

# Portail Numérique

VO Paris datacenter

Franck Le Petit & Fabrice Roy  
Laboratoire Univers & Théories  
Damien Guillaume  
UFE

<http://vo.obspm.fr/simulation>



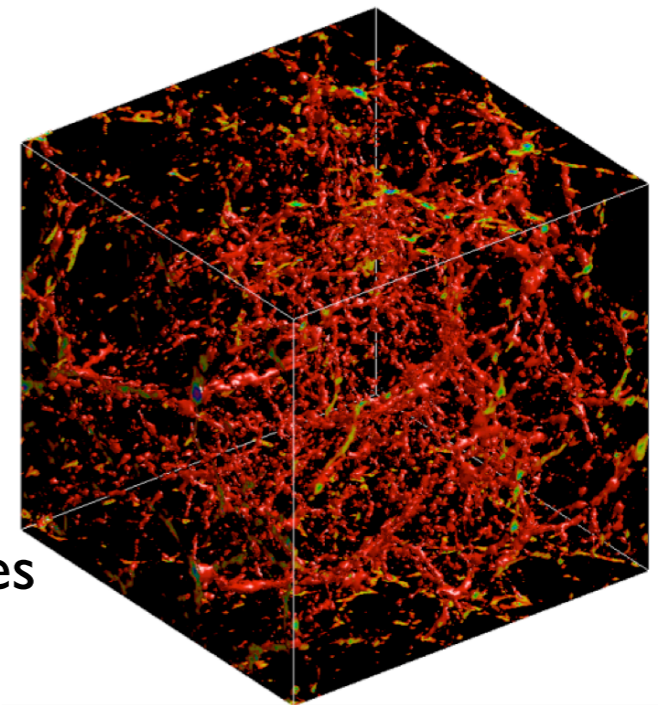
Virtual Observatory Paris Data Center

Développement d'un portail numérique :

- Fournir un **accès aux codes** développés à l'Observatoire
  - facile d'utilisation
  - documentés
  - aide aux utilisateurs
- Mettre en place des **bases de données de résultats de modèles théoriques**
  - gain en temps de calcul
- Placer ce portail dans les **Observatoires Virtuels**
  - bénéficier des outils de visualisation développés dans les OV
  - rendre interopérables les codes entre eux

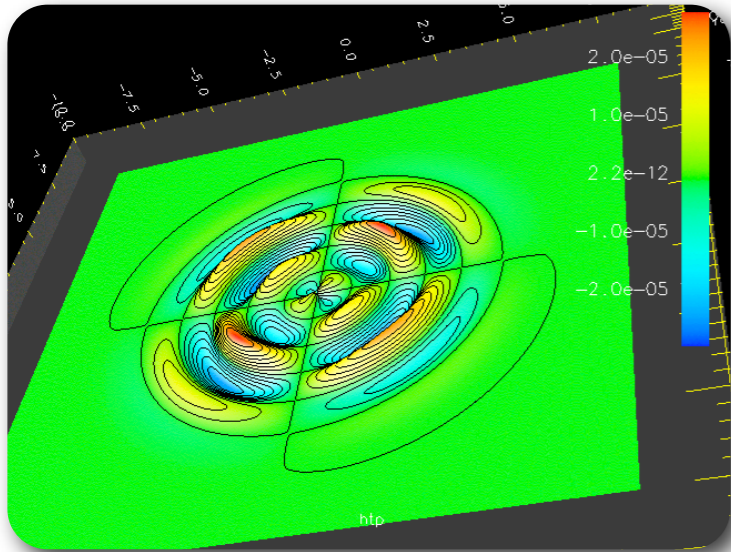
Buts :

- Rentabiliser l'investissement demandé par le développement des codes
- Faciliter l'interprétation des observations → plus-value scientifique
- Travailler plus efficacement



## Codes disponibles

- Lorene

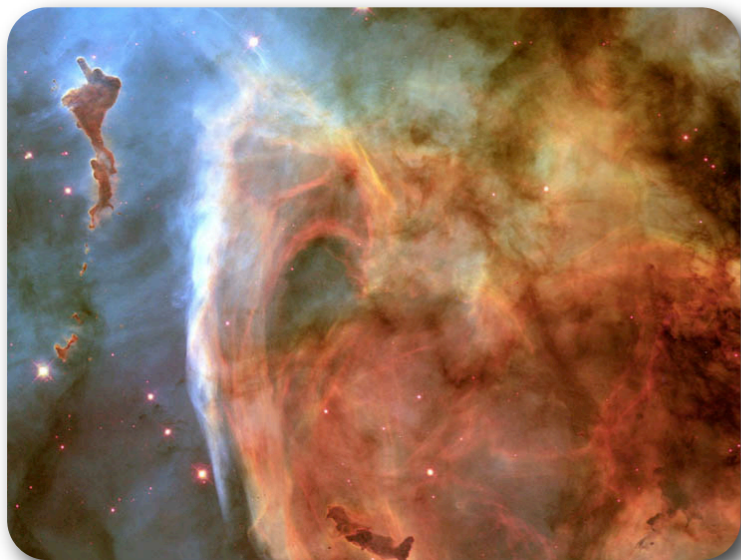


Equipe relativiste LUTh (E. Gourgoulhon, J. Novak, ...)

- Librairie d'outils pour résoudre les équations aux dérivées partielles par des méthodes spectrales multi-domaines

Applications : - Objets compacts (F. Limousin)  
- Ondes gravitationnelles

- Code PDR de Meudon



Equipe MIS du LUTh

Applications :

- Interprétation des observations dans les régions moléculaires

Exemples : FUSE, ISO, HST, Herschel, ALMA, ...

- Code ouvert depuis 2002

## Priorité donnée à quelques “gros” codes

Code	Contact	Description
<a href="#">Abelion</a>	G. Stasinska	Composition chimique des nébuleuses
<a href="#">Arty</a>	L. Chevallier	Transfert de rayonnement exact
<a href="#">Bona</a>	S. Bonazzola	Hydrodynamique dans une sphère avec prise en compte de la relativité générale
<a href="#">Cosmo3D</a>	J.M. Alimi	Formation de structures cosmiques
<a href="#">FishHure</a>	J.M. Huré	Résolution de l'équation de Poisson à plusieurs dimensions
<a href="#">DIP</a>	R. Grappin & J. Léorat	Code de MHD axisymétrique avec frontières transparentes
<a href="#">IOStars</a>	C. Michaut	Calcul des Rankine-Hugoniot pour des gaz parfaits et des gaz ionisés
<a href="#">Lorene/Rotstar</a>	E. Gourgoulhon	Modèles d'étoiles stationnaires axisymétriques en rotation
<a href="#">Modelex/Radioshape</a>	N. Biver et D. Bockelee-Morvan	Transfert de rayonnement pour analyse des observations cométaires
<a href="#">Monte Carlo</a>	V. Zakharov	Code de transfert Monte-Carlo
<a href="#">Nebu</a>	D. Pequignot	Modèle de nébuleuse ionisée
<a href="#">NO-Bones</a>	J.M. Huré	
<a href="#">Noar</a>	A. Abrassart & R. Goosmann	
<a href="#">Opack</a>	C. Michaut & C. Stehlé	Calcul d'opacités
<a href="#">S3 / S3C</a>	D. Pelat	Synthèse de populations stellaires
<a href="#">Saha</a>	J.M. Huré	Résolution de l'équation de Saha
<a href="#">Solver</a>	S. Fay	Résolution d'équations différentielles
<a href="#">StarkH</a>	C. Stehlé	Profils de raies de H II par effet Stark
<a href="#">Titan</a>	L. Chevallier & A. Gonçalves	Transfert de rayonnement dans des nuages photoionisés épais
<a href="#">TreeASPH</a>	J.M. Alimi	Code de formation de structures cosmiques
<a href="#">VS3KAD</a>	J.M. Huré	Code de structure interne de disques d'accrétion
<a href="#">Virexplobs</a>	Allard, Barman, Schneider & Dedieu	Calcul d'observables pour les exoplanètes
<a href="#">ZETL</a>	C. Stehlé	Calcul du degré de charge d'un ion
	R. Lehoucq	Calcul des modes propres du laplacien dans les espaces sphériques
	A. Riazuelo	Simulation de cartes CMB dans tous types d'espaces

- Aide aux utilisateurs
- Moyens d'accès aux codes

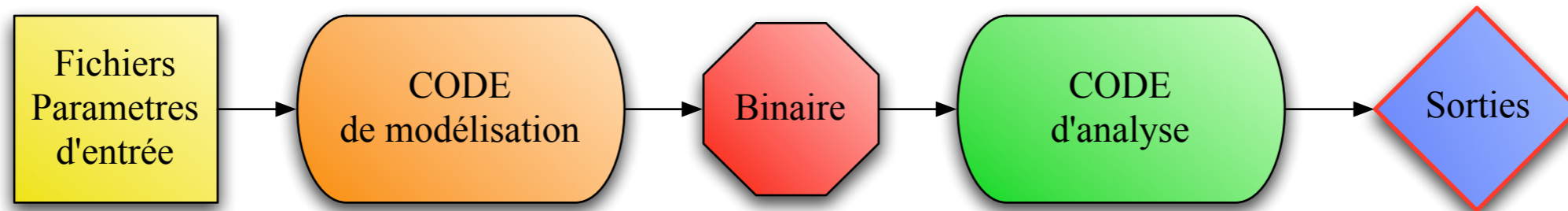


Développeurs des codes

Permet la modélisation de la physico-chimie des nuages interstellaires

Travail en deux temps :

1. calcul de la structure d'un nuage interstellaire → produit un fichier binaire
2. travaille sur le fichier binaire pour analyser les résultats
  - calcul de colonnes de densité
  - calcul d'intensités de raies
  - ...



Introduction du code dans l'OV

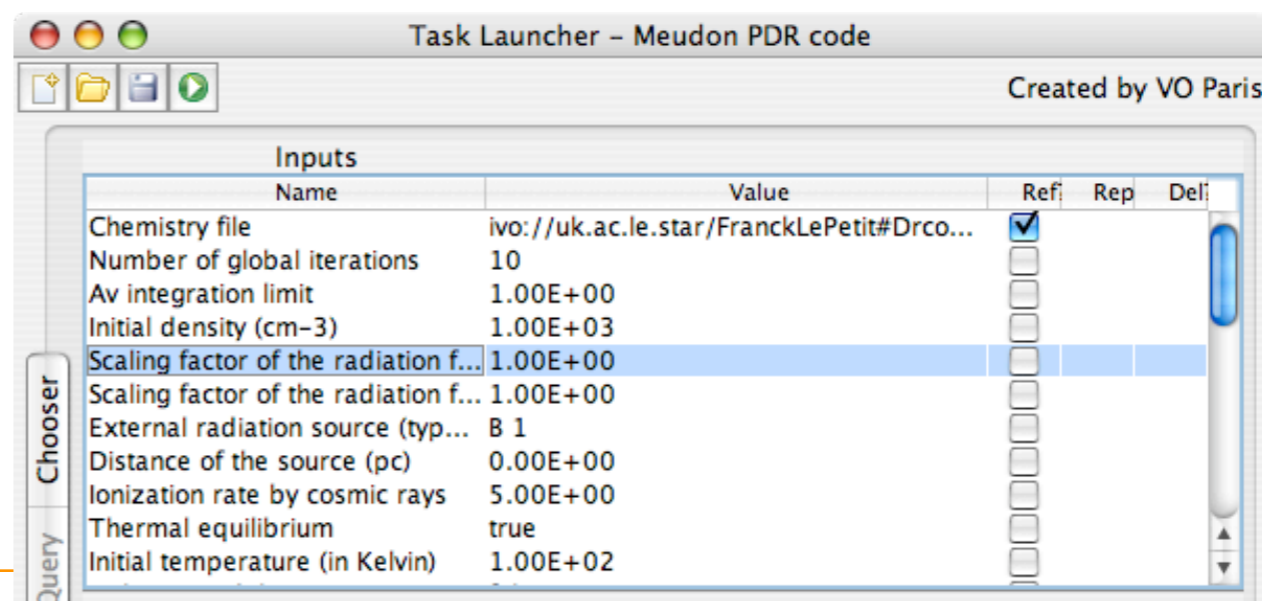
- conserver ces deux aspects :
  - lancement du code : relativement facile
  - Analyse des résultats : plus complexe car code-dépendant

## Introduction de PDR dans Astrogrid (D. Guillaume)

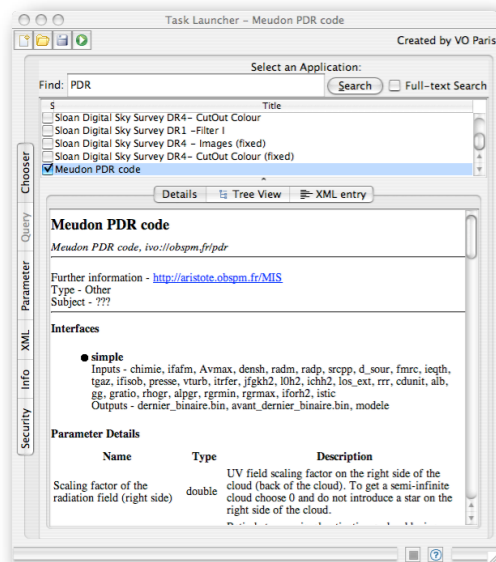
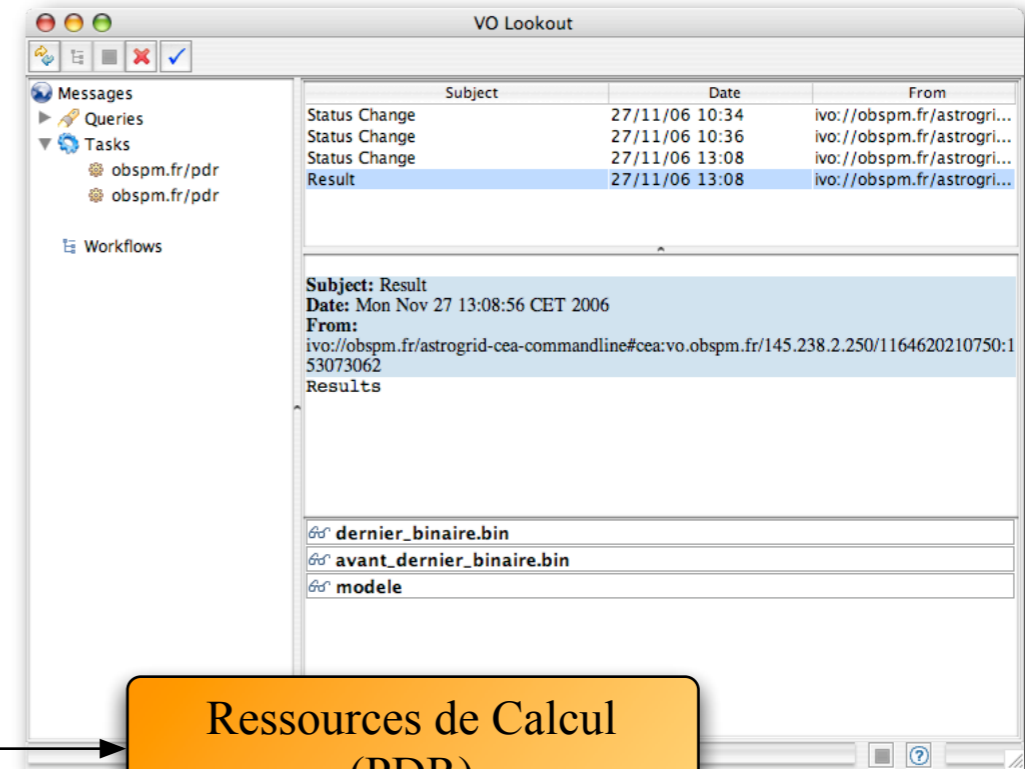
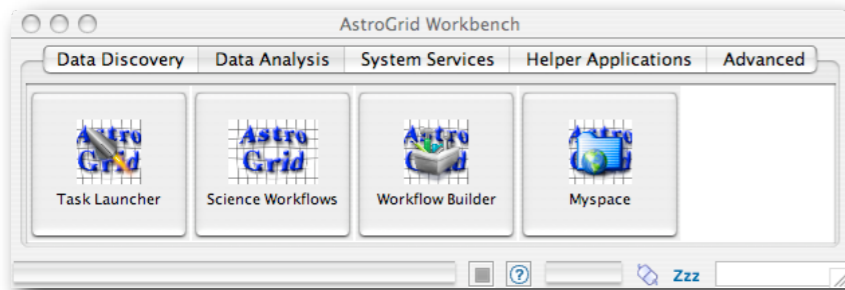
- Installation d'Astrogrid à l'Observatoire de Paris  
Pierre Le Sidaner, Igor Chilingarian, Guy Rixon
- Enregistrement du code PDR dans les registries : NVO & Astrogrid
- Description des paramètres d'entrée dans un fichier xml (D. Guillaume) : interface générique

```
<CmdLineParameterDefn fileRef="false" type="double" name="densh">  
  <agpd:UI_Name>Initial density (cm-3)</agpd:UI_Name>  
  <agpd:UI_Description>Density of the cloud in cm-3 defined as  $n_H = n(H) + 2 n(H_2)$ </agpd:UI_Description>  
  <agpd:DefaultValue>1.00E+03</agpd:DefaultValue>  
</CmdLineParameterDefn>
```

```
<CmdLineParameterDefn fileRef="false" type="text" name="srcpp">  
  <agpd:UI_Name>External radiation source (type spectral)</agpd:UI_Name>  
  <agpd:UI_Description>Add to the UV field the radiation field of a star (black body)</agpd:UI_Description>  
  <agpd:DefaultValue>B 1</agpd:DefaultValue>  
  <agpd:OptionList>  
    <agpd:OptionVal>0 3</agpd:OptionVal>  
    <agpd:OptionVal>0 5</agpd:OptionVal>  
    <agpd:OptionVal>0 8</agpd:OptionVal>  
    <agpd:OptionVal>B 0</agpd:OptionVal>  
    <agpd:OptionVal>B 1</agpd:OptionVal>  
    <agpd:OptionVal>B 3</agpd:OptionVal>  
    <agpd:OptionVal>B 5</agpd:OptionVal>  
    <agpd:OptionVal>B 8</agpd:OptionVal>  
    <agpd:OptionVal>A 0</agpd:OptionVal>  
    <agpd:OptionVal>A 1</agpd:OptionVal>  
    <agpd:OptionVal>A 5</agpd:OptionVal>
```



## Introduction de PDR dans Astrogrid



Registry Astrogrid

VO-Paris

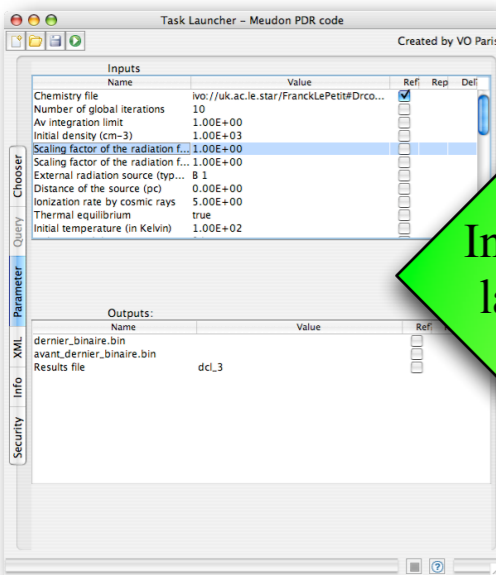
Ressources de Calcul (PDR)

multi-utilisateurs

Interface de lancement

MySpace

Espace utilisateur



## Introduction de PDR dans Astrogrid

### Avantages :

- Facile d'utilisation
- Génère automatique une interface
- Description des paramètres, valeurs par défaut
- Utilise "identification" d'Astrogrid
- Utilise calcul distribué d'Astrogrid

### Inconvénients :

- Pas de structuration des paramètres
- Découplé du code
  - développement du code plus complexe
  - pas de vérification des paramètres
  - pas de lien entre les paramètres

The screenshot displays the AstroGrid Workbench interface. At the top, there is a menu bar with options: Data Discovery, Data Analysis, System Services, Helper Applications, and Advanced. Below the menu bar is a toolbar with three icons: AstroScope, HeliScope, and Task Launcher. The main window is titled 'Task Launcher - Meudon PDR code' and contains a table of input parameters and their values. The table has columns for Name, Value, Ref, Rep, and Del. The input parameters are:

Name	Value	Ref	Rep	Del
Chemistry file	ivo://uk.ac.le.star/FranckLePette#Drco...	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Number of global iterations	10	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Av integration limit	1.00E+00	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Initial density (cm-3)	1.00E+03	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Scaling factor of the radiation f...	1.00E+00	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Scaling factor of the radiation f...	1.00E+00	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
External radiation source (typ...	8 1	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Distance of the source (pc)	0.00E+00	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Ionization rate by cosmic rays	5.00E+00	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Thermal equilibrium	true	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Initial temperature (in Kelvin)	1.00E+02	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

Below the input table is an 'Outputs' section with a table:

Name	Value	Ref	Rep	Del
dernier_binaire.bin		<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
avant_dernier_binaire.bin		<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Results file	dcl3	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

To the right of the main window is a 'VO Lookout' window showing a message log. The log contains the following entries:

Subject	Date	From
Status Change	27/11/06 10:34	ivo://obspm.fr/astrogrid...
Status Change	27/11/06 10:36	ivo://obspm.fr/astrogrid...

The 'Status Change' message at the bottom of the log reads: 'Subject: Status Change, Date: Mon Nov 27 10:36:56 CET 2006, From: ivo://obspm.fr/astrogrid-cea-commandline#cea:vo.obspm.fr/145.238.2.250/1164620210750:153073062, Status changed to RUNNING'.

Limitations dans le cas d'un code de simulation : on ne peut rien faire d'un binaire

→ interface d'analyse capable de fonctionner de façon modulaire pour faire partie d'un workflow



## Développement d'interfaces spécifiques (F. Roy)

- Lancement des codes

The Meudon PDR code

Cloud parameters Grains parameters Transfer

Model name

Chemistry file Drcnos.chi Browse

Size (Av) 1.0

Density [cm-3] 100

Radiation field (left) 1

Radiation field (right) 1

External source

Spectral type B 1 V

User defined source Browse

Distance [pc] -0.0

Thermal balance

Temperature [K] 100

Equation of state Constant density  Symetrical profile

Specific density profile Browse

Pressure [cm-3 K] 6000

Cosmic rays ionization rate 2.0

Turbulent velocity [km/s] 2.0

Number of iterations 8 Launch

Load parameters Save parameters Close Doc

- Paramètres structurés
- Relation entre les paramètres
- Permet de stocker les paramètres
- Lien direct avec le code
  - Champs remplis par base de donnée du code
- Documentation
  - Bulles d'aide
  - Texte PDF

En développement

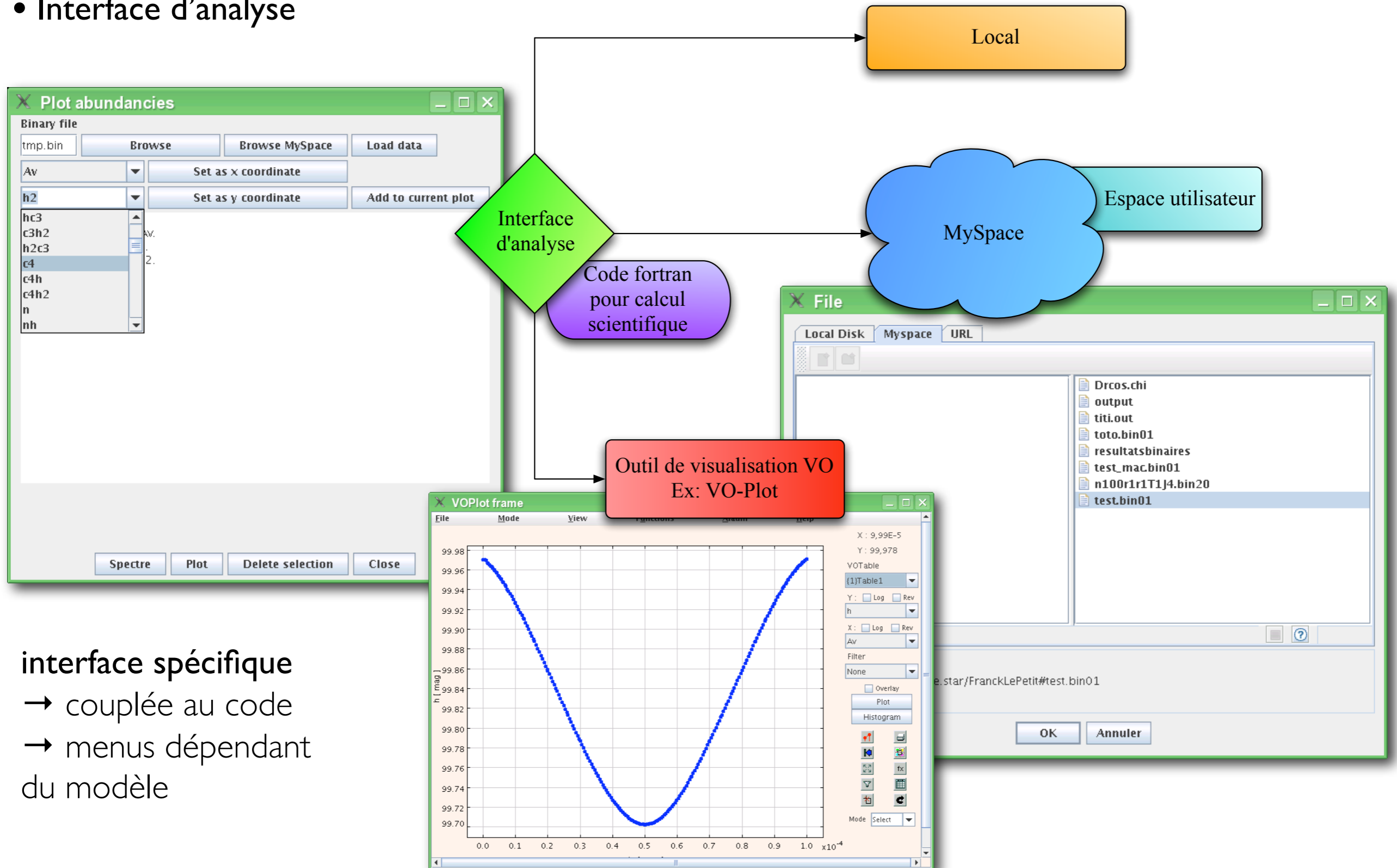
Lancement du code soit :

- en local
- sur une machine distante via Astrogrid

Interface de lancement du code PDR  
développée par F. Roy

## Développement d'interfaces spécifiques

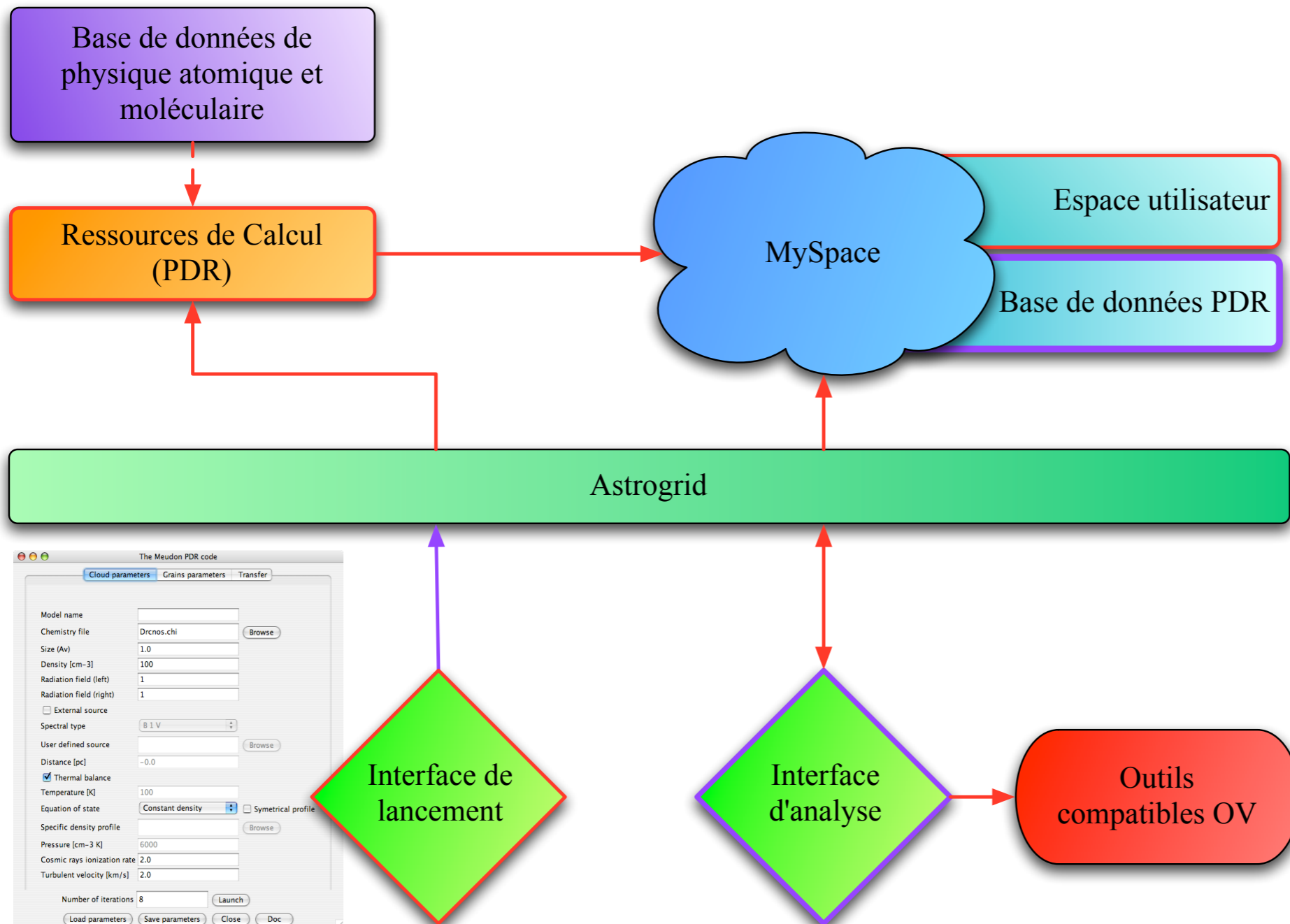
- Interface d'analyse



interface spécifique  
→ couplée au code  
→ menus dépendant  
du modèle

## En cours

- Lancement via Astrogrid à partir de l'interface de lancement
- Développement de l'interface d'analyse
- Bases de données de résultats



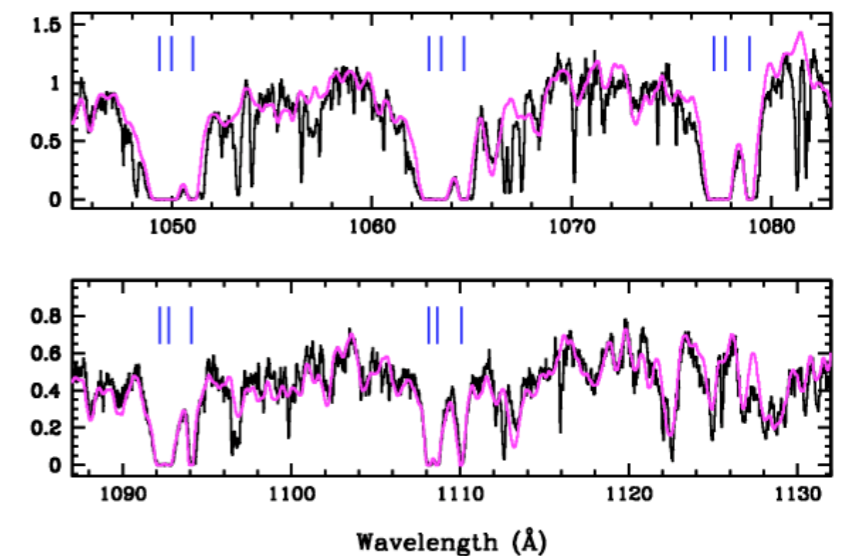
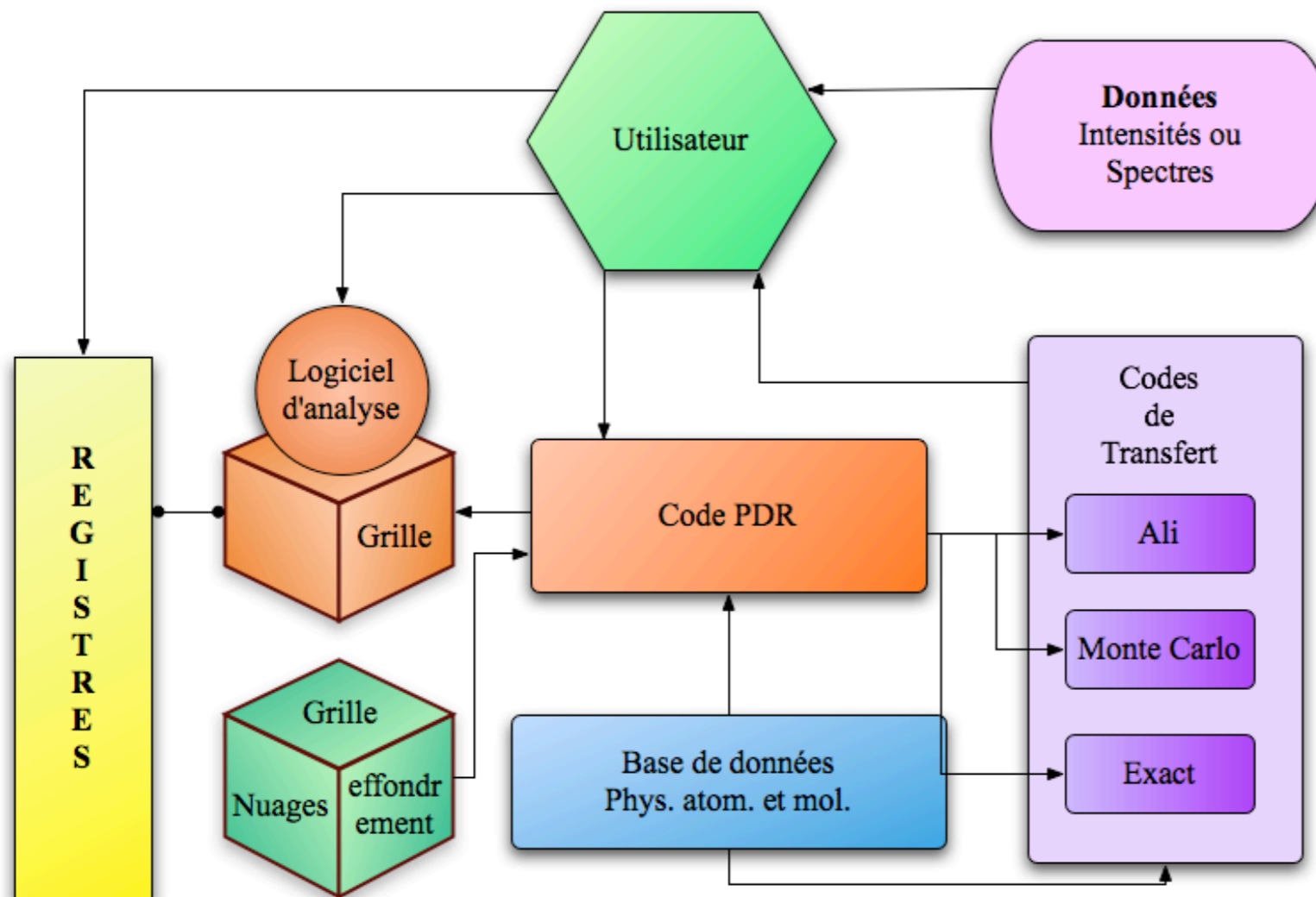
Développement en collaboration avec :

- VO-Paris
- LUTh
- Astrogrid

Distribution :

- PCMI

- Remplacement des binaires par des bases de données → récupération d'une quantité spécifique
- Workflows : couplage entre codes  
Exemple : PDR + transfert de rayonnement  
Code d'évolution dynamique des nuages + PDR pour la résolution de la micro-physique



Spectre FUSE vers HD76534  
(C. Martin-Zaidi et al. 2006)

- Application aux autres codes du portail numérique ...