

ECOLE DOCTORALE DES SCIENCES DE L'ENVIRONNEMENT
D'ILE DE France N° 129
Proposition de sujet de thèse pour la rentrée 2020

Nom du Laboratoire d'accueil : LISA N° UMR : 7583
Nom du Directeur du laboratoire : Patrice Coll (Pr)
Adresse complète du laboratoire : Laboratoire Interuniversitaire des Systèmes Atmosphériques (LISA), CNRS UMR 7583, Université Paris-Est Créteil, Université de Paris, Campus Créteil, 61 avenue du Général de Gaulle, 94010 Créteil Cedex, France.

Nom de l'Equipe d'accueil et adresse si différente de celle du laboratoire :

Groupe de Modélisation du LISA / Atmospheric modelisation group

Nom du Directeur de thèse HDR :	Nom du co-directeur de thèse:
Matthias Beekmann	Gil Forêt
Téléphone : + 33 (0)182392096	Téléphone : +33 (0) 145171389
Mail : Matthias.Beekmann@lisa.u-pec.fr	Mail : Gilles.Foret@lisa.u-pec.fr

Nom de la Co-Directrice de thèse (HDR) : Gaelle Uzu
Téléphone : + 33 (0)456520994
Mail : Gaelle.Uzu@ird.fr
Laboratoire IGE (UMR5001 / UR 252), 460 rue de la piscine, 38400 Saint Martin d'Hères

• **Titre de la thèse en Français :**

**Modélisation du potentiel oxydant de l'aérosol :
un indicateur pour l'impact sur la santé**

• **Titre de la thèse en Anglais :**

**Simulation of the aerosol oxidative potential :
a new health related indicator of air quality**

• **Résumé Sujet en Français (1 page maximum) :**

La masse des particules d'un diamètre inférieur à 2.5 µm (PM_{2.5}) a été traditionnellement utilisée comme indicateur d'impact de la pollution particulaire sur la santé. Néanmoins, il est bien connu que l'impact sanitaire de l'aérosol dépend de sa taille et spéciation chimique. En particulier, les espèces carbonées à fort pouvoir oxydant et certains métaux de transition peuvent exercer un stress oxydant sur les cellules, et favoriser des réactions inflammatoires. Ce potentiel oxydant peut-être caractérisé dans des échantillons d'air ambiant par des tests extra cellulaires, et varie en fonction de la source de l'aérosol et notamment d'aérosol organique.

Le groupe de modélisation du LISA co-développe le modèle de qualité de l'air CHIMERE, également utilisé pour la prévision de la qualité de l'air. Le LISA a une grande expérience de simulation des

différents polluants dans un contexte de pollution urbaine ou d'échelle régionale/continentale. Il a entre autres mené des travaux d'évaluation de différentes modules d'aérosol organique et d'assimilation de données. Un nouvel axe des travaux de recherche pour les prochaines années consiste à rendre ces simulations les plus pertinentes possibles pour l'évaluation de l'impact de la pollution de l'air sur la santé humaine. Le groupe de chimie atmosphérique de l'IGE est à la pointe de l'état de l'art sur la métrique d'intérêt sanitaire du Potentiel Oxydant (PO) des aérosols. Il développe une approche multidisciplinaire aux frontières de la géochimie, de la toxicologie, de l'épidémiologie et de la modélisation visant à valider/invalidier le PO comme une nouvelle métrique de la qualité de l'air. Ce sujet bénéficiera des savoir-faire complémentaires des encadrants des deux laboratoires.

Dans ce contexte, la thèse proposée vise à modéliser le potentiel oxydant de l'aérosol et de sa fraction organique avec le modèle de qualité de l'air CHIMERE. Il s'agira de déterminer si et comment la variabilité spatio-temporelle du potentiel oxydant diffère des concentrations massiques du $PM_{2.5}$ et de quantifier ses principales sources (trafic, chauffage résidentielle, industrie, biogénique, ...). Une telle démarche de modélisation est novatrice et n'a pas encore été entreprise en France.

Cette modélisation du potentiel oxydant pourra être effectuée en deux étapes : d'abord, des relations empiriques entre type d'aérosol (organique) et potentiel oxydant issus de la littérature seront introduites dans le modèle. Elles seront issues de la littérature, et surtout de la base de données unique constituée par une équipe de l'IGE pilotée par Gaëlle Uzu. Constituée d'environ 5000 échantillons, elle comporte aujourd'hui des séries annuelles (env. 100 points de prélèvements par an) sur plus de 20 sites dans le monde entier (Bolivie, Inde, Chine, 5 sites suisses, Pays-Bas et environ 15 sites français) permettant entre autres de calculer des PO intrinsèques par type de sources. Le sujet propose une partie du travail à Grenoble pour intégrer au mieux les données de terrain dans le modèle. Ces travaux nécessitant également l'utilisation d'un module de suivi des sources d'aérosols déjà intégré dans CHIMERE.

Dans un deuxième temps, les principaux agents du potentiel oxydant seront pris en compte explicitement dans les simulations, notamment les métaux de transition (Cu, Fe, Mn, etc.), et certaines molécules organiques, en particulier les quinones dont les voies chimiques de formation (à partir d'hydrocarbures aromatiques polycycliques) seront introduites dans le mécanisme chimique du modèle.

Cette thèse doit à termes contribuer à la transformation des politiques de gestion de la qualité de l'air à travers la mise en œuvre d'une nouvelle variable prédictive pertinente pour l'exposition sanitaire afin de doter la France d'un outil plus efficace pour réduire l'exposition des populations.

• **Résumé Sujet en Anglais (1 page maximum) :**

The mass of fine particles with a diameter of less than $2.5 \mu m$ ($PM_{2.5}$) has traditionally been used as an indicator of the health impact of particulate matter pollution. Nevertheless, it is well known that the health impact of particulate matter depends on its size and chemical speciation. In particular, carbonaceous species with high oxidizing power and certain transition metals can exert oxidative stress on cells, and promote inflammatory reactions. This oxidative potential (OP) can be characterized in ambient air samples by extracellular tests, and varies according to the source of the aerosol and in particular of organic aerosol.

The LISA modelling group is co-developing the CHIMERE air quality model, widely used for air quality studies and forecasting. LISA has extensive experience in simulating different pollutants in a context of urban pollution or regional/continental scale. Among other things, the group has carried out

development and evaluation of various organic aerosol modules and data assimilation. A new focus of research in the coming years is to make these simulations as relevant as possible to the assessment of the air pollution impact on human health. The IGE Atmospheric Chemistry Group develops a multidisciplinary approach at the boundaries of geochemistry, toxicology, epidemiology and modelling to validate/invalidate the OP as a new air quality metric. This subject will benefit from the complementary know-how of the supervisors of the two laboratories.

In this context, the proposed thesis aims at modelling the oxidative potential of the aerosol and its organic fraction with the CHIMERE air quality model. We seek at determining if and how the spatial and temporal variability of the oxidative potential differs from the mass concentrations of PM_{2.5} and to quantify its main sources (traffic, residential heating, industry, biogenic, etc.). Such a modelling approach is highly novel has not yet been undertaken in France.

Modelling of the oxidative potential (PO) can be carried out in two steps: first, empirical relationships between the type of (organic) aerosol and the oxidative potential from the literature will be introduced into the model. They will be based on the literature, and above all on the unique database created by the IGE led by Gaëlle Uzu. Consisting of about 5000 samples, it now includes annual series (about 100 sampling points per year) at more than 20 sites worldwide (Bolivia, India, China, 5 Swiss sites, the Netherlands and about 15 French sites) allowing, among other things, to calculate intrinsic POs by type of source. This part of the work will be partially performed in Grenoble. For this, a source tracking module adapted to CHIMERE, ingénieur de recherche au LISA, will also be used.

In a second step, the main agents of the oxidative potential will be explicitly taken into account in the simulations, in particular transition metals (Cu, Fe, Mn, etc.), and certain organic molecules, in particular quinones. For the latter, chemical formation pathways (from PAHs, polycyclic aromatic hydrocarbons) will be introduced into the chemical mechanism of the model.

This thesis should ultimately contribute to a transformation of air quality management policies through the implementation of a new predictive variable relevant to health exposure in order to provide France with a more effective tool to reduce population exposure.

• Type de financement autre que ED 129, précisez si envisageable ou acquis (CNES, CEA, ADEME etc...) :

Une demande pour une bourse de thèse ADEME sera soumis pour le 31. Mars.

• Encadrement : Actuellement pas d'encadrement d'étudiant.e.s de thèse pour Matthias Beekmann
L'encadrement de la thèse bénéficiera du concours de Guillaume Siour, Ingénieur de recherche au LISA, pour les aspect de développement du modèle CHIMERE.