

Proposition de recherche doctorale 2025-2028

[PINNACLE: Physics Informed Neural Networks for Accelerated Cloud Light-scattering Emulator](#)

Mots clés : Transfert radiatif, Physics-Informed Neural Networks (PINN), Graph Neural Network, Vision Transformer, Télédétection

Lieu : LOA / CRISTAL - Université de Lille, France

Contact : Directeur Pr Jérôme Riedi (LOA) jerome.riedi@univ-lille.fr
 Co-encadrant Dr Pierre Tirilly (CRISTAL) pierre.tirilly@univ-lille.fr

Approches neuromorphiques informées par la physique pour la modélisation radiative des atmosphères nuageuses tridimensionnelles.

Résumé : L'intelligence artificielle révolutionne les sciences de l'atmosphère et notamment la prévision météorologique. D'une part des modèles comme GraphCast ont montré des performances remarquables, et par ailleurs, l'apprentissage profond informé par la physique se développe, combinant intelligence artificielle et lois physiques pour mieux représenter les phénomènes atmosphériques. En télédétection, l'augmentation de résolution des capteurs spatiaux accroît considérablement les besoins de calculs requis pour l'analyse d'observations toujours mieux résolues. L'apprentissage profond informé par la physique pourrait offrir une solution efficace pour modéliser plus rapidement le signal atmosphérique de manière réaliste. Pour cela, notre projet explorera l'usage combiné de réseaux de neurones convolutionnels ou en graphe et de modèles d'attention, en guidant leur attention grâce aux lois et aux propriétés physiques de l'atmosphère, pour développer des modèles de calcul rapides dans des atmosphères nuageuses 3D.

Description du projet : L'application des méthodes d'apprentissage profond dans le domaine des sciences de l'atmosphère, et en particulier pour la prévision du temps, a connu, comme dans beaucoup d'autres domaines, un essor fulgurant ces dernières années. Ces méthodes d'apprentissage profond viennent concurrencer les modèles classiques de simulation déterministe basés sur les équations physiques réelles, dont le coût calculatoire est extrêmement élevé, et croît avec la quantité de données à traiter. Les performances obtenues par le modèle GraphCast par exemple témoignent sans ambiguïté du potentiel de ces méthodes (Remi Lam et al, 2023). Les comparaisons entre modèles dit « data-driven » comme GraphCast (Lam et al, 2023) ou Pangu-Weather (Bi et al, 2023) et leurs équivalents déterministes reposant sur des équations physiques, montrent à la fois l'énorme potentiel de ces modèles reposant sur l'apprentissage profond en tant qu'émulateurs rapides mais aussi le chemin qu'il reste à parcourir (Olivetti et al, 2024) pour permettre par exemple d'aborder la question des incertitudes associées aux inférences de ces modèles (Molina et al, 2021) et la prise en compte de contraintes physiques (Kashinath et al, 2021). L'explicabilité des modèles développés pour les sciences atmosphériques reste en effet très limitée et les raisons sous-jacentes aux performances des différentes architectures mises en œuvre demeurent également largement masquées par la complexité de celles-ci.

Pour dépasser ces limitations et améliorer l'efficacité des modèles lors de la phase d'apprentissage, le développement de méthodes neuronales informées par la physique a connu un essor très important ces dernières années et en particulier pour trois domaines que sont l'émulation de paramétrisation de processus atmosphériques complexes, la descente d'échelle (downscaling) pour la production de données à haute résolution et la prédiction spatio-temporelle de la dynamique océanique et atmosphérique (Kashinath et al., 2021).

Nous plaçons notre projet dans ce contexte général et plus spécifiquement dans le cadre de l'observation spatiale pour les applications en sciences de l'atmosphère.

Dans le domaine de la télédétection, la détermination des propriétés de l'atmosphère à partir de l'imagerie multispectrale ou hyperspectrale peut être vue comme un problème assez classique en informatique de traduction image-à-image habituellement abordé dans le domaine de la vision ou de l'apprentissage. Le problème consiste à faire correspondre des images multispectrales issues de l'observation spatiale (ie. multicanaux) à des images décrivant les propriétés physiques de l'atmosphère.

Pour établir cette correspondance, les algorithmes actuels d'inversion des propriétés de l'atmosphère reposent largement sur des codes de calcul du transfert radiatif permettant de simuler le signal observable dans différents canaux spectraux à partir d'une description plus ou moins détaillée de l'atmosphère. Des méthodes d'inversion ou d'optimisation permettent alors de restituer les propriétés physiques de l'atmosphère en ajustant les propriétés recherchées jusqu'à obtenir une correspondance entre signal simulé et observations. Ces codes de simulation deviennent cependant extrêmement coûteux en temps de calcul à mesure que la complexité des scènes et notamment que la structure tridimensionnelle de l'atmosphère doit être prise en compte. Si des progrès indéniables ont été réalisés ces dernières années pour accélérer les codes de calcul reposant sur des méthodes de Monte-Carlo, ceux-ci demeurent encore beaucoup trop coûteux pour envisager leur utilisation dans le traitement massif et opérationnel des données issues des systèmes d'observation météorologique. Ce problème est d'autant plus important que les résolutions spectrales et spatiales des systèmes d'observations ne cessent de croître. Cette augmentation des résolutions spectrales et spatiales engendre un double effet sur les besoins de performances des codes de calcul car d'une part le volume de données augmente mais surtout, la simulation réaliste du signal nécessite la prise en compte explicite ou implicite de la nature tridimensionnelle des scènes observées afin de garantir la cohérence entre les propriétés atmosphériques et les observations multispectrales réalisées à différentes échelles. D'un point de vue technique, les méthodes itératives d'inversion des propriétés atmosphériques désormais mises en œuvre nécessitent également des moyens de calculs très intensifs.

Ainsi le domaine de la télédétection spatiale de l'atmosphère est confronté à un défi majeur concernant la capacité à simuler de manière beaucoup plus rapide qu'actuellement, tout en restant physiquement réaliste, le signal atmosphérique observé. Le développement de modèles neuronaux informés par la physique pour émuler de manière efficace et précise les calculs de transfert radiatif est donc une piste qui pourrait permettre de dépasser de nombreuses limitations actuelles dans l'observation de l'atmosphère. En nous inspirant des travaux réalisés dans le cadre de la prévision météorologique, nous proposons dans ce projet d'explorer l'usage combiné de réseaux de neurones (convolutionnels ou en graphe) et de modèles d'attention, en guidant leur attention grâce aux lois et aux propriétés physiques de l'atmosphère, pour développer des modèles rapides de calcul du transfert dans des atmosphères nuageuses 3D.

Les travaux précurseurs de Mishra et Molinaro (2021) ont posé des bases intéressantes pour aborder le problème de la simulation du transfert radiatif et de sa formulation inverse à partir de l'apprentissage profond informé par la physique. Nous proposons notamment d'aborder au cours de cette thèse le problème de la formulation et de l'application d'un modèle reposant sur l'apprentissage profond informé par la physique permettant de simuler de manière réaliste le signal multispectral et multidirectionnel (ie dépendant de la géométrie d'observation) observable pour des atmosphères nuageuses tridimensionnelle.

On orientera nos travaux sur des architectures de modèles qui semblent a priori adaptées à la géométrie des problèmes de physique atmosphérique, en particulier des architectures capables de considérer l'information contenue à plusieurs échelles dans les données d'apprentissage. Même si les performances du modèle Pangu-Weather (basé sur les transformers) sont globalement plus faibles que GraphCast (basé sur les GNN), il permet parfois d'obtenir de meilleures prévisions dans certaines conditions (Bi et al., 2022). Ceci suggère que les mécanismes d'attention des transformers pourraient apporter une information supplémentaire dans le traitement des données atmosphériques. Cette hypothèse a notamment conduit certains auteurs à tester l'utilisation combinée de GraphCast avec des transformers (modèles FuXi) (Liu et al, 2024). L'utilisation de la

fonction coût de GraphCast avec des transformers a permis à Nguyen et al (2024) de montrer que des performances similaires pouvaient être obtenues tout en nécessitant moins de données et de calculs.

Le transfert radiatif dans des atmosphères tridimensionnelles nuageuses est un problème où les différentes échelles peuvent interagir. Ferlay et Isaka (2006) ont établi une formulation multi-résolution de l'équation du transfert radiatif pour des milieux inhomogènes. L'équation multi-résolution est décomposée en deux ensembles d'équations facilitant son interprétation physique. Le premier ensemble représente le transfert radiatif à une certaine échelle d'approximation, tandis que le second décrit ce transfert à des échelles plus petites. Ces équations exposent explicitement comment les couplages à l'échelle locale, résultant des fluctuations des propriétés optiques et des champs de rayonnement à différentes échelles, contribuent au champ de rayonnement à une échelle donnée et en un point précis, en introduisant des fonctions sources internes supplémentaires. Dans leur article de 2006, Ferlay et Isaka expriment ces fonctions à l'aide de termes impliquant les coefficients de connexion du système multi-résolution choisi ainsi que les coefficients d'échelle et d'ondelettes des propriétés optiques inhomogènes. Nous postulons pour ce projet qu'une telle représentation pourrait être obtenue à partir de réseaux de neurones profonds possédant des architectures adaptées et que ceux-ci pourraient être utilisés pour émuler le transfert radiatif dans des atmosphères nuageuses 3D avec un coût calculatoire beaucoup moins important que les méthodes exactes actuelles reposant largement sur l'utilisation de simulations de Monte Carlo.

Les graph neural networks (GNN) (Scarselli et al., 2009) utilisés par GraphCast et les vision transformers (ViT) (Dosovitskiy et al, 2021) utilisés par PanguWeather sont deux types d'architectures permettant de modéliser ces relations multi-échelles, d'une manière intégralement guidée par les données. Notons que ces deux approches ne sont pas nécessairement orthogonales, puisque les mécanismes d'attention des transformers peuvent être intégrés à des architectures GNN (Veličković et al., 2018). Notre hypothèse est que ces architectures peuvent bénéficier d'approches de type réseaux de neurones informés par la physique (PINN — Physics-informed neural networks) (Raissi et al., 2019) pour intégrer explicitement des modèles physiques des propriétés radiatives de l'atmosphère à différentes échelles spatiales, tels que celui de Ferlay et Isaka (2006). L'intégration de ces connaissances au réseau de neurones permettrait de guider le processus d'apprentissage vers des solutions cohérentes avec les modèles physiques, améliorant ainsi la qualité des prédictions tout en nécessitant moins de données d'apprentissage.

Dans ce projet, nous investiguerons donc l'ajout de modèles physiques dans les architectures de type GNN et ViT. Nous établirons d'abord quels modèles physiques sont les meilleurs candidats pour atteindre cet objectif, puis étudierons comment ces modèles peuvent être intégrés à des architectures GNN, ViT ou GAT (Graph Attention Networks), pour déterminer quel type d'architecture offre le meilleur compromis entre qualité de prédiction et coût calculatoire.

Les modèles développés seront entraînés et évalués à partir de simulations de référence générées par des programmes de simulation Monte Carlo pour les atmosphères 3D ou des modèles analytiques valides pour des situations simples permettant de représenter physiquement les conditions limites du signal.

Bien que fondamentaux par nature, les résultats de ces travaux pourront trouver un cadre applicatif direct dans l'exploitation de missions spatiales en cours ou en préparation par les agences spatiales française et européenne (C3IEL, 3MI, EarthCare, ...). Par ailleurs ces travaux pourraient également déboucher sur de nouvelles méthodes de calcul rapide du transfert radiatif utilisable par les modèles de prévision du temps ou de simulation climatique et bénéficieraient ainsi à une très large communauté en sciences de l'atmosphère.

Bibliographie :

- Bi, K., Xie, L., Zhang, H. *et al.* Accurate medium-range global weather forecasting with 3D neural networks. *Nature* **619**, 533–538 (2023). <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06185-3>
- Bi, K., Xie, L., Zhang, H., Chen, X., Gu, X. and Tian, Q., (2022). Pangu-Weather: A 3D High-Resolution Model for Fast and Accurate Global Weather Forecast. 10.48550/arXiv.2211.02556.
- Dosovitskiy, Alexei, Lucas Beyer, Alexander Kolesnikov, Dirk Weissenborn, Xiaohua Zhai, Thomas Unterthiner, Mostafa Dehghani, Matthias Minderer, Georg Heigold, Sylvain Gelly, Jakob Uszkoreit, Neil Houlsby, An image is worth 16X16 words: transformers for image recognition at scale, International Conference on Learning Representations (ICLR), 2021, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2010.11929>.
- Ferlay, N., and H. Isaka, 2006: Multiresolution Analysis of Radiative Transfer through Inhomogeneous Media. Part I: Theoretical Development. *J. Atmos. Sci.*, **63**, 1200–1212, <https://doi.org/10.1175/JAS3678.1>.
- Kashinath K *et al.*, Physics-informed machine learning: case studies for weather and climate modelling. (2021) *Phil. Trans. R. Soc. A*.37920200093. <http://doi.org/10.1098/rsta.2020.0093>
- Lam R., *et al.*, Learning skillful medium-range global weather forecasting. *Science* **382**,1416-1421(2023).DOI:[10.1126/science.adi2336](https://doi.org/10.1126/science.adi2336)
- Liu, CC., Hsu, K., Peng, M.S. *et al.* Evaluation of five global AI models for predicting weather in Eastern Asia and Western Pacific. *npj Clim Atmos Sci* **7**, 221 (2024). <https://doi.org/10.1038/s41612-024-00769-0>
- Mishra,S. et R. Molinaro, Physics informed neural networks for simulating radiative transfer, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, Volume **270**, 2021, 107705, <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2021.107705>
- Molina, M. J., O'Brien, T. A., Anderson, G., Ashfaq, M., Bennett, K. E., Collins, W. D., Dagon, K., Restrepo, J. M., and Ullrich, P. A.: A Review of Recent and Emerging Machine Learning Applications for Climate Variability and Weather Phenomena, *Artif. Intell. Earth Syst.*, **2**, 220086, <https://doi.org/10.1175/AIES-D-22-0086.1>, 2023.
- Nguyen, Tung, Rohan Shah, Hritik Bansal, Troy Arcomano, Romit Maulik, Veerabhadra Kotamarthi, Ian Foster, Sandeep Madireddy, et Aditya Grover. « Scaling Transformer Neural Networks for Skillful and Reliable Medium-Range Weather Forecasting », s. d. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2312.03876>
- Olivetti, L. and Messori, G.: Do data-driven models beat numerical models in forecasting weather extremes? A comparison of IFS HRES, Pangu-Weather, and GraphCast, *Geosci. Model Dev.*, **17**, 7915–7962, <https://doi.org/10.5194/gmd-17-7915-2024>, 2024.
- Petar Veličković, Guillem Cucurull, Arantxa Casanova, Adriana Romero, Pietro Liò, Yoshua Bengio, Graph Attention Networks, International Conference on Learning Representations (ICLR), 2018, <https://doi.org/10.48550/arXiv.1710.10903>.
- Raissi,M., P. Perdikaris, G.E. Karniadakis, Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations, *Journal of Computational Physics*, **378**, 686-707, 2019, <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.10.045>.
- Scarselli, F., M. Gori, A.C. Tsoi, M. Hagenbuchner and G. Monfardini, The graph neural network model', *IEEE Transactions on Neural Networks*, **20**(1), 61-80, 2009, <https://doi.org/10.1109/TNN.2008.2005605>.
- Siddhartha Mishra et Roberto Molinaro, Physics informed neural networks for simulating radiative transfer, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **270**, 2021, 107705, <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2021.107705>