

# Portail théorique

**Logiciel d'analyse des résultats  
de simulation**

**J. Normand, F. Roy, F. Le Petit**

# Introduction de codes de simulation dans le VO

- ❑ **Utilisation de l'infrastructure Astrogrid.**
- ❑ **Accès aux codes et à des moyens de calcul dédiés.**
- ❑ **Nécessité de proposer un outil utilisable par des non spécialistes :**
  - Documentation complète ;
  - Interface user friendly.
- ❑ **Exécution identique en locale et sur les serveurs de calcul dédiés du VO.**

Contexte

Analyse des résultats

Workflow

Conclusion

# Introduction de codes de simulation dans le VO

## □ Cas test : le code PDR

## □ Utilisation de la structure Astrogrid :

- Installation d'Astrogrid à l'Observatoire de Paris ;
- Enregistrement du code PDR comme un service CEA (Common Execution Architecture) ;
- Description des paramètres d'entrée et sortie du code par un fichier xml.

Contexte

Analyse des résultats

Workflow

Conclusion

# Introduction de codes de simulation dans le VO

## □ Possibilités offertes à ce moment là :

- Lancement du code sur le serveur de calcul dédié de l'Observatoire de Paris à travers une interface créée automatiquement sur le Workbench d'Astrogrid.
- Utilisation de MySpace pour stocker les fichiers de paramètres et de résultats.
- Suivi du status du job à travers le Lookout (Workbench).

Contexte

Analyse des résultats

Workflow

Conclusion

# Introduction de codes de simulation dans le VO

## □ Développement d'un client Java pour faciliter l'utilisation

- L'interface automatique du Workbench est peu pratique.
- AstroRuntime permet de communiquer très simplement avec l'infrastructure AstroGrid.
- Un client offre des possibilités de visualisation et de contrôle des paramètres.

Contexte

Analyse des résultats

Workflow

Conclusion

# Introduction de codes de simulation dans le VO

Contexte

Analyse des résultats

Workflow

Conclusion

The Meudon PDR code

File Help Plot

Cloud parameters Grains parameters Transfer & H2

Model name

Chemistry file chimie06.chi

Size ( $A_V$ ) 1.0

Density [ $\text{cm}^{-3}$ ] 100

Radiation field (left) 1

Radiation field (right) 1

External source

Spectral type B 1 V

User defined source

Distance [pc] -0.0

Thermal balance

Temperature [K] 100

Equation of state Constant density   Symetrical profile

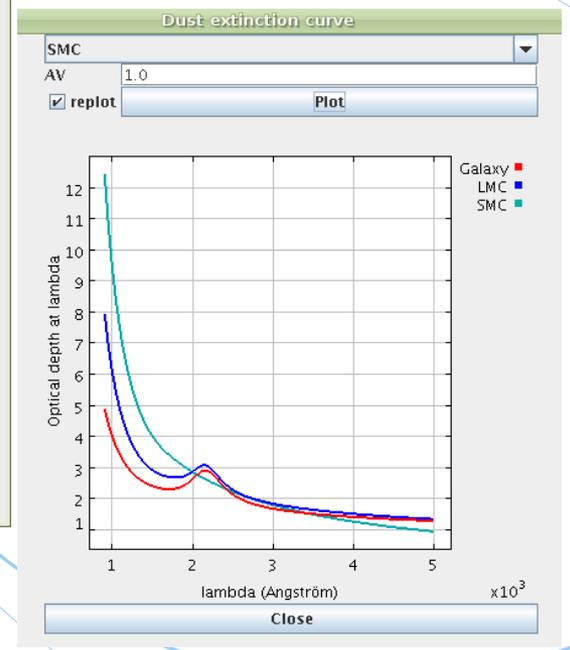
Specific density profile

Pressure [ $\text{cm}^{-3}$  K] 6000

Cosmic rays ionization rate 2.0

Turbulent velocity [km/s] 2.0

Number of iterations 8



# Introduction de codes de simulation dans le VO

- Facilité d'utilisation d'AstroRuntime.

- Exemple : accès à un fichier sur MySpace

```
f = new Finder();
```

```
acr = f.find();
```

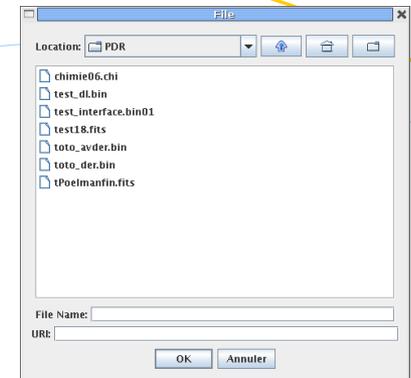
```
Myspace ms = (Myspace)acr.getService(Myspace.class);
```

```
msHome = ms.getHome();
```

```
ResourceChooser chooser =
```

```
(ResourceChooser)acr.getService(ResourceChooser.class);
```

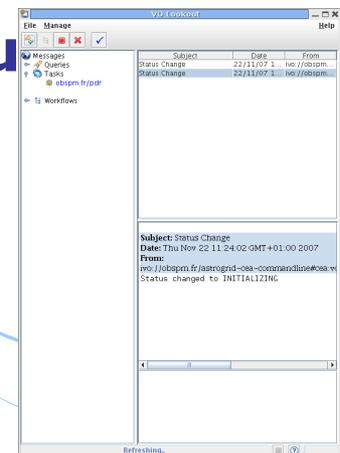
```
URI file = chooser.chooseResource("File",true);
```



- Exemple : ouverture du Lookout

```
Lookout look = (Lookout) acr.getService(Lookout.class);
```

```
look.show();
```



Contexte

Analyse des résultats

Workflow

Conclusion

# Logiciel d'analyse des résultats

## □ Objectifs

- Donner accès à toute la physique d'une simulation
  - Nombre de quantités physiques variable (jusqu'à 10000 dans le cas de PDR)
- Présentation structurée et récupération des quantités physiques
- Générique

## □ Architecture

- Core
  - Chargement des résultats d'une simulation en local ou dans MySpace
  - Extraction des quantités via une méthode getField dans l'esprit du SNAP
- GUI
  - Présentation structurée + fonctionnalités

Contexte

Analyse des  
résultats

Workflow

Conclusion

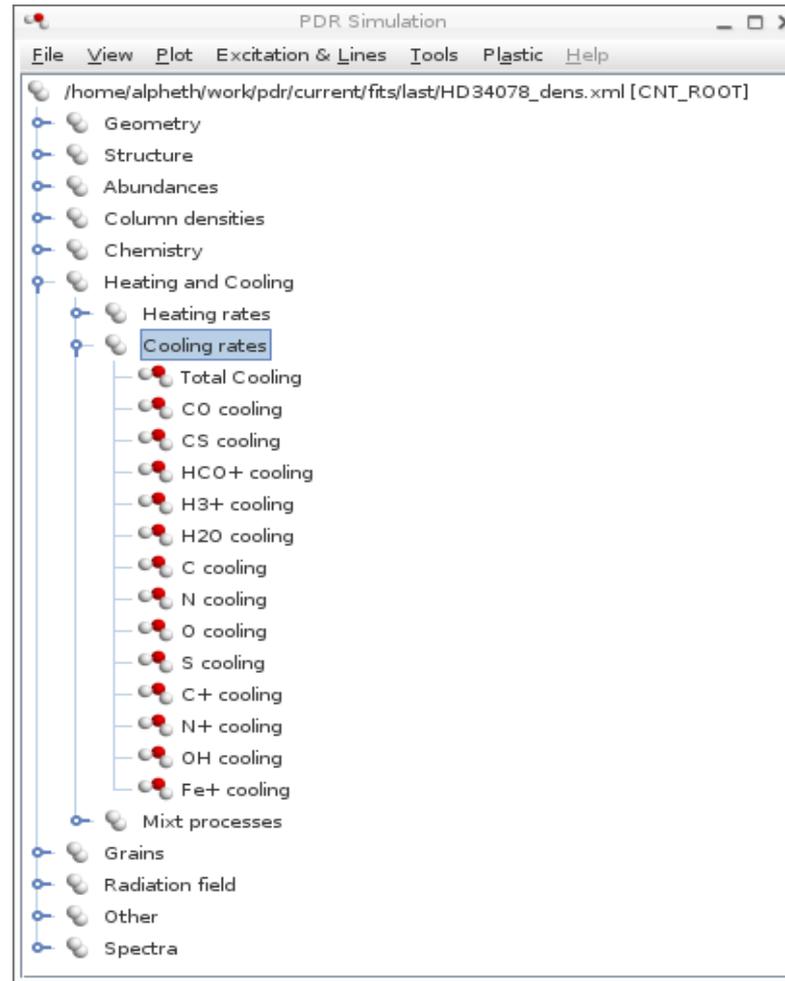
# Logiciel d'analyse des résultats

Contexte

Analyse des  
résultats

Workflow

Conclusion



# Fichiers d'entrée

## ❑ Sortie d'un code de simulation

### ○ FITS

- Quantités physiques calculées
- Paramètres d'entrée du modèle

### ○ XML (VOTable)

- Description des quantités physiques (metadata)
- Relations entre les quantités
- Axes associés aux quantités
- Fichier FITS contenant les quantités

## ❑ Correspondance

- ID unique pour chaque quantité
- ID balise FIELD = EXTNAME

Contexte

Analyse des  
résultats

Workflow

Conclusion

# Fonctionnalités

- ❑ **Input**
  - Local et MySpace
- ❑ **Scriptable**
- ❑ **Mécanisme de plug-in**
- ❑ **Plastic**
- ❑ **Output**
  - GUI
  - Tables ASCII
  - VOTable

Contexte

Analyse des  
résultats

Workflow

Conclusion

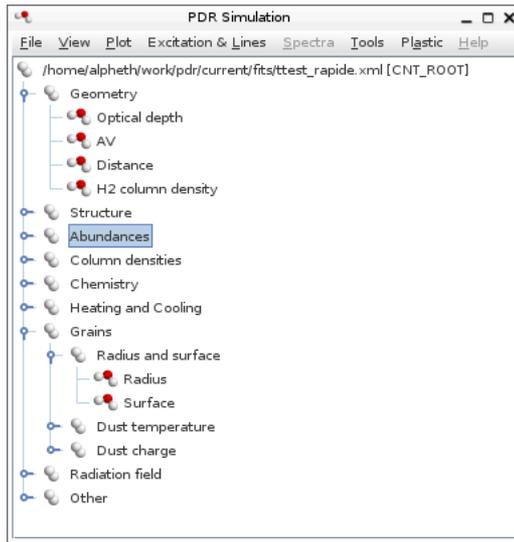
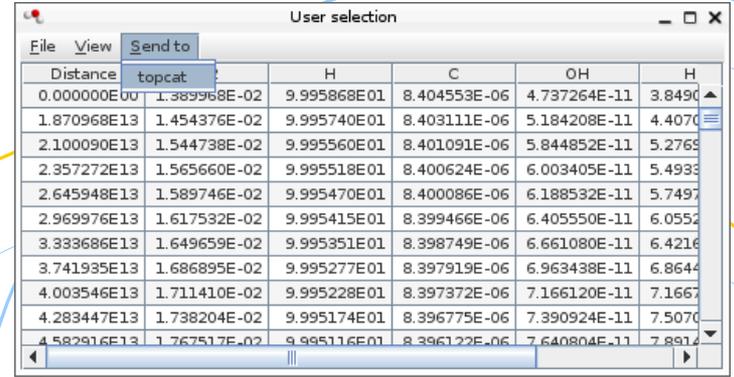
# Fonctionnalités

Contexte

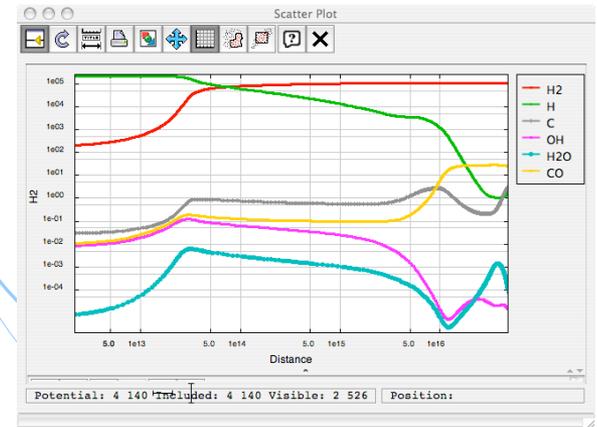
Analyse des résultats

Workflow

Conclusion

Distance	topcat	H	C	OH	H
0.000000E00	1.389968E-02	9.995868E01	8.404553E-06	4.737264E-11	3.8490
1.870968E13	1.454376E-02	9.995740E01	8.403111E-06	5.184208E-11	4.4070
2.100090E13	1.544738E-02	9.995560E01	8.401091E-06	5.844852E-11	5.2765
2.357272E13	1.565660E-02	9.995518E01	8.400624E-06	6.003405E-11	5.4993
2.645948E13	1.589746E-02	9.995470E01	8.400086E-06	6.188532E-11	5.7497
2.969976E13	1.617532E-02	9.995415E01	8.399466E-06	6.405550E-11	6.0552
3.333686E13	1.649659E-02	9.995351E01	8.398749E-06	6.661080E-11	6.4216
3.741935E13	1.686895E-02	9.995277E01	8.397919E-06	6.963438E-11	6.8644
4.003546E13	1.711410E-02	9.995228E01	8.397372E-06	7.166120E-11	7.1667
4.283447E13	1.738204E-02	9.995174E01	8.396775E-06	7.390924E-11	7.5070
4.582916E13	1.767517E-02	9.995116E01	8.396122E-06	7.640804E-11	7.8917



# Script

## ❑ Utilisation en mode CLI

- Traitement par lot
- Workflow

## ❑ Format XML

- Connaissance du XML non requise
- Présence d'un éditeur de scripts

## ❑ Facilite le travail répétitif

Contexte

Analyse des  
résultats

Workflow

Conclusion

## ❑ Étendre les fonctionnalités

## ❑ Traitements spécifiques selon les simulations

## ❑ Cas de PDR

- Calcul de nouvelles quantités dérivées de celles du résultat
- Interface pour analyser la chimie

Contexte

Analyse des résultats

Workflow

Conclusion

# Plug-in

Contexte

Analyse des résultats

Workflow

Conclusion

Chemistry Analyzor

View

Species : CO

Av : 1.000000E-01

Threshold (%) : 5.0

Compute all Processes

Temperature (K) = 532.8968031149866

Abundance (cm-3) = 6.398907733859288E-10

Formation rate (cm-3 s-1) = 3.386266641531316E-16

Destruction rate (cm-3 s-1) = 3.3862666413645196E-16

Computation done

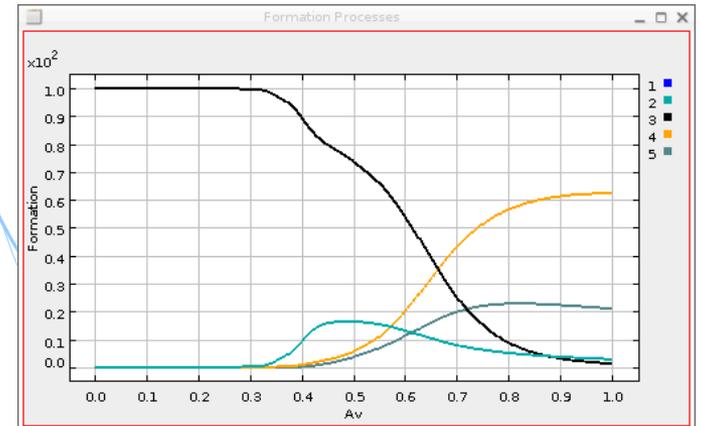
Processes

Formation Processes

Plot ID	React. 1	React. 2	React. 3	Prod. 1	Prod. 2	Prod. 3	Prod. 4
1	O	CH		CO	H		
2	OH	C+		H+	CO		
3	H	CO+		H+	CO		
4	HCO+	ELECTR		CO	H		
5	HOC+	ELECTR		CO	H		

Destruction Processes

Plot ID	React. 1	React. 2	React. 3	Prod. 1	Prod. 2	Prod. 3	Prod. 4
1	CO	PHOTON		C	O		



## □ Comment ?

- Fournir les résultats sous la forme de 2 fichiers XML + FITS

## □ État

- Logiciel développé pour PDR (~ 10000 quantités physiques accessibles)
- Adaptation des résultats de Galmer sous la forme requise et utilisation avec succès du logiciel
  - Rapide à mettre en oeuvre (~10 quantités)

Contexte

Analyse des  
résultats

Workflow

Conclusion

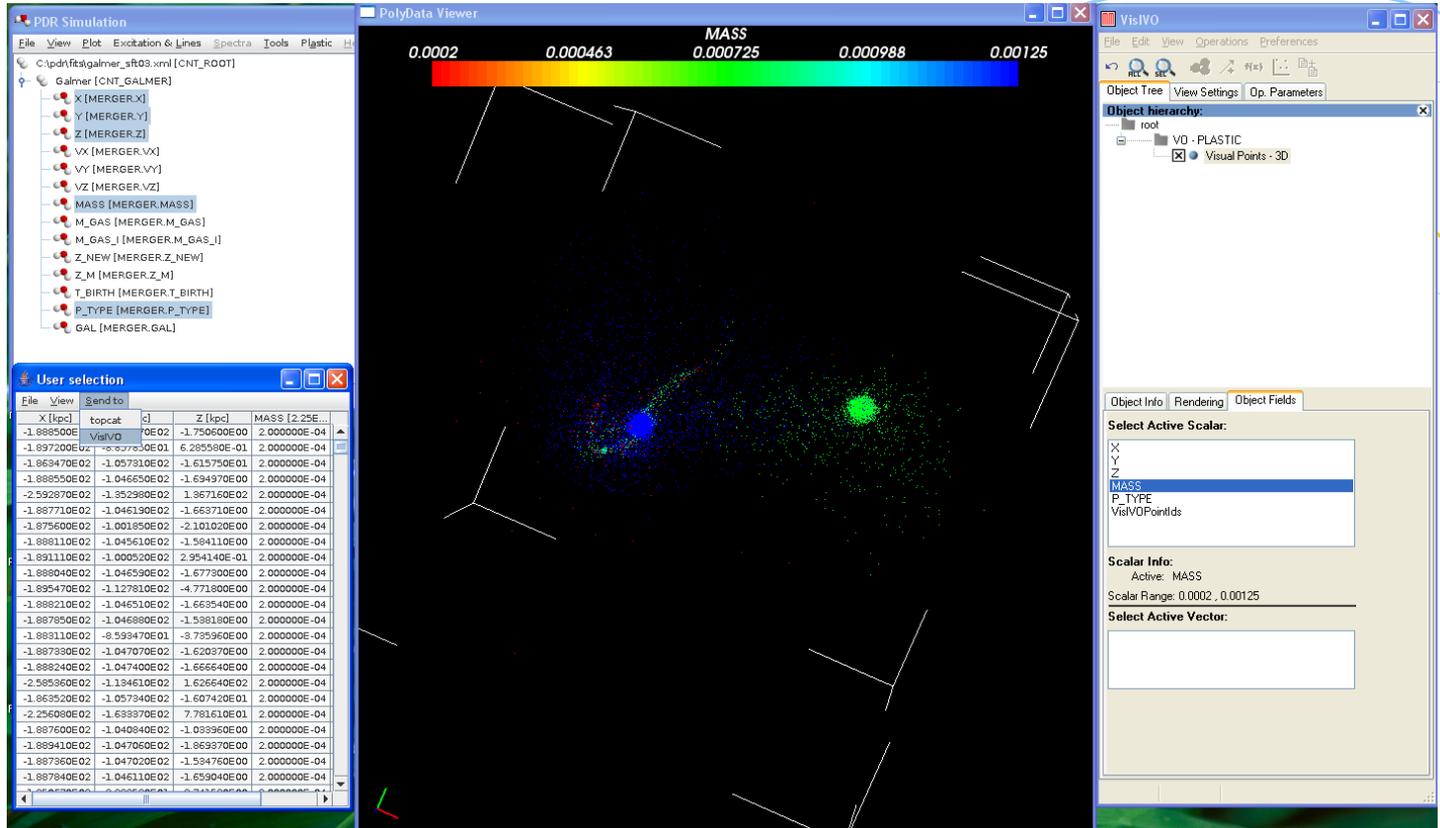
# Généricité : GalMer

Contexte

Analyse des résultats

Workflow

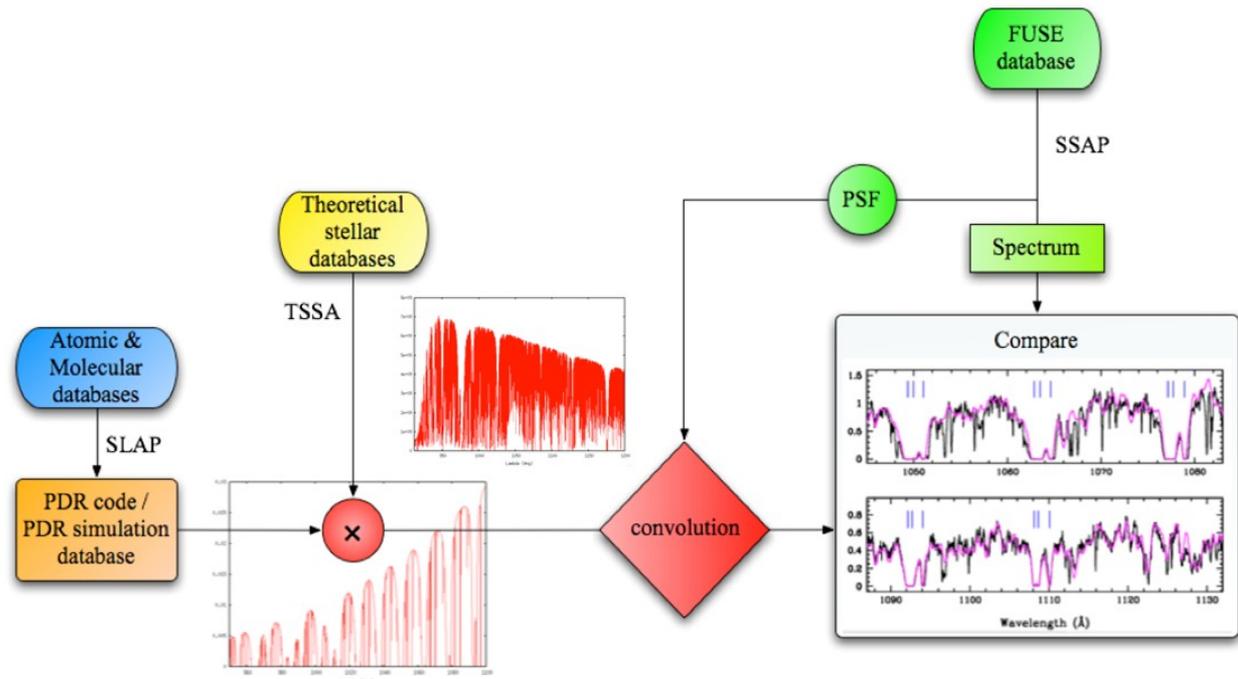
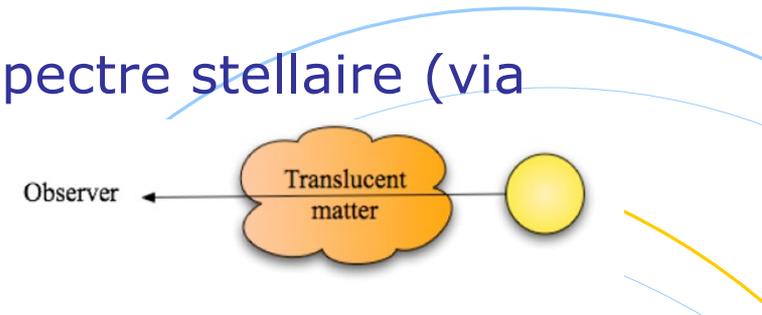
Conclusion



# Utilisation dans des Workflows

## Objectif

- Couplage entre PDR, spectre stellaire (via POLLUX) et FUSE
- Courant 2008

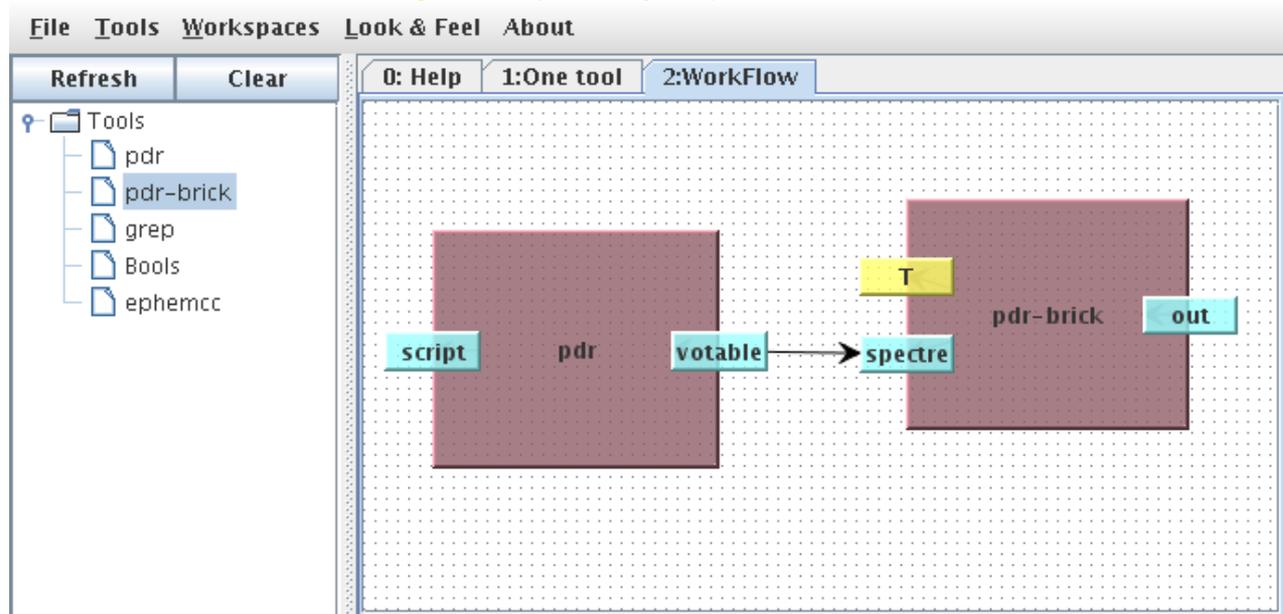


# Utilisation dans des Workflows

## □ Faisabilité

### ○ Workflow avec AIDA

- 2 briques : PDR et convolution de spectre
- Extraction du spectre d'absorption avec PDR et convolution avec celui d'un corps noir



## □ Actuellement

- Maîtrise de la chaîne depuis le lancement jusqu'à la récupération des quantités physiques
- Fonctionne dans les workflows

## □ Futur

- Converger vers le SNAP
- Application à d'autres codes de simulation

Contexte

Analyse des  
résultats

Workflow

Conclusion