $PM_{10}$ ,  $PM_{2.5}$ ). Nous basons nos simulations de cet indicateur sur 3 méthodes qui utilisent les observations de PO in situ (à partir de mesures sur filtres, Weber et al, 2021) et qui pour deux d'entre elles utilisent même le PO intrinsèque par sources de polluants obtenus en combinant les observations de PO et des données de PMF (Positive Matrix Factorization) qui est une méthode d'attribution des sources basée sur les observations. Notre dernière méthode, dite statistique, s'appuie sur la confrontation directe des PO mesurés aux PO simulés par le modèle en supposant que ce PO simulé soit la somme des PO associées aux sources de particules prises en compte dans le modèle. Comme évoqué plus haut, ces trois méthodes, notamment la dernière, nécessitent encore d'accumuler plus d'observations pour les rendre plus robustes. Les données seront utilisées à la fois pour le développement des méthodes et leur validation en prenant soin de bien séparer les jeux de données utilisés pour ces deux objectifs.

Par ailleurs, il faut noter qu'un des points clé de la modélisation du PO est la capacité du modèle à simuler et suivre les sources des particules. Dans le modèle CHIMERE nous avons implémenté une méthode de « taggage » dite PSAT (Wagstrom et al, 2008) qui permet de réaliser cette attribution des sources. Un des points compliqués de la modélisation du PO est la façon dont on compare sources modélisées et sources obtenues à partir des PMF. Cet aspect aussi mérite plus de cas d'études et des développements méthodologiques. Cette question sera une de celle spécifiquement abordées dans les projets Poparts et RI-URBANS et les nouvelles simulations réalisées apporteront aussi de nouvelles connaissances sur ce point spécifique.

Un dernier point, nous envisageons d'intégrer à nos simulations certains métaux (Cu, Fe et Mn) dont les inventaires d'émissions ont été développés dans la thèse de N. Dubois (Dubois et al, 2023) et qui sont des espèces importantes pour le PO voire le traçage de certaines sources de polluants (trafic notamment).

Les points de vigilance :

Pour simuler les deux années ciblées, 2022 et 2023, il faudra être capable de récupérer les forçages nécessaires pour CHIMERE. Concernant les champs météorologiques, il ne devrait pas y avoir de problèmes car les champs météorologiques GFS (Global forecasting system) utilisés pour forcer le modèle de météo régional WRF (Weather Research and forecasting) sont disponibles en temps réel. Par contre pour les émissions annuelles, notamment celles produites par le TNO ou EMEP qui sont utilisées par CHIMERE pour construire ses propres émissions, il peut y avoir des délais qui peuvent rendre compliqué la mise en place de nos simulations. Il en va de même pour les émissions produites par Airparif qui pourrait aussi être utilisées. Cependant, pour les émissions anthropiques, on peut postuler que les variations interannuelles d'une année sur l'autre sont faibles au regard des autres déterminants qui pilotent la variabilité des concentrations comme la météorologie. Cela permet d'envisager d'utiliser des émissions de 2021 ou 2022 pour les deux années.

Evaluation des temps de calculs nécessaires pour réaliser nos travaux :

Pour ces simulations on peut se baser sur l'expérience des années précédentes. Ainsi, nos simulations sur l'Europe de l'Ouest sur 2 ans à  $9 \times 9 \text{ km}^2$  de résolution ( $300 \times 300 \times 9 = 810\,000$  mailles) ont consommées environ 900.000 heures scalaires. Si on ajoute les métaux (c'est-à-dire de nouvelles espèces), on peut prendre imaginer une consommation de 1.000.000 d'heures scalaires. Par ailleurs pour les simulations à haute résolution on aura besoin d'une configuration du type : Simulation France  $5 \times 5 \text{ km}^2$  ( $240 \times 240 \times 9 = 518.400$  mailles) puis zoom Ile de France à  $1 \times 1 \text{ km}^2$  ( $200 \times 200 \times 9 = 346.000$  mailles) forcée par la simulation européenne. Il est cependant peu probable que l'on puisse réaliser cette simulation intégralement en 2024 mais nous aurons besoin d'heures de calculs pour la mettre en place, nous prévoyons 100.000 heures scalaires pour cela.

Au final, le besoin en temps de calcul est :

- Une Simulation biannuelle  $9 \times 9 \text{ km}^2$  sur l'Europe = 1.000.000 heures scalaires
- Une simulation zoomée sur l'IDF ( $1 \times 1 \text{ km}^2$ ) à mettre en place à ce stade = 100.000 heures scalaires

**→ Heures demandées : 1.100.000 heures scalaire 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 for public health. In the densely populated and rapidly urbanizing cities of Nairobi in Kenya, Kampala in Uganda, and Kigali in Rwanda, regulatory monitoring of air quality remains non-existent. Findings from random short-term campaigns conducted in these cities show compelling evidence of a deteriorating state of air quality. However, the lack of spatially resolved measurements has hindered air quality spatial-temporal characterization, assessment of sources contribution, regional transport, and potential mitigation pathways. The observed air pollution is mainly related to traffic emissions and residential use of biofuels for cooking. Biomass burning which generally happens over the central African belt during dry seasons considerably impacts on regional air quality, especially around Kigali and Kampala. Therefore, enhancement in  $\text{PM}_{2.5}$  concentration levels tends to occur in dry seasons due to regional transport of pollution, but also due to less wet removal of  $\text{PM}_{2.5}$ . The current project aims to combine ground measurements, satellite observations and modeling to achieve several objectives, namely; (i) assessment of spatial-temporal variations of air quality, (ii) sources characteristics (regional, local, anthropogenic, biogenic, primary, secondary) and their contribution to observed air pollution, (iii) analyses of potential mitigation scenarios.

Nairobi has the longest duration of continuous ground measurements collected over a three-year (2020 January to 2022 December) monitoring campaign, during this period, low-cost  $\text{PM}_{2.5}$  sensors were collocated with a reference-grade instrument for calibration after which the sensors were deployed across various locations to monitor



the concentrations. PM<sub>2.5</sub> measurements are also available in Kampala and Kigali for 2021; this data provides an opportunity for model evaluation to get insights into the state of air quality in these cities. The low-cost devices also collected NO<sub>2</sub> measurements, but unfortunately, these measurements could not be calibrated due to lack of a reference instrument. Furthermore, we combine ground-based data with satellite observations to improve model predictions. We use (the year 2021) tropospheric column density retrieval from TROPOMI sensor (Veefkind et al., 2012) and Aerosol Optical Depth (AOD) from MODIS sensor (Rudke et al., 2023), the MODIS sensor use Multi-Angle Implementation of Atmospheric Correction (MAIAC) algorithm to collect data.

The modeling work in this research uses CHIMERE (<https://www.lmd.polytechnique.fr/chimere/>), a multi-scale chemistry-transport model (CTM) that has been adequately developed for urban-scale air quality applications (Menut et al., 2013). Global anthropogenic emission datasets like those provided by CAMS (Copernicus Atmosphere Monitoring Service) (Granier et al., 2019) and EDGAR (Emission Database for Global Atmospheric Research) (Crippa et al., 2018) inventories are used for modeling air quality in the sub-Saharan Africa region since they are better developed compared to the regional inventories. The datasets, however, lack sufficient robustness to accurately characterize the regional-specific emission sources which introduces uncertainties in CTM models. Although earlier studies from these cities lay good foundation for research, the studies could not adequately evaluate air quality spatial-temporal characteristics, speciation, source contribution, regional transport, and evaluation of potential mitigation pathways due to limited data.

#### 3.4.2. Air Quality Analyses

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. CHIMERE simulation is set to be run for a similar duration (year 2021) during which the ground measurements are available in Nairobi, Kampala, and Kigali. The simulation uses coarse, intermediate and nested model domains with nesting ratios of 1:5:3 and horizontal grid resolutions of 30 km<sup>2</sup>, 6 km<sup>2</sup>, and 2 km<sup>2</sup> respectively. The coarse model domain has 147 x 104 horizontal grid-cells which not only covers the eastern Africa but also extends to the entire central African belt which is important to regional air quality due to seasonal wild fires. The intermediate model domain is set over Nairobi, Kampala, and Kigali and has 221 x 156 horizontal grid cells. The cities are then nested separately within the intermediate domain. Each nested domain has 166 x 118 grid cells of 2 km<sup>2</sup> horizontal resolution, while the model uses 20 vertical layers. Global anthropogenic emission datasets like those provided by CAMS (Copernicus Atmosphere Monitoring Service) (Granier et al., 2019) and EDGAR (Emission Database for Global Atmospheric Research) (Crippa et al., 2018) inventories are used to model air quality in the sub-Saharan Africa region since they are better developed compared to regional inventories. The datasets, however, lack sufficient robustness to accurately characterize the regional-specific emission sources which introduce uncertainties in CTM models. Currently, various tests (CAMSV4.2, and CAMSV5.3) are being made to improve emissions and ensure reasonably accurate model results. The main difference between these datasets is that CAMSV5.3 includes updated ship emissions from CAMS-GLOB-SHIP v3.1 for seven species (Granier et al., 2019). We are also attempting to adapt emissions temporal profiles for East African

conditions to ensure the accuracy of modeled  $PM_{2.5}$  diurnal profiles. The impact of a minimum planetary boundary layer height is also being tested. The last test focuses on various manners of vertical wind diagnostics using the winds simulated by WRF. The final model output will be evaluated against the ground measurements and satellite data. The chemical speciation of  $PM_{2.5}$  will be directly determined from the model output since it is calculated in CHIMERE. The spatial-temporal chancellization of air quality will be estimated from the collection of these datasets. The PSAT tool integrated into CHIMERE will be used for assessment of source contribution to the modeled  $PM_{2.5}$ . The secondary  $PM_{2.5}$  loading will be analyzed and its contribution to overall  $PM_{2.5}$  in these cities assessed. We will also evaluate different mitigation measures which can lead to improvement of air quality in the cities. The scenarios to be tested include; testing the sensitivity of air quality to changes in anthropogenic emissions, and evaluation of the contribution of other sources through setting the anthropogenic emissions to zero.

The number of requested hours to accomplish this work is 260,000 in skylake.

→ **Heures demandées : 260.000 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  $-0,22$   $[-0,47$  à  $0,04]$   $W/m^2$

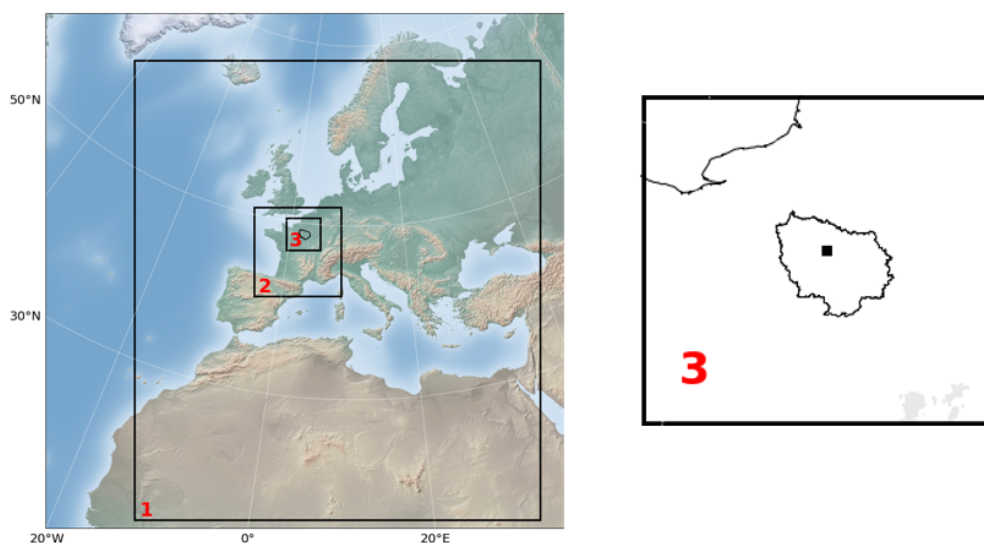


Figure 1: Case study and ACROSS configuration: 1-30kmx30km, 2-6kmx6km, 3-2kmx2km

(ERFari) à cause des interactions aérosol-radiation entre la période 1750-2019. En

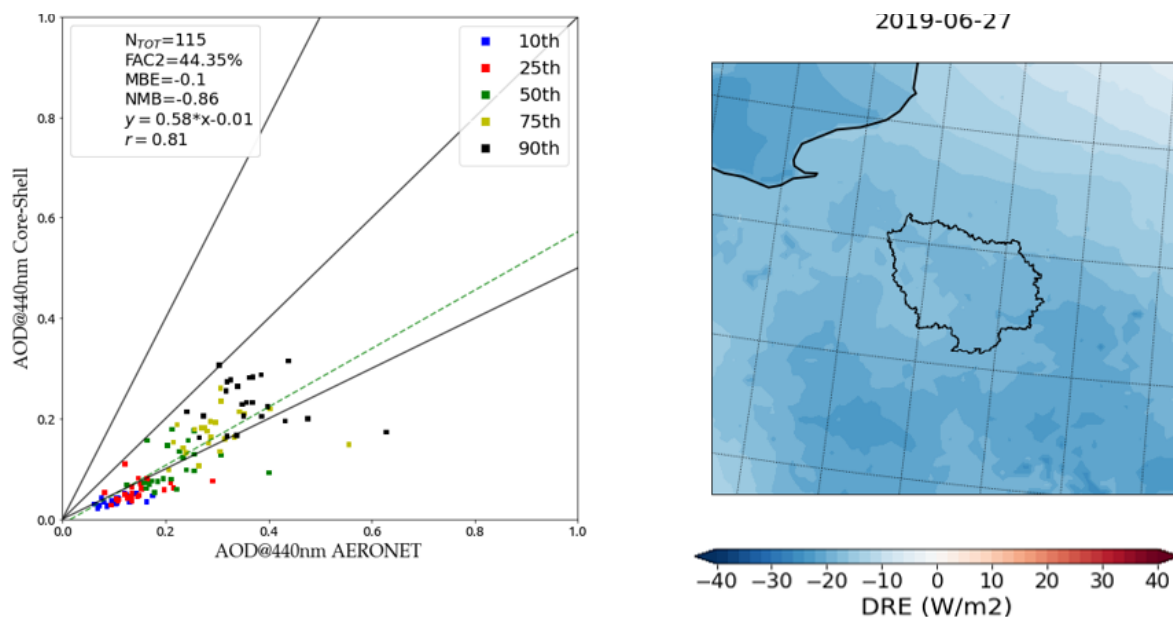
effet, les aérosols peuvent être émis ou produits à partir de sources de nature biogénique ou anthropogénique, et leurs propriétés optiques et l'indice de réfraction changent en fonction de la nature et du pattern de formation. En particulier, ce travail s'inscrit dans le cadre et l'objectif du projet 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 des travaux entrepris l'année dernière et qui nous pourrions affiner au cours de l'année prochaine avec les données obtenues lors de la campagne ACROSS.

Par ailleurs, l'été 2022 a été particulièrement chaud et sec et est considéré comme un proxy pour un climat futur de la période 2050 à 2060<sup>1</sup>. La simulation des interactions entre émissions biogéniques et anthropiques pour cet été permettra alors d'étudier leur effet sur la composition chimique et la qualité pour des conditions climatiques futures. Cet objectif s'inscrit dans un nouveau projet ADEME Acacia ECLAT (Tirer les leçons de l'Été 2022 : quelle qualité de l'air dans un **CLimAT** futur ?), qui vise justement d'utiliser l'été 2022 comme un proxy pour un climat futur. Le projet dont le LISA (Matthias Beekmann) est co-ordinateur commencera en automne 2023 sur une durée de 4 ans.

---

<sup>1</sup> [Rapport Annuel 2023 du Haut Conseil pour le Climat - ACTER L'URGENCE ENGAGER LES MOYENS \(sortie juin 2023\), page 32](#)

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



Pour la période 2023 - 2024, l'objectif reste donc de la modéliser et d'évaluer l'effet radiatif sur la région de l'Ile de France pour la période de la campagne ACROSS 2022. Pour atteindre cet objectif final, une évaluation étape par étape du modèle CHIMERE est nécessaire. Elle inclut une évaluation des émissions biogéniques des COV simulées par le modèle MEGAN pour les conditions chaudes et sèches de l'été 2022 à partir des mesures des COV au cours de la campagne ACROSS, mais aussi de données satellitaires de HCHO, dont le précurseur principal en été est l'isoprène. Elle implique ensuite l'évaluation de l'aérosol organique et inorganique secondaires à partir de ces émissions biogéniques et anthropiques, ainsi que des émissions primaires, y compris des poussières et feux. Enfin, les mesures très fines obtenues lors de la campagne permettront également d'évaluer les propriétés physico-chimiques (distribution de taille, propriétés optiques) de l'aérosol en Ile-de-France. En particulier, elles permettront de mieux évaluer l'impact d'espèces organiques absorbantes sur le bilan radiatif, formées à partir d'émissions anthropiques et de feux notamment. L'ensemble de ces évaluations permettra de mieux qualifier les incertitudes inhérentes aux estimations d'impact radiatif.

En fonction de ces objectifs, le besoin en temps de calcul se répartit comme suit :

- Simulation pour toute la période ACROSS Juin-Juillet 2022 (avec les 3 domaines décrits ci-dessus) et calcul off-line du forçage radiatif lié aux aérosols = 335000 heures
- Simulation des sensibilités avec différentes configurations du modèle MEGAN pour toute la période ACROSS Juin-Juillet, pour évaluer l'effet des conditions climatiques de cet été (avec les 3 domaines décrits ci-dessus) = 335000 heures
- Tests de nouvelles espèces SOA absorbantes dans le modèle, introduites à partir des mesures moléculaires et de propriétés optiques lors de la campagne ACROSS (les 3 domaines décrits ci-dessus) = 200000 heures

→ Heures demandées : 870.000 heures

#### 4. Justification de l'emploi de la machine demandée

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 2023-2024		300
	Modélisation inverse des émissions des précurseurs de la pollution photo-oxydante à partir d'observations satellitaires	ARGONAUT/LOCKAIR : Inversion des émissions de NO <sub>x</sub> à partir de TROPOMI sur l'Europe	200	
		Base de données d'apprentissage pour un nouveau système de modélisation inverse		600
	Méthodes d'analyse de mesures satellitaires	Base de données d'apprentissage pour une régularisation dans le traitement des données satellitaires		600
Modélisation d'un nouvel indicateur de l'impact sanitaire des particules, le potentiel oxydant	Modélisation empirique du potentiel oxydant	Simulation biannuelle 9 x 9 km <sup>2</sup> sur l'Europe	1000	
	Vers la modélisation explicite du potentiel oxydant	Simulation zoomée sur l'IDF (1 x 1 km <sup>2</sup> )	100	
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	260	
Interaction entre émissions biogéniques et anthropiques	Interaction entre émissions biogéniques et anthropiques - impact de l'aérosol sur le bilan radiatif	Simulation pour toute la période ACROSS Juin-Juillet 2022	335	
		Simulation des sensibilités avec différentes configurations du modèle MEGAN	335	
		Tests de nouvelles espèces	200	
<b>Total</b>			<b>2430</b>	<b>1500</b>

#### 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, Kuylentierna Johan C.I., 2018. Estimates of the Global Burden of Ambient PM<sub>2.5</sub>, Ozone, and NO<sub>2</sub> 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.

Crippa, M., Guizzardi, D., Muntean, M., Schaaf, E., Dentener, F., van Aardenne, J. A., Monni, S., Doering, U., Olivier, J. G. J., Pagliari, V., & Janssens-Maenhout, G. (2018). Gridded emissions of air pollutants for the period 1970–2012 within EDGAR v4.3.2. *Earth System Science Data*, 10(4), 1987–2013. <https://doi.org/10.5194/essd-10-1987-2018>

Daellenbach, K. R., Uzu, G., Jiang, J., Cassagnes, L.-E., Leni, Z., Vlachou, A., Stefenelli, 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.

Dubois, N., Foret, G., Beekmann, M., Siour, G., Vida, M., Andre, J.-M., Moukhtar, S., Uzu, G., Jaffrezo, J.-L., Conil, S., Le Berre, L., Marchand, N., Chazeau, B., Gille, G., Alastuey, A., Querol, X., Reche, C., Socquet, S., Bret, C., and Duval, M.: European modeling of atmospheric copper, iron and manganese as key players for aerosol toxicity, EGU General Assembly 2023, Vienna, Austria, 23–28 Apr 2023, EGU23-12878, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu23-12878>, 2023.

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.

Eremenko, M., Sgheri, L., Ridolfi, M., Cuesta, J., Costantino, L., Sellitto, P., Dufour, G., Tropospheric ozone retrieval from thermal infrared nadir satellite measurements: Towards more adaptability of the constraint using a self-adapting regularization. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 10.1016/j.jqsrt.2019.106577

Gaudel, A., O. R. Cooper, G. Ancellet, B. Barret, A. Boynard, J. P. Burrows, C. Clerbaux, P. -F. Coheur, J. Cuesta, E. Cuevas, S. Doniki, G. Dufour, F. Ebojie, G.

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

Granier, C., Darras, S., van Der Gon, H. D., Jana, D., Elguindi, N., Bo, G., Michael, G., Marc, G., Jalkanen, J.-P., & Kuenen, J. (2019). *The Copernicus atmosphere monitoring service global and regional emissions (April 2019 version)* [PhD Thesis]. Copernicus Atmosphere Monitoring Service.

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. Lösche, 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.

Kaiser, J. W., Heil, A., Andreae, M. O., Benedetti, A., Chubarova, N., Jones, L., Morcrette, J.-J., Razinger, M., Schultz, M. G., & Suttie, M. (2012). Biomass burning emissions estimated with a global fire assimilation system based on observed fire radiative power. *Biogeosciences*, 9(1), 527–554

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.

Lattuati, M. (1997). *Contribution à l'étude du bilan de l'ozone troposphérique à l'interface de l'Europe et de l'Atlantique Nord: Modélisation lagrangienne et mesures en altitude. PhD thesis, Université P.M.Curie, Paris, France*

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 PM2.5 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.

Rudke, A. P., Martins, J. A., Hallak, R., Martins, L. D., de Almeida, D. S., Beal, A., Freitas, E. D., Andrade, M. F., Koutrakis, P., & Albuquerque, T. T. A. (2023). Evaluating TROPOMI and MODIS performance to capture the dynamic of air pollution in São Paulo state: A case study during the COVID-19 outbreak. *Remote Sensing of Environment*, 289, 113514. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2023.113514>

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.

Veefkind, J. P., Aben, I., McMullan, K., Förster, H., de Vries, J., Otter, G., Claas, J., Eskes, H. J., de Haan, J. F., Kleipool, Q., van Weele, M., Hasekamp, O., Hoogeveen, R., Landgraf, J., Snel, R., Tol, P., Ingmann, P., Voors, R., Kruizinga, B., ... Levelt, P. F. (2012). TROPOMI on the ESA Sentinel-5 Precursor: A GMES mission for global observations of the atmospheric composition for climate, air quality and ozone layer applications. *Remote Sensing of Environment*, 120, 70–83. <https://doi.org/10.1016/j.rse.2011.09.027>

Vida, M., Foret, G., Siour, G., Weber, S., Favez, O., Jaffrezo, J.-L., Uzu, G., and Beekmann, M.: Oxidative potential modelling of PM<sub>10</sub>: an indicator of aerosol health risk studied in France with the CHIMERE model, EGU General Assembly 2023, Vienna, Austria, 24–28 Apr 2023, EGU23-5896, <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu23-5896>, 2023.

Wagstrom, K. M., Pandis, S. N., Yarwood, G., Wilson, G. M., & Morris, R. E. (2008). Development and application of a computationally efficient particulate matter

apportionment algorithm in a three-dimensional chemical transport model. *Atmospheric Environment*, 42(22), 5650-5659.

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.