

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 initiales (Cpu mono-processeur) sur le projet :

TGCC BULL Irene skl : 2.430.000 heures scalaires

TGCC BULL Irene rome : 1.500.000 heures scalaires

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

TGCC BULL Irene skl : 950.000 heures scalaires

TGCC BULL Irene rome : 900.000 heures scalaires

1. 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 et la santé.

2. Utilisation des heures initiales

Lors de la demande initiale, nous avons demandé 2430 kh sur Skylake et 1500 kh sur Rome. La totalité des heures demandées nous a été attribuée. Aucun problème n'a été rencontré concernant l'utilisation du temps alloué car tous les projets se font dans la continuité des projets précédents, et l'adaptation des codes aux ressources de TGCC a été effectué auparavant.

Les utilisations actuelles de ressources sont :

Accounting for project gen7232 on Irene Rome at 2024-01-31

Total	203387.9
Allocated	1500000.0
Suggested use at this time	25.14%
Real use at this time	13.56%

Accounting for project gen7232 on Irene Skylake at 2024-01-31

Total	1294829.39
Allocated	2430000.0
Suggested use at this time	25.14%
Real use at this time	53.29%

3. Justification de besoin des heures complémentaires

Cette demande complémentaire a pour objectif de compléter la demande initiale. Elle est organisée autour des 3 thèmes de la demande initiale et une, qui fait partie des demandes des années précédentes, mais ne figure dans la demande des heures de calcul 2023/2024:

- Étude de la pollution aux échelles continentales par synergie de la modélisation et des observations satellitaires
- Scénarios urbains d'aménagement et de politiques énergétiques
- Simulation des sources de pollution de l'air en Afrique
- Modélisation des émissions d'aérosols terrigènes pour les régions semi-arides

Étude de la pollution aux échelles continentales par synergie de la modélisation et des observations satellitaires

Pour le premier de ces thèmes, deux activités nécessitent un complément d'heures. La première concerne la modélisation inverse des émissions des précurseurs de la pollution photo-oxydante et particulaire à partir d'observations satellitaires. Cette activité est décrite dans la demande principale mais nécessite des heures de calculs supplémentaires : Entre juillet et décembre 2023, nous étions en phase de production de données pour inverser les émissions de NOx 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 pensions que cette production serait finie avant novembre et comptabilisée sur les heures de l'année passée. Cependant, du fait du ralentissement engendré par une surconsommation en fin de période et a un besoin en RAM plus important que prévu pour les simulations à haute résolution, la production a dû s'étendre sur le début de la période actuelle (novembre-décembre) et a dépassé le nombre d'heures qu'on avait demandé qui était de 200kheures. Depuis nous avons trouvé un moyen pour limiter l'utilisation de la RAM et du nombre de processeurs. Afin de compenser les heures surconsommées et de pouvoir mettre en production les inversions prévues pour cette période pour remplir les objectifs du projet ARGONAUT pour les émissions de COVs et garder quelques capacités de tests du système, nous demandons 450 kheures supplémentaires (300kheures de compensation et 150 kheures pour production et tests).

→ Heures complémentaires demandées : 450.000 heures sur skylake

La deuxième activité concerne les études de la distribution globale de l'ozone dans la très basse troposphère par restitution multispectrale IASI+GOME2. Ce sont les mesures satellitaires à l'échelle mondiale pour lesquelles les ressources de TGCC ont été sollicités dans les demandes de 2021-2022 et 2022-2023. Cette activité n'était pas incluse dans le projet en Août 2023, c'est pourquoi elle fait partie la demande complémentaire.

→ Heures complémentaires demandées : 600.000 heures sur rome

Scénarios urbains d'aménagement et de politiques énergétiques

Ce projet, focalisé sur la modélisation détaillée et multi-échelle de la pollution urbaine en Île-de-France, vise à évaluer les effets des stratégies d'aménagement territorial et des politiques énergétiques sur la qualité de l'air. À travers une approche intégrative, nous analysons l'impact de plusieurs facteurs, incluant la construction de nouvelles infrastructures, l'optimisation des systèmes de transport, et les initiatives de développement et d'aménagement urbain, ainsi que la modernisation du parc immobilier régional. Notre démarche s'appuie sur un ensemble de modèles numériques centrés principalement sur le modèle. L'objectif principal est d'explorer différentes stratégies d'aménagement et de politiques énergétiques pour réduire les inégalités environnementales et les impacts sanitaires de la pollution de l'air dans les zones urbaines. Jusqu'à présent, nos travaux ont permis de simuler un scénario de référence ainsi que plusieurs scénarios alternatifs, révélant des variations significatives dans l'exposition des populations urbaines aux polluants. Pour continuer sur cette voie, et dans le but d'approfondir nos analyses avec des scénarios supplémentaires, nous sollicitons une allocation complémentaire de ressources de calcul. Ces ressources supplémentaires nous permettront d'intégrer des hypothèses plus complexes concernant l'aménagement national et régional, et de mieux comprendre les dynamiques entre résidence, emploi, et loisirs, afin d'affiner notre analyse de l'exposition des populations à la pollution. Le projet s'inscrit également dans le cadre de collaborations internationales, telles que le projet SINO-EUROPEEN IMTECC, visant à optimiser la gestion du trafic multimodal, améliorer la mobilité urbaine, et contribuer à la construction de villes intelligentes et climatiquement neutres.

Scénarios urbains en lien avec le projet POLLEXPO: **300.000 heures sur Irene-Rome**

Scénarios urbains en lien avec le projet IMTECC: **100.000 heures sur Irene-Skylake**

Simulation des sources de pollution de l'air en Afrique

The purpose of the additional computer hours is because more tests need to be done to further improve the current model performance. We intend to test DACCIWA regional emissions inventory to examine its ability to reproduce the observations, this inventory is considered as having improved representation of the local/regional sources compared to the global inventories. Sensitivity test will also be conducted to determine the effect of future changes in emissions. The VBS simulation will also be repeated since the first simulation was affected by the already mentioned bug in the dust module. Another test will focus on using population density data to distribute emissions over the simulation domain unlike all previous simulations which have relied on land use data for this purpose.

→ I'm therefore requesting for **300.000 computer hours on skylake** to be able to accomplish this work.

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

Plusieurs projets ont été consacrés à l'évaluation de la capacité des modèles à reproduire les principales caractéristiques des poussières observées à l'échelle globale ou régionale (Huneeus et al., 2011 ; Zhao et al., 2022). Ces projets ont mis en évidence une grande dispersion des flux de dépôts simulés, due à de larges disparités dans les flux d'émissions simulés et la distribution en taille des poussières. Dans le cadre du projet ANR DRUMS-ASTRID (2013-2016), les flux de dépôts de poussières simulés avec le modèle CHIMERE (Menut et al., 2021) forcé par différents champs météorologiques ont été comparés aux flux de dépôts de poussières mesurés dans les stations INDAAF du Sahel (<https://indaaf.obs-mip.fr>). Dans le cadre du projet européen DustClim, des comparaisons similaires ont été effectuées avec le modèle BSC-DREAM (Dust REgional Atmospheric Model, Basart et al., 2012). En moyenne, le modèle CHIMERE sous-estime les dépôts secs d'un facteur 2, alors que le modèle BSC-DREAM les surestime d'un facteur 3. CAMS fournit la réanalyse la plus récente des champs de poussières minérales. L'assimilation des AOD de MODIS améliore considérablement l'accord avec les concentrations de PM₁₀ mesurées dans les stations INDAAF du Sahel (Cuevas et al., 2015). Cependant, cela produit des incohérences en termes de dépôt : par exemple, le dépôt global simulé est 4 fois plus élevé que les émissions simulées (Zhao et al., 2022). Dans le cadre de l'ANR NETWAT (<https://netwat.osug.fr>), l'objectif du LISA est donc d'améliorer la simulation du cycle de la poussière avec le modèle CHIMERE et en particulier le dépôt. La stratégie consiste à optimiser la simulation du dépôt de poussières en testant différentes paramétrisations de la vitesse de dépôt et différentes distributions en taille des poussières. En plus de la paramétrisation disponible dans le modèle CHIMERE (Wesely et al., 1985 et Zhang et al., 2001), nous intégrerons dans le modèle CHIMERE une paramétrisation plus récente (Zhang et Shao, 2014) qui a fourni une bien meilleure estimation de la vitesse de dépôt des poussières estimée à partir de mesures sur le terrain du flux de dépôt sec (Bergametti et al. 2018). Les concentrations de poussières, la distribution en taille et les flux de dépôt mesurés aux stations INDAAF et les AOD et distribution en taille fournis par les mesures du réseau AERONET seront utilisés pour évaluer les simulations qui seront également testées par rapport aux mesures obtenues dans le cadre du projet NETWAT.

Cette demande n'était pas présente dans la demande initiale car nous étions en phase de recrutement d'un post-doctorant. Ce recrutement sera effectif à compter d'avril 2024, et la solide expérience en calcul scientifique du candidat retenu permettra de démarrer les travaux dès son recrutement.

→ Heures scalaires demandées : 100.000 heures sur skylake