



## PROPOSITION DE SUJET POUR PROJET M2

**Titre : Mieux comprendre l'influence des suies sur le climat : calcul des propriétés de diffusion de la lumière par les particules carbonées issues des phénomènes de combustion.**

**Mots clés :** nanoparticules, simulation atomistique, suie, optique, fortran, python

**Auteur :** Michel DEVEL

**Tél + email :** 03.63.08.24.94, [michel.devel@femto-st.fr](mailto:michel.devel@femto-st.fr)

**Co-encadrant :** Sylvain Picaud (UTINAM), [sylvain.picaud@utinam.cnrs.fr](mailto:sylvain.picaud@utinam.cnrs.fr)

**Lieu principal du déroulement du projet :**

Bâtiment de FEMTO-ST situé sur le site Temis Sciences

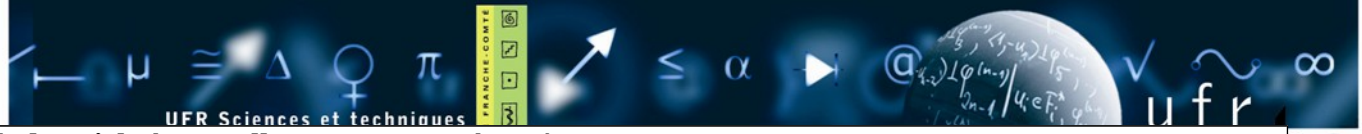
**Sujet:** depuis plusieurs années, je m'intéresse (en collaboration avec des chercheurs de l'institut UTINAM et des chercheurs de l'université de l'université de Guangxi (Chine)) à la modélisation des propriétés optiques des suies carbonées émises lors de certaines combustions. L'impact sur la santé et sur le climat de ces suies n'est toujours pas très clair car très dépendant des caractéristiques morphologiques et chimiques qui dépendent très fortement des conditions de production et des interactions avec les gaz de l'atmosphère lors de leur vieillissement. Or l'observation de leur interaction avec la lumière est quasiment le seul moyen de caractériser leur structure in situ, c'est-à-dire dans l'atmosphère.

Dans ce cadre, nous avons développé un programme (en fortran 95) capable de calculer les propriétés de la lumière diffusée par des suies de structures définies à l'échelle atomique, afin de les comparer aux résultats expérimentaux et en déduire des renseignements sur la structure des suies expérimentales, en fonction de leur vieillissement dans l'atmosphère. Une version série (utilisée pour plusieurs articles) existe déjà pour des particules élémentaires de suies composées uniquement d'atomes de carbone. Récemment, nous avons parallélisé des portions du programme fortran existant (avec openMP) et d'autre part développé des parties en python pour l'obtention de paramètres pour d'autres types d'atomes et pour faciliter le traitement graphique et statistique des fichiers de sortie.

Le travail proposé consisterait à contribuer à améliorer cet ensemble de codes, par exemple en augmentant la parallélisation avec MPI ou les « co-arrays » de fortran 201x, ou en améliorant la partie python pour l'obtention de nouveaux paramètres atomiques, ou en reprenant une partie implémentant un algorithme multi-échelle qui pourrait être amélioré, ou encore en améliorant l'algorithme d'intégration tridimensionnel permettant de calculer les moyennes sur toutes les orientations de particules.

**Support technique – matériel à disposition :**

PC de bureau (fourni) ou PC portable de l'étudiant, accès au cluster de l'UBFC



**Industriels éventuellement concernés : néant**

*Volume : 4 mois à temps plein de début février à fin mai. Rémunération : 3,75 € / heure*