

Sujet de thèse

Titre de la thèse : Conception d'un algorithme sous OOPS pour l'inversion des sources en chimie atmosphérique.

Encadrement de thèse :

Olivier Pannekoucke (CNRM, HDR, olivier.pannekoucke@meteo.fr)

Sujet de thèse :

Les activités anthropiques sont responsables d'émissions de composés chimiques réactifs, qui interagissent ou s'accumulent dans l'atmosphère. L'estimation du cadastre des sources & puits – les flux nets – est un enjeu de la modélisation en prévision pour la qualité de l'air ou pour la sécurité aérienne lorsqu'il s'agit de cendres volcaniques. Ainsi, disposer d'un système de quantification des flux nets apparaît comme incontournable dans la modélisation et la prévision en chimie atmosphérique.

L'état de l'art dans l'estimation des flux nets repose sur le formalisme de l'assimilation de données variationnelles, capable de séparer les contributions issues des conditions initiales de celles issues des sources/puits. Pour cela il est nécessaire de procéder à une modélisation des flux, par exemple en recherchant un flux journalier moyen sur une fenêtre temporelle – ce qui limite la résolution temporelle des flux nets. Ce formalisme variationnel est proche de la résolution des équations du filtre de Kalman autre méthode incontournable pour l'assimilation de données. Récemment, une nouvelle technique de résolution des équations du filtre de Kalman a été introduite dans laquelle les covariances d'erreur de prévision et d'analyse sont approchées à l'aide d'un modèle de covariance, ajusté à l'aide d'un jeu de paramètres. Dans cette approche, les étapes de prévision et d'analyse du filtre de Kalman sont réalisées directement sur les jeux de paramètres utilisés pour décrire les covariances. L'intérêt majeur est de réduire le coût de calcul associé à la propagation des incertitudes de prévision, en remplaçant la propagation des covariances par celles des paramètres du modèle de covariance utilisé. Cette technique de résolution des équations du filtre de Kalman est connue sous le nom de filtre de Kalman paramétrique.

L'objectif de la thèse est de proposer un nouvel algorithme d'estimation des flux nets reposant sur le filtre de Kalman paramétrique. Cette approche devrait permettre de réduire la complexité de l'estimation des flux tout en offrant une meilleure résolution temporelle que les techniques existantes. Afin de comparer avec la littérature, il sera nécessaire de développer un schéma d'estimation des flux nets correspondant à l'état de l'art. Cette partie du travail sera réalisée dans l'environnement OOPS – une sur-couche de programmation orientée objet, développée pour les besoins de l'assimilation de données. Un des principaux avantages d'OOPS est de permettre l'élaboration d'algorithmes de manière unifiée pour les tester soit dans des conditions académiques, soit proche d'une utilisation opérationnelle. Ainsi, les développements seront d'abord réalisés et validés dans la maquette QG-Chem qui reproduit un modèle de chimie transport simplifié reposant sur le modèle quasi-géostrophique pour la partie dynamique. Puis, une utilisation réaliste sera menée dans l'environnement ARPEGE/IFS où l'on cherchera à retrouver un cadastre d'émission spécifié, sous la forme d'une expérience simulée reproduisant le contexte d'une éruption volcanique.

La thèse s'inscrit dans le cadre de projets soutenus par la communauté scientifique, et sera réalisée au CERFACS et au CNRM pour combiner l'expertise en algorithmie et en chimie atmosphérique des deux laboratoires. Ce travail bénéficiera d'un environnement stimulant reposant sur l'expertise internationale de ces laboratoires ainsi que de leurs réseaux de collaborateurs scientifiques de haut niveau. En particulier, l'étudiant.e sera amené.e à présenter ses travaux dans des conférences scientifiques internationales. La priorité sera donnée aux candidats.es ayant une expérience, ou une solide formation, en assimilation de données, ou en prévision numérique, ou en mathématiques appliquées au calcul scientifique. La maîtrise de la programmation en python (ou langage équivalent C++, fortran) est indispensable.