

Calcul intensif pour la modélisation du milieu interstellaire

François Levrier

Franck Le Petit

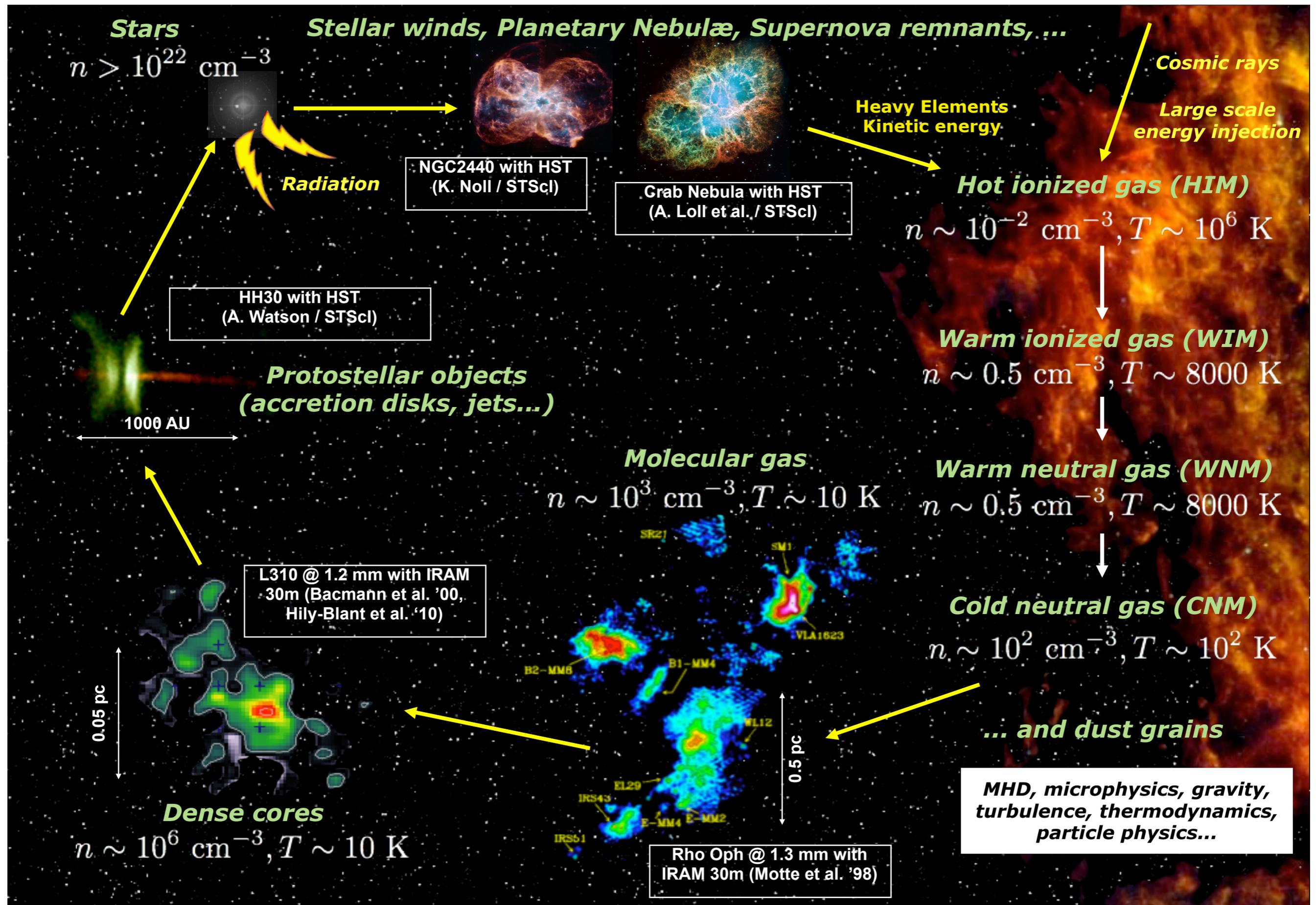
Fabrice Roy

Patrick Hennebelle

Pierre Lesaffre



Le cycle de la matière interstellaire



Le MIS : un système ouvert et complexe

Multiplicité des processus

- Gravitation
- Dynamique / Turbulence
- Champ magnétique
- Radiation
- Physico-chimie hors équilibre

Grande dynamique

- Fluctuations de densité du gaz
- Grandes plages d'échelles spatiales et temporelles
- Couplage des échelles

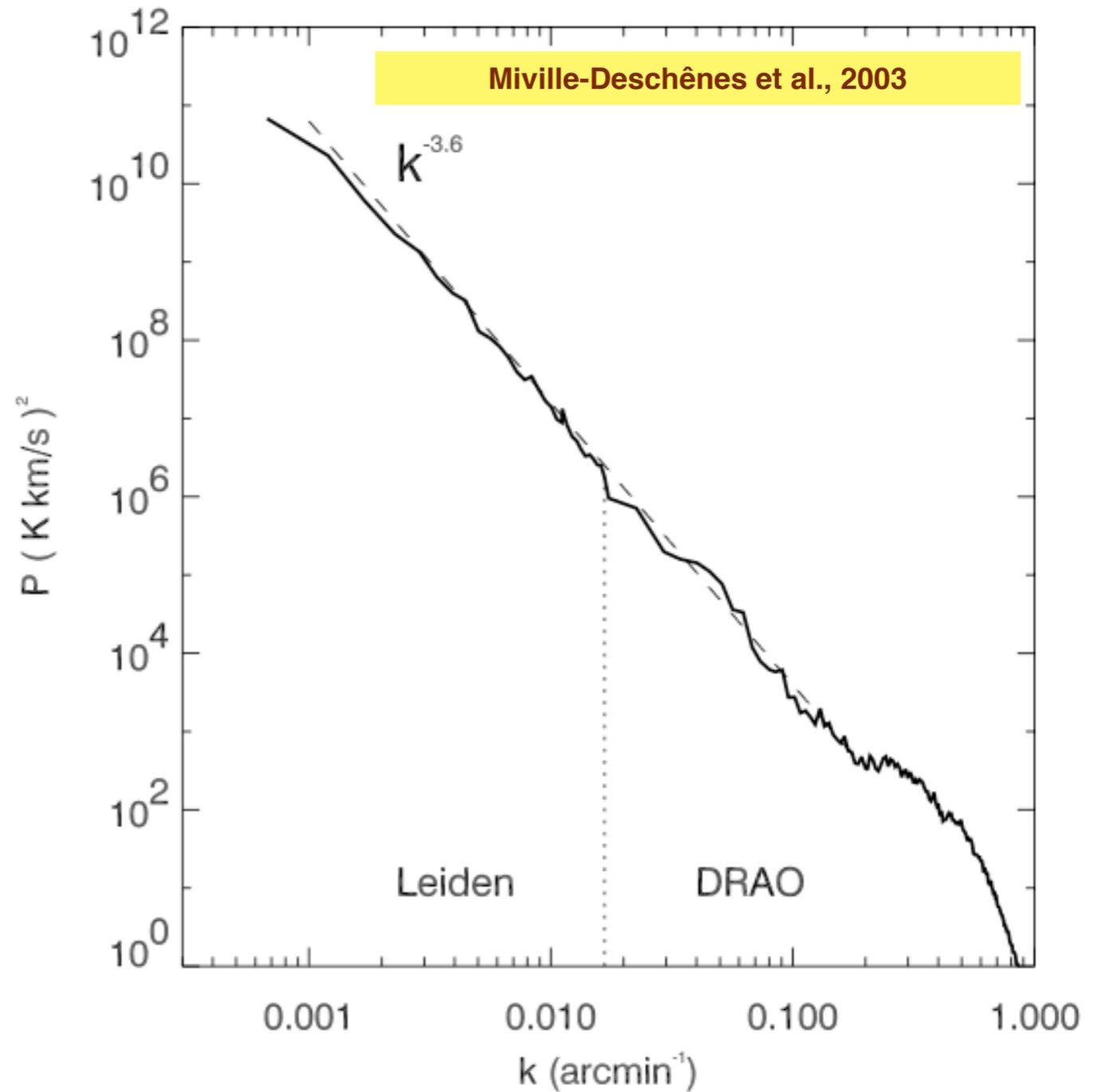
OUT OF THIS WORLD
A wealth of molecules is found in interstellar clouds

2 atoms		3 atoms		4 atoms		5 atoms	
H ₂	NO	C ₃	MgCN	c-C ₃ H	HNCS	C ₅	HC ₂ NC
AlF	NS	C ₂ H	MgNC	l-C ₃ H	HOCO*	C ₄ H	HCOOH
AlCl	NaCl	C ₂ O	N ₂ H ⁺	C ₃ N	H ₂ CO	C ₄ Si	H ₂ CHN
C ₂	OH	C ₂ S	N ₂ O	C ₃ O	H ₂ CN	l-C ₃ H ₂	H ₂ C ₂ O
CH	PN	CH ₂	NaCN	C ₃ S	H ₂ CS	c-C ₃ H ₂	H ₂ NCN
CH ⁺	SO	HCN	OCS	C ₂ H ₂	H ₃ O ⁺	CH ₂ CN	HNC ₃
CN	SO ⁺	HCO	SO ₂	HCCN	NH ₃	CH ₄	SiH ₄
CO	SiN	HCO ⁺	c-SiC ₂	HCNH ⁺	SiC ₃	HC ₃ N	H ₂ COH*
CO ⁺	SiO	HCS ⁺	CO ₂	HNCO			
CP	SiS	HOC ⁺	NH ₂				
CSi	CS	H ₂ O	H ₃ ⁺				
HCl	HF	H ₂ S	SiCN				
KCl	SH	HNC	AlNC				
NH	FeO	HNO					

6 atoms		7 atoms		8 atoms		9 atoms	
C ₅ H	CH ₃ SH	C ₆ H	CH ₂ CHCN	CH ₃ C ₃ N	CH ₃ C ₄ H	CH ₃ C ₄ H	CH ₃ CH ₂ CN
l-H ₂ C ₄	HC ₃ NH ⁺	CH ₂ CH ₂ CN	CH ₃ C ₂ H	HCOOCH ₃	CH ₃ COOH	[CH ₃] ₂ O	CH ₃ CH ₂ OH
C ₂ H ₄	HC ₂ CHO	HC ₅ N	HCOCH ₃	C ₇ H	CH ₂ OHCHO	HC ₂ N	C ₈ H
CH ₃ CN	NH ₂ CHO	NH ₂ CH ₃	c-C ₂ H ₄ O				
CH ₃ NC	C ₃ N	CH ₂ CHOH					
CH ₃ OH							

10 atoms	11 atoms	13 atoms
CH ₃ C ₅ N	HC ₉ N	HC ₁₁ N
[CH ₃] ₂ CO		
NH ₂ CH ₂ COOH		

NOTE: Evidence suggests that much larger molecules such as polycyclic aromatic hydrocarbons and fullerenes are also present.
SOURCE: National Radio Astronomy Observatory



Moyens observationnels



Herschel



Planck



En attendant SKA...

SKA (Australia / South Africa)



Moyens de calcul

JxB (CEMAG)



4 machines SMP de 64 coeurs

MesoPSL



Deux clusters (1472 et 216 coeurs)
Une machine SMP

Babel



40.960 coeurs
20 To de mémoire
800 To de disques

Jade

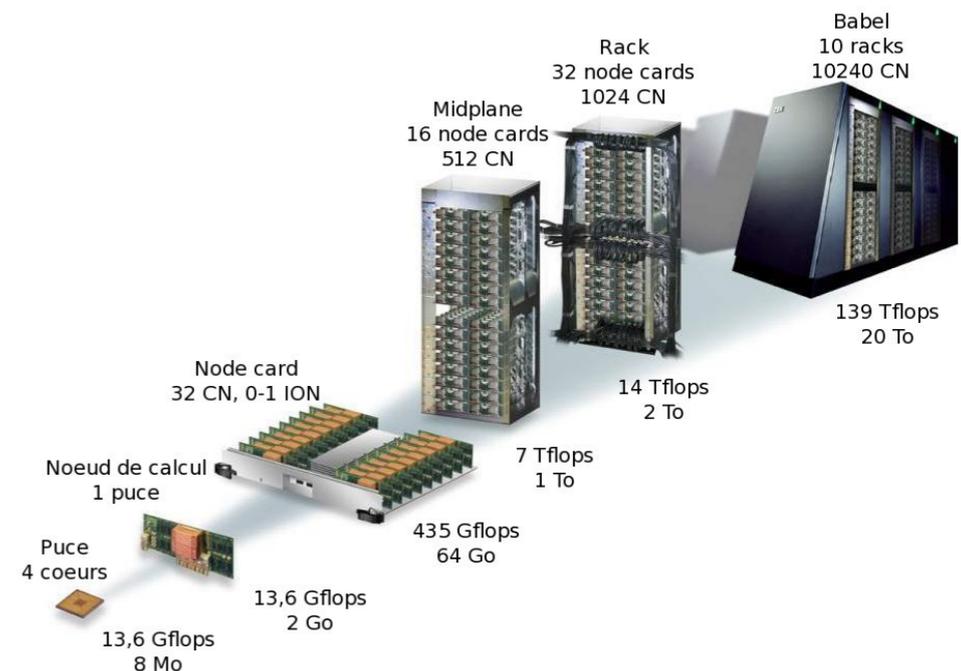


23040 coeurs
93 To de mémoire
700 To de disques

European Grid Initiative



www.egi.eu



Modélisation chimique et dynamique du MIS

Simulations et modèles du MIS

- **Simulations MHD**
 - Structures à grande échelle
 - Densités, champ de vitesse, champ magnétique
- **Modèles de physico-chimie**
 - Centaines d'espèces chimiques
 - Etats d'excitations dans des milliers de niveaux
 - Intensités de milliers de raies

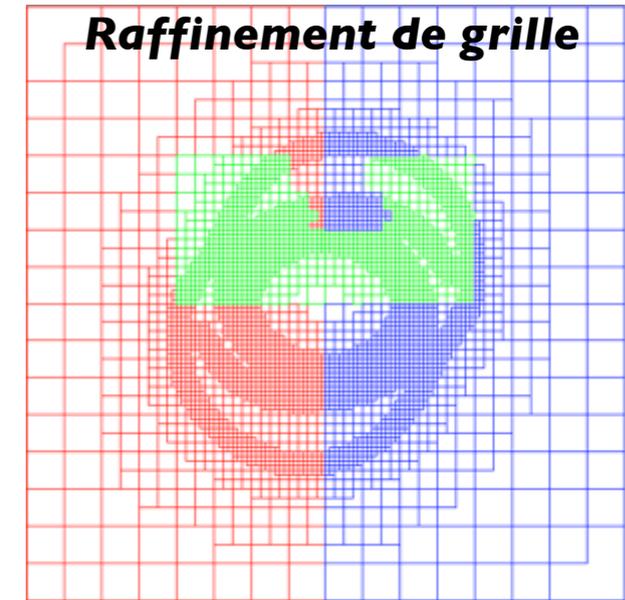
Impossible de traiter en détail MHD et évolution chimique couplées directement

Post-traitement de simulations MHD pour en déduire la structure chimique

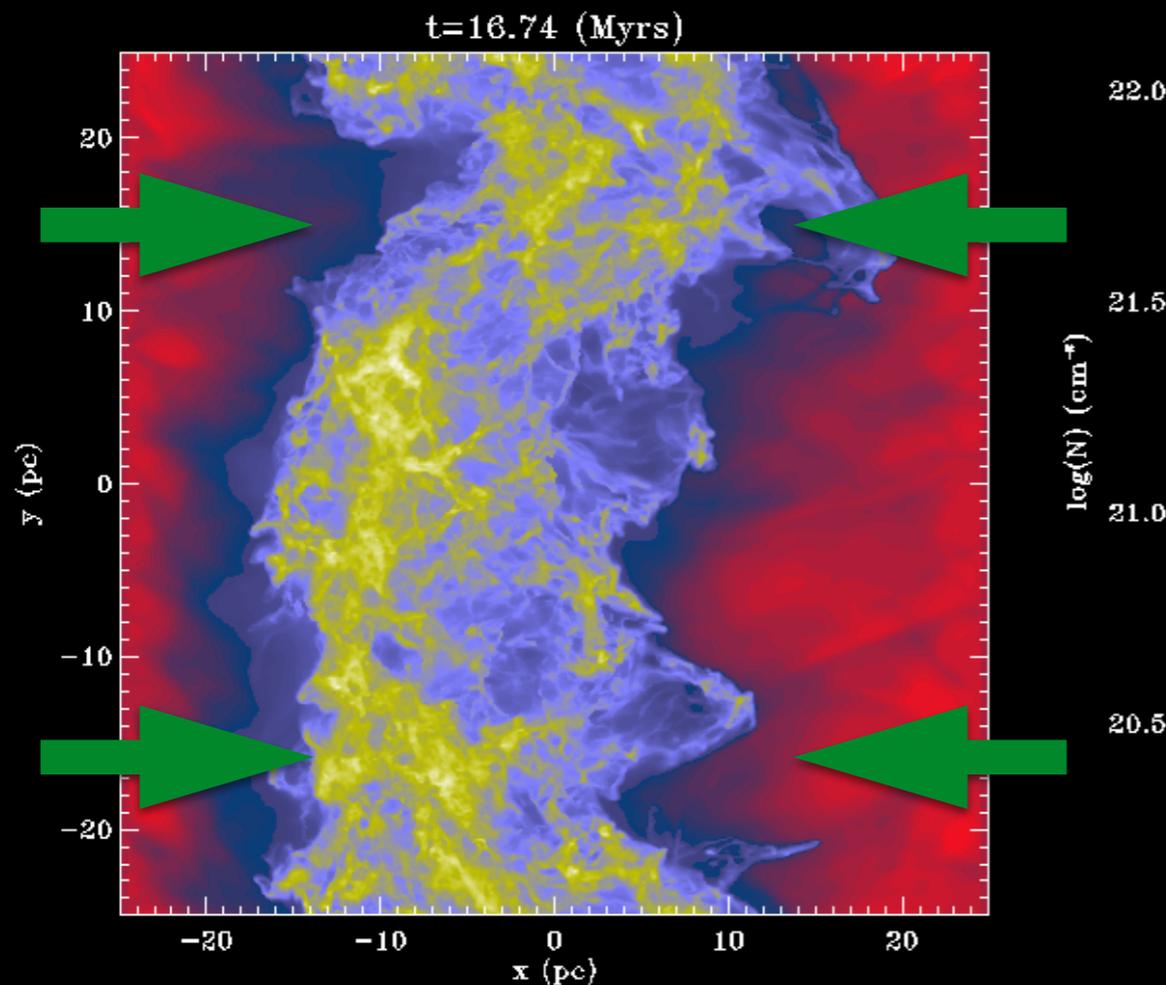
Chimie simplifiée couplée aux simulations MHD

Simulations de turbulence MHD

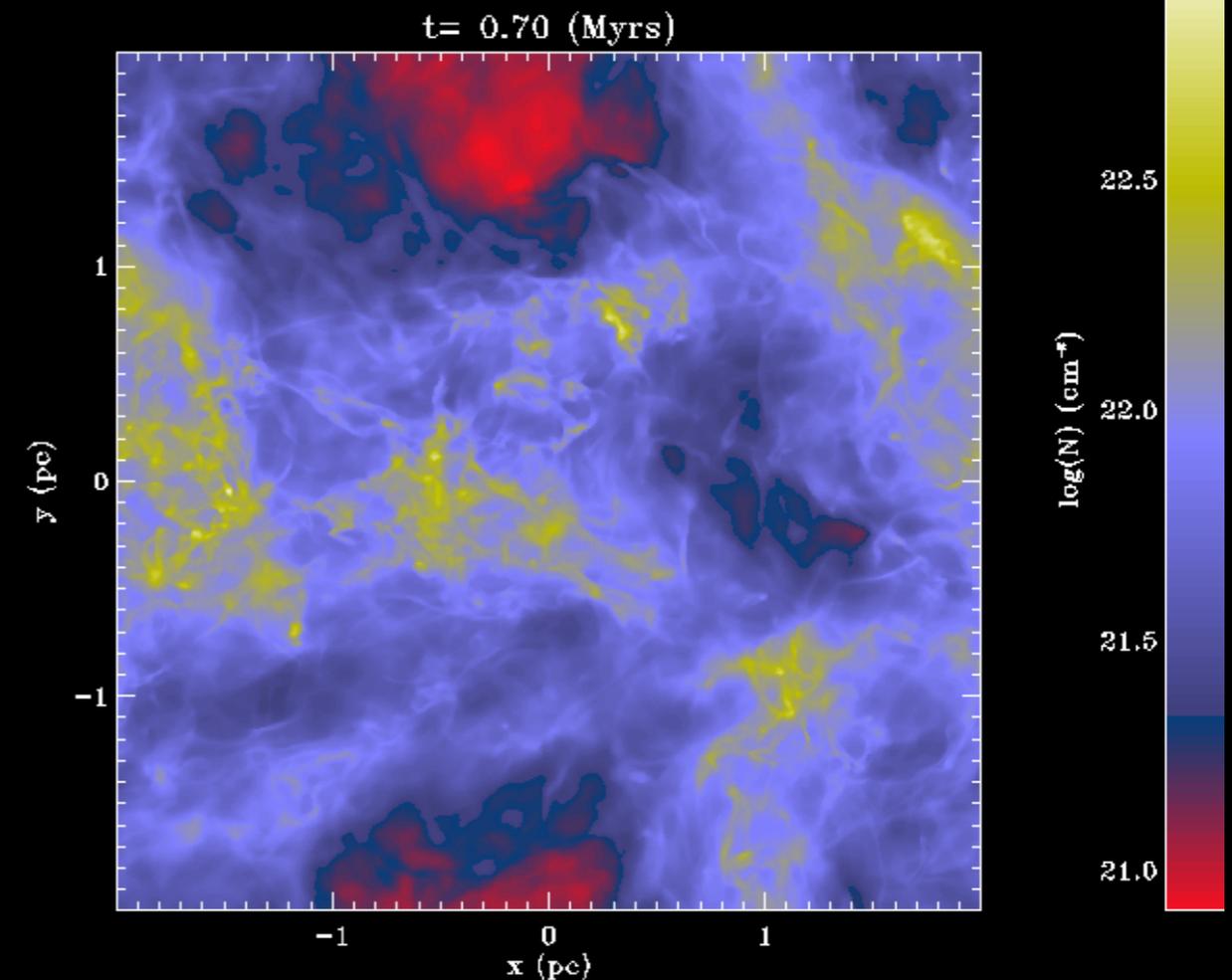
- Code RAMSES code (Teyssier 2002, Fromang et al. 2006)
- Raffinement Adaptatif de Maillage (AMR)
- (Magnéto)hydrodynamique
- Autogravitation
- Chauffage et refroidissement du gaz.



Collision d'écoulements



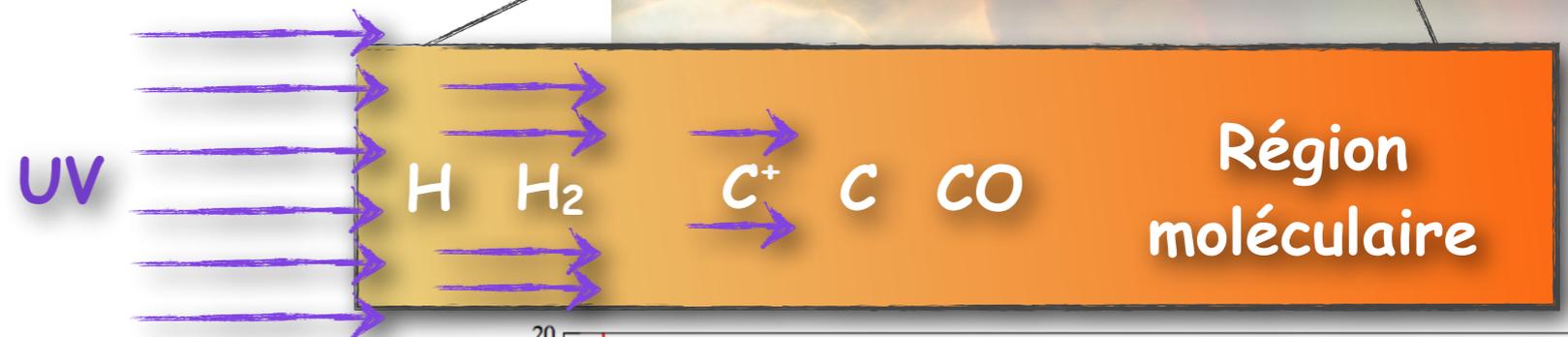
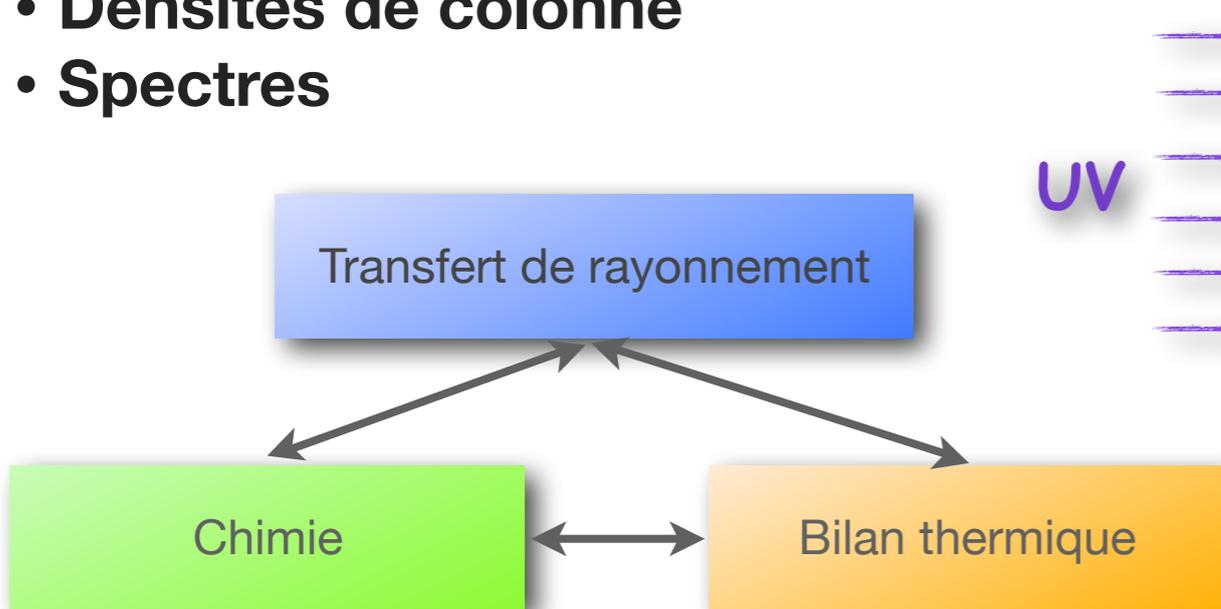
Turbulence en déclin



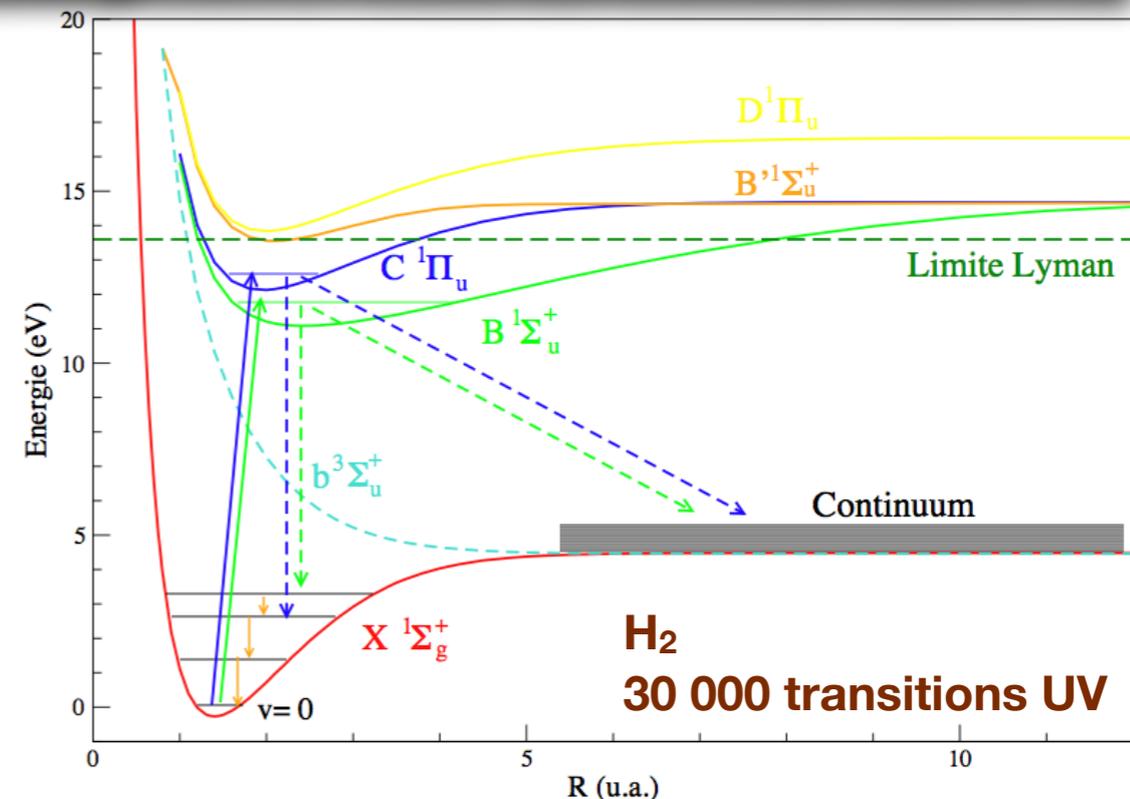
Le code PDR de Meudon

Calcul de la structure atomique et moléculaire des nuages interstellaires : comprendre les processus physiques qui les contrôlent

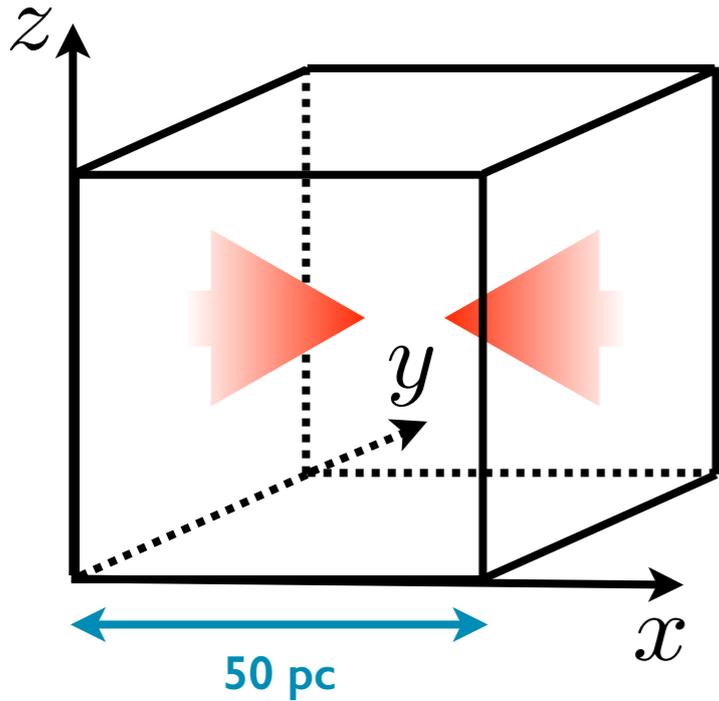
- Abondances des espèces chimiques
- Etat d'excitation dans les niveaux
- Température et charges des grains
- Intensités des raies (H_2 , CO, H_2O , ...)
- Densités de colonne
- Spectres



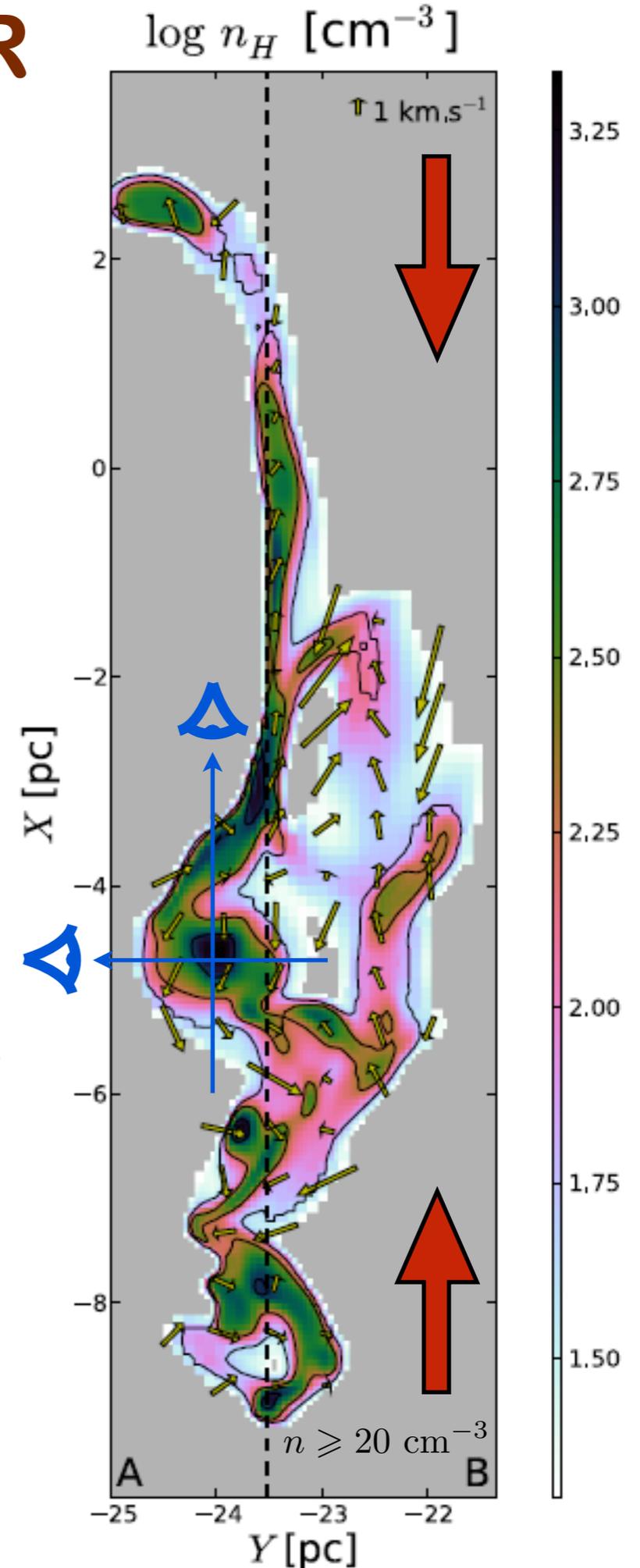
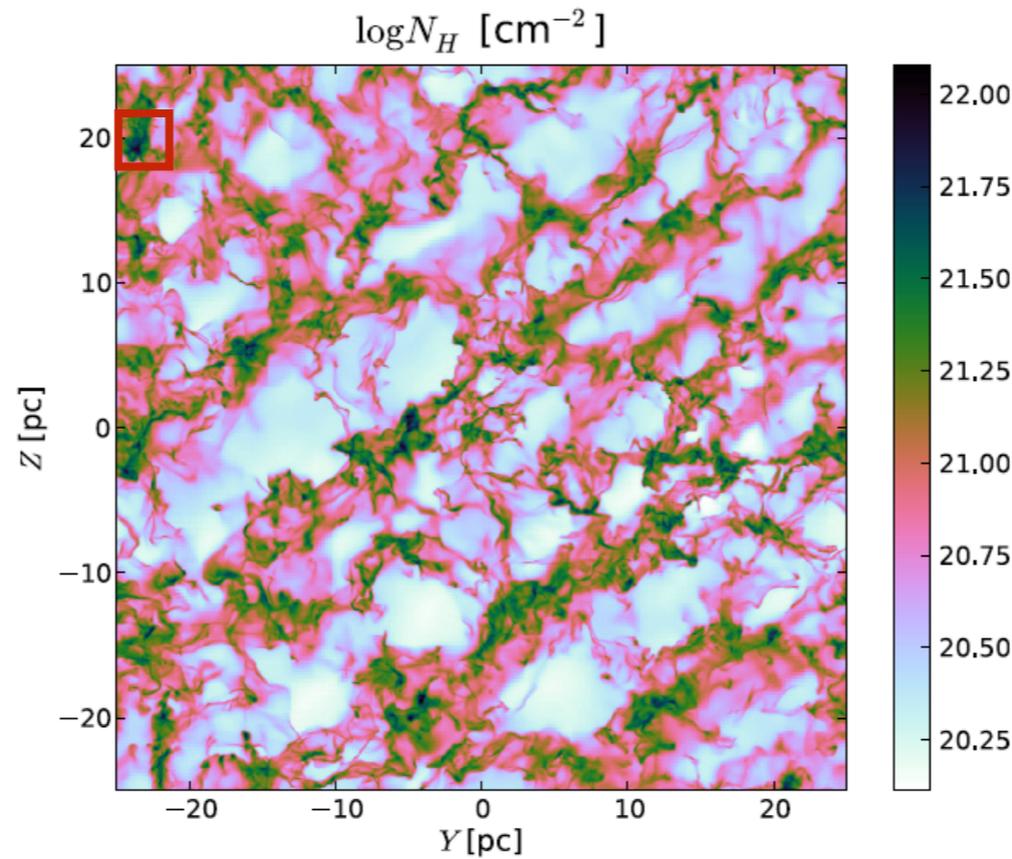
- Plusieurs centaines d'espèces chimiques
- Milliers de réactions
- Hors Equilibre Thermodynamique Local (ETL)
- Résolution de l'équilibre statistique des niveaux d'énergie
- Effet photo-électrique, rayons cosmiques, chimie, ...



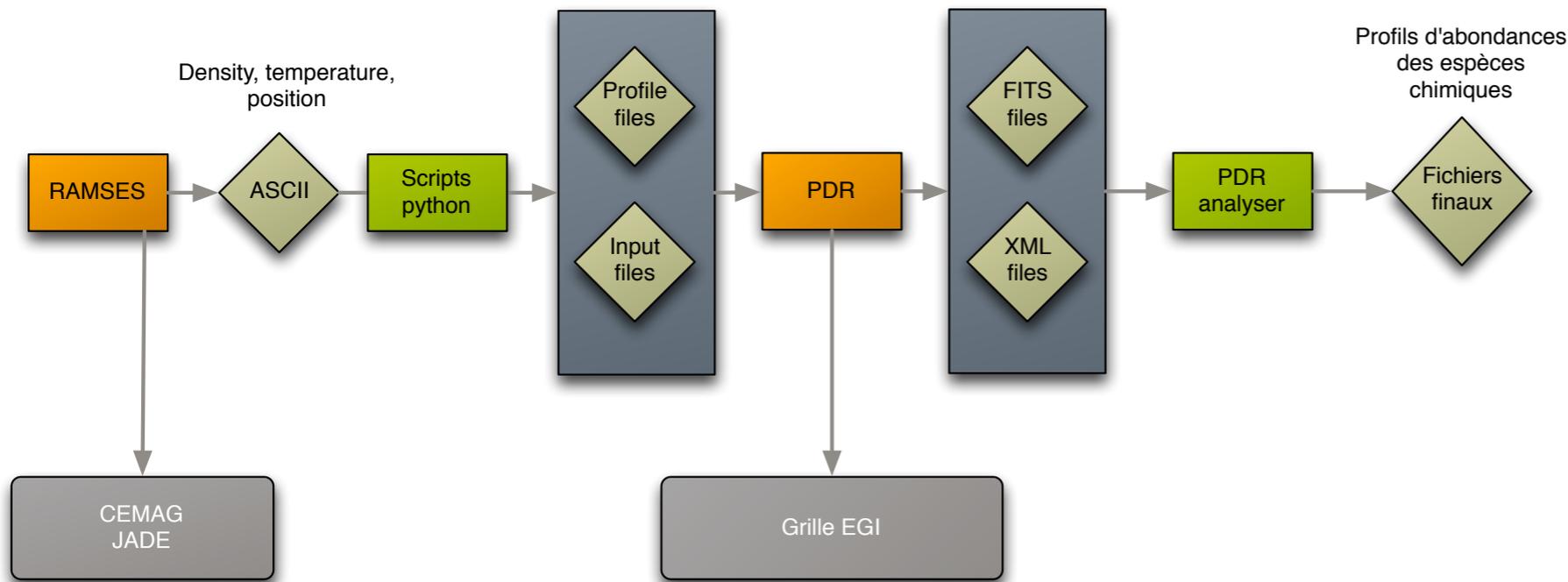
Couplage MHD/PDR



Hennebelle et al. 2008, Levrier et al 2012

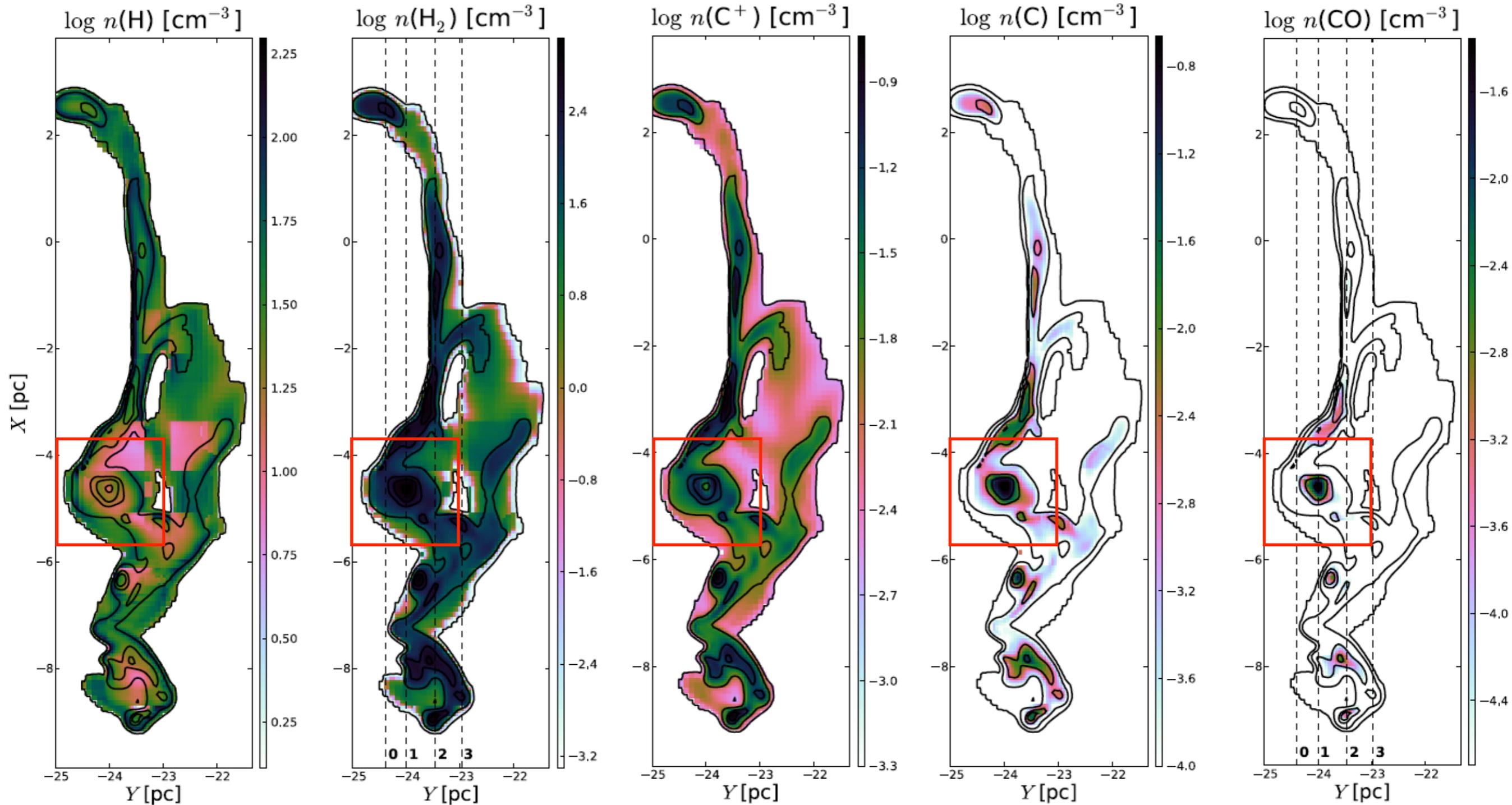


- Extraction d'une partie d'un cube de simulation MHD (RAMSES)
- Calcul de la structure chimique sur plusieurs lignes de visée
- ~ 900 modèles PDR



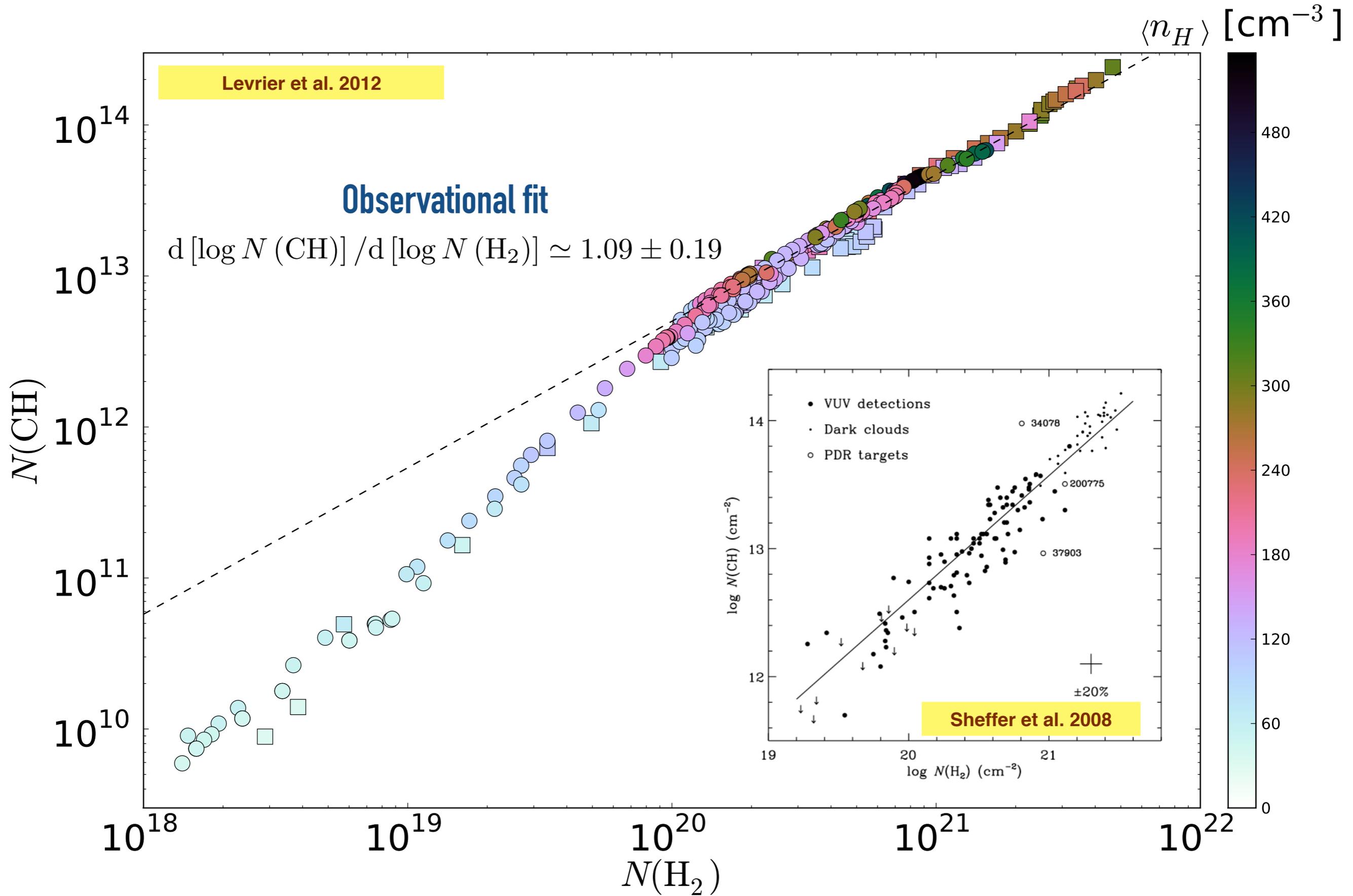
Exemples de cartes d'abondances chimiques

Levrier et al. 2012



- **C^+ trace la densité totale du gaz, sauf dans les régions les plus denses.**
- **CO ne trace que les régions les plus denses**

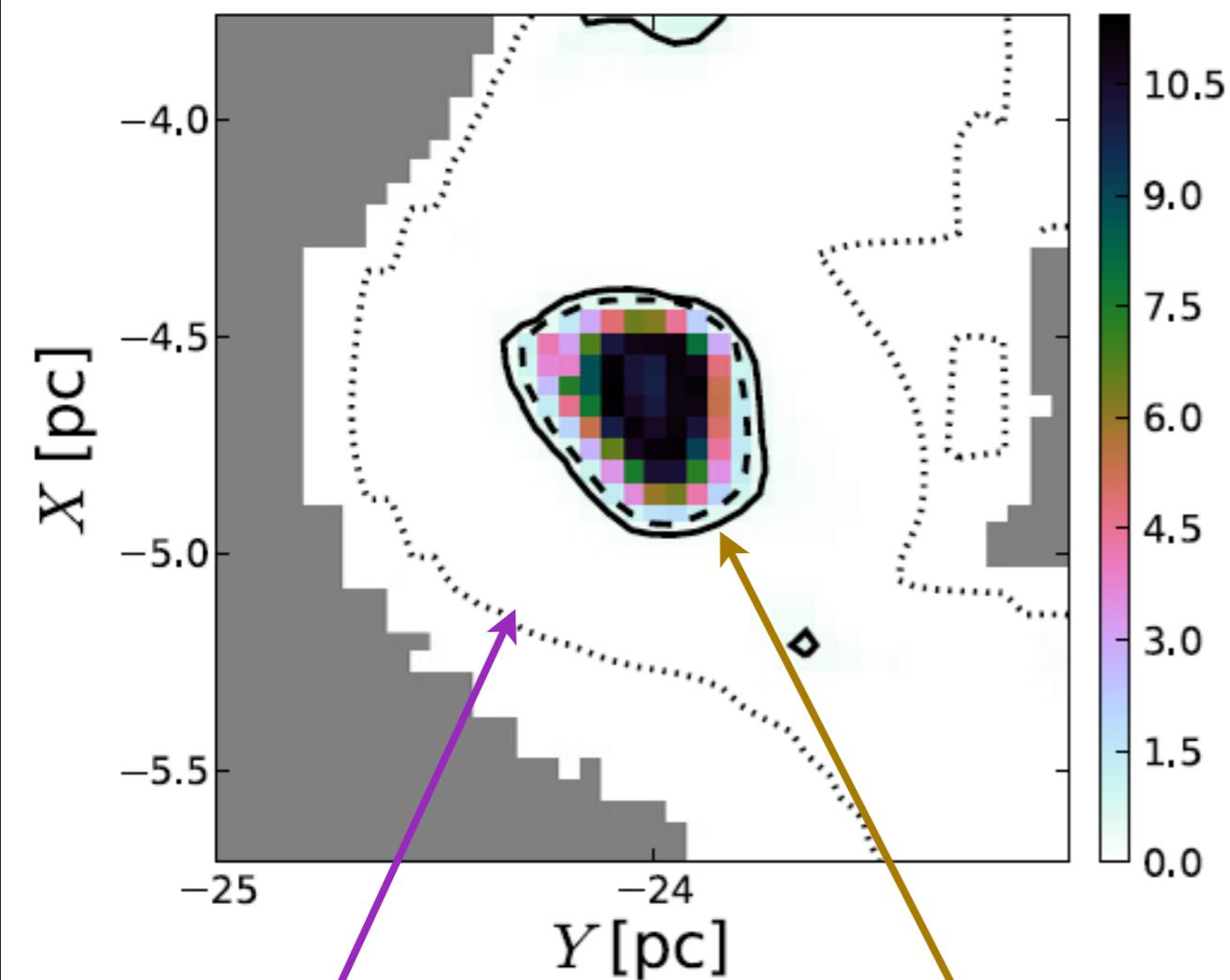
Diagnostics observationnels simulés



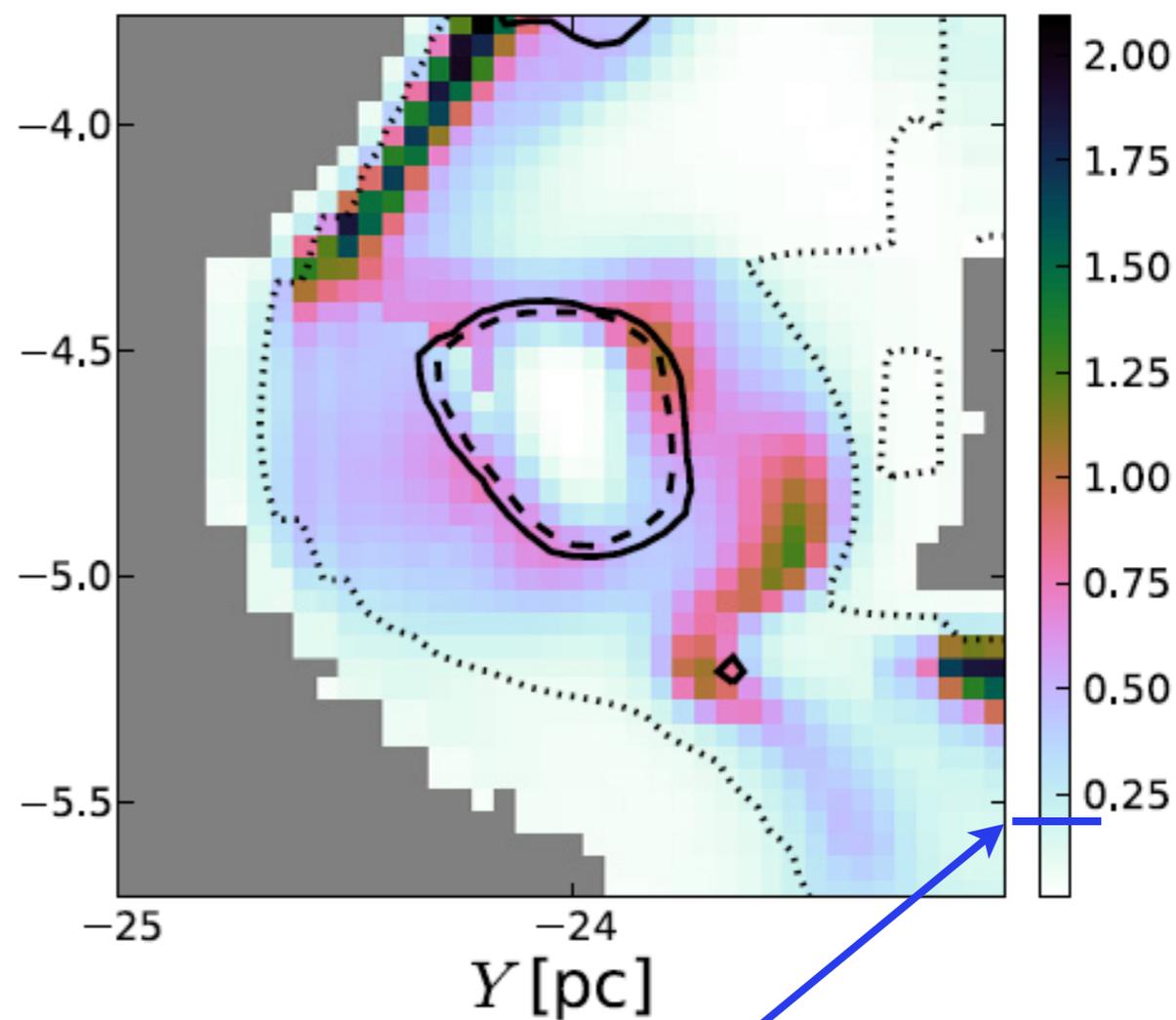
Observations simulées

Levrier et al. 2012

CO(1-0) [K.km.s⁻¹]



C⁺ (158μm) [K.km.s⁻¹]



$$f_{\text{H}_2} = 1/2$$

Fraction moléculaire

$$W_{\text{CO}} = 0.4 \text{ K.km.s}^{-1}$$

Limite de détection de CO

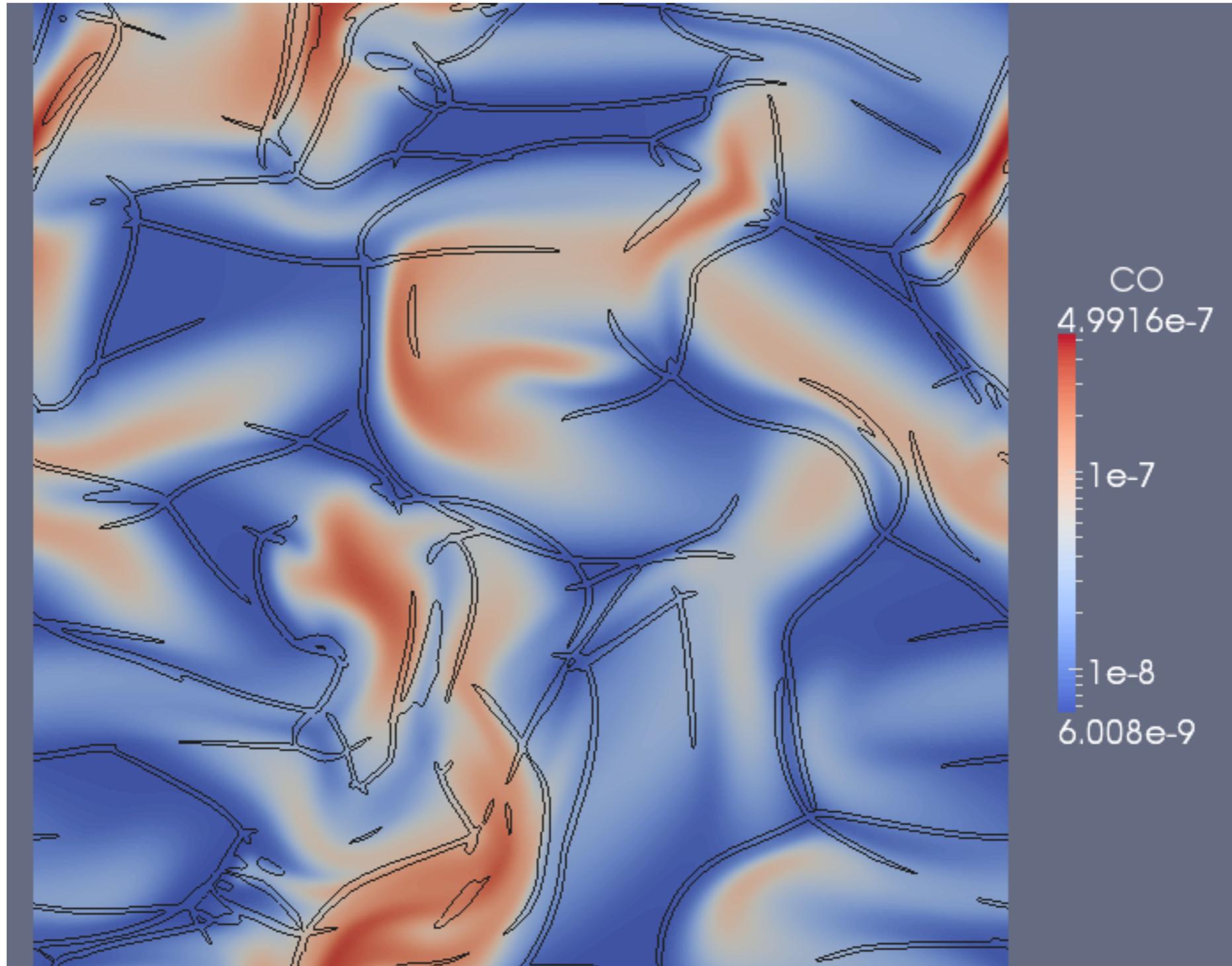
$$\sigma_{\text{CII}} = 0.1 - 0.2 \text{ K.km.s}^{-1}$$

Limite de détection de C⁺

Velusamy et al. 2010

Couplage direct chimie et dynamique

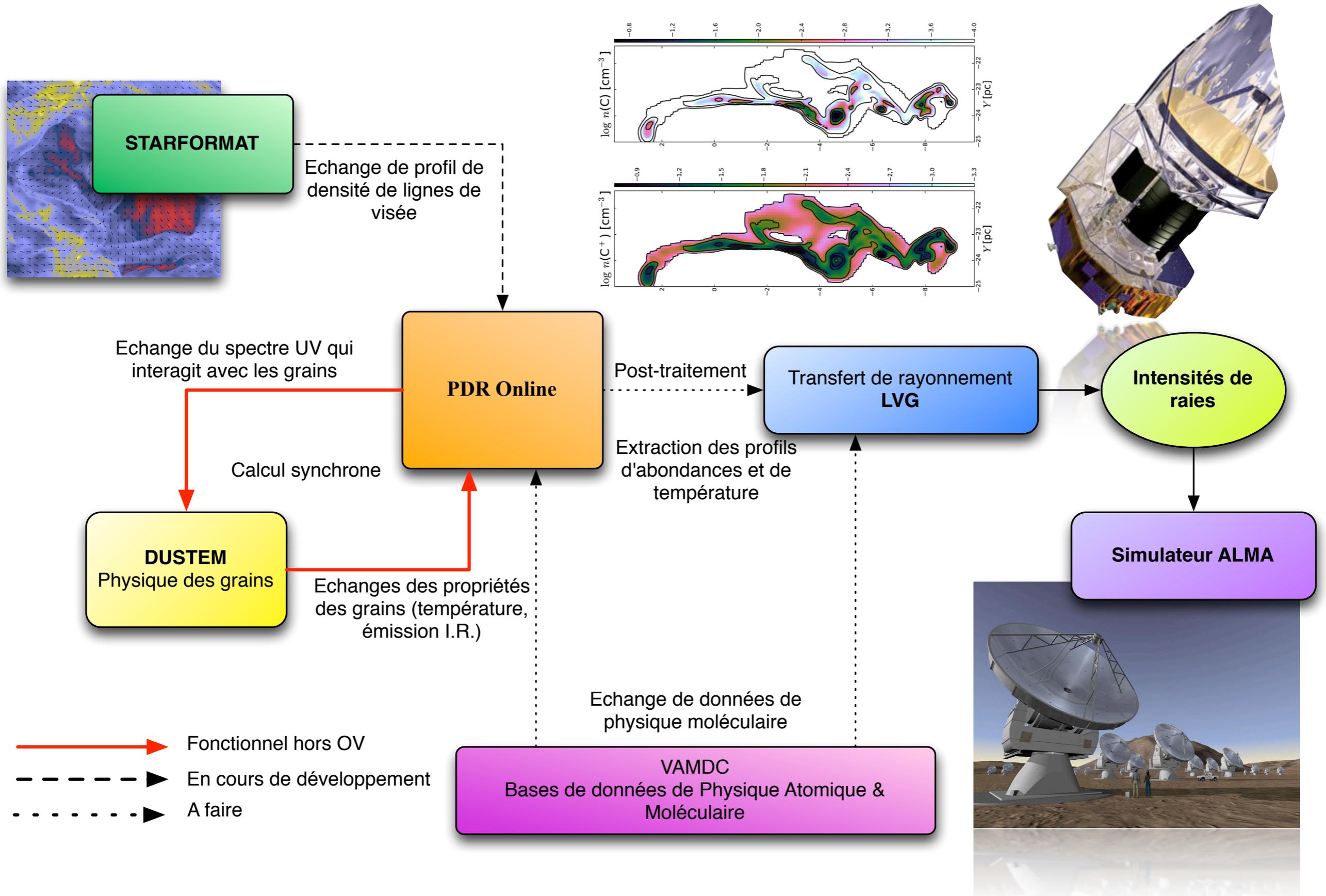
Simulation de turbulence bidimensionnelle en déclin avec couplage chimique simple



- Echelle de couleurs : Abondances de CO
- Contours : Régions de fort chauffage visqueux

Lesaffre et al., in prep

Interopérabilité entre services théoriques



Conclusions

Difficultés de la modélisation du milieu interstellaire

- Multiplicité des processus physico-chimiques
- Grandes dynamiques
- Couplage des échelles

Augmentation colossale de la quantité de données observationnelles

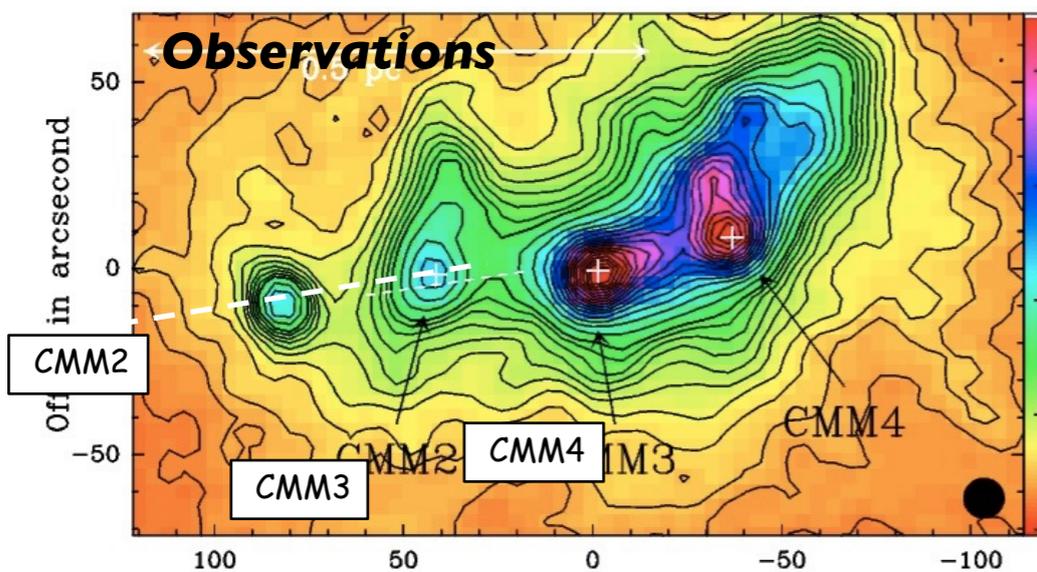
Modélisation du MIS

- Approche numérique directe détaillée impossible
- Post-traitement chimique de simulations magnétohydrodynamiques
- Couplage de la dynamique en temps réel avec une chimie simplifiée

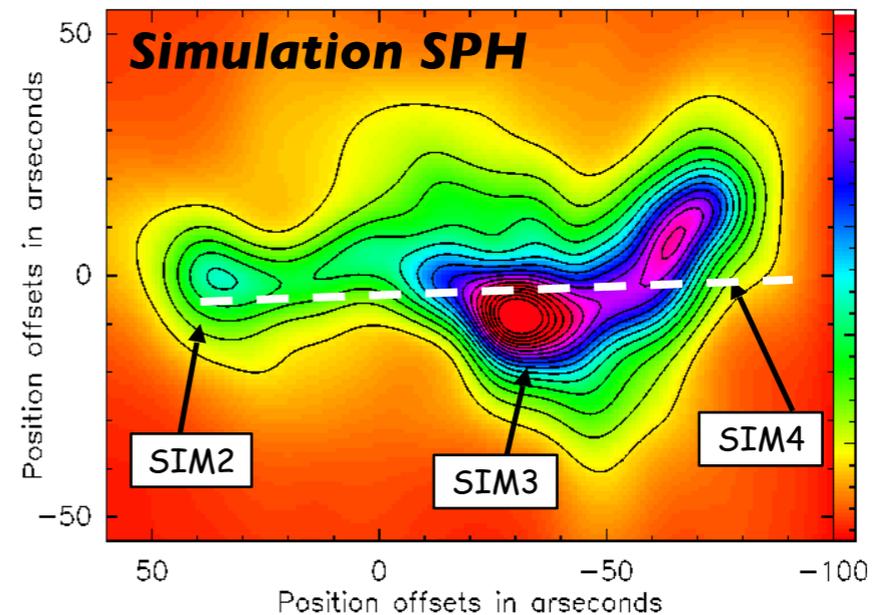
Mise à disposition de services théoriques pour la communauté

- Bases de données
- Interfaçages de codes
- Codes en ligne

Vers une nouvelle manière d'aborder
l'interprétation des données observationnelles...



Peretto et al., 2006



Peretto et al., 2007