

Le milieu interstellaire présente une diversité chimique intéressante. Les progrès fait en matière de simulation ont suivi l'avènement des calculs de haute performance, et il est devenu possible de modéliser les réactions chimiques dans un nuage moléculaire. Nous cherchons à obtenir la structure physico-chimique d'une simulation 3D de la dynamique du milieu interstellaire. Nous utilisons les sorties de simulations magnétohydrodynamique comme exemples de profils de densité pour étudier la répartition des décompositions possibles en gaussienne de chaque profil. Celle-ci nous sert de base pour créer une grille de modèles auxquels on applique le code PDR de Meudon afin d'accélérer le traitement en 3D des simulations. Nous créons ainsi une grille de 507 modèles échantillonnés sur les paramètres de gaussienne et la répartition des éclaircissements qu'on peut observer dans deux simulations

Modèles de la structure physico-chimique des nuages interstellaires

Bilal Ladjelate

June 21, 2013

1 Introduction

1.1 Photon-Dominated Region

Le milieu interstellaire (MIS) est un système éminemment complexe : les structures qu'on y observe, et la dynamique dont il est le siège, sont liées à l'interaction de nombreux processus micro- et macrophysiques d'intensités comparables, sur une grande plage d'échelles (Lequeux et al.). Pour comprendre la formation stellaire et planétaire, il est également essentiel de comprendre le fonctionnement du MIS, car c'est par la dissipation de la turbulence interstellaire et le refroidissement des structures via le transfert de rayonnement que l'effondrement gravitationnel des nuages préstellaires peut avoir lieu.

Ce domaine de l'astrophysique a connu de grands progrès ces dernières années, bien entendu du côté des observations, avec par exemple les moissons de données du satellite Herschel (Pilbratt et al. 2010; de Graauw et al. 2010), mais également du point de vue théorique, avec l'apparition de simulations numériques de plus en plus détaillées (voir par exemple Banerjee et al. 2009; Vázquez-Semadeni et al. 2010), incluant de manière cohérente l'autogravité, les processus thermiques et magnétohydrodynamiques.

La pièce manquant encore aux simulations numériques est un traitement détaillé de la chimie du MIS, que ce soit en phase gazeuse, ou plus ardu encore, à la surface des grains. Cette étape est indispensable si l'on souhaite comparer ces simulations aux observations des raies atomiques et moléculaires, ainsi qu'à celles du continuum des poussières.

Pour ce faire, l'une des possibilités, suivie par Glover et al. (2010) et par le travail (mentionné plus loin) de V. Valdivia, est de traiter un réseau chimique où chaque espèce est représentée par un fluide distinct, couplé aux autres via des réactions de formation et destruction. Cette approche, si elle a l'avantage de traiter naturellement la dépendance temporelle de la distribution tridimensionnelle des espèces ainsi que leur dynamique, peut vite devenir fort coûteuse en temps de calcul. Elle oblige donc à considérer un réseau réduit, traitant peu d'espèces différentes, au risque de négliger un aspect essentiel de la chimie interstellaire. A titre d'exemple, Glover et al. (2010) considèrent un réseau de 32 espèces liées par 218 réactions, et seules 19 de ces espèces sont effectivement traitées comme dépendantes du temps.

Dans ce travail, nous adoptons une approche différente, semblable à celle de Levrier et al 2012, en calculant la composition chimique de structures formées dans des simulations monofluide via l'application du code PDR de Meudon en tant que post-processing. Cette approche a l'avantage de permettre le traitement complet de la chimie (99 espèces, 1362 réactions), mais en contrepartie, elle impose les conditions du code PDR, à savoir unidimensionnalité et stationnarité. Dans Levrier et al 2009, le traitement d'une simulation MHD par le code PDR de Meudon a montré l'importance des effets d'ombre dans le calcul de la chimie. Pour simplifier, Levrier et al. 2012 ont découpé les profils de densité issus de la simulation MHD en utilisant un simple seuil de densité et ont appliqué un champ de rayonnement commun à tous les bords de profils. Dans ce travail, nous faisons un pas de plus vers le traitement complet du calcul de la structure physico-chimique de simulations MHD via le code PDR. D'une part, nous utilisons le champ de rayonnement calculé par une méthode développée par V. Valdivia, et d'autre part, nous développons une décomposition Gaussienne des structures en densité obtenues dans les simulations MHD, de façon à construire une banque de modèles PDR. Ces modèles ont vocation à être utilisés par la suite pour reconstituer la structure chimique tridimensionnelle dans la simulation MHD.

1.2 Code PDR de Meudon

Le code PDR de Meudon (Le Bourlot et al. 1993; Le Petit et al. 2006; Gonzalez Garcia et al. 2008, <http://pdr.obspm.fr/>) est un ensemble de routines dont le but est de décrire la chimie dans les régions de photodissociation (PDR) où l'apport énergétique nécessaire à l'évolution chimique du milieu est essentiellement dû aux photons UV. Il s'agit d'un code unidimensionnel

et stationnaire, dans lequel une tranche de gaz de géométrie plan-parallèle est éclairée sur ses deux faces par un champ de rayonnement donné (potentiellement différent des deux côtés). Ce champ de rayonnement peut être simplement celui considéré comme standard dans notre Galaxie (Interstellar Standard Radiation Field - ISRF), défini à partir d'expressions de Mathis et al. (1983) et Black (1994), mais il peut également inclure la radiation d'une étoile proche. Dans notre cas, seul le rayonnement de l'ISRF sera pris en compte.

Habituellement, le code PDR est utilisé sur des tranches homogènes, mais il peut accepter des profils complexes en densité, comme décrit dans Levrier et al 2012. En chaque point de la ligne de visée, le transfert radiatif dans l'UV est résolu pour obtenir la position de la transition entre l'hydrogène atomique (H) et l'hydrogène moléculaire (H_2), soit dans l'approximation FGK (Federman et al. 1979), soit exactement via une méthode fondée sur les harmoniques sphériques (Goicoechea & Le Bourlot 2007). L'inclusion des processus de chauffage (effet photoélectrique sur les grains, ionisation par les rayons cosmiques) et de refroidissement (raies d'émission IR et millimétriques) permet le calcul détaillé de l'équilibre thermique (on rappelle qu'il s'agit d'un code stationnaire). En sortie, le code fournit les propriétés du gaz en chaque point : température, taux d'ionisation, abondances chimiques, densité d'énergie radiative, populations des niveaux énergétiques

Comme l'indiquent Levrier et al 2012, il est impossible d'espérer traiter toutes les lignes de visée à travers un cube de simulation MHD avec le code PDR, d'une part parce que le nombre de profils à traiter rend la chose computationnellement intraitable, mais aussi parce que le code connaît des difficultés à converger dans les zones de faible densité (typiquement moins de 20 cm^{-3}), qui peuvent représenter la majeure partie du volume d'un cube de simulation. A titre d'exemple, Levrier et al. 2012 indiquent que dans 96% du volume du cube de données qu'ils ont utilisé, la densité était effectivement inférieure à cette valeur de 20 cm^{-3} . Enfin, et c'est peut-être le plus important pour ce qui nous intéresse ici, le caractère unidimensionnel du code PDR entraîne des effets d'ombre artificiels importants lorsqu'une structure dense apparaît dans un profil de densité. En réalité, la nature fractale du MIS implique que ces régions "à l'ombre" sont éclairées dans d'autres directions. Dans ce travail, nous utilisons le champ de rayonnement "réel", calculé à chaque bord de profil PDR via une méthode développée pour RAMSES par V. Valdivia.

2 Simulations

2.1 Ramses

Les différentes simulations du MIS utilisées sont issues de RAMSES. Le code RAMSES (Teyssier, 2002; Fromang et al. 2006), est un environnement de simulation développé à Saclay pour étudier la formation des grandes structures et la formation des galaxies. Il est désormais adapté à la simulation de fluides auto-gravitants à plus petite échelle, ce qui justifie son utilisation dans le cas présent. Il présente l'avantage d'être à grille adaptative (Adaptive Mesh Refinement, AMR), ce qui aide considérablement à l'étude de phénomènes où la densité varie sur plusieurs ordres de grandeurs. En effet, lorsque la densité dans une cellule atteint un seuil prédéfini, le code divise cette cellule en sous-cellules et augmente donc la résolution spatiale de simulation. Cette décomposition de chaque cellule est dite "Tree-Based".

Dans les deux simulations utilisées dans ce travail, il s'agit de la collision entre deux flux de matière neutre chaude (Warm Neutral Medium, WNM) à $n_H = 1\text{cm}^{-3}$ dans un cube de 50 pc de côtés. La première est une simulation à basse résolution. Les niveaux de raffinement valent 7 et 9 pour le minimum et le maximum, et la résolution effective maximale est de 0.1 pc. Ces niveaux de raffinement correspondent au nombre de subdivision d'une cellule de départ qu'on peut effectuer. La simulation est arrêtée à 16 Myr. La seconde est une simulation à plus haute résolution. Le niveau de raffinement minimum monte à 8 tandis que le niveau maximum va jusqu'à 10. La résolution effective finale vaut alors 0.05 pc. Elle est arrêtée à 8 Myr. Les flux convergents se rencontrent dans le plan $X = 0$ et alors la matière chaude se refroidit (Cold Neutral Medium, CNM) (Field, 1965; Hennebelle & Pérault, 1999, 2000). Les premières structures se forment après 1 Myr, et lorsque la simulation est arrêtée, des clumps peuvent être extraits de la simulation ($n_H > 100\text{cm}^{-3}$)

Une simulation ainsi faite n'est pas suffisante pour une entrée dans le code PDR. Il est nécessaire de connaître le champ de rayonnement en chaque point.

2.2 Calcul d’extinction

En effet, l’éclairement a une grande influence sur les réactions chimiques interstellaires, et on cherche à observer le couplage entre la dynamique des fluides dans le milieu et les réactions en cours. Cependant, la dynamique est déjà contenue dans la simulation, seules les structures seront étudiées dans la suite.

Un nuage moléculaire est éclairé par des étoiles environnantes, qui contribuent à l’évolution du milieu. A l’intérieur du nuage, la poussière diffuse les photons issus de l’ISRF, et nous considérons un cube de 50 pc dans ce nuage, éclairé donc par ces photons diffusés.

A l’aide d’un code calculant sur une grille adaptative l’écrantage du à chaque cellule, il est possible d’obtenir pour chaque pixel le facteur d’extinction χ tel que $I = \chi I_0$. C’est un module développé pour RAMSES. (Valdivia et al., in prep). Les fichiers obtenus grâce à ce code vont donc être utilisés comme entrées pour la méthode que nous cherchons à valider.

Afin de calculer l’extinction en chaque pixel, il est nécessaire de calculer la densité de colonne en chaque point, pour connaître sa contribution à l’écrantage. Ceci est fait dans 40 directions iso-réparties sur 4π stéradians. Cependant, le code tourne sur une simulation issue de RAMSES qui génère des cellules de taille différente le long du parcours pour l’intégration de la densité de colonne. Il faut donc calculer la densité de colonne suivant une direction en tenant compte de la longueur interceptée par le rayon dans la cellule.

Le facteur d’extinction est lié à

$$\chi = \frac{1}{N_{dir}} \sum_{i_{dir}}^{N_{dir}} e^{-\sigma_{1000} \cdot N_{dir}} \quad (1)$$

avec $\sigma_{1000} = 2.10^{-21} cm^2$ qui correspond à l’atténuation effective pour la poussière à 1000 Angström (Draine & Bertoldi, 1996; Glover & MacLow, 2007).

3 Traitement des profils

3.1 Décomposition

Les simulations proposées sont purement physique, mais on cherche à décrire la chimie intervenant sur les structures présentes en 3D. Rappelons que le code PDR ne traite que des couches plan-parallèle 1D, et que le calcul est très complexe. On cherche donc à accélérer le processus en décomposant chaque profil en une famille de fonctions dont le paramétrage est simple. Il faudra après reconstruire les profils complexes en combinant les structures chimiques de chaque sous-profil. Chaque simulation contient position, densité, colonne-densité, et extinction. Nous nous intéressons dans un premier temps à la densité, qui nous permet de tracer des profils et de calculer A_V donnée par

$$A_V = \frac{R_V}{C_D} \left(\frac{N_H}{1 \text{ cm}^{-2}} \right) \quad (2)$$

avec $R_V = 3.1$ et $C_D = 5.8 \times 10^{21} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{mag}^{-1}$, et $N_H = N(\text{H}) + 2N(\text{H}_2)$

Sur une tranche de densité, plusieurs pics peuvent être présents, représentant plusieurs structures qui peuvent être transitoires. Passé un certain seuil de densité, une structure peut éventuellement perdurer sauf si elle est dynamiquement instable, et des réactions chimiques peuvent être modélisées dans ces zones par le code PDR.

Compte tenu des limitations du code PDR, qui ne travaille que sur des tranches 1D, et dont la complexité, i.e. la longueur d'exécution rend impossible le traitement chimique d'une simulation complète 3D, il semble important de décomposer chaque profil en éléments simples, avec peu de paramètres. Grâce à une telle décomposition, nous pouvons réduire l'étude à une famille de profils bien choisis et les étudier avec le code PDR au préalable, pour utiliser les résultats de notre démarche pour accélérer le traitement chimique d'une simulation.

Ceci devrait permettre d'approcher la composition chimique d'une structure 3D. Le code PDR est itératif, et des problèmes de convergence peuvent se présenter pour des structures trop diffuses, c'est pourquoi on se limitera aux structures dépassant 20 cm^{-3} .

Nous pouvons nous intéresser à la nature de ces structures, leur largeur et leur hauteur. Nous utilisons pour cela un algorithme d'optimisation natif dans python/scipy, basé sur la méthode Levenberg-Marquardt (<http://docs.scipy.org/doc/scipy/reference>) sur le logarithme des profils en densité, pour s'assurer que nous tenons bien

compte de tous les pics, sans se limiter aux plus grands pics qui pourraient perturber la modélisation des structures moins denses.

L'algorithme est le suivant:

- Détection du maximum du profil: il est associé à un pic de densité assimilable à une gaussienne, pouvant montrer un clump existant.
- Optimisation d'une gaussienne autour de ce maximum. Nous choisissons ici de faire une régression 5 pixels autour du pic. Ceci est nécessaire pour la suite, puisque nous cherchons à obtenir dans un premier temps la meilleure estimation des coefficients de gaussienne à utiliser pour la régression.
- Soustraction de la gaussienne optimisée. La surdensité observée est retirée à l'ensemble du profil.
- Optimisation d'une somme de gaussiennes sur le profil initial basé sur les coefficients déterminés jusque maintenant.
- Passage au pic suivant, de façon itérative.

On retire ainsi pour chaque profil toutes les gaussiennes optimisées sur les pics détectés, et on opère une régression supplémentaire à chaque boucle, pour raffiner les coefficients.

Cependant, à chaque étape, la régression n'est pas assurée de fonctionner. Il se peut que l'algorithme de Levenberg-Marquardt ne parvienne pas à trouver une optimisation raisonnable. C'est pourquoi à chaque étape, il faut effectuer une régression de l'ensemble du profil.

Cet algorithme étant itératif, il nécessite une condition d'arrêt. Nous en avons testé deux.

La variance peut être un premier critère. Une fois une variance limite atteinte, les variations ne sont plus suffisantes et alors on peut cesser de traiter les pics, qui ne pourront pas être traités par le code PDR. Cependant, ce critère n'a pas fonctionné et a mis en évidence l'un des problèmes du code. Le milieu trop diffus est mal pris en charge par le code PDR. Sous un certain seuil de densité, ($\sim 20 \text{ cm}^{-3}$, Levrier et al, 2012), le code ne parvient pas à converger vers une solution.

En effet, si le pas en A_V est trop faible entre les deux premier pixels de la simulation, le code PDR semble considérer que celui-ci est nul.

Considérer la moyenne comme un critère d'arrêt semble alors plus pertinent

pour éviter de prendre en compte des structures trop diffuses. On choisit pour cela une moyenne de 3 cm^{-3} sur le profil. Pour ce qui est de la performance, l'optimisation est un processus très long, difficile à accélérer. En effet, il s'agit de minimiser une fonction en parcourant un espace de paramètres pas à pas.

En terme de calcul CPU, il est envisageable d'augmenter la vitesse de nos algorithmes, en effectuant les calculs sur les pics en parallèle, c'est à dire en détectant les N premiers maximums et en optimisant une gaussienne autour de chacun d'eux sur N processeurs différents, à mémoire partagée.

L'approche par ligne de visée est cohérente avec le fonctionnement du code PDR, mais un algorithme de clumpfind (GILDAS) aurait éventuellement pu, en procédant de la même manière, obtenir des résultats plus rapides et surtout en 3D, ce que l'on attend de cette méthode.

4 Bibliothèque

4.1 Principe de l'échantillonnage

Nous cherchons à créer un espace de paramètres restreint mais représentatif des simulations, afin de traiter au mieux les pics les plus fréquents dans celles-ci. Il faut donc, sur la base de simulations, observer des similitudes, et s'assurer que toute grille de modèles tienne bien compte de chaque pic représenté dans les simulations. Les paramètres retenus pour la grille sont répartis en deux catégories. Il y a dans un premier temps les paramètres structurels, qui décrivent la taille et la densité des clumps dans les simulations. La famille de fonctions paramétrées retenue étant une famille de fonction gaussiennes, il faut s'intéresser à la dispersion et à la hauteur de celles-ci.

A cela s'ajoutent deux paramètres physiques. Chaque gaussienne est illuminée à gauche et à droite par l'ISRF, et celui-ci influe sur la chimie du milieu.

A cette fin nous avons utilisé l'algorithme décrit en 3.1 sur les deux simulations dont les extinctions ont été calculées. Du fait de la lenteur de l'optimisation sur les simulations, il a été nécessaire de sauvegarder les résultats au fur et à mesure, après 4 à 5h de calcul sur une machine récente.

Compte tenu des résidus, il faut éliminer les zones qui ne semblent pas correspondre à des paramètres physiquement acceptables pour des clumps. Ceci

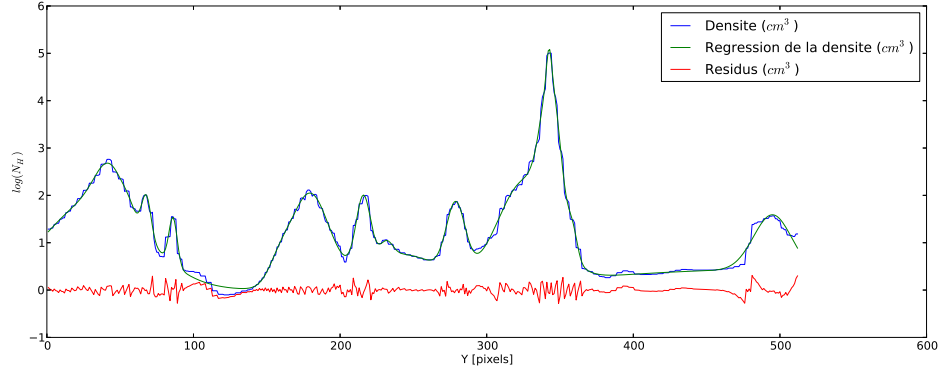


Figure 1: Exemple de profil sur lequel une régression est effectuée

est du à des erreurs de convergence lors de l'optimisation, ou à une régression qui ne tient pas compte de suffisamment de pics. On doit en outre tenir compte de gaussiennes beaucoup plus larges, correspondant à une ligne de base sur le profil.

Une fois la répartition obtenue, la méthode la plus simple pour obtenir une grille de modèles, est de considérer des zones intéressantes dans l'espace des coefficients, d'en considérer les valeurs minimum et maximum, et d'y placer un nombre prédéfini de cases.

Les deux simulations traitées présentent des similitudes dans la répartition des coefficients de gaussienne et d'éclairement. Ceci semble logique étant donné la répartition des valeurs de densité sur l'ensemble des simulations. (cf histogrammes)

4.2 Répartition

Nous pouvons remarquer des points d'accumulation. De très nombreux petits pics, de faible dispersion sont détectés ($\sigma < 1$ pixel et $\log(n_H) < 1$). Lors de la régression, ils ont servi d'ajustement, pour approcher au plus près la courbe à modéliser. Ils ne peuvent pas être pris en compte, étant donné leur trop faible hauteur, puisque le code PDR ne les prend pas en charge. On s'intéresse donc à la partie que le code peut traiter.

La présence de pics de très grande dispersion ($\sigma > 100$ pixels) s'explique

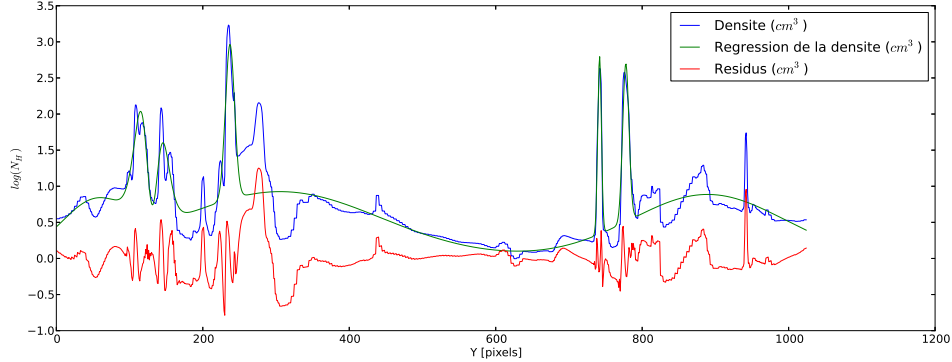


Figure 2: Exemple de profil de densité contenant des gaussiennes relativement large suivant le profil comme une ligne de base

par le fait que certains profils font apparaitre une ligne de base. Il faudrait alors retirer cette valeur de base, mais celle-ci étant difficile à caractériser, l'algorithme la traite comme une gaussienne de très grande dispersion mais de faible hauteur.

Etonnamment, il apparait une zone de pics de grande hauteur, et de grande dispersion. Ceci est plus difficilement explicable, d'autant qu'il semblerait qu'un point d'accumulation soit présent dans cette aire. La répartition en luminosité semble plus uniforme. Il est difficile de concevoir des zones de trop fort gradient d'extinction, donc la plupart des coefficients sont groupés autour de la droite $\chi_m = \chi_p$. L'ensemble des extinctions χ sont comprises entre 0 et 0.7, ce qui simplifie l'espace des éclaircissements possibles, qui peut se limiter à une grille comprise dans un carré de 0.7 de côté.

L'échantillonnage en paramètres de gaussienne est plus compliqué étant donné la répartition des coefficients. Nous avons opté pour une grille basée sur une répartition logarithmique dans un premier temps, en hauteur et en largeur. De plus nous observons une décorrélation des éclaircissements avec les paramètres gaussiens. En effet, ceux-ci semblent en grande partie répartis de façon homogène en fonction des éclaircissements. Ceci est dû au caractère fractal du milieu. En effet, l'éclairement en un point est statistiquement indépendant de la densité locale.

On peut donc construire notre grille séparément sur les éclaircissements, et sur les paramètres de gaussiennes. La grille de calcul qui nous est mise à dis-

position fixe le nombre de modèles qu'on peut faire tourner en un temps raisonnable (\sim une semaine), ce qui contraint notre échantillonnage.

Nous avons donc construit la grille de modèles de la façon suivante: Les hauteurs sont logarithmiquement équiréparties en 20 pas et vont de 30 à 2000 cm^{-3} . Les dispersions sont logarithmiquement équiréparties en 20 pas aussi et vont de 1 à 30 pixels

Les éclairagements quant à eux sont équirépartis en 3 pas et vont de 0.1 à 0.7. La répartition en éclairagement est un peu sommaire, mais on peut ajouter plus de fichiers qui pourront être traités dans les mois qui viennent.

5 Résultats et Interprétation

Après une semaine de calcul, chaque modèle a pu être traité. Tous ont retourné des fichiers d'abondance qui sont exploitables à l'aide du module `pdrAnalyser` qui utilise en entrée les sorties du code PDR. Ces sorties contiennent tous les paramètres physiques utilisées par le code PDR et les abondances calculées par le code à chaque itération. Nous obtenons au final une bibliothèque de 507 modèles PDR. Les résultats sont présentés figure 13 et 14. Nous avons manqué de temps pour exploiter tous les résultats. Cependant, nous pouvons observer divers effets sur les courbes d'abondances. En effet, dans un premier temps, l'éclairagement joue un rôle crucial dans la chimie des profils étudiés. Une zone plus éclairée aura tendance à présenter des espèces différentes à des abondances différentes, ce qui justifie notre démarche d'échantillonnage selon les différents éclairagements possibles. Notre approche est justifiée par Levrier et al. (2009). Dans les figures 12 et 13, nous observons que le code PDR lancé sur des profils aux bords desquels ont pose un éclairagement valant 1 va entraîner l'observation de CII, ce qui n'est pas le cas sur l'ensemble du profil, les photons ne pouvant pas atteindre cette zone, et par conséquent activer des réactions de formation de CII. Quelques semaines de plus nous permettront de lancer plusieurs profils gaussiens et des profils complets afin de comparer les chimies observées sur l'ensemble d'un profil et sur un profil recomposé.

6 Conclusion

Ainsi, nous avons créé une bibliothèque de modèles, à partir de deux simulations issues de RAMSES, dans lesquelles l'écrantage de la poussière entourant chaque cellule à été calculé. Ces modèles ont été choisies en fonction des gaussiennes que nous avons pu observer sur les simulations fournies. Celles-ci permettront, dans le meilleur des cas, avec un raffinement meilleur plus tard, de décomposer chaque profil de densité pour chaque simulation. Nous pourrions ainsi obtenir une bibliothèque de modèles possibles, et ainsi accélérer grandement le traitement de la chimie dans les simulations. Aujourd'hui, il n'est possible que de traiter des simulations en 2D de façon précise, ou des simulations 3D, mais avec des réseaux chimiques peu étendus. Ici, nous pouvons obtenir une estimation de la chimie dans des simulations plus étendues. Parmi les développements futurs, nous pourrions resserrer la grille de modèles, pour approcher au mieux les pics observés, mais aussi chercher une méthode d'estimation de la distribution représentant le mieux les nuages de points qu'on peut obtenir. De plus, il est possible d'accélérer et d'optimiser l'espace utilisé par la régression sur l'ensemble de la simulation en gérant les variables et les opérations, ce qui permettra d'étendre cette méthode sur 3 dimensions.

A Le code PDR de Meudon appliqué à des profils de densité personnalisés

Dans cette partie, nous expliquons le fonctionnement pratique du code PDR de Meudon.

Le code requiert en entrée deux fichiers: un fichier `.pfl` contenant A_V , la température T (en K), et la densité totale n_H (cm^{-3}) le long de la ligne de visée, et un fichier `.in`, donnant les paramètres pour lancer le code.

Nous en détaillons quelques uns:

- `modele` est le nom du modèle, dossier dans lequel les fichiers de sortie seront stockés
- `ifafm` est le nombre d'itération utilisée. Nous avons utilisé `ifafm = 20` pour tous les modèles.
- `Avmax` est la dernière A_V du fichier `.pfl`, l'absorption maximale
- On fixe `dense`, `tgaz` et la pression `presse = densh × tgaz`
- `radm` and `radp` représentent les intensités χ_m et χ_p à gauche et à droite de l'ISRF, fixés grce aux calculs d'écrantages.

- `fprofil` est l'endroit où il faut spécifier le fichier `.pfl` que l'on va utiliser.
- `vturb` est la vitesse turbulente. N'ayant pas de vitesses renseignées dans la simulation, nous l'avons fixé arbitrairement à 1 km.s^{-1}
- `ifisob` est un nombre permettant de spécifier si on souhaite utiliser un fichier de profil personnalisé ou non. Dans notre cas, on prend $ifisob = 1$, puisqu'on utilise un fichier de profil précis.

Table 1: Paramètres utilisés dans le code PDR, spécifiés dans le fichier `.in`.
Repris de Levrier et al. 2012.

Parameter	Description	Value
<code>modele</code>	Basename for the output files	<i>see appendix</i>
<code>chimie</code>	Chemistry file	<code>chimie08</code>
<code>ifafm</code>	Number of global iterations	20
<code>Avmax</code>	Integration limit in A_V	<i>see appendix</i>
<code>densh</code>	Initial density (cm^{-3})	<i>see appendix</i>
<code>F_ISRF</code>	ISRF expression flag	1
<code>radm</code>	ISRF scaling factor χ_m	<i>see appendix</i>
<code>radp</code>	ISRF scaling factor χ_p	<i>see appendix</i>
<code>srcpp</code>	Additional radiation field source	<code>none.txt</code>
<code>d_sour</code>	Star distance (pc)	0
<code>fmrc</code>	Cosmic rays ionisation rate (10^{-17})	20
<code>ieqth</code>	Thermal balance computation flag	1
<code>tgaz</code>	Initial temperature (K)	<i>see appendix</i>
<code>ifisob</code>	State equation flag	<i>see appendix</i>
<code>fprofil</code>	Density-Temperature profile file	<i>see appendix</i>
<code>presse</code>	Initial pressure	<i>see appendix</i>
<code>vturb</code>	Turbulent velocity	<i>see appendix</i>
<code>itrfer</code>	UV transfer method flag	0
<code>jfgkh2</code>	Minimum J level for FGK approximation	0
<code>ichh2</code>	H + H ₂ collision rate model flag	2
<code>los_ext</code>	Line of sight extinction curve	<code>Galaxy</code>
<code>rrr</code>	Reddening coefficient $R_V = A_V/E_{B-V}$	3.1
<code>cdunit</code>	Gas-to-dust ratio $C_D = N_H/E_{B-V}$ ()	5.8×10^{21} g
<code>alb</code>	Dust albedo	0.42 ^g
<code>gg</code>	Diffusion anisotropy factor $\langle \cos \theta \rangle$	0.6
<code>gratio</code>	Mass ratio of grains / gas	0.01 ^g
<code>rhogr</code>	Grains mass density (g.cm^{-3})	2.59
<code>alpgr</code>	Grains distribution index	3.5 ^g
<code>grmin</code>	Grains minimum radius (cm)	3×10^{-7}
<code>grmax</code>	Grains maximum radius (cm)	3×10^{-5}
<code>F_DUSTEM</code>	DUSTEM activation flag	0
<code>iforh2</code>	H ₂ formation on grains model flag	0
<code>istic</code>	H sticking on grain model flag	4

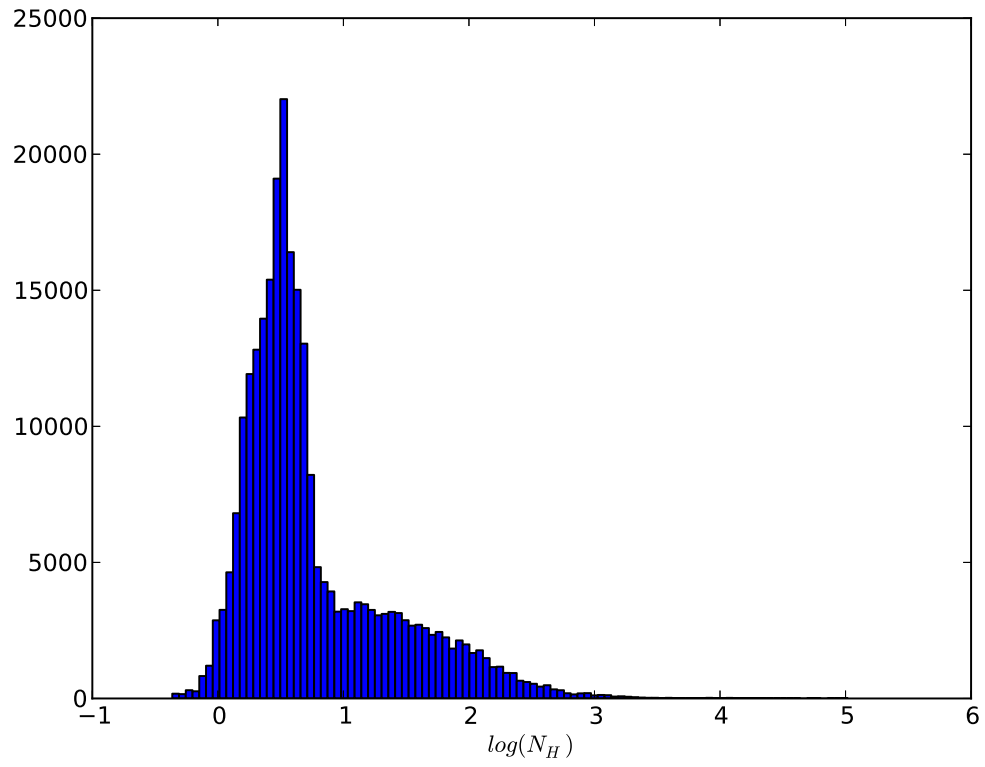


Figure 3: Histogrammes des valeurs de logarithmes de densité pour la simulation basse résolution

□

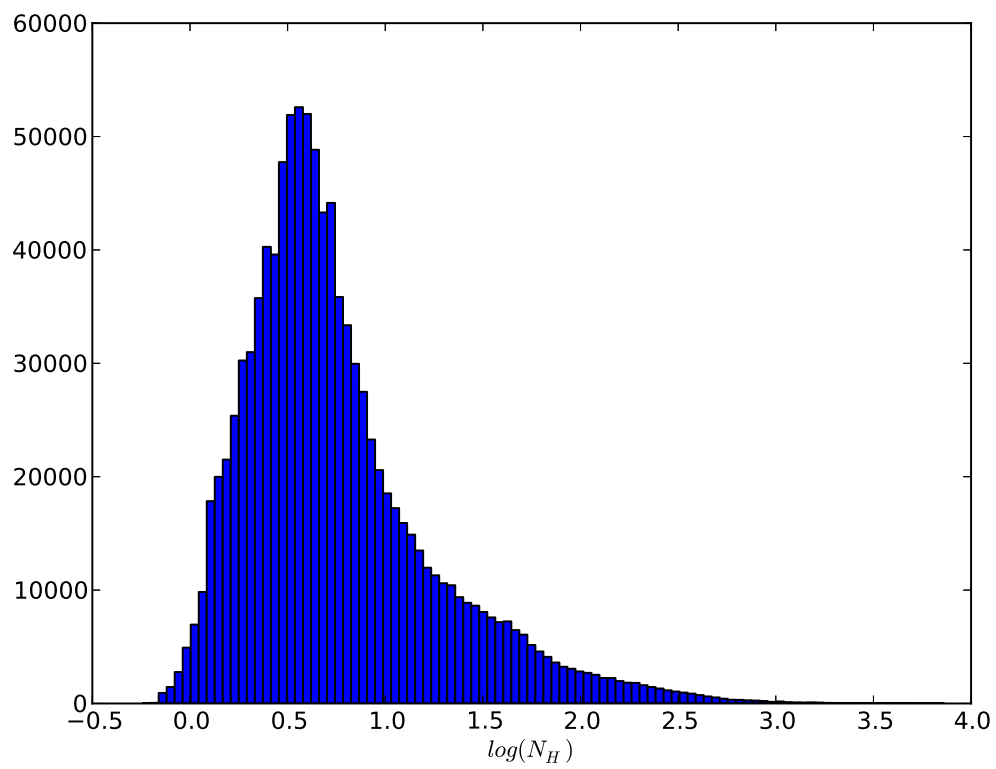


Figure 4: Histogramme des valeurs de logarithmes de densité pour la simulation haute résolution

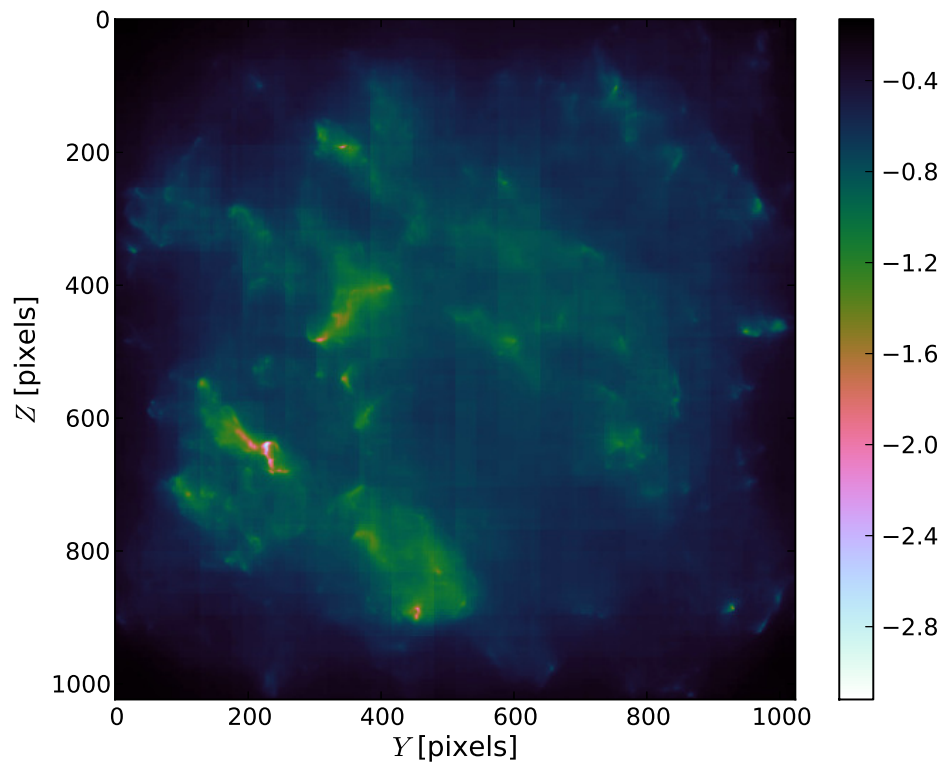


Figure 5: Simulation Haute Résolution arrêtée à 8 Myr, Logarithme des extinctions

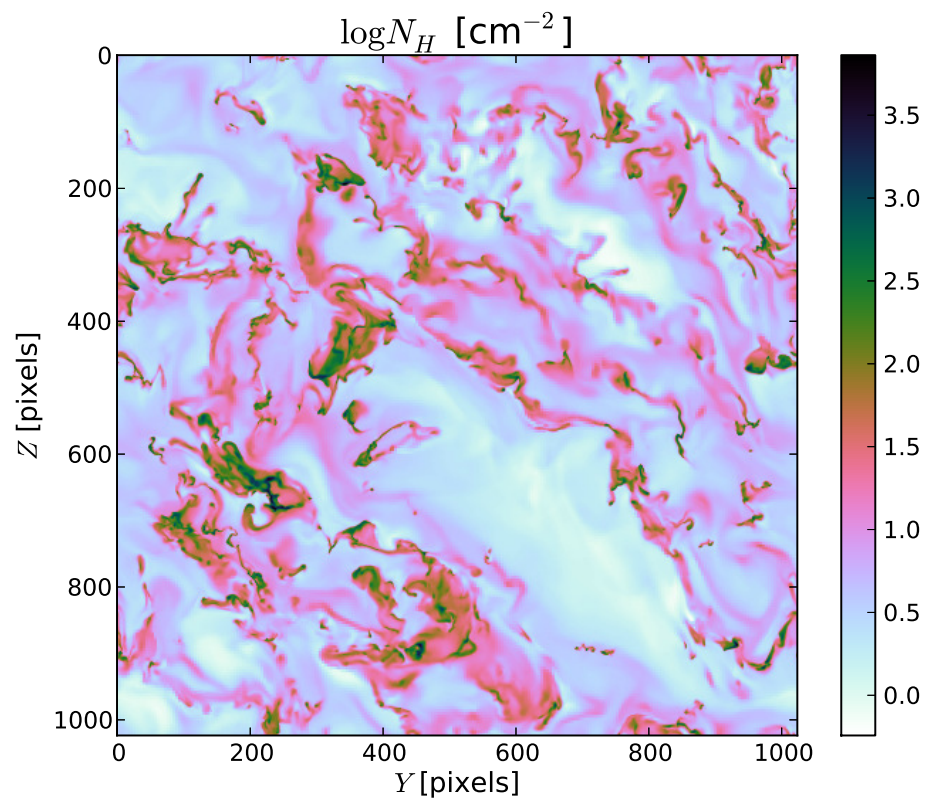


Figure 6: Simulation Haute Résolution arrêtée à 8 Myr, logarithmes des densités

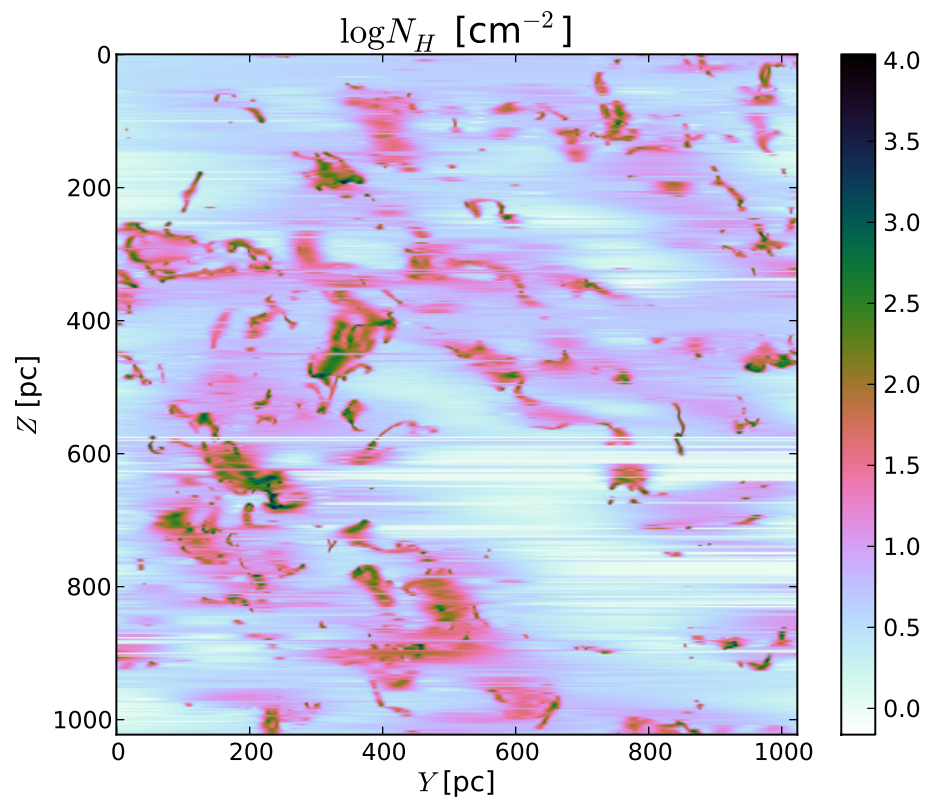


Figure 7: Résultat des régressions sur la simulation Haute résolution.

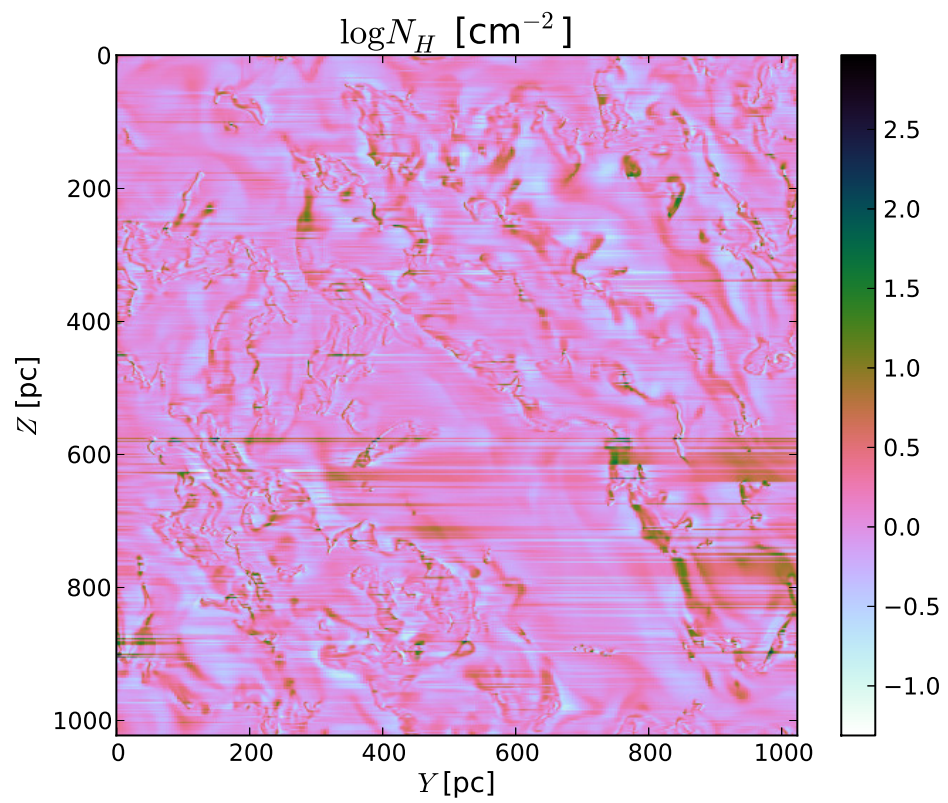


Figure 8: Résidus: Logarithme des densités-Régression sur la simulation haute résolution

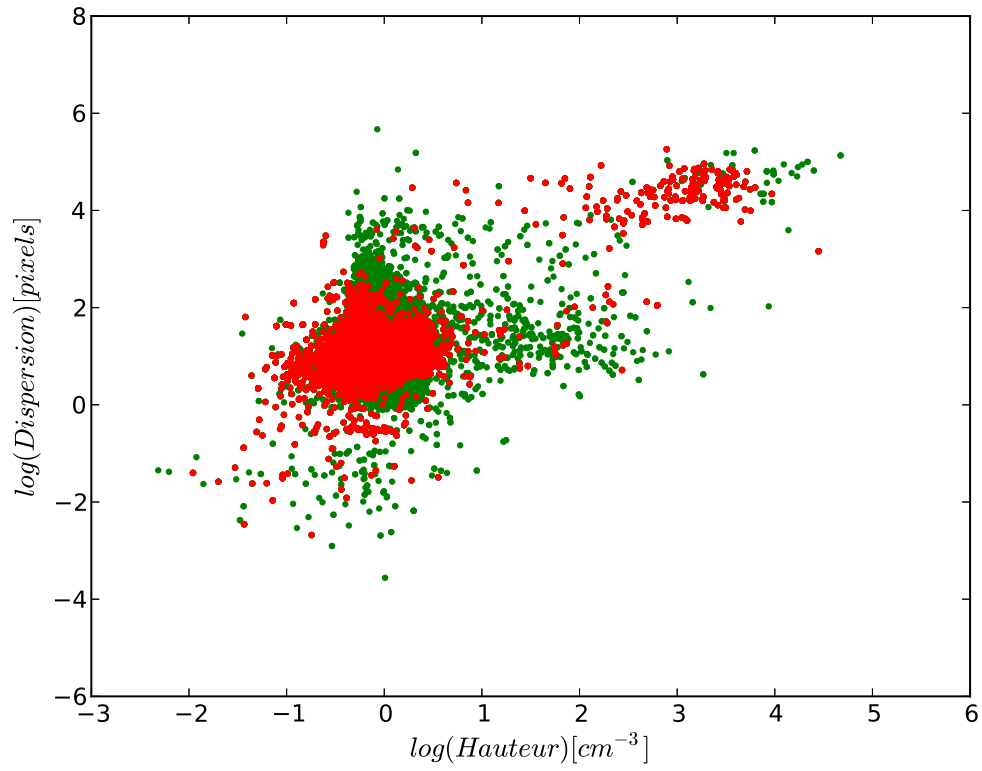


Figure 9: Répartition des coefficients de gaussienne, en vert pour la simulation à basse résolution, en rouge pour la simulation à haute résolution

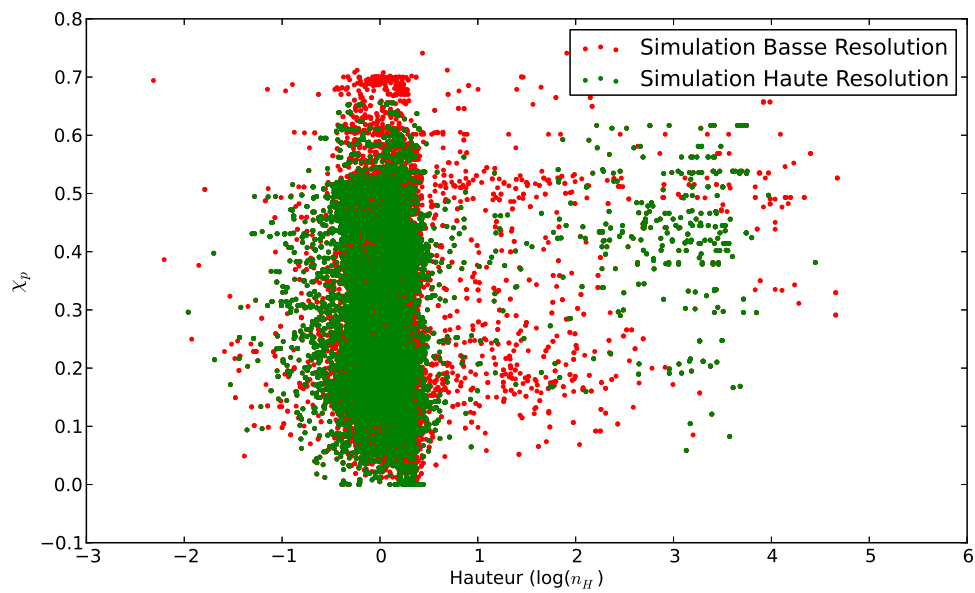


Figure 10: Répartition des coefficients de simulation, en vert pour la simulation à basse résolution, en rouge pour la simulation à haute résolution. On remarque ici la décorrélation entre la densité maximal du pic et l'éclairement associé.

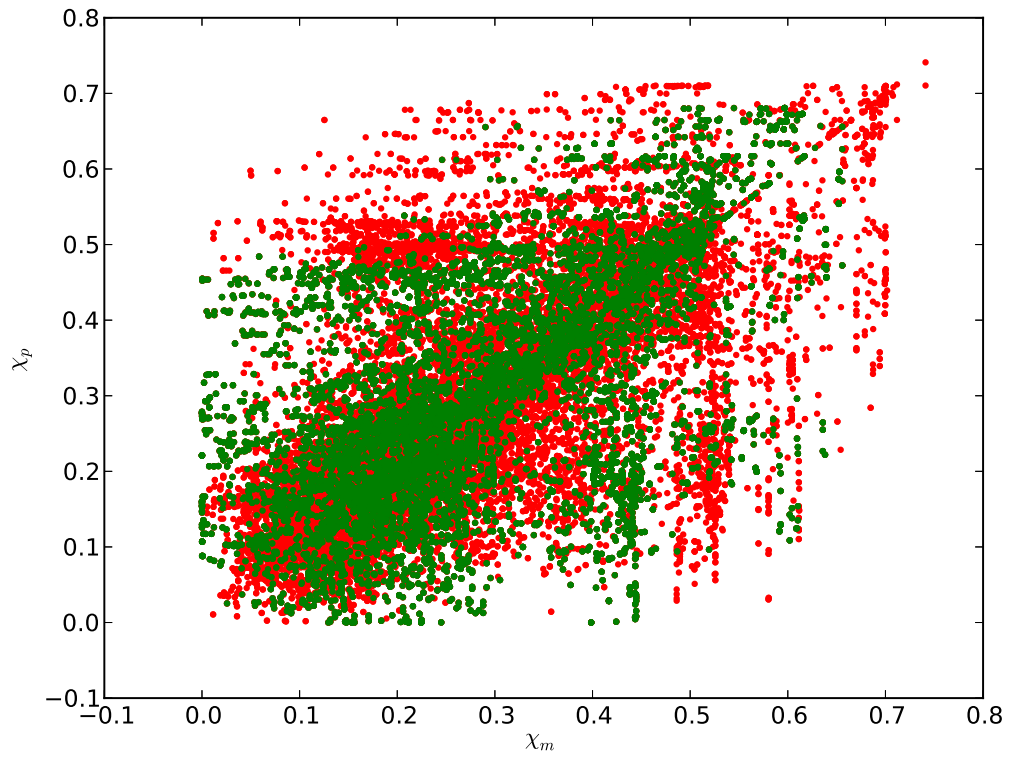


Figure 11: Répartition des coefficients de simulation, en vert pour la simulation à basse résolution, en rouge pour la simulation à haute résolution. On remarque ici l'iso-répartition des éclaircissements dans le plan.

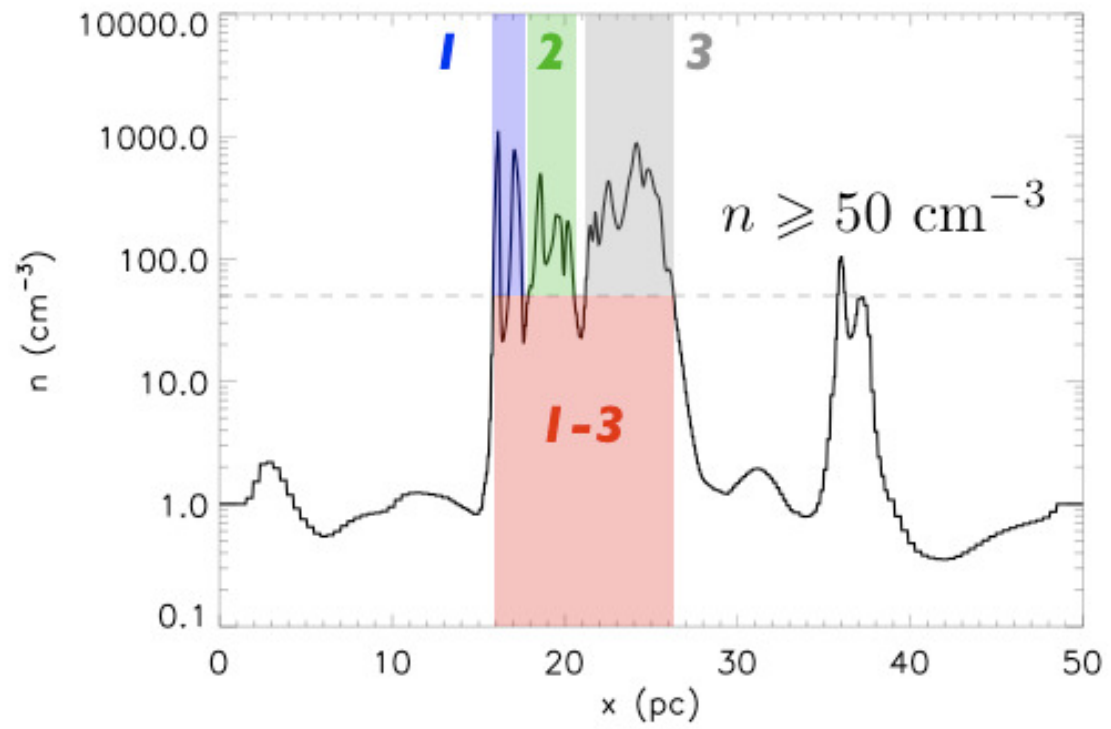


Figure 12: Figure empruntée à Levrier et al. 2009. Les zones 1, 2 et 3 sont considérées comme des clumps séparés et la zone de 1 à 3 est considérée comme un grand clump. Ils appliquent le code PDR sur les profils 1, 2, et 3 séparément, et de 1 à 3 ensemble.

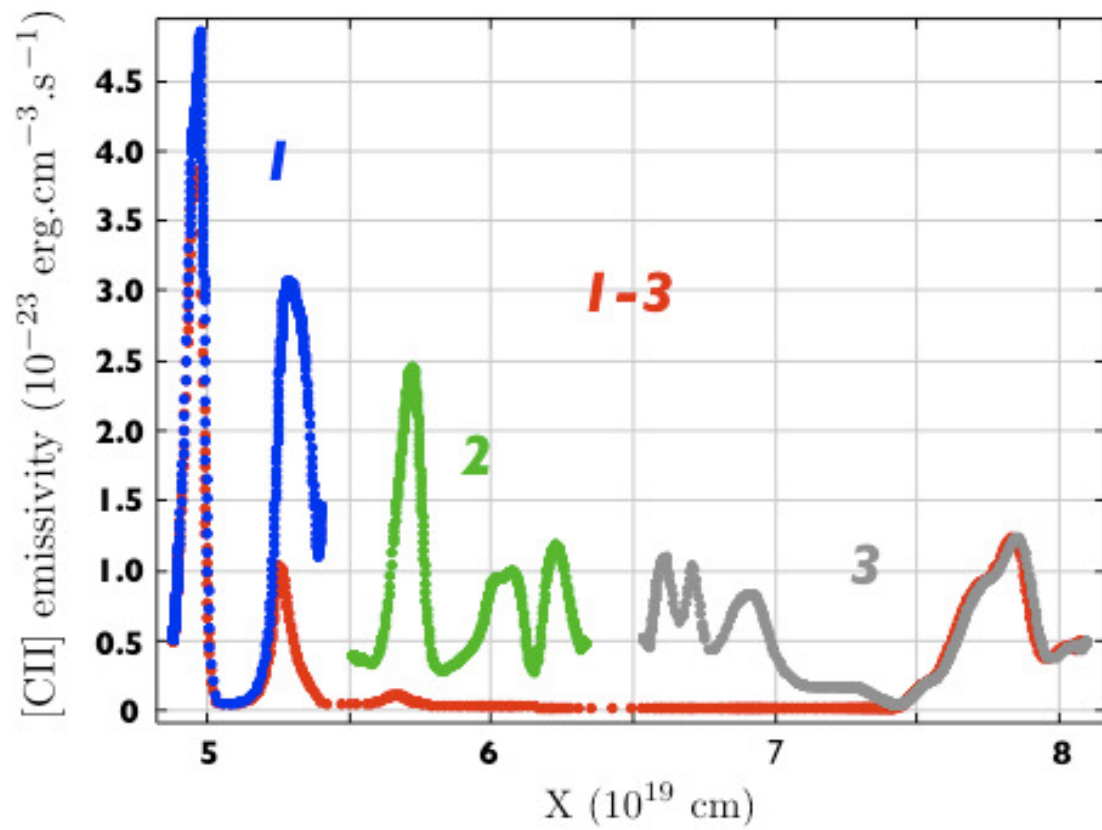


Figure 13: Figure empruntée à Levrier et al. 2009. Ici, on remarque l'importance de l'éclairage. Si on considère trois tranches séparées avec des éclairages valant 1 à chaque extrémité, il se formera du CII, contrairement à la zone 1-3, dans laquelle l'éclairage n'est plus suffisant pour observer la formation de CII

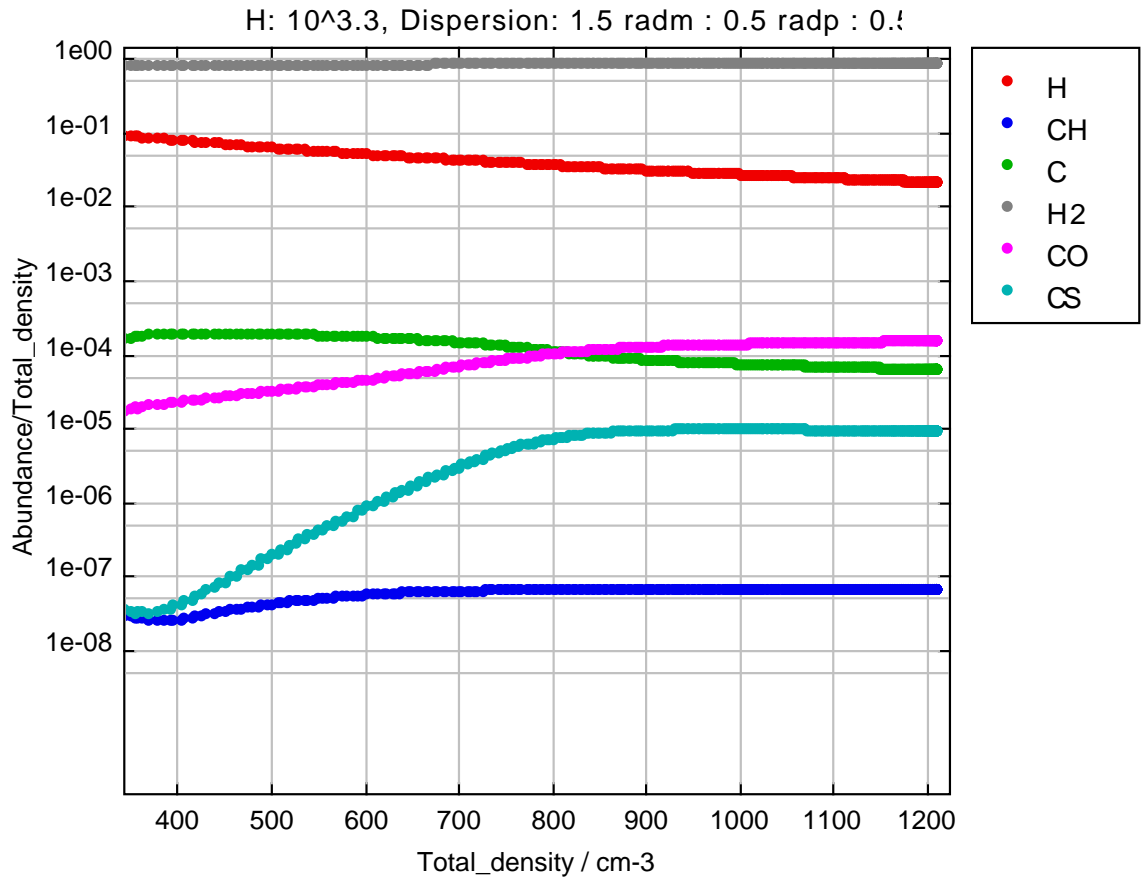


Figure 14: Courbes d'abondances de H, H₂, CH, C, CO et CS. On normalise ici par la densité totale le long du profil. Les paramètres d'éclairement valent à gauche et à droite 0.5

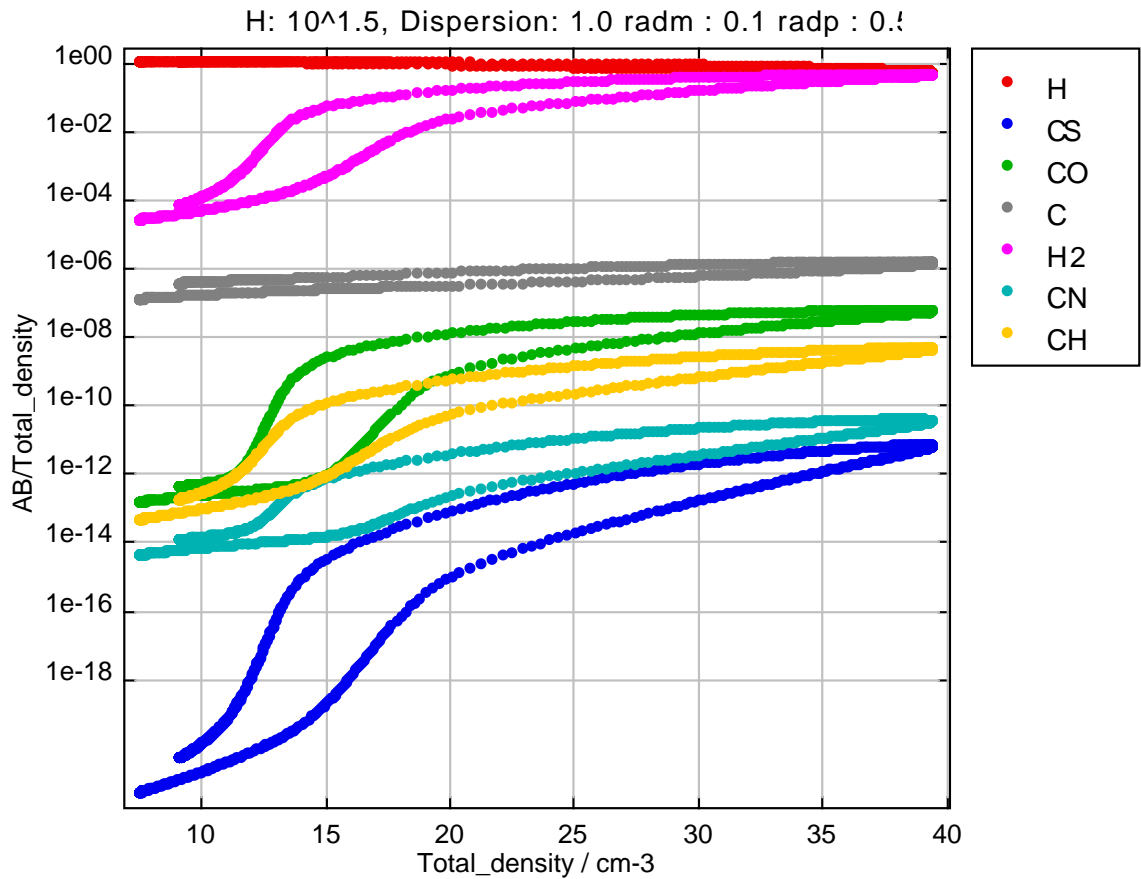


Figure 15: Courbes d'abondances de H, H₂, CS, CO, C, CN et CH. Les paramètres d'éclairement valent à gauche 0.1 et à droite 0.5. On note ici que la différence d'éclairement induit une différence d'abondance, ce qui montre que cet éclairement influe sur la chimie du profil.