

RAPPORT SCCI 2003

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.

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 constituaient, en 2000, 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.

Une première opération, financée sur les crédits propre de l'Observatoire, est envisagée début 2004. Cette opération consiste en l'achat d'un quadri-processeurs 64 bits qui devrait permettre, d'une part de répondre au besoin urgent de ressources supplémentaires, et d'autre part de pallier à une éventuelle panne des machines IBM. Celles-ci sont en effet retirées de la maintenance fin 2003.

Nous nous orientons à priori vers des architectures AMD opteron. Nous avons déjà testé à plusieurs reprises ces processeurs. Les résultats des benches sont très satisfaisants, mais seule une expérience plus poussée nous permettra de nous engager dans une opération conséquente basée sur ces nouvelles machines et les compilateurs associés. Cette plateforme nous donnera donc la possibilité, de tester au mieux ces architectures en vue de notre opération CPER.

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 avons participé à la mise en œuvre de leur projet cluster de PCs, projet PHYNUM. Cette expérience nous est très utile dans le cadre d'une veille technologique pour les besoins futurs de l'Observatoire.

Une nouvelle salle informatique a été aménagée à l'Observatoire. Cette salle abrite le cluster de 40 PCs du projet PHYNUM. Elle est conçue pour répondre aux besoins de 120 PCs bi-processeurs, 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 avons hébergé, pendant un an, le cluster de 24 PCs du projet BioImage. Le laboratoire TIMC a en effet déménagé cet automne dans de nouveaux locaux, précédemment en cours de rénovation.

Le icluster de 200 PCs du laboratoire ID est, depuis cet été, dans nos locaux. Cet hébergement temporaire permet d'assurer une continuité du service en attente de la mise en exploitation du nouveau cluster itanium2 à Montbonnot.

Le rapprochement des ingénieurs autour de ces opérations a permis de 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 permet de bien cibler l'utilisation des machines en fonction des caractéristiques de chaque code.

L'IBM SMP du SCCI sert par ailleurs de plateforme de développement, tremplin pour l'utilisation des calculateurs de l'IDRIS ou du CINES. Pour un certain nombre de codes du SCCI, le développement 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.

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 de l'Observatoire servent de tests pour la validation des outils développés dans le cadre de CIGRI.

Nous avons également entamé une collaboration avec la société Icatiss. Cette société développe un système de calcul global virtuel qui permet d'utiliser au mieux les ressources disponibles dans une entreprise ou un laboratoire, sans altération des systèmes en place.

Notre objectif est de mettre en place Icatiss au Laboratoire d'Astrophysique, Laboratoire qui possède déjà une longue expérience des solutions diskless. Cette première expérience sera ensuite étendue à l'Observatoire en s'appuyant sur les développements effectués au niveau 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 avons 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.

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.
- nous avons participé à l'école d'automne « Introduction au Calcul Scientifique » (20-24 octobre 2003).

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
- 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 : H_2O , H_2CO , CH_3OH , SO , SO_2 , 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.

Nous présenterons ci-après les projets les plus gourmands en terme de puissance de calcul.

Projets du LAOG (Laboratoire d'AstrOphysique de Grenoble)

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, où 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 formaldéhyde et du méthanol. Un survey de l'émission de ces deux molécules en provenance de 15 proto-étoiles, et la modélisation de l'émission a été réalisé, et nous avons pu en particulier mettre en évidence l'existence de coeurs chauds sur toutes les proto-étoiles que nous avons observé (Maret et al. 2003, Ceccarelli et al. 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

1. d'une part des développements au niveau des I/O
 - ré-écriture directe du calcul des intégrales bi-électroniques
 - découverte auto-adaptative des zones de travail temporaire accessibles aux différents processeurs de la machine MPI
 - et techniques de « blocking » des I/O pour les excitations triples qui permettent de réduire celles-ci de 1 à 2 ordres de grandeur en réutilisant toute la mémoire disponible
2. d'autre part des développements MPI pour le load-balancing auto-adaptatif des multiples boucles du programme par le développement d'une approche générique.

Le nouveau code est ainsi parallèle de manière efficace pour toutes les étapes intensives du calcul.

La version de production correspondante est maintenant mise à disposition de la communauté européenne du programme COST-VD26 chemistry action sur le web (cf <http://www-laog.obs.ujf-grenoble.fr/~valiron/ccr12>).

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.

Concernant la modélisation des collisions inélastiques H₂O - H₂ ou H₂O - H, nous avons combiné 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>), ces derniers calculs ont été 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.

Modélisation des disques protoplanétaires autour des étoiles T Tauri.

F. Ménard, C. Pinte

Les observations récentes, à différentes longueurs d'onde, des disques protoplanétaires semblent indiquer une sédimentation verticale des grains dans les disques, en fonction de leur taille. La modélisation de la lumière stellaire diffusée par le disque circumstellaire permet de contraindre la répartition en taille des grains dans le disque et ainsi de remonter aux conditions physiques qui y règnent. Les calculs sont de type Monte-Carlo et prennent en compte les diffusions multiples dans le disque.

Le code est assez gourmand en temps de calcul, du fait de la prise en compte des diffusions multiples et du nombre important de paramètres libres.

Plasmas Astrophysiques

G. Henri, L. Saugé

L'équipe SHERPAS (plasmas astrophysiques) du Laboratoire d'AstrOphysique de Grenoble développe un code d'émission radiatif dépendant du temps dédié à l'étude de la variabilité rapide des objets de type BL Lacs extrêmes (Noyaux actifs de galaxie de type particulier).

Sans rentrer dans les détails de la modélisation, il consiste mathématiquement en la résolution d'un système d'équation aux dérivées partielles dont les termes sources ne peuvent être calculés de manière numériques. Difficilement parallélisable dans sa version actuelle, ce code il est vrai n'utilise pas toute la puissance des machines SMP mais fait appel de manière intensive à la bibliothèque numérique NAG. Le temps d'exécution d'un run est de l'ordre de 24 à 48 heures, en fonction de la charge des machines. Il nécessite en sortie un espace disque pour les résultats de l'ordre de 250 à 500 Mo/run. La discrétisation spatiale des nombreuses quantités physiques considérées nécessite un espace mémoire conséquent à accès rapide. L'essentiel des calculs se font actuellement sur l'une des 2 machines quadripcesseurs IBM du SCCI.

De plus, dans le cadre des cours transversaux proposés par le Collège Doctoral de l'UJF, Ludovic Saugé a pu participer aux formations doctorales CIMENT "Modélisation numérique et calcul intensif" et "Introduction au calcul réparti". Ces formations se sont avérées très utiles voire indispensables pour une meilleure maîtrise et compréhension des machines SMP disponibles sur le site de l'Observatoire de Grenoble et du calcul réparti de manière générale.

Projets du LGIT (Laboratoire de Géophysique Interne et Tectonophysique)

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

S. Bonnefoy

Parmi les principales méthodes d'estimation des effets de sites en zone urbaine (microzonage) les mesures de bruit de fond sismique en réseau, et la technique de « Nakamura » connaissent actuellement un grand essor et une grande popularité. Cependant, les principes sur lesquels reposent ces méthodes ne font pas l'objet d'un accord unanime dans la communauté scientifique. C'est pourquoi nous avons entamé un programme de simulation numérique du bruit de fond afin (1) d'étudier la fiabilité de ces techniques, (2) de comprendre la composition du champ d'ondes constituant le bruit (projet Européen SESAME). La modélisation 1D du bruit se fait par le calcul des fonctions de Green avec le code d'Hisada (Hisada, 1994). Ce code est basé sur la méthode des nombres d'ondes discrets.

Le code associé est un code OpenMP qui nécessite entre 1 et 2 Go de mémoire RAM, et 10 Go d'espace disque.

Convection en rotation rapide avec champ magnétique en Géodynamo

N. Gillet

Pour tenter de comprendre comment s'organisent les écoulements dans les noyaux planétaires, nous utilisons un code hybride 2D (pour les écoulements) et 3D (pour le champ magnétique). Une précédente étude sans champ (thèse de Julien Aubert) a mené à la publication de :

"Quasigeostrophic models of convection in rotating spherical shells"

J. Aubert, N. Gillet and P. Cardin

G-cubed, 4(7), 2003

Dynamique des fluides

N. Schaeffer

Projet1 : Etude des instabilités de la couche de Stewartson. c'est un des thèmes de la thèse (3eme année) de N. Schaeffer.

Code de dynamique des fluides en rotation, approximation quasi-2D, domaine cylindrique. différences finies en rayon, décomposition spectrale en azimut.

Le but est d'étudier la déstabilisation d'une couche de cisaillement dans un fluide en rotation. Cet objectif a été atteint (publication), et nous nous dirigeons maintenant vers l'étude de la turbulence engendrée par ces instabilités.

Projet2 : Dynamo quasi-géostrophique.

Au code de dynamique des fluides précédent (2D), nous ajoutons un code d'induction magnétique 3D. Différences finies radiale + décomposition en harmoniques sphériques. Le but est d'étudier le régime dynamo du noyau, avec des paramètres physiquement plus proche des simulations 3D existantes, qui sont limitées à des taux de rotation très faibles, et des fluides très visqueux. Notre approximation 2D pour l'écoulement permet de briser ces barrières.

Résultats : nous avons observé l'action dynamo. Le développement du code se poursuit.

Etude d'un fluide en rotation dans une cavité sphéroïdale en précession

D. Schmitt et D. Jault

Le cadre général de ces calculs est d'étudier les effets de l'excentricité de la cavité sur les modes d'écoulement d'un fluide visqueux en rotation rapide à l'intérieur de la cavité, lorsque celle-ci précesse autour de l'axe de rotation.

Les calculs précédents ont toujours utilisé une géométrie sphérique, les codes développés actuellement visent à les étendre à la géométrie sphéroïdale. Dans un premier temps, les effets non-linéaires ont été négligés (mode de "spinover").

Les résultats préliminaires sont encourageants.

Références :

- une communication à la conférence EGU-AGU, Nice, avril 2003
- un publication soumise à J. Comp. Phys., 2003

Calcul par éléments spectraux de la réponse basse fréquence de la Terre.

Emmanuel Chaljub (LGIT, Grenoble); Bernard Valette (LGIT, Chambéry)

Objectif : nous utilisons la méthode des éléments spectraux pour calculer la propagation 3D des ondes sismiques dans la Terre.

Les objectifs que nous poursuivons sont triples :

1/ Améliorer le calcul du splitting des modes propres de la Terre.

2/ Effectuer un calcul réaliste des forces de marée solide.

3/ Calculer le splitting du triplet de Slichter (mode de translation de la graine).

A chaque fois, il s'agit de réaliser ces calculs dans des modèles réalistes qui incluent la topographie de la surface et des interfaces du modèle, des perturbations latérales de vitesses et de densité, la stratification du noyau externe. Du point de vue des ingrédients physiques influençant la propagation des ondes, il nous faut tenir compte de la rotation (force de Coriolis et ellipticité de figure) et de l'auto-gravitation (en particulier la redistribution des masses).

Démarche numérique :

Nous utilisons une méthode d'éléments spectraux en espace couplée avec une méthode de différences finies explicite en temps.

Pour calculer le splitting des modes sismiques qui sont de l'ordre de quelques micro-Hertz, il nous faut propager quelques millions de pas de temps.

Nos applications sont donc gourmandes en temps de calcul mais pas en mémoire, puisque les grilles nécessaires au calcul à basse fréquence sont assez lâches (de l'ordre de 1000 éléments et 100000 à 1000000 de points).

Le code parallèle est écrit en Fortran 90, les communications étant assurées par les routines de la librairie de passage de messages MPI.

Résultats :

En utilisant les moyens de calcul du SCCI, nous avons pu valider l'implémentation de la redistribution des masses et d'une stratification quelconque du noyau externe. Ces développements font l'objet d'une publication soumise à Geophysical Journal International. Nous sommes en cours de validation des termes de rotation en comparant les splittings calculés par ES avec les prédictions de méthodes perturbatives.

Initiation et propagation de la rupture sismique

P. Favreau, M. Campillo

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).

Projet du LPG (Laboratoire de Planétologie de Grenoble)

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 a la mission Mars Express de l'ESA (European Space Agency), 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.

Ce code a tourné sur le SCCI et sur la grille de calcul CIMENT (environ 200 h).

Chaque jeu de paramètre correspondant à une orbite de Mars Express nécessite 10-12h de calcul sur un PC Xeon 2.4 GHz, la simulation d'un très grand nombre d'orbite est nécessaire.

Thèse : Sondage radar du sous-sol Martien par un radar basse fréquence depuis un satellite en orbite basse. Modélisation et préparation de réduction de données. Décembre 2003.

Projet du LIS (Laboratoire des Images et des Signaux)

Caractérisation des ondes UBF

B. Nicolas

Nous simulons la propagation d'ondes P et SV à l'aide d'un code aux différences finies. Ce programme est utilisé dans le cadre d'une thèse qui porte sur la caractérisation des ondes Ultra Basse Fréquence (1-100 Hz) dans les guides d'ondes océaniques. Le but de notre travail est la localisation de la profondeur d'une source dans un guide d'onde océanique.

Ce travail est financé par la Délégation Général pour l'Armement.

Publications

Bonnefoy-Claudet S., Cornou C., Fäh D., Bard P.-Y., Wathelet M., Ohrnberger M., 2003. "Modélisation numérique du bruit de fond sismique: implication pour déterminer la nature du bruit". VI Colloque National AFPS, 1-3 juillet 2003. I, 201-208.

Bruneton, M., Farra, V., Pedersen, H.A. and SSTWG, "Non-linear surface wave phase velocity inversion based on ray theory", Geophysical Journal International, 2002, 152(2), 583-596.

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.

Ceccarelli C., Maret S., Tielens AGGM, Castets A. et Caux E.
“Theoretical H₂CO emission from protostellar envelopes”
Astronomy & Astrophysics 2003, 410, 487.

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

J-P. Gratier, P. Favreau and F. Renard.
“Modeling Fluid Transfer along Californian Faults when Integrating Pressure Solution Crack-Sealing and Compaction Process”.
Art no 2104, Journal of Geophysical Research, 108(B2) NIL_28-NIL_52.

Maret S., Ceccarelli C., Caux E., Tielens AGGM et Castets A.
“Water emission in NGC1333-IRAS 4, The physical structure of the envelope”
Astronomy & Astrophysics, 2002, 395, 573.

Maret S., Ceccarelli C., Caux E., et al.
“The H₂CO abundance in the inner warm regions of low mass protostars”
Astronomy & Astrophysics, 2003, sous presse.

Menard, F., Pinte, C., Abrahamov, M., “No need for large grains in the disk of KH 15D”
a soumettre a Astronomy & Astrophysics

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, p. 131.

Noga J., Valiron P., "Towards universel R12 basis sets" Collect. Czech Chem. Comm., 2003, 63, 340.

Pinte, C., Menard, F., “A model of the disk of AA Tauri: Impact of magnetospheric accretion on the inner disk structure”
2003, soumis a Astronomy & Astrophysics

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

Saugé, L., Henri, G., "Time-dependent Modeling of High Energy Emission of TeV blazars"
The physics of relativistic jets in the CHANDRA and XMM Era, Bologna (Italy), 23-27
Septembre 2002.

Publié dans New Astronomy Reviews (2003), 47, 529-531

Saugé, L., Henri, G. "TeV blazar gamma-ray emission produced by a cooling pile-up particle energy distribution function", soumis à l'Astrophysical Journal (2003)

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 H_2 molecules », Chem. Phys., 2002, 283, p. 433.

Schaeffer N., "Boundary driven shear layer instabilities in a rotating fluid", soumis a J. Fluid Mech.

Valiron P., Kedžuch S. and Noga J., « Avoiding numerical instabilities in R12 calculations through universal R12 consistent basis sets.», Chem. Phys. Lett., 2003, 367, p. 723.

Thèses

« Modèles expérimentaux et numériques de la convection dans le noyau de la Terre ».
Julien Aubert
Thèse soutenue le 1er Oct. 2001.

« Composition du champ d'ondes du bruit de fond sismique : analyse expérimentale et simulation numérique »
Sylvette Bonnefoy-Claudet
Thèse en cours.

« Etude de la structure lithosphérique 3D à l'échelle régionale par l'analyse des ondes de surface »
Marianne Bruneton
Thèse soutenue en septembre 2003.

« Traitement d'antenne et imagerie sismique dans l'agglomération grenobloise : implications sur les effets de site »
Cécile Cornou
Thèse soutenue le 15 mars 2002.

« Etude numérique et expérimentale de la convection dans une sphère en rotation en présence de champ magnétique imposé »
Nicolas Gillet
Thèse en cours

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

Pascal Favreau
Thèse soutenue en octobre 2000.

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

Celine Lacombe
Thèse soutenue le 21 décembre 2001.

« 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.

« 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).

« Structure physico-chimique des proto-étoiles de faible masse »

Sébastien Maret
En co-direction avec le CESR Toulouse, Thèse soutenue à l'Université Paul Sabatier (Toulouse III) le 24 octobre 2003.

« Caractérisation des ondes Ultra Basse Fréquence (1-100 Hz) dans les guides d'ondes océaniques »

Barbara Nicolas
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 (soutenance en décembre 2003)

« Modélisation des disques protoplanétaires autour des étoiles T Tauri »

Christophe Pinte
Thèse en cours.

« 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.

« Pcessus de rayonnement AGN, Blazars »

Ludovic Saugé
Thèse en cours

« Etude expérimentale et numérique des mécanismes fondamentaux de la dynamo terrestre »

Nathanael Schaeffer
Thèse en cours.

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

Michael Wernli

Thèse en cours.

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

Sylvie Wolf

Thèse en cours.