

Fiche sujet de stage

Titre du sujet de stage : Un réseau de neurones pour modéliser l'évolution des particules ultrafines.

Description du sujet :

Contexte : Les particules ultra fines correspondent aux particules dont le diamètre équivalent est égal ou inférieur à $0,1 \mu\text{m}$. Elles sont jusqu'à présent relativement peu étudiées du fait de leur très faible contribution aux indicateurs habituellement utilisés dans le cadre de la pollution atmosphérique. Néanmoins les particules ultrafines représentent généralement la majorité du nombre de particules des populations d'aérosols observées en atmosphère libre et confinée. Du fait de leur nombre et de leur grande pénétration dans le corps humain, elles constituent aujourd'hui un enjeu de santé public. De ce fait, il est très probable dans un proche avenir que le nombre de particules soit réglementé comme le sont déjà les concentrations massiques. La modélisation des particules ultrafines est inséparable de la modélisation des gros aérosols actuellement pris en compte dans les modèles d'aérosols existants. Le modèle SSH-aerosol développé par le CERE et l'INERIS représente la formation et l'évolution des particules ultrafines ainsi que des particules fines et grossières. SSH-aerosol est implémenté dans les modèles de qualité de l'air CHIMERE et Polyphemus, ainsi que dans le code de mécanique des fluides Code_Saturne. Les processus représentés dans SSH-aerosol ont été étudiés pour décrire le nombre de particules et les processus spécifiques aux particules ultrafines (effet Kelvin pour la condensation/évaporation, nucléation).

Le processus de condensation/évaporation est le processus influençant majoritairement les particules fines et grossières (Zhang et Wexler 2002). Cependant, du fait de la courbure des particules de diamètre inférieur à 10-100 nm, seule la condensation/évaporation des composés peu volatils est importante pour l'évolution de ces particules, qui sont cependant, contrairement aux particules fines et grossières, aussi fortement influencés par la coagulation et la nucléation. Plusieurs paramétrisations de la nucléation sont fréquemment utilisées. Elles considèrent un ou plusieurs composés gazeux: acide sulfurique, ammoniac et/ou organiques de faible volatilité. Parce que les particules ultrafines sont de faible dimension, les temps caractéristiques associés aux processus impliqués sont faibles, impliquant l'utilisation de petit pas de temps dans la simulation des aérosols, et donc des temps de calculs importants pour les simulations de qualité de l'air.

Objectif : Étant donné des concentrations atmosphériques en aérosols et gaz, l'objectif est de représenter l'évolution temporelle des particules de diamètre inférieur à un diamètre critique (à fixer entre 10 et 100 nanomètres) à l'aide de techniques d'apprentissage automatique, notamment d'un réseau de neurones résiduel profond et probablement dense, pour différentes paramétrisations de la nucléation. Ce réseau pourra ensuite servir de modèle substitut permettant de calculer très rapidement l'évolution des particules ultrafines. Les performances du réseau seront également un indicateur de la capacité à réduire la dynamique des particules ultrafines.

Les premières expériences seront mono-espèces (sulfate typiquement). On augmentera ensuite la difficulté en considérant la dépendance aux paramètres tels que la concentration du gaz, la température et l'humidité relative. Puis on rajoutera des espèces, typiquement l'ammoniac.

Bibliographie :

Zhang KM, Wexler AS. (2002) Modeling the number distributions of urban and regional aerosols: theoretical foundations. Atmos. Environ., 36, 1863–1874.

Résumé en anglais (5 lignes) : The goal of this internship is to develop a surrogate model for the dynamics of ultrafine particles in the aerosol model SSH, which is used in the air quality models CHIMERE and Polyphemus. Indeed, their dynamics are numerically very costly and a reduced model could considerably accelerate their simulation. The surrogate model will be a residual deep and dense neural network.

Responsable du stage (Nom/prénom/statut) : Bocquet Marc (Prof. à l'École des Ponts ParisTech), Sartelet Karine (DR2). Emails : marc.bocquet@enpc.fr et karine.sartelet@enpc.fr

Laboratoire concerné : CEREAS

Equipes de recherche concernées : Assimilation de données et modélisation de la qualité de l'air.

Niveau du stage (Licence, M1, M2, internship) : M2

Licence ou Master(s) où sera proposé le sujet : TRIED, MOCIS, WAPE

Thème scientifique de l'IPSL concerné : Stage pluri-disciplinaire en lien avec les thèmes SAMA et Composair de l'IPSL et appliqué à des outils de l'IPSL. Participation du stagiaire aux activités de SAMA.

Durée du stage : 4 à 6 mois

Période : du 15/03/2020 au 14/09/2020

Est-il prévu une thèse dans le prolongement du stage ? C'est possible, mais pas de financement à ce stade.