

The VO-Paris Simulation Datacenter

Franck Le Petit¹, Fabrice Roy¹, Damien Guillaume², Jean-Michel Alimi¹, Loic Chevallier¹, André Füzfa¹, Anabela Gonçalves¹, Eric Gourgoulhon¹, Roland Grappin¹, Patrick Hennebelle³, Jacques Le Bourlot¹, Pierre Le Sidaner⁴, Didier Pelat¹, Evelyne Roueff¹



Laboratoire de l'Univers et de ses Théories

1 - LUTH
2 - UFE
3 - LERMA / ENS
4 - VO-Paris

Abstract

Simulations are fundamental in astrophysics either to prepare missions, or to interpret observations or simply for theoretical studies. The development of some codes can require as much work as the elaboration of some instruments on a telescope. To get the highest return from this investment, the Observatory of Paris is developing a simulation data center to give access to codes as well as theoretical databases. This simulation data center will, in the end, be part of the virtual observatories with inputs and outputs following VO standards. This will allow users to perform complicated tasks in an easy way.

1 - Le portail numérique

Les simulations numériques sont un élément essentiel de la recherche astrophysique tant au niveau de la préparation des missions, de l'interprétation des observations que de la recherche théorique. Le développement de ces codes peut demander le même type d'effort collectif que l'élaboration de certains instruments pour un télescope. Afin de maximiser le rendement de ces codes, le LUTH, qui possède une forte expertise en simulation numérique, met en place un portail numérique par lequel la communauté astrophysique aura accès aux outils de simulation et de modélisation développés à l'Observatoire de Paris. Outre un accès aux codes, le portail numérique de l'Observatoire de Paris fournira un espace de calcul et de stockage de résultats. A terme, les codes du portail répondront aux standards des Observatoires Virtuels (OV) permettant leur interopérabilité avec d'autres codes ou services des OV.

Une vingtaine de chercheurs participent au développement du portail numérique. Dans un premier temps 5 codes seront disponibles (Tab. 1). D'autres, dont la liste peut être trouvée sur le site de VO-Paris (<http://vo.obspm.fr/Simulation>), les rejoindront ultérieurement.

Cosmologie	Différents codes de cosmologie (Jean-Michel Alimi, André Füzfa)
DIP	Code de simulation MHD pour étudier les vents stellaires et l'effondrement de nuages interstellaires (Roland Grappin)
Lorène	Librairies pour la résolution des équations de la relativité générale (Equipe relativiste - LUTH)
PDR	Code de modélisation de la physico-chimie du Milieu Interstellaire (Equipe MIS - LUTH)
Titan	Code de modélisation des régions ionisées des noyaux actifs de galaxies (Loïc Chevallier, Anabela Gonçalves)

Tab 1 : Liste des codes accessibles début 2007 via le portail numérique.

La librairie Lorène ainsi que le code PDR sont déjà ouverts à la communauté. Leurs sources peuvent être téléchargées aux adresses :

Lorène	http://www.lorene.obspm.fr
PDR	http://aristote.obspm.fr/MIS

L'une des difficultés majeures à la mise à disposition de codes est leur relative complexité d'utilisation. C'est pourquoi les codes du portail numérique seront documentés et une aide aux utilisateurs sera fournie par les développeurs. Ceci est par exemple déjà le cas pour Lorène et PDR.

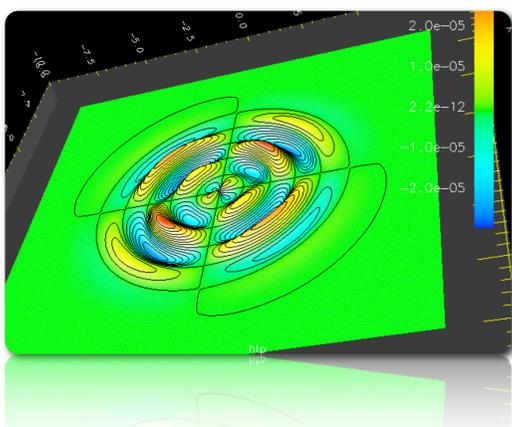


Fig 1. Etude de la propagation des ondes gravitationnelles en perspective à LISA au moyen d'un code basé sur Lorène (Bonazzola et al. 2006).

2 - Bases de données théoriques

Les codes de simulation nécessitent souvent des temps de calcul importants. Afin de rentabiliser les ressources, le portail numérique contiendra des bases de données de résultats théoriques. Outre obtenir des résultats physiques pour un jeu de paramètres donné, ces bases pourront être utilisées pour :

- réaliser des études statistiques théoriques
- valider la bonne utilisation d'un code

• obtenir une première approximation pour l'interprétation d'observations qui pourra ensuite servir de point de départ à une étude plus détaillée au moyen du code associé à la base de données.

Trois bases de données théoriques sont initialement prévues :

Coeurs denses	P. Hennebelle
Développée à partir du code Ramses-MHD	
Profils de densité, vitesse, champ magnétique ...	
Nuages interstellaires	F. Le Petit
Développée à partir du code PDR	
Profils d'abondances, températures, colonne densités, ...	
Régions photo-ionisées	A. Gonçalves
Développée à partir de Titan	
Spectres X importables dans X-Spec	

3 - Fonctionnement du portail numérique

Grâce à l'Observatoire de Paris et à VO-Paris, le LUTH s'équipe d'un cluster constitué de processeurs Xeon ainsi que d'espace de stockage. En s'inscrivant sur le portail numérique, les chercheurs auront accès à cette machine de calcul pour lancer les programmes du portail numérique. Ils disposeront également d'un espace disque pour stocker et analyser leurs résultats. Cette zone de stockage sera intégrée au MySpace des Observatoires Virtuels.

Après avoir mis en place un prototype du portail numérique (Damien Guillaume - UFE), nous développons les interfaces via lesquelles il sera possible de lancer et d'analyser les simulations. Ces interfaces permettront d'accéder au code sur la propre machine de l'utilisateur si ce dernier a téléchargé la source ou sur les ordinateurs du portail numérique. De même, les interfaces d'analyse permettront d'analyser indifféremment les résultats des simulations des bases de données théoriques stockées à l'Observatoire ou celles sur l'ordinateur de l'utilisateur.

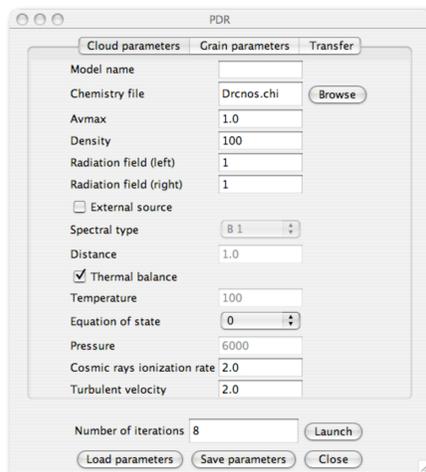


Fig 2 : Interface de lancement du code PDR développée par F. Roy (LUTH).

4 - Des standards pour la simulation

Des standards sont développés au sein des Observatoires Virtuels pour les données observationnelles. Ils imposent un format spécifique aux données et qu'un certain nombre d'informations précisant la nature des données soient associées à celles-ci (métadonnées). L'objectif est de permettre à n'importe quelle application OV adaptée de lire et d'utiliser les données.

De même, le groupe VO-Theory cherche à mettre en place des standards pour les résultats de simulation. Cependant compte tenu de la grande variété de codes numériques, la définition de ces standards est une tâche lente nécessitant de surmonter de nombreuses difficultés.

Actuellement, les principaux axes de développement du groupe VO-Theory sont :

- Définition de la sémantique pour enregistrer les codes de simulation dans les registres des Observatoires Virtuels.
- Définition d'un format de stockage standard pour les résultats de simulations N-Corps et hydrodynamique.
- Développement d'un protocole d'accès (SNAP - Simple Numerical Access Protocol) pour extraire une partie d'une simulation.
- Développement d'un modèle de données pour les résultats de simulation.

Une fois ces standards établis, les codes et les résultats de simulation pourront être publiés dans les Observatoires Virtuels. Il sera alors possible de trouver facilement un code spécifique pour étudier un problème physique donné ou d'accéder à des résultats de simulation lourde.

5 - Workflows

L'intérêt de standardiser les entrées/sorties des codes est de les rendre interopérables entre eux ou avec les services OV, le résultat de l'un pouvant être compris par un autre. Les simulations pourront alors jouer le rôle de briques élémentaires des workflows qui sont des successions de tâches, éventuellement délocalisées, au sein des Observatoires Virtuels. Via les workflows, il sera possible de réaliser simplement des tâches a priori complexes et ainsi d'aller plus loin dans le travail d'analyse scientifique. La figure ci-dessous présente un cas d'utilisation visant à interpréter des observations spectroscopiques dans des nuages interstellaires. Plusieurs groupes développent des systèmes de workflows comme par exemple Aïda au CDS (A. Schaaf et col.).

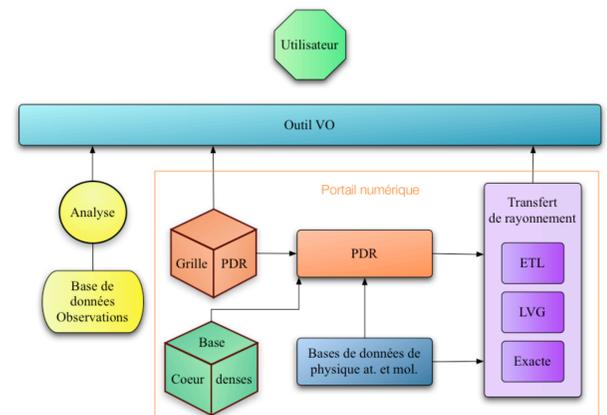


Fig 3 : Exemple de workflow. Un observateur cherche à interpréter des observations spectroscopiques d'une molécule observée dans un coeur dense. Via un outil OV: 1 - il se procure les observations et les visualise. 2 - Il utilise la grille de modèles PDR pour obtenir une première approximation des paramètres physiques du nuage interstellaire permettant de reproduire les observations. 3 - Il lance le code PDR en se servant de sa première approximation et en injectant au code un profil de densité de coeur dense réaliste provenant de la base de données de coeurs denses. 4 - Les profils d'abondance sont calculés par le code PDR qui les injecte dans un code de transfert de rayonnement pour générer un spectre. 5 - Le spectre est envoyé à l'outil OV pour comparaison aux observations. L'outil OV convolue le spectre théorique avec la résolution instrumentale, cette dernière lui étant connue par les métadonnées des données observationnelles. Dans cet exemple, le code PDR et les codes de transfert sont liés à BASECOL (Marie-Lise Dubernet - Lerma), base de données fournissant automatiquement les données moléculaires indispensables au fonctionnement de ces codes.

6 - Planning

L'ouverture du portail numérique est prévue début 2007.

Été 2006	• Développement des interfaces pour PDR
Rentrée 2006	• Mise en service du cluster
	• Transfer du prototype du portail numérique sur le cluster
Automne 2006	• Ouverture du portail numérique à la communauté PCMI avec accès au code PDR
	• Développement des bases de données PDR et Titan
	• Développement des interfaces pour Titan
Fin 2006 / Début 2007	• Ouverture du portail à l'ensemble de la communauté
	• Développement des interfaces pour les codes de cosmologie et de MHD

7 - Liens

VO-Paris :	http://vo.obspm.fr
Portail numérique :	http://vo.obspm.fr/Simulation
VO-France :	http://www.france-ov.org
IVOA :	http://www.ivoa.net