



**HAL**  
open science

## Modélisation du milieu interstellaire sur la Grille

Franck Le Petit, Fabrice Roy

► **To cite this version:**

Franck Le Petit, Fabrice Roy. Modélisation du milieu interstellaire sur la Grille. Rencontres Scientifiques France Grilles 2011, Sep 2011, Lyon, France. hal-00653010

**HAL Id: hal-00653010**

**<https://hal.science/hal-00653010>**

Submitted on 16 Dec 2011

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

## Modélisation du milieu interstellaire sur la Grille

Franck Le Petit (1), Fabrice Roy (2)

(1) [Franck.LePetit@obspm.fr](mailto:Franck.LePetit@obspm.fr), LUTH, Observatoire de Paris / UMR 8102 / Université Paris Diderot

(2) [Fabrice.Roy@obspm.fr](mailto:Fabrice.Roy@obspm.fr), LUTH, Observatoire de Paris / UMR 8102 / Université Paris Diderot

### Overview:

The interpretation of recent observations of the interstellar medium requires state-of-the-art numerical models. Because the sensitivity of the new instruments, as the recent HERSCHEL space telescope, always increases, the mass of data produced is always larger. A proper return of such scientific data requires that theorists have access to computing resources to interpret the observations. Here, we present how we used the EGI-InSPIRE Grid infrastructure for 2 projects in the context of the study of star formation. The Grid has been used to run a code computing the atomic and molecular structure of interstellar clouds for a large number of input parameters corresponding to different kinds of interstellar clouds. Thanks to this computing infrastructure, we have been able to quickly produce simulated data to interpret observations. The total amount of CPU used on the Grid is about 40 000 hours mono-CPU.

### Enjeux scientifiques, besoin de la grille :

Les nuages interstellaires sont au coeur de l'évolution des galaxies. En s'effondrant sous l'effet de la gravité, ils donnent naissance à de nouvelles étoiles. Ces dernières, lorsqu'elles meurent, enrichissent le milieu interstellaire en éléments lourds, produits de la nucléosynthèse ayant lieu dans les étoiles. Pour comprendre l'évolution des galaxies, il est nécessaire de comprendre la physique des nuages interstellaires et leur interaction avec le milieu ambiant. Les nuages interstellaires sont des systèmes complexes hors équilibre thermodynamique et sont le siège d'une chimie riche. C'est par l'étude spectroscopique des atomes, des molécules et des grains qui les composent que nous arrivons à remonter aux propriétés physiques de ces objets. De plus, la chimie interstellaire joue un rôle important sur le bilan énergétique des nuages. Ces derniers reçoivent de l'énergie de l'extérieur via le rayonnement des étoiles, les rayons cosmiques, le champ magnétique et en perdent via l'émission dans les raies des molécules qui les composent. Afin de comprendre les processus physiques et chimiques se déroulant dans ces objets, les plus grands télescopes au sol et spatiaux sont utilisés pour déterminer les abondances des éléments et leurs états d'excitation. A ce jour, près de 170 molécules ont été détectées par spectroscopie de l'ultra-violet lointain au millimétrique. La première molécule à avoir été détectée est CH en 1937. Récemment, le satellite HERSCHEL a permis la détection d'ions moléculaires comme OH<sup>+</sup> dont la présence est fortement liée au flux de rayons cosmiques. Le constituant majeur des nuages moléculaires est l'hydrogène moléculaire. Cette molécule homonucléaire ne possédant pas de transitions radiatives dipolaires électriques est difficile à détecter. On peut l'observer en absorption dans l'UV lointain et au bords des nuages dans les régions de formation d'étoile en émission dans certaines bandes depuis le sol, et dans l'infrarouge depuis l'espace. Ces dernières années, plusieurs grands instruments ont été mis en service et ont permis de détecter des molécules clefs de la chimie interstellaire comme les satellites Spitzer et HERSCHEL. Le radio-télescope interférométrique ALMA est peu à peu mis en service. Ce projet international, l'un des plus importants en astrophysique, permettra d'observer les nuages interstellaires avec une résolution inégalée. Si ces instruments ont permis de bien contraindre la chimie des régions interstellaires de grandes questions restent en suspens. En particulier, la confrontation des modèles numériques et des observations a montré que les grains interstellaires

jouent un rôle clef dans la chimie et que les processus mis en jeu sont très mal compris. En jouant le rôle de catalyseur, ils permettent à des réactions qui ne peuvent avoir lieu en phase gazeuse (en raison de blocages thermodynamiques ou cinétiques) de se produire. La chimie de l'eau et du méthanol en sont des exemples. L'interprétation de ces observations repose sur une confrontation des données observées avec des modèles numériques de plus en plus sophistiqués. Compte tenu des volumes des données à interpréter, sans cesse croissants, et des challenges que représentent ces nouvelles détections, les modèles numériques sont de plus en plus sollicités ce qui nécessite de disposer de ressources de calcul de plus en plus conséquentes.

### **Développements, déploiement sur la grille :**

La modélisation numérique de la physico-chimie du milieu interstellaire a commencé dans les années 70-80 (Tielens & Hollenbach, 1985). Les premières études ont porté sur la compréhension de la transition entre l'hydrogène atomique et moléculaire qui nécessite de traiter l'interaction entre la matière interstellaire et le rayonnement UV émis par les étoiles de type O et B. Ces codes, appelés codes PDR (Photo-Dominated Regions) ont depuis sans cesse évolué pour prendre en compte des mécanismes de plus en plus fins et nombreux et ainsi permettre d'interpréter les observations des nouveaux instruments. Il existe aujourd'hui un peu moins d'une dizaine de ces codes au monde.

Au LUTH, l'un des laboratoires de l'Observatoire de Paris, nous développons le code PDR de Meudon (Le Petit et al., 2006). Ce code calcule l'état stationnaire d'une tranche de gaz plansparallèles soumise à un champ de rayonnement. Le code résout de façon couplée le transfert de rayonnement, la chimie et le bilan thermique.

- Le transfert de rayonnement est résolu pour des photons allant de l'UV lointain au millimétrique. L'absorption et l'émission dans le continu par les poussières et dans les raies des molécules est prise en compte. Dans le cas de l'hydrogène moléculaire, l'ordre de grandeur des transitions UV prises en compte est de 30 000 raies.
- La chimie comporte typiquement quelques centaines d'espèces et plusieurs milliers de réactions chimiques.
- Le bilan thermique prend en compte les mécanismes de chauffage comme l'effet photoélectrique sur les grains, l'ionisation par les rayons cosmiques, les réactions chimiques exothermiques, etc ... et, pour le refroidissement, l'émission dans les raies des atomes et des molécules. Les nuages interstellaires étant fortement hors équilibre thermodynamique, l'intensité des raies en émission doit être calculée en résolvant explicitement l'équation d'équilibre statistique dans les niveaux des atomes et des molécules. Pour cela, nous prenons en compte les processus d'excitation et de désexcitation radiatifs et collisionnels.

Le code PDR utilise un très grand nombre de données de physique atomique et moléculaire ainsi que des taux de réactions chimiques provenant de diverses bases de données. Pour un jeu de paramètres d'entrée, il fournit en sortie, entre autres, la structure atomique et moléculaire d'un nuage interstellaire ainsi que les intensités des raies des principales espèces.

Ce code est publique et accessible à la communauté sur le site [pdr.obspm.fr](http://pdr.obspm.fr). Il est largement utilisé par la communauté française pour interpréter des observations dans différents types de milieux interstellaires (nuages diffus, régions de formation d'étoiles, nuages sombres, disques proto-planétaires, ...). Dans le cadre de l'interprétation des observations du satellite Herschel du milieu interstellaire, quasiment toutes les équipes françaises impliquées utilise directement ou indirectement ce code.

Un run du code demande entre 6 heures et plusieurs jours mono-CPU en fonction des algorithmes choisis. La sensibilité des nouveaux instruments permet des observations détaillées des objets proches ainsi que l'observation de molécules dans d'autres galaxies voire dans des systèmes à grand redshift (Noterdaeme et al. 2010). Pour ces milieux, très différents du milieu interstellaire local, l'interprétation des observations nécessite d'explorer l'influence d'un plus grand nombre de paramètres comme la métallicité, la composition et l'abondance des grains interstellaires, le flux de rayons cosmiques, etc ... Cela impose d'avoir accès à d'avantage de ressources de calcul souvent dans un laps de temps court, pour répondre rapidement aux besoins des observateurs.

Nous avons porté le code PDR sur la Grille EGI-InSPIRE. Ce code, écrit en fortran 90/95, a été relativement simple à porter. Il est compilé avec le compilateur Fortran GNU. Le code utilise les bibliothèques BLAS/Lapack et cfitsio, qui sont liées statiquement à la compilation. Les données de physiques atomiques et moléculaires ainsi que le code compilé sont accessibles sur un Storage Element. L'ensemble des paramètres à explorer est envoyé aux CE en utilisant la procédure des jobs paramétriques. Une documentation sur ce portage est en cours de rédaction. Elle expliquera aux utilisateurs de la version publique du code comment l'utiliser sur EGI-InSPIRE.

#### **Outils, difficultés rencontrées :**

Les séries de simulations réalisées à l'aide du code PDR contiennent de quelques centaines à quelques milliers de modèles. La principale difficulté rencontrée lors de la réalisation des simulation concerne la gestion des échecs.

Les simulations sont soumises à l'aide de jobs de type paramétrique contenant chacun quelques centaines de simulations au plus (jusqu'à 500 selon les ressources disponibles et le nombre total de modèles à examiner). Le paramètre variant est le numéro du jeu de conditions initiales donné en entrée du code. Pour chaque paramètre, le script d'exécution transfère l'ensemble des fichiers nécessaires à la simulation depuis un SE vers le CE où il s'exécute, puis la simulation est réalisée, et enfin les fichiers de résultats sont transférés vers un SE.

Des scripts shell simples permettent de gérer le suivi des jobs, de repérer les échecs, de transférer les résultats depuis les SE vers nos serveurs locaux. Le taux d'échecs observé n'excède généralement pas quelques % du nombre total de simulations réalisées. Les causes de ces échecs sont variables, allant de problèmes numériques provoqués par l'utilisation de valeurs extrêmes des paramètres d'entrée du code au dépassement du walltime sur le CE cible. Les modèles ayant abouti à un échec sont soumis sur un cluster de calcul local pour plus de contrôle sur les sources éventuelles de problème.

#### **Résultats scientifiques :**

Deux projets ont récemment tiré parti de la Grille EGI-InSPIRE. La Grille a été choisie comme solution compte tenu du nombre important de modèles à faire tourner pour mener ces études (plusieurs milliers dans chaque cas) et des délais courts dans lesquels les résultats devaient être obtenus pour répondre aux besoins de la communauté. La Grille, en fournissant un nombre important de CPU à la demande, répondait à ces deux impératifs. Au total, un peu plus de 40 000

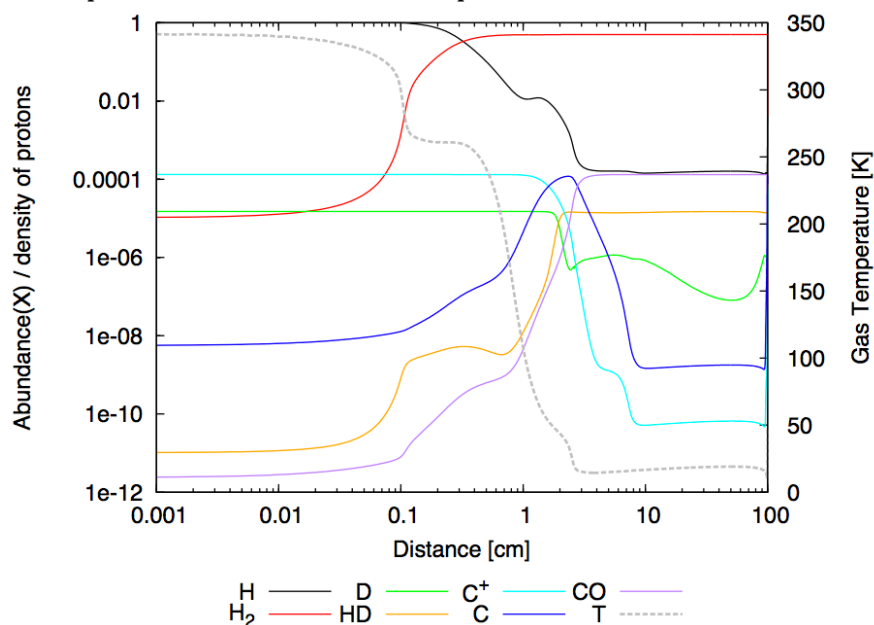
heures mono-CPU ont été utilisés sur la Grille pour ces deux projets. Les simulations ont été exécutés par deux utilisateurs, à l'aide des ressources mis à disposition de l'organisation virtuelle astro.vo.eu-egee.org, en particulier des Computing Elements du LAL, de l'Université de Bordeaux et de l'Observatoire de Paris, et du Storage Element de l'Observatoire de Paris.

### Détermination des fonctions d'auto-écrantage de H<sub>2</sub>.

Le premier projet visait à déterminer les fonctions d'auto-écrantage de la molécule H<sub>2</sub>. Cette molécule, la plus abondante du milieu interstellaire, est difficile à traiter proprement dans les modèles numériques. Son abondance est directement liée à son taux de photo-destruction qui, pour être déterminé, demande de résoudre de façon détaillée le transfert de rayonnement dans les raies de H<sub>2</sub> et de prendre en compte les mécanismes d'auto-écrantage. Un tel niveau de raffinement n'est pas possible à prendre en compte dans les simulations MHD des nuages interstellaires. En utilisant la Grille de façon intensive, nous avons pu déterminer des fonctions d'auto-écrantage pour un grand nombre de configurations de nuages interstellaires (densité, intensité du champ de rayonnement, métallicité). Une fois publiée, ces fonctions pourront être implémentées dans les codes de simulation MHD qui ainsi pourront estimer l'abondance de H<sub>2</sub>.

### Formation de H<sub>2</sub> et interprétation des observations Spitzer et Herschel.

L'un des points majeurs à mieux contraindre dans la chimie interstellaire est la formation de l'hydrogène moléculaire sur les grains interstellaires. Les observations du satellite Spitzer (Habart et al., 2011) ont montré que H<sub>2</sub> est présent au bord des nuages interstellaires dans les régions de formation d'étoile, alors que, d'après les expériences en laboratoire, H<sub>2</sub> ne peut pas se former sur des grains de température supérieure à une vingtaine de Kelvin. Or les observations montrent que la température des grains peut avoisiner les 30 K. Nous avons récemment implémenté le traitement détaillé des mécanismes de formation de H<sub>2</sub> à la surface des grains en nous basant sur les résultats des expériences en laboratoire. Outre les mécanismes faisant intervenir de la physisorption, nous avons introduit des mécanismes de chimisorption qui sont à même d'expliquer la formation de H<sub>2</sub> sur des grains chauds. La Grille ainsi que le mésocentre MESOPSL de Paris Sciences et Lettres ont été utilisés pour explorer l'espace des paramètres et produire des courbes d'intensité des raies de H<sub>2</sub> qui sont actuellement confrontées aux observations Spitzer. Bien que le satellite Herschel ne permette pas de détecter H<sub>2</sub>, ces résultats sont intéressants pour les interprétations des observations Herschel, car le taux de formation des molécules observées par Herschel sont fortement dépendantes d'un traitement précis de H<sub>2</sub>.



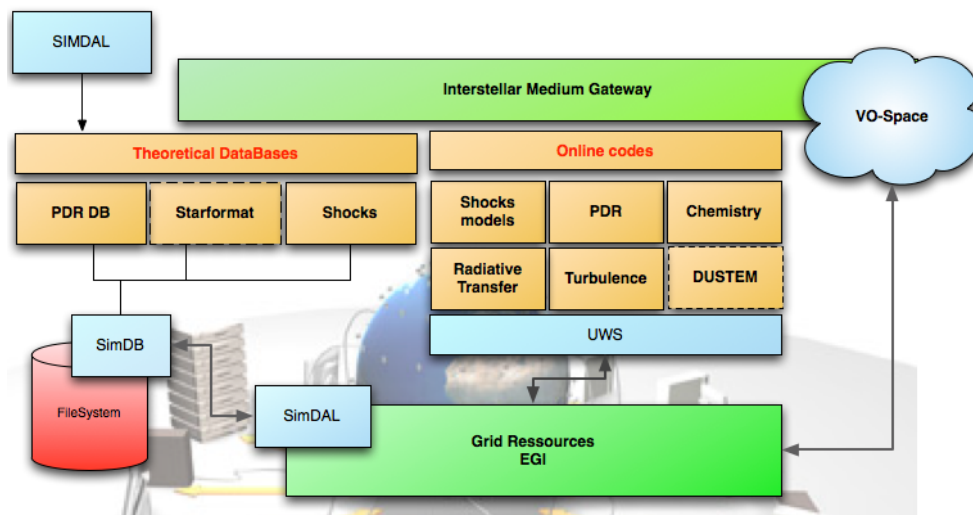
Exemple de profils d'abondance de quelques molécules pour un nuage isobare de pression  $P = 1E6 \text{ cm}^{-3} \text{ K}$  et illuminé par un champ de rayonnement 1000 fois supérieur à la valeur moyenne du milieu interstellaire. Le bord éclairé du nuage se trouve sur la gauche de la figure.

Example of abundances profiles for a few molecules in an isobaric cloud with pressure  $P = 1E6 \text{ cm}^{-3} \text{ K}$  and illuminated by a radiation field 1000 time higher than the interstellar medium mean value. The illuminated edge of the cloud is on the left side of the figure.

### Perspectives :

Sur le moyen terme, nous comptons développer un service web pour donner accès au code PDR en ligne. Ce projet se développe dans le cadre de l'Observatoire Virtuel, projet international en astronomie et astrophysique visant à développer une couche d'interopérabilité au dessus des bases de données et des services pour en donner accès de façon transparente à la communauté.

Le développement d'un service en ligne autour du code PDR fait partie d'un ensemble plus large de mise à disposition de codes numériques en ligne à l'Observatoire de Paris. Ce projet nécessitera des ressources de calcul à la volée. La Grille apparaît comme l'une des solutions d'autant plus que l'Observatoire de Paris maintient une UI d'EGI-InSPIRE.



Projet de plateforme de services théoriques pour le milieu interstellaire. Les services, composés de bases de données et de codes en ligne, pourraient être interconnectés à la Grille via des protocoles de l'Observatoire Virtuel (SimDAL, UWS). La Grille fournirait la puissance de calcul nécessaire aux services.

Project for a theoretical services platform for interstellar medium. The services – databases and online simulation services – could be interconnected with the grid through Virtual Observatory protocols (SimDAL, UWS). The grid would provide computing resources needed by the services.

### Références :

- Habart et al., 2011, A&A, 527, A122
- Le Petit et al., 2006, ApJ, 164, 506
- Noterdaeme et al., 2010, A&A, 423, A80
- Tielens et Hollenbach, 1985, ApJ, 291, 722