

Simulation codes in the Virtual Observatory



Franck Le Petit¹, Jonathan Normand²,
Fabrice Roy¹, Damien Guillaume³

1 - LUTH 2 - VO-Paris 3 - UFE

Abstract

Numerical simulations are fundamental in astrophysics either to prepare missions, to interpret observations or 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, thanks to Virtual Observatory tools, the Observatory of Paris has developed a way to give access to simulation codes and computing facilities. The first code introduced in this way is the Meudon PDR code allowing modelisation of the physics and chemistry of molecular interstellar clouds. Other codes will be introduced in the same way allowing the astrophysical community to get access to complex simulation codes to go further in analysis and understanding of the physics of the Universe.

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, l'Observatoire de Paris met en place un portail numérique par lequel la communauté astrophysique aura accès aux outils de simulation et de modélisation. Outre un accès aux codes, le portail numérique de l'Observatoire de Paris fournira un espace de calcul et de stockage de résultats.

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

Plusieurs codes sont déjà disponibles via le site du portail numérique de l'Observatoire de Paris :

- Lorène développé par l'équipe relativiste du LUTH. Bibliothèques en C++ permettant la résolution des équations aux dérivées partielles par des méthodes spectrales multi-domaines.
- Le code PDR développé par l'équipe MIS du LUTH. Permet la modélisation de la physico-chimie des nuages moléculaires.
- ADPPLawD développé par Jean-Marc Huré (L3AB/LUTH) pour déterminer le potentiel des disques d'accrétion.

Lorène	http://www.lorene.obspm.fr
PDR	http://aristote.obspm.fr/MIS
ADPPLawD	http://www.obs.u-bordeaux1.fr/radio/JMHure/intro2aplawd.html

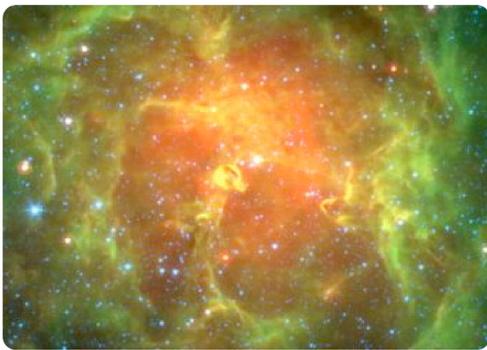


Fig 1 : L'accès aux codes de simulations par l'ensemble de la communauté permettra d'aller plus loin dans l'interprétation des Observations. (Observation Spitzer de la nébuleuse de la Trifid).

2 - Accès aux codes de simulations via l'OV

Les standards et les outils développés au sein de l'OV sont un moyen de donner plus facilement accès aux codes de simulation numérique. Les standards de définition de codes et de bases de données théoriques permettront de trouver plus simplement un code ou des résultats de simulation pour interpréter des observations. L'interopérabilité, rendue possible par les standards OV, permettra de coupler les codes entre eux ou avec des bases de données.

L'un de nos premiers objectifs a été d'enregistrer un code dans l'OV et de permettre son utilisation via les protocoles développés au sein de l'Observatoire Virtuel.

Objectifs :

- Donner accès aux codes de simulation via des clients permettant d'appréhender la physique des codes
- Donner accès à des moyens de calcul pour faire tourner les simulations
- Fournir de l'espace disque pour stocker les résultats
- Fournir des clients permettant d'analyser les résultats des codes

Pour répondre à ces objectifs, nous avons mis en place un système permettant de lancer des codes de simulation sur des serveurs distants via des clients communiquant avec Astrogrid.

Notre prototype est basé sur le code PDR de Meudon.

2.1 - Astrogrid

Le projet Astrogrid financé par le Royaume Uni et l'Europe développe un workbench permettant d'accéder aux données de l'Observatoire Virtuel. Via le workbench, il est possible d'interroger les bases de données observationnelles enregistrées dans l'OV. Nous l'avons utilisé pour donner également accès aux codes de simulations numériques.

L'intérêt d'Astrogrid est qu'il permet facilement de "wrapper" les codes dans le CEA (Common Execution Architecture) évitant ainsi de développer soi-même un webservice. Le CEA permet en outre de communiquer avec MySpace.

2.2 - Enregistrement de codes de simulation

L'enregistrement d'un code de simulation comme un service CEA se fait via un fichier XML décrivant le code et ses paramètres d'entrée. Cette description doit être enregistrée dans le registry d'Astrogrid.

Une fois enregistré, le task launcher d'Astrogrid permet d'entrer les paramètres d'un modèle dans une interface générique et de lancer une simulation sur un serveur distant. Le résultat est stocké dans MySpace.

L'interface générique d'Astrogrid étant difficile à utiliser pour une personne ne connaissant pas le code, nous avons développé un client présentant une interface adaptée au code PDR. Grâce aux bibliothèques d'AstroRuntime, ce client peut communiquer avec le service enregistré dans Astrogrid.

Dans le cas d'une simulation prenant plusieurs heures, l'utilisateur peut se servir du lookout pour suivre l'évolution du code.

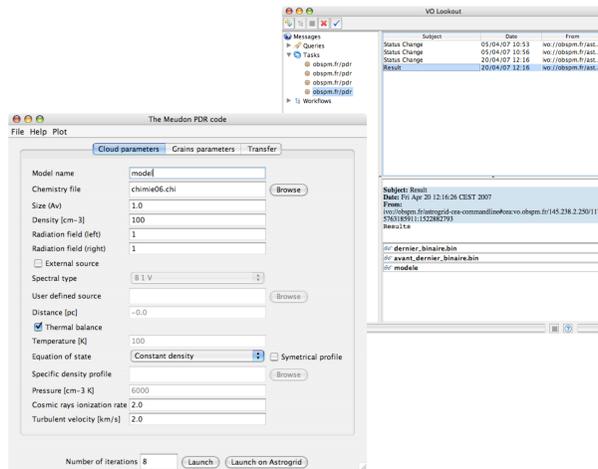


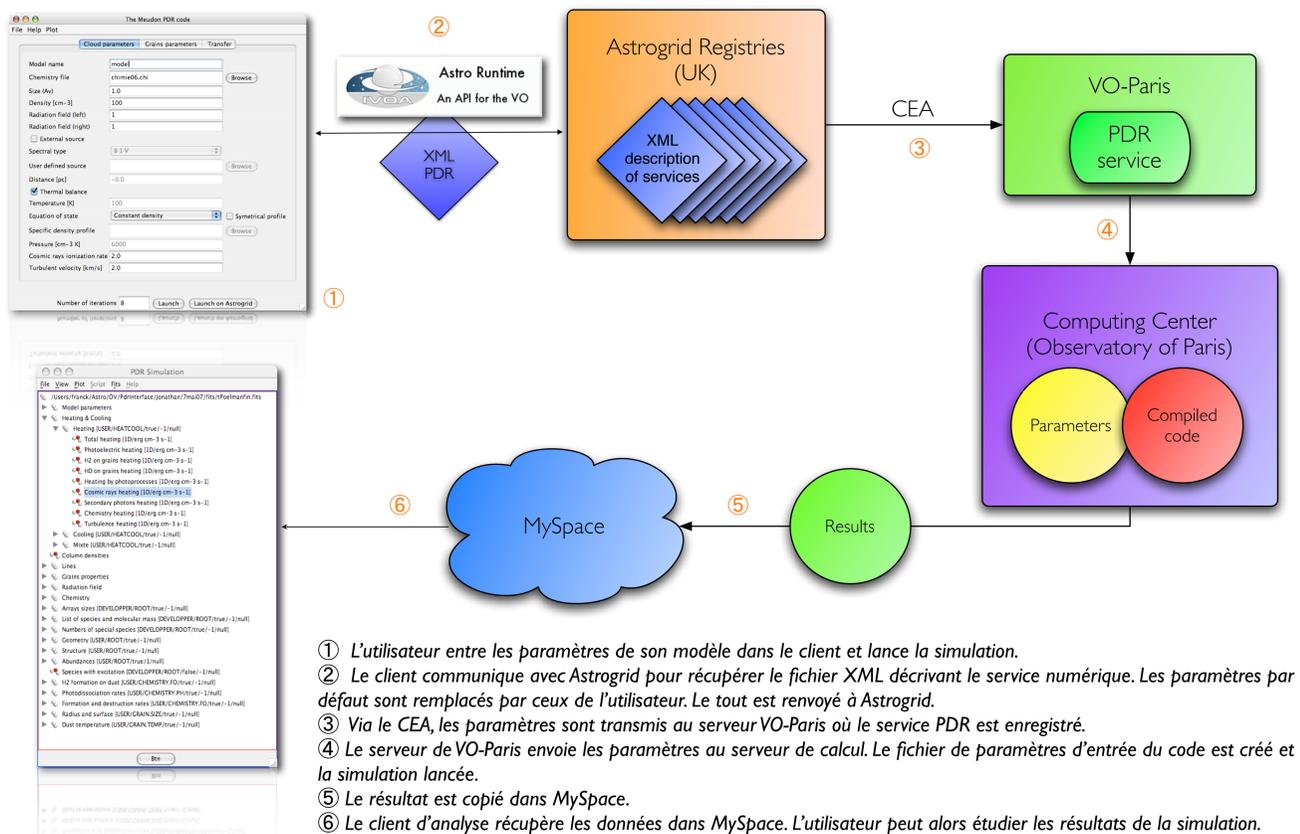
Fig 2 : Client de lancement du code PDR développé par F. Roy (LUTH) et Lookout permettant de suivre l'évolution du code sur les serveurs de calcul de l'Observatoire de Paris.

3 - Fonctionnement

Lorsqu'un utilisateur lance une simulation à partir du client, 4 sites entrent en jeu :

- L'ordinateur de l'utilisateur
- Les serveurs d'Astrogrid en Angleterre
- Le serveur VO-Paris, point d'entrée aux services VO de l'Observatoire de Paris
- Le serveur de calcul de l'Observatoire de Paris

Le fonctionnement général est présenté sur la figure ci-dessous.

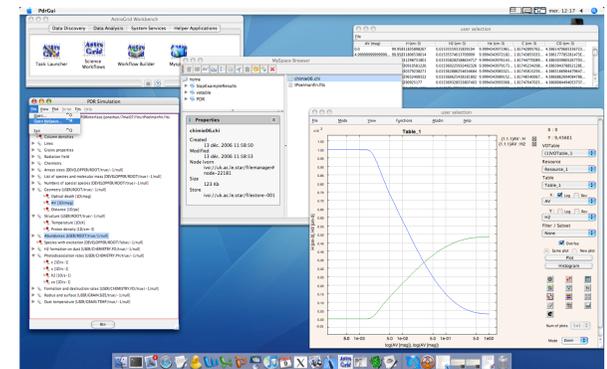


- 1 L'utilisateur entre les paramètres de son modèle dans le client et lance la simulation.
- 2 Le client communique avec Astrogrid pour récupérer le fichier XML décrivant le service numérique. Les paramètres par défaut sont remplacés par ceux de l'utilisateur. Le tout est renvoyé à Astrogrid.
- 3 Via le CEA, les paramètres sont transmis au serveur VO-Paris où le service PDR est enregistré.
- 4 Le serveur de VO-Paris envoie les paramètres au serveur de calcul. Le fichier de paramètres d'entrée du code est créé et la simulation lancée.
- 5 Le résultat est copié dans MySpace.
- 6 Le client d'analyse récupère les données dans MySpace. L'utilisateur peut alors étudier les résultats de la simulation.

4 - Accès aux résultats de simulations

Les résultats d'une simulation numérique pouvant être de nature diverses nous avons développé un client permettant de les visualiser.

Dans le cas du code PDR, les résultats sont écrits dans différents DataUnits d'un fichier fits. Le code génère également une VO-Table décrivant les quantités physiques disponibles. Elles sont identifiées par leur unité et leur UCD, ainsi que leur emplacement dans le fichier fits.



Exemple du bureau vu par l'utilisateur lors de l'analyse des résultats. On y trouve le client d'analyse, la fenêtre permettant de visualiser MySpace, VO-Plot où sont tracés les résultats. Le client utilise AstroRuntime pour accéder lire des résultats dans MySpace.

Nous avons développé un client capable d'interpréter cette VO-Table et pouvant présenter les résultats à l'utilisateur. Lorsque l'utilisateur sélectionne une quantité, celle-ci est extraite du fichier fits et présentée soit à l'écran, soit dans une VO-Table, soit dans un outil VO comme VO-Plot.

5- Développements futurs

Les développements futurs se déclinent sur deux axes principaux :
1 - Accès, via le client d'analyse, à des bases de données de résultats théoriques en utilisant le protocole SNAP.
2 - Workflows pour permettre de coupler les codes entre eux.

6 - Remerciements

Ce travail a été possible grâce au soutien de :

- VO-Paris (<http://vo.obspm.fr>)
- L'action spécifique OV-France (<http://www.france-ov.org>)
- Le laboratoire Univers & Théories
- Le conseil scientifique de l'Observatoire de Paris
- Le programme national PCMI