

RAPPORT SCCI 2001-2002

Responsable scientifique : Pierre Valiron (Laboratoire d'Astrophysique de Grenoble)

Responsable technique : Françoise Roch (Observatoire de Grenoble)

Rappel de la problématique et des objectifs scientifiques

Créé en 1990, le SCCI (Service Commun de Calcul Intensif de l'Observatoire de Grenoble) est un service de calcul intensif de proximité pour les membres de l'Observatoire. Il est utilisé par les chercheurs, les doctorants des laboratoires de l'Observatoire mais également par les stagiaires issus des différentes formations, et notamment du DEA d'Astrophysique et de l'école doctorale TUE (Terre – Univers – Environnement).

Le succès du site a favorisé le développement de projets centrés sur la modélisation et il a de ce fait été accompagné d'une croissance importante des besoins.

Par ailleurs d'élargissement de l'Observatoire à 6 laboratoires et 2 équipes, totalisant environ 400 permanents et doctorants, nous a conduit à anticiper l'arrivée de nouveaux modélisateurs. En 1999, le SCCI visait donc une jouvence majeure de ses moyens de calcul avec une rupture technologique permettant de gagner un ordre de grandeur sur la taille des calculs supportés par le centre.

Les objectifs du SCCI rentrant totalement dans le cadre du projet CIMENT, le SCCI a tout naturellement intégré le projet dès sa création en 99.

Nous avons monté une opération en 2 tranches permettant l'achat anticipé de deux versions successives de nouvelles architectures multiprocesseurs IBM SP (8, puis 16 processeurs, 16 Go de mémoire), accompagnées de 2 quadriprocesseurs IBM (2x 4 Goctets de mémoire).

Ces machines constituent aujourd'hui la brique de base des supercalculateurs de l'IDRIS et du CINES.

Ces machines ont été munies d'espace disque rapide 1 tour de 10 disques de 80 Go en 2000, puis 1 tour de 2 disques de 180 Go en 2002, assurant plus d'un Téraoctet d'espace temporaire pour les modélisations.

Une jouvence majeure du site est prévue dans le cadre du CPER en 2004.

Le déploiement du réseau gigabit doit progressivement s'étendre à d'autres composantes de l'Observatoire, et à d'autres projets CIMENT.

Dans cette optique et afin de raccorder le projet PHYNUM dès sa mise en service, un nouveau routeur gigabit cuivre sera installé à l'Observatoire dès le mois d'août.

Parallèlement, le service réseau de l'UJF prévoit de nous octroyer une nouvelle plage d'adresses IP, ceci afin de séparer le réseau du LAOG (Laboratoire d'AstrOphysique de Grenoble) et le réseau des machines de calcul et permettre l'extension de ce dernier.

Liens avec les autres projets

En 2000, les physiciens numériques, qui projetaient la mise en place d'un centre de calcul mésoscopique pour leurs besoins propres, ont souhaité un rapprochement. Nous accueillons leur ingénieur depuis un an et demi, une journée hebdomadaire.

Nous participons à la définition du cahier des charges et à la commission d'appel d'offre de leur projet cluster de PCs, projet PHYNUM. Nous avons participé à la définition de jeux de tests, à l'évaluation de la fiabilité et des performances des machines. Cette expérience nous

est très utile dans le cadre d'une veille technologique pour les besoins futurs de l'Observatoire. Elle nous permet de nous former à l'administration de clusters de PCs sous linux et d'étudier les outils logiciels spécifiques dédiés à ces architectures.

Le projet BioImage a mis à notre disposition 4 de leurs PCs pour effectuer des tests qui nous ont permis notamment de mettre en œuvre un réseau Gigabit, avec le prêt de deux routeurs de la part du service réseau de l'UJF et de la part d'une société spécialisée dans la vente de matériel réseau.

Une nouvelle salle informatique est actuellement en cours d'aménagement à l'Observatoire. Cette salle abritera dès la fin de l'été le cluster de 40 PCs du projet PHYNUM. Elle est conçue pour répondre aux besoins de 120 PCs, en terme d'espace, de courant secouru, et de climatisation, et elle constituera un laboratoire pour la mutualisation des ressources au sein de CIMENT.

Cette salle abritera la jouvence du SCCI, prévue dès 2004, dans le cadre d'un Contrat de Plan Etat Région CIMENT.

Nous hébergerons également, dès la fin de l'été, le cluster de 24 PCs du projet BioImage. Le laboratoire TIMC doit en effet déménager d'ici fin 2003 dans de nouveaux locaux, actuellement en cours de rénovation.

Guy Bourrel, ingénieur en charge du cluster BioImage, prévoit de passer au moins une journée hebdomadaire à l'Observatoire durant la durée de l'hébergement des machines à l'Observatoire.

Le rapprochement des ingénieurs devraient encore renforcer les collaborations et l'expertise technique autour des clusters de PCs.

Notre objectif, au travers de ces collaborations, est également de mutualiser une fraction de nos ressources.

La complémentarité des architectures serveur SMP et clusters de PCs permettra de bien cibler l'utilisation des machines en fonction des caractéristiques de chaque code.

L'IBM SMP du SCCI servira par ailleurs de plateforme de développement, tremplin pour l'utilisation des calculateurs de l'IDRIS ou du CINES, pour les deux communautés PHYNUM et SCCI. Cela est déjà le cas pour un certain nombre de codes du SCCI pour lesquels les développements des codes et les tests de différents outils pour le parallélisme, pour la gestion des entrées sorties, pour l'optimisation des accès mémoire, se font en local avant passage sur les centres nationaux.

Nos interactions avec les centres nationaux nous permettent ponctuellement de bénéficier de leurs rapports privilégiés avec IBM et donc de récupérer de dernières versions logicielles, ou d'outils d'administration des laboratoires, non disponibles dans les distributions, ou encore d'obtenir des informations techniques sur le fonctionnement des logicielles et les performances.

Le projet ACI GRID «CIGRI», dont nous sommes partenaire, s'accorde totalement avec notre souhait de partage d'une fraction des ressources entre les différents projets CIMENT.

Ce projet vise en effet à la construction d'une grille autour des plateformes CIMENT.

Différentes applications de type Monte Carlo et calculs multiparamétriques serviront de tests pour la validation des outils développés dans le cadre de CIGRI.

Formation, assistance, documentation

Nous effectuons un travail important de recherche et de mise à dispositions des utilisateurs des outils logiciels les mieux adaptés à leurs besoins et les mieux ciblés pour les architectures du site.

Les possibilités offertes par les nouvelles machines et les nouveaux outils logiciels, qui évoluent en parallèle, sont importantes tant au niveau des capacités mémoire, de la puissance de calcul, que des modes de programmation. Elles répondent fort bien à la diversité des applications de l'Observatoire. En revanche, elles requièrent, pour un usage optimal, la connaissance de nouvelles notions et l'apprentissage de nouveaux outils.

Nous donc mis un accent tout particulier sur la rédaction de documentations pour familiariser les utilisateurs aux nouveaux logiciels, pour les inciter à utiliser de nouveaux modes de programmation, pour les aider dans l'analyse et l'optimisation de leurs codes.

Nous avons également initié des « demi-journées formation » consacrées à la présentation des différents outils de calcul intensif du site pour orienter les utilisateurs vers les solutions logicielles les mieux adaptées à leurs besoins.

Nous intervenons ponctuellement sur le développement, la compilation, ou le débogage, l'optimisation de certains codes.

Nous assurons également la coordination avec les centres nationaux IDRIS, CINES, CEA.

Dans le cadre de CIMENT :

- nous intervenons dans le module « calcul distribué », module transversal du Collège Doctorale. Ce module est accessible à l'ensemble des étudiants en thèse de l'Observatoire.
- nous avons proposé, en concertation avec les autres ingénieurs informaticiens, de dispenser un certain nombre de formations pour le calcul intensif, dans le cadre de la formation continue. L'obtention de crédits pour la mise en place d'une salle de Travaux Pratiques CIMENT nous permettra d'assurer ce type de formation dès 2003. Elles devraient notamment être accessibles à tous les chercheurs de l'Observatoire.

Projets scientifiques

Les éléments scientifiques que nous listerons ci-dessous (liste des projets, publications, thèses) sont loin d'être exhaustifs.

Nous avons en effet délibérément choisis, sur notre site, un mode de fonctionnement très souple.

C'est un aspect particulièrement apprécié par les utilisateurs qui sont par ailleurs, pour la plupart, pressurisés par de nombreuses contraintes de tous ordres. De fait, les projets de modélisation peuvent se mettre en place et évoluer très rapidement.

Cette souplesse d'utilisation est en partie responsable de la réussite de notre opération depuis la création du service en 1990, elle a largement contribué au développement des projets de modélisation à l'Observatoire. La commission informatique de l'Observatoire a donc toujours fait en sorte de la préserver.

Nous listerons ici quelques un des projets du LAOG, du LGIT et du LPG.

Les thèmes abordés sont cependant beaucoup plus nombreux :

- Evolution stellaire, fin de la vie des étoiles de masse intermédiaire (avec un gros projet associé sur le CINES)
- Modélisations dynamiques diverses

- Modélisation physique de l'évaporation de planétésimaux dans le système de beta Pictoris
- Modélisation dynamique de l'évaporation des mêmes planétésimaux et de leurs signatures spectrales. (codes couplés multi-physique).
- Modélisation de la structure thermique des enveloppes en effondrement autour des proto-étoiles de type solaire.
- Modélisation de la structure chimique des enveloppes en effondrement autour de proto-étoiles de type solaire.
- Modélisation de l'émission moléculaire d'une couche de gaz : H₂O, H₂CO, CH₃OH, SO, SO₂, SiO, OH, OC⁺, ...
- Astrophysique moléculaire : modélisation des interactions collisionnelles inélastiques entre les molécules observées dans l'espace et les constituants majoritaires du gaz (hydrogène moléculaire et hélium) ; modélisation de processus réactifs critiques pour rendre compte de l'abondance de diverses molécules observées (en liaison avec les observations spectroscopiques réalisés sur les TGE au sol et depuis l'espace, notamment IRAM, et bientôt ALMA et HERSCHEL, et dans le cadre de collaborations du programme national « Physique et Chimie du Milieu Interstellaire » du CNRS. (Projets IDRIS et CINES associés). Validation des modèles sur des systèmes à petit nombre de corps (physico-chimie en présence d'antimatière) sur la base de mesures effectuées au CERN.
- Chimie théorique (recherche amont) : développement de méthodes à haute précision dans le cadre de collaborations internationales (approches Coupled-Cluster explicitement corrélées) ; développement d'algorithmes parallèles spécifiques et expérimentations d'approches émergentes (Athapascan 0 et 1) dans le cadre de la thèse de N. Maillard.
- Modélisation de la dynamique et de la dynamo dans le noyau terrestre
 - MHD
 - Convection thermique
 - précession
 - modélisation d'expérience analogique de laboratoire
- Initiation et propagation de la rupture sismique : instabilité de frottement en élastodynamique
- Propagation des ondes acoustique et élastiques en milieu hétérogènes (simulations de Monte Carlo).
- Modélisation de la propagation des ondes de surface dans des milieux hétérogènes, mais surtout inversion des temps d'arrivée d'ondes de surface pour obtenir la structure de la Terre à une échelle régionale.
- Instabilité du glissement sur une faille segmentée : analyse spectrale et simulation numérique
- Analyse de signaux sismiques à l'aide de réseau dense de capteurs.

Projet de modélisation de l'émission moléculaire de protoétoiles de type solaire

C. Ceccarelli et S. Maret

Ce projet a pour but de calculer de façon auto-consistante l'émission moléculaire des enveloppes de protoétoiles de type solaire dans les premières phases de leur évolution. Ces calculs nécessitent un calcul de la chimie, l'équilibre thermique et du transfert radiatif à l'oeuvre dans ces enveloppes (Ceccarelli et al. 1998). La comparaison des résultats de ces modèles avec des observations infrarouges (ISO-LWS) ou millimétriques (JCMT, IRAM et

SEST) permettent de contraindre les paramètres physico-chimiques de la proto-étoile tel que sa masse, son taux d'accrétion, et l'abondance des principales espèces dans l'enveloppe.

Cette étude a déjà été réalisée sur la protoétoile IRAS16293-2422 et a permis, entre autre, de montrer l'existence d'un coeur chaud dans les parties les plus internes de l'étoile en formation, ou une chimie complexe est à l'oeuvre (Ceccarelli et al. 1998, Ceccarelli et al. 1999, Ceccarelli et al. 2000)

L'étude la plus récente que nous avons menée est la protoétoile NGC1333-IRAS4, à partir d'observations ISO-LWS des raies de l'eau (Maret et al. 2002)

La contrainte des paramètres des proto-étoiles observées nécessite un grand nombre de simulations pour différentes valeurs de paramètres. Une simulation dure en moyenne 15 min sur la machine hal. Nous avons réalisé depuis juillet 2001 environ 250 simulations, soit environ 60 heures de calcul. Cette étude a permis de déterminer la masse de la proto-étoile, son taux d'accrétion, son âge, ainsi que l'abondance de l'eau dans l'enveloppe. Cette étude a aussi mis en évidence l'existence d'un coeur chaud comparable à celui observé sur IRAS16293-2442 (Maret et al. 2002)

L'étude se porte à présent sur la modélisation de l'émission de la formaldehyde et du méthanol. Un survey de l'émission de ces deux molécules en provenance de 15 proto-étoiles, et la modélisation de l'émission est en cours (Maret et al., in prep)

Simulation 3D de jets de disques keplerien

D. Clarke

Nous étudions l'extension de 2D à 3D des simulations de l'évolution, en fonction du temps, des jets non relativistes de disques d'accrétion keplerien.

Nous examinons les éjections qui émanent d'un disque d'accrétion magnétique, qui est initialement en équilibre hydrostatique avec la couronne froide qui l'entoure. Le disque d'accrétion lui-même est pris en compte pour fournir un ensemble de conditions limites.

Simulation numérique MHD : simulation numérique de la turbulence de cisaillement

Pierre-Yves Longaretti (LAOG), David Clarke (Saint Mary's University, Halifax, Nova Scotia, Canada)

Ce nouveau thème, très consommateur de ressources, a pu émerger grâce à l'arrivée des nouvelles machines.

L'objet de l'étude est de réaliser des simulations mettant en évidence la turbulence de cisaillement dans la perspective de la caractérisation du transport turbulent dans les disques astrophysiques via un processus essentiellement hydrodynamique.

Les objectifs visés sont :

i/ Mettre en évidence dans les simulations la turbulence observée en laboratoire dans les régimes de Taylor-Couette linéairement stables. Ceux-ci sont bien observés et caractérisés en laboratoire, mais aucune simulation n'a encore pu reproduire le résultat des expériences dans

le régime astrophysiquement pertinent où le flot est stable vis-a-vis du critère de Rayleigh. Ces questions sont de première importance pour les disques non magnétisés.

ii/ Aborder la même question dans le régime dit de « shearing sheet » abondamment utilisé dans les études analytiques de modélisation des disques d'accrétion. Peu d'expériences de laboratoire se rapportent à ce régime, mais les éléments expérimentaux disponibles semblent indiquer que le flot doit être turbulent au moins pour des nombres de Rossby aussi petit que 0.1, alors que les simulations existantes montrent déjà une stabilisation pour des nombres de Rossby de l'ordre de l'unité.

iii/ Caractériser l'influence du champ magnétique sur la turbulence hydrodynamique de cisaillement, dans des régimes astrophysiquement pertinents. Aucune expérience de laboratoire n'est actuellement réalisée ou en projet sur ce problème, et, bien évidemment, compte-tenu de la situation décrite dans les deux précédents paragraphes, aucune des simulations effectuées à ce jour n'aborde cette question. Certaines simulations de disques magnétisés ont mis en évidence la présence de turbulence, mais celle-ci est liée à une instabilité magnéto-rotationnelle, et non pas au cisaillement de vitesse. Par ailleurs, il est vraisemblable qu'aux nombres de Reynolds typiquement atteints dans les disques d'accrétion, le transport lié au cisaillement domine celui lié à l'instabilité magnéto-rotationnelle, d'où l'importance de cette phase du projet.

Il s'agit d'un projet à long terme (au minimum 5 ans), qui a débuté l'année dernière, et en est encore dans sa phase préliminaire. Pour l'instant, une série de simulations a été effectuée sur le centre de calcul de l'Observatoire. Elle a mis en évidence une carence importante dans la compréhension de la physique des flots de type Taylor-Couette. Cette carence a été cernée et comblée par une approche phénoménologique, qui a fait l'objet d'une publication (mais dans laquelle les simulations effectuées n'ont pas été utilisées). Ce travail a permis de dégager une stratégie de recherche pour des simulations plus pertinentes et plus détaillées, qui seront effectuées fin 2002/début 2003. Une première publication sur ce thème est attendue en 2003.

Préparation des observations de l'Univers moléculaire avec Herschel et Alma : collisions inélastiques de l'eau et d'autres constituants moléculaires

Equipe AMOL (Astrophysique MOLéculaire) - LAOG

L'Observatoire spatial Herschel renouvellera à partir de 2007 notre connaissance de l'Univers moléculaire à toutes les échelles (des galaxies aux régions de formation d'étoiles et aux proto-systèmes planétaires proches) par l'observation complète de la fenêtre sub-millimétrique et IR lointain avec une sensibilité et une précision de calibration inégalée. Des observations spectroscopiques à haute résolution seront notamment possibles avec le spectromètre embarqué HIFI. L'originalité de cette fenêtre d'observation est de permettre l'observation de molécules dans des états d'excitation très variés et donc de sonder les objets astronomiques sur une très large gamme de conditions physiques. L'interféromètre ALMA qui sera déployé ultérieurement au Chili vers 2010 sera limité aux fenêtres de transparence de l'atmosphère mais apportera une résolution spatiale comparable aux grands télescopes optiques.

La nécessité de disposer des données moléculaires fondamentales pour l'interprétation des données est reconnue par le programme national PCMI (Physique et Chimie du Milieu Interstellaire), par le CNES, et bien sûr par l'agence spatiale européenne. En particulier la connaissance des taux de collision inélastiques est indispensable pour faire la part des processus d'excitation liés au transfert radiatif et à l'interaction collisionnelle avec le gaz

interstellaire environnant. Concernant l'eau, les partenaires de collision privilégiés sont l'hydrogène moléculaire (qui est le constituant majoritaire du gaz moléculaire), et dans les régions partiellement ionisées ou dans les chocs, l'hydrogène atomique et les électrons. L'approche théorique est incontournable en raison de la nécessité de disposer de taux détaillés d'état à état, mais les mesures expérimentales seront très utiles pour valider les prédictions théoriques.

Le traitement complet de l'excitation collisionnelle de H₂O (et ses isotopes deutérés) par H₂ constitue un problème formidable pour plusieurs raisons : 1) le calcul de la surface d'énergie potentielle (PES) à la précision de quelques cm⁻¹ requise pour modéliser l'excitation de l'eau dans le milieu froid (5 à 20 K) ; 2) l'échantillonnage de ses 9 dimensions (une distance et 4 angles d'interaction mutuelle, une coordonnée de pliage pour H₂O, et trois longueurs de liaison pour la prise en compte des corrections liées aux interactions de point zéro), avec la mise en place d'une hiérarchie d'approximations pour limiter le temps de calcul à 100 ou 200 000 heures ; 3) l'expansion angulaire et l'interpolation de cette PES à 9D en préservant la précision sur les degrés de liberté les plus critiques ; 4) le traitement collisionnel inélastique proprement dit, qui devra combiner une approche purement quantique à basse température, des approximations semi-classiques pour les collisions à plus haute température (excitation collisionnelle dans les chocs), et des approximations classiques pour identifier ou interpréter certains processus, notamment des familles de résonances ; et 5) les moyennes intégrées sur les distributions de Boltzmann, en prenant en compte les résonances. (L'étude des taux de collisions isotopiques peut utiliser la même PES du moment que son échantillonnage est suffisant pour permettre la prise en compte des fonctions vibrationnelles des divers isotopes.)

L'équipe AMOL (Astrophysique MOLéculaire) au LAOG a développé récemment des méthodes avancées (coupled cluster explicitement corrélées CCSD(T)-R12) concernant la détermination de PES intra- et inter-moléculaire à haute précision, dans le cadre d'une collaboration avec le Pr. J. Noga à Bratislava (cf. références et articles soumis et en préparation). L'équipe dispose également d'une expérience solide dans le domaine de l'échantillonnage et de l'interpolation des PES, avec notamment les travaux antérieurs d'A. Faure et C. Rist. Sur 2001 et 2002 nous avons également poursuivi le développement d'un code de production CCSD(T)-R12 pour accéder à un nouveau niveau de précision dans la description des interactions inter-moléculaires, aussi bien pour des petits systèmes à couches fermées comme H₂O - H₂ ou des systèmes à couches ouvertes comme H₂O -H. La parallélisation de ce code combine des développements Open-MP (notamment pour les excitations triples) et des développements MPI pour la parallélisation de la génération des intégrales atomiques et les coucles SCF et CCSD correspondantes. La souplesse des machines du SCCI et la possibilité de disposer d'une mémoire centrale importante et d'entrées sorties performantes ont beaucoup favorisé la réalisation de ce projet. Nous visons maintenant avec l'aide de F. Roch à mettre en place d'ici fin 2002 une version de production performante sur l'IDRIS et le CINES.

Concernant la modélisation des collisions inélastiques H₂O - H₂ ou H₂O - H, nous prévoyons de combiner deux approches pour un total de l'ordre de 200000 heures de calcul :

- 1) des calculs à haute précision (environ 100h CPU par géométrie) pour étalonner les domaines les plus critiques de chaque PES.
- 2) un échantillonnage complet de la PES 9-D pour H₂O - H₂ et de la PES 6-D pour H₂O - H avec une précision moindre mais des calculs plus rapides (quelques min. à quelques dizaines de min. de CPU par géométrie) sur une grille de type Monte Carlo. Ces derniers calculs sont particulièrement performants sur des gros PC (voir l'article « Quand les PC Linux d'essaient à

jouer dans la cour des grands... », Gazette CINES du 1^{er} Juillet, sous <http://www.cines.fr/textes/gazette8.pdf>), et seront également déployés sur la grille CIMENT (projet ACI CiGri) pour valider en vraie grandeur les logiciels d'accès à la grille, de récupération d'erreurs, etc.

Initiation et propagation de la rupture sismique

P. Favreau

Modèles directs de tremblements de Terre, incluant les processus physiques d'initiation et de propagation spontanées de la rupture ainsi que la propagation de la radiation sismique à la surface de la Terre et le calcul de la directivité de l'énergie sismique.

La base de la modélisation numérique est la différence finie d'ordre élevé. Le programme est écrit en Fortran 90 et Open_MP. Le parallélisme est simple mais à gros grain (chaque thread exécute des imbrications de routines et de boucles).

Une simulation de rupture et propagation en champ très proche consomme 650 Mo de mémoire RAM, et environ 8h00 CPU sur un processeur de nos machines.

Une simulation de rupture et calcul de la directivité de l'énergie sismique, qui consiste à caractériser les flux d'énergie sismique d'un tremblement de Terre dans un gros modèle de propagation des ondes en milieu hétérogène et pendant une longue durée consomme : 4.5 Go de mémoire RAM pendant environ 48 h (temps écoulé) sur 8 à 12 processeurs de notre IBM SP (16 processeurs SMP).

Calculs de simulation numérique du bruit de fond sismique en milieu 3D

S. Bonnefoy

Des calculs de simulation numérique du bruit de fond sismique en milieu 3D seront prochainement effectués sur le SCCI, dans le cadre du projet européen SESAME. Le code associé est un code OpenMP qui nécessite entre 1 et 2 Go de mémoire RAM, et 10 Go d'espace disque. Le temps CPU estimé est de l'ordre de 100h sur 8 processeurs.

Simulation de propagation d'onde radar basse fréquence dans l'ionosphère et le sous-sol Martien.

J. F. Nouvel

Cette simulation s'inscrit dans le cadre de la collaboration du LPG à la mission Mars Express de l'ESA, et plus particulièrement au radar Marsis.

Notre code utilise des modèles pour la surface de Mars, les tailles de matrices manipulées sont de l'ordre de 3000x3000 en complexes double précision.

Les temps de calcul pour chaque jeu de paramètres seront de 40 à 50h sur l'IBM 44P du SCCI. Le traitement d'une dizaine de jeux de paramètres différents est nécessaire.

Simulation de la propagation d'ondes radio dans des modèles de noyaux cométaires

A. Piot

La mission européenne ROSETTA doit étudier la comète Wirtanen pendant 18 mois, à partir de novembre 2011. Pour les besoins de CONSERT (Comet Nucleus Sounding Experiment

by Radio wave Transmission), nous simulons la propagation d'ondes radio dans des modèles de noyaux cométaires en deux dimensions.

Les simulations reposent sur la résolution des équations de Maxwell. Les difficultés sont liées à la dimension du problème : le noyau cométaire est estimé avoir un diamètre de 1200m, alors que la longueur d'onde λ du signal de sondage est de l'ordre de deux mètres dans le noyau. La méthode Pseudo Spectral Time Domain permet de résoudre les équations de Maxwell avec une précision suffisante avec un maillage de $\lambda/5$. Le domaine de calcul contient alors 3072×3072 points et nécessite environ 2Go de mémoire vive.

La méthode repose sur l'emploi massif de transformées de Fourier rapides (FFT) pour le calcul des dérivées spatiales. Elle est facilement parallélisable car les dérivées sont indépendantes les unes par rapport aux autres.

Nous avons utilisé les directives OpenMP et exploité les capacités de la machine SMP 16 processeurs. Les simulations durent en moyenne 8 jours sur 4 processeurs, ou 5 jours sur 8 processeurs. Des tests ont montré que les simulations sur un processeur prendraient 32 jours de calcul. A ce jour, une trentaine de simulations ont été effectuées. Quelques simulations sur 6144×6144 points ont été effectuées en utilisant les 16 processeurs.

En raison des ressources de calcul et de la taille mémoire nécessaires, ces simulations n'auraient pu être effectuées sans l'accès à une architecture de ce type.

Publications

M. Benna, A. Piot, J.-P. Barriot, W. Kofman, 2002, "Data Set Generation And Inversion Simulation of Radio-waves Propagating Through a Comet Nucleus (CONSERT Experiment)", submitted to Radio Science.

Bruneton, M., Farra, V., Pedersen, H.A. and SSTWG,
Non-linear surface wave phase velocity inversion based on ray theory,
Geophysical Journal International, sous presse

C. Cornou, P.-Y. Bard, M. Dietrich
Contribution of dense array analysis to the identification and quantification of basin-edge induced waves. Part I : Methodology
2002, soumis au Bull. Seism. Soc. Am.

C. Cornou, P.-Y. Bard, M. Dietrich
Contribution of dense array analysis to the identification and quantification of basin-edge induced waves. Part II : Application to Grenoble basin (French Alps)
2002, soumis au Bull. Seism. Soc. Am.

Ceccarelli C., Loinard L., Castets A., Tielens A.G.G.M., Caux E., Lefloch B.,
Vastel C., « Extended D2CO emission : The smoking gun of grain surface-chemistry »,
Astronomy & Astrophysics 2001, 372, 998

Ceccarelli C., Loinard L., Castets A., Tielens A.G.G.M., Caux E., « The hot core of the star-type protostar 16293-2422: H₂CO emission », Astronomy & Astrophysics 2000, 357, L9

Ceccarelli C., Castets A., Caux E., Hollenbach D., Loinard L., Molinari S., Tielens A.G.G.M., « The structure of the collapsing envelope around the low-mass protostar IRAS 16293-2422 », *Astronomy & Astrophysics* 2000, 355,1129.

Faure A., Wiesenfeld L. and Valiron P., «Temperature dependence of fast neutral-neutral reactions : a triatomic model study », *Chem. Phys.*, 254, 49—67, 2000.

P. Favreau, M. Campillo and I.R. Ionescu.
Initiation of Shear Instability in Three Dimensional Elastodynamics.
In press in the *Journal of Geophysical Research*.

P. Favreau and R. Archuleta
Direct seismic energy modeling and application to the Imperial Valley 1979 earthquake in submission in the *Geophysical Research Letters*

J-P. Gratier, P. Favreau and F. Renard.
Modeling Fluid Transfer along Californian Faults when Integrating Pressure Solution Crack-Sealing and Compaction Process.
In press in the *Journal of Geophysical Research*.

Maret S. et al,
Water emission in NGC1333-IRAS 4, The physical structure of the envelope
Astronomy & Astrophysics, 2002, submitted

Molinari S., Noriega-Crespo A., Ceccarelli C., Nisini B., Giannini T., Lorenzetti D., Caux E., Liseau R., Saraceno P., White G.J., « ISO spectroscopy of the HH 7-11 flow and its red-shifted counterpart », *The Astrophysical Journal* 2000, 538, 698.

Noga J. and Valiron P., «Explicitely correlated R12 coupled cluster calculations for open shell systems», *Chem. Phys. Lett.*, 324, 166-174, 2000.

Noga J., Valiron P. and W. Klopper, «The accuracy of atomization energies from explicitly correlated coupled cluster calculations », *J. Chem. Phys.* 115, 2022-2032, and Erratum, 2001.

Noga J., Valiron P., «Explicitly Correlated Coupled Cluster R12 Calculations », in : *Computational Chemistry : Reviews of Current Trends Vol. 7*, edited by J. Leszczynski, World Scientific, Singapore, New Jersey, London, Hong Kong, 2002, in press.

A. Piot, w. Kofman "Resolution of the Maxwell equation in 2D using a std algorithm"
To be sent to *Computational Physics*

Rachid Ouyed, David A. Clarke, Ralph E. Pudritz
Three dimensional simulations of jets from keplerian disks: Self-regulatory stability
Submitted to the *Astrophysical Journal*.

Sauge S., Valiron P. and Mayer I., «Dissociative recombination of antiprotonic atomcules $p\text{He}^+$ with positronium : towards antihydrogen synthesis ? », *Chem. Phys. Lett.*, 334, 330-336, 2001.

Sauge S. and Valiron P., «Collisional survival of antiprotonic helium atoms », Chem. Phys., 265, 47-61, 2001.

Sauge S. and Valiron P., «Quenching of antiprotonic helium atoms by collisions with H₂ molecules », Chem. Phys., 2002, accepted.

Valiron P., Kedzuch S. and Noga J., « Avoiding numerical instabilities in R12 calculations through universal R12 consistent basis sets.», Chem. Phys. Lett., submitted.

Thèses

« Etude de la structure lithosphérique 3D à l'échelle régionale par l'analyse des ondes de surface ».

Marianne Bruneton .

Thèse en cours.

« Modélisation des phases avancées de l'évolution des étoiles : contribution des étoiles de masse intermédiaire à l'évolution spectro-photométrique et chimique des galaxies et morphologie des diagrammes HR des amas globulaires ».

Gwenaëlle Leclair

Thèse en cours.

« Modélisation physique de l'évaporation de planétésimaux dans le système de beta Pictoris ». Cyrille Karmann

Soutenance prévue en 2002.

« Ecoulement d'un fluide dans une cavité en précession : approches numériques et expérimentales ».

Jérôme Noir

Thèse soutenue le 17 Nov. 2000.

« Modèles expérimentaux et numériques de la convection dans le noyau de la Terre ».

Julien Aubert

Thèse soutenue le 1er Oct. 2001.

« Instabilité du glissement sur une faille segmentée : analyse spectrale et simulation numérique ».

Sylvie Wolf

Thèse en cours.

« Propagation des ondes élastiques dans la lithosphère hétérogène : Modélisations et applications».

Celine Lacombe

Thèse soutenue le 21 décembre 2001.

« Initiation et propagation de la rupture sismique : instabilité de frottement en élastodynamique ».

Pascal Favreau

Thèse soutenue le 31 octobre 2000.

« Traitement d'antenne et imagerie sismique dans l'agglomération grenobloise : implications sur les effets de site ».

Cécile Cornou

Thèse soutenue le 15 mars 2002.

« Du lancement de jets aux rayons cosmiques : la fonction de la turbulence magnétique ».

Fabien Casse

Thèse soutenue le 16 juin 2000.

« Préparation de la mission Rosetta : Simulations de la propagation d'ondes radio à travers des modèles de noyaux de comètes ».

Alexandre Piot

Thèse soutenue en 2001.

« Physico-chimie des atomcules d'hélium antiprotonique : modélisation de processus réactifs en présence d'antimatière ».

Sébastien Sauge

Thèse soutenue à l'UJF le 6 juillet 2000.

« Algorithmes d'ordonnements optimaux en temps et en mémoire : Etude de cas sur des problèmes en mécanique quantique ».

Nicolas Maillard

Thèse soutenue à l'UJF le 19 novembre 2001 (thèse en co-direction avec le laboratoire ID).

« The thermal and chemical structure of solar type protostars ».

Sebastien Maret

En co-direction avec le CESR Toulouse, Thèse en cours.

« Sondage radar du sous sol Martien par un radar basse fréquence depuis un satellite en orbite basse. Modélisation et préparation de réduction de données ».

Jean-François Nouvel

Thèse en cours

« Collisions inélastiques de l'eau dans l'Univers moléculaire observable par le satellite Herschel. ».

Michael Wernli

Thèse prévue à partir de septembre 2002.