

Contributions des « petites » bases :
Comment faire et sous quel format ?
Avec les outils actuels ...
Et plus particulièrement avec CASSIS

Par Jean-Michel GLORIAN

Chef de projet CASSIS

Responsable technique OVGSO

Utilisation de CASSIS avec les bases spectroscopiques et collisionnelles

■ Présentation de CASSIS



■ Utilisation des bases de données spectroscopiques

- Pourquoi ?
- Lesquelles et comment ?
 - Pour les petites bases ...

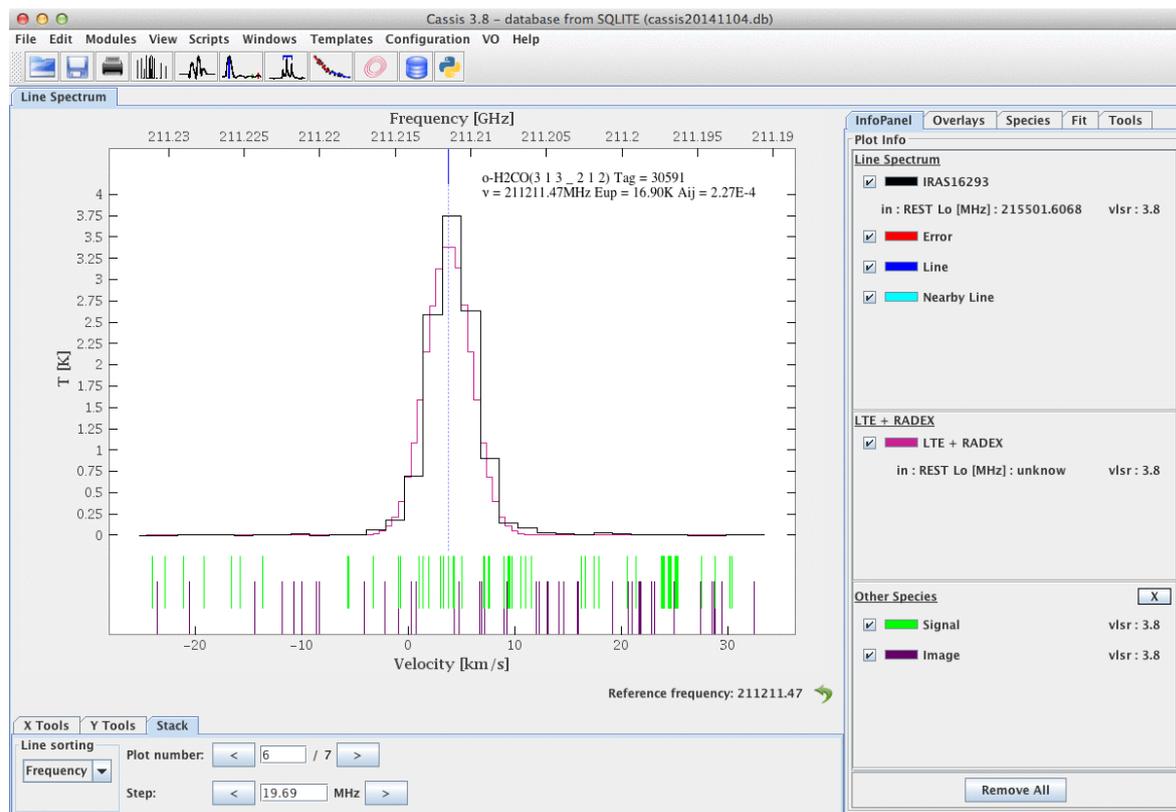
■ Utilisation des bases de données collisionnelles

- Pourquoi ?
- Lesquelles et comment ?
 - Pour les petites bases ...

- Outil pour accéder, lire, visualiser, **traiter et analyser** des spectres électromagnétiques en **utilisant des espèces chimiques, des modèles** et d'autres spectres synthétiques ou observés



Un exemple de la vue line spectrum : identification des raies o-H₂CO dans le spectre observé (en noir) avec la superposition d'un modèle LTE (rose) et d'autres raies possible dans le gamme de fréquence (vert et violet)



Utilisation des bases de données spectroscopiques : Pourquoi ?

Pour identifier des raies

- Utilisation du module Line Analysis



- Utilisation de l'outil Others Species

Line Analysis 1

Data: Load [an/CassisDatas/co.bas] Vlsr data: 3.8 km/s in: REST Telescope: 30M-V...

Tuning: Range min: 114.994874 max: 115.504874 GHz Band: 60.0 km/s

Threshold: Eup min: 0.0 max: 150.0 K Aij min: 0.0 max: * Jup min: * max: * Kup min: * max: * Lup min: * max: * Mup min: * max: *

Line Spectrum: Frequency [GHz] vs T [K] vs Velocity [km/s]. Peak at 115.27 GHz. Parameters: CO, v=0 (1, 0) Tag = 28503, v = 115271.2018(40.0005) MHz, Eup = 5.53 K Aij = 7.20E-8 Gup = 3, Vlsr = 3.80 km/s (signal).

Species Table:

Species	Tag	Database	Sel.
C-13-0	29501	CDMS	<input checked="" type="checkbox"/>
C-13-0-17	30503	CDMS	<input checked="" type="checkbox"/>
C-13-0-18	31502	CDMS	<input checked="" type="checkbox"/>
CO, v=0	28503	CDMS	<input checked="" type="checkbox"/>
CO-17	29503	CDMS	<input checked="" type="checkbox"/>
CO-18	30502	CDMS	<input checked="" type="checkbox"/>

- => Seules les noms des espèces et les fréquences des transitions sont obligatoires
- Optionnel pour faire des filtres : Aij, Eup
 - Optionnel pour avoir d'autres informations : Nombres quantiques : Elow, Gup, références

Utilisation des bases de données spectroscopiques : Pourquoi ?

- Pour faire des modèles théoriques ...
 - Paramètres dépendants du modèle :
Voir présentation Charlotte VASTEL



Utilisation des données spectroscopiques : Lesquelles et comment ?

- CDMS et JPL
 - Récupération des données à travers les fichiers .cat
 - Mise en forme dans la base embarquée au format SQLite fourni avec CASSIS



- NIST
 - Récupération à travers un formulaire web
 - Mise en forme dans la base embarquée au format SQLite fourni avec CASSIS

=> nécessité d'avoir une meilleure expertise sur les raies atomiques

Utilisation des données spectroscopiques : Lesquelles et comment ?

- Accessible par le protocole VAMDC
 - 12 fournisseurs compatibles
 - 5000 espèces
 - Plusieurs millions de raies
 - Format des Fichiers : XSAMS
 - Requetes : Protocole HTTP avec API REST et langage VSL2
 - Données parfois tronquées et problèmes de rapidité avec des grosses requêtes sur certaines bases

- Par le protocole SLAP de l'IVOA
 - SPLATALOGUE
 - NIST
 - Format des Fichiers : VOTABLE
 - Requetes : Protocole HTTP avec API REST et langage ADQL



Utilisation des données spectroscopiques : Lesquelles et comment ? Pour les petites bases

- Fournir les fichiers au format .cat de JPL
 - Un **fichier catdir.cat** avec la liste des espèces
 - Nom, tag (fictif ou non), fonction de partition
 - Des **fichiers « c0tag.cat »** contenant les informations sur transitions
- Sollicitations multiples ...
- Nécessite de bien suivre le format
 - Valeurs des paramètres contraints par la taille des colonnes
 - Températures des fonctions de partition limitées et imposés

- Possibilité de fournir un fichier ASCII

```
//JPL          p-c-C3H2
//Temp (K)    log(Z)
3.000         0.5513
6.000         0.9742
9.375         1.2577
```

Utilisation des données spectroscopiques : Lesquelles et comment ? Pour les petites bases

Exemple VASTEL: séparation ortho/para et A / E

catdir.cat	4581 p-H2D+	72	1.2810	1.0967	0.8418	0.4573	0.1915	0.0375	0.0012	69	1.8834
	4591 o-H2D+	89	1.8834	1.7403	1.5639	1.3369	1.1905	1.0971	1.0144	69	1.8834
	5581 p-D2H+	75	1.9813	1.8211	1.6106	1.3194	1.1353	1.0244	0.9667	69	2.3870
	5591 o-D2H+	87	2.2103	2.0253	1.7662	1.3356	0.9793	0.8078	0.7788	69	2.3870
c060093.cat											
c060083.cat											
c048597.cat											
c048587.cat	445.5438	0.0007	-9.4631	3	125.9119	27	48587	30313	310	13	311
	687.3610	0.0010	-9.1458	3	139.1858	29	48587	30314	311	14	312
	1028.8456	0.0015	-8.8548	3	153.4092	31	48587	30315	312	15	313
	1408.4105	0.0006	-8.1601	3	5.3333	3	48587	303	1 1 0	1	1 1
	1499.8436	0.0020	-8.5870	3	168.5822	33	48587	30316	313	16	314
	2136.0836	0.0026	-8.3401	3	184.7047	35	48587	30317	314	17	315
	2979.6971	0.0033	-8.1119	3	201.7768	37	48587	30318	315	18	316
	3202.6236	0.0068	-9.4762	3	926.0622	83	48587	30341	536	41	537
	4036.7589	0.0075	-9.3702	3	965.8909	85	48587	30342	537	42	538
c044093.cat											

Utilisation des données spectroscopiques : Lesquelles et comment ? Pour les petites bases

- Possibilité d'interfacer une base de raies à partir de fichiers ASCII lus par **un script Jython** dans CASSIS
- Exemple base de données internes IRAP pour MARS

1	elt ex	wav_nist	wav_mars	RelInt	Intensity	Base	Target
2	Fe II	241.125	241.133	300.000	501.938	MARS	Fe
3	Ni II	241.686	241.703	2000.00	27.3480	MARS	Ni
4	Mn II	242.812	242.841	20.0000	49.9940	MARS	Mn
5	Mn II	242.846	242.841	50.0000	49.9940	MARS	Mn
6	Mn II	243.811	243.789	30.0000	64.6990	MARS	Mn
7	Mn II	243.858	243.789	20.0000	64.6990	MARS	Mn
8	Ni II	243.863	243.857	500.000	27.6680	MARS	Ni
9	Mn II	245.323	245.319	30.0000	91.1710	MARS	Mn
10	Fe II	246.202	246.209	80.0000	609.834	MARS	Fe
11	C I	247.930	247.957	800.000	11.1600	MARS	cibles
12	C I	247.931	247.930	800.000	67.0390	MARS	C
13	Fe II	248.341	248.333	100.000	628.802	MARS	Fe
14	Fe I	248.402	248.357	10000.0	67.1240	MARS	Fe
15	Cu III	248.721	248.677	700.000	6.98400	MARS	Cu
16	Fe I	249.066	249.076	50.0000	828.159	MARS	Fe
17	Fe I	249.139	249.103	3000.00	91.7880	MARS	Fe
18	Fe II	249.393	249.393	100.000	1233.64	MARS	Fe
19	Fe II	249.401	249.439	500.000	73.5680	MARS	cibles
20	Fe I	249.475	249.439	60.0000	73.5680	MARS	cibles

Utilisation des données spectroscopiques : Lesquelles et comment ? Pour les petites bases

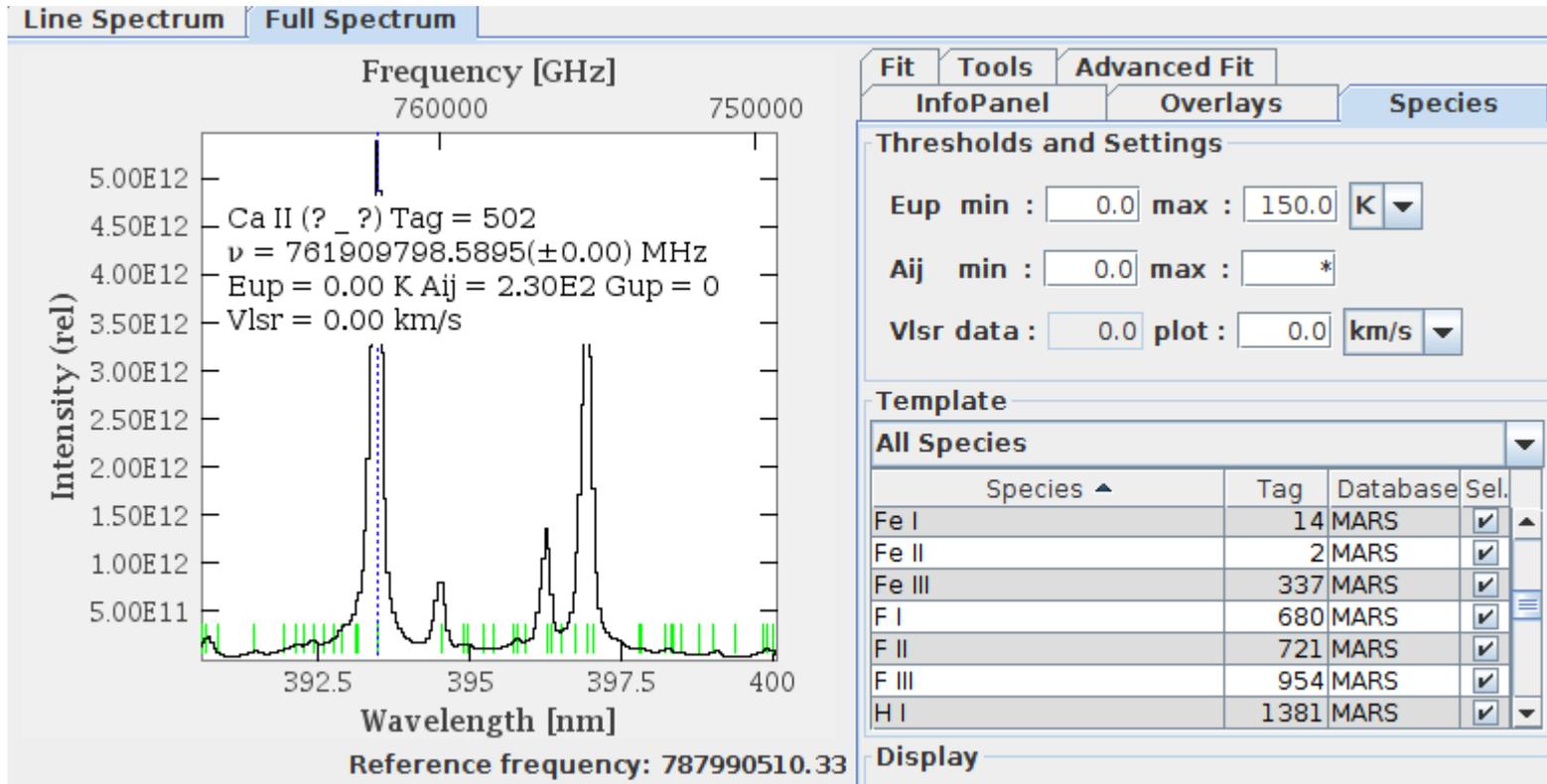
- Exemple base de données internes IRAP pour MARS :
Script Jython

```

1 fileDataBase = "All_mars_v8.dat"
2
3 from eu.omp.irap.cassis.database.access import AccessDataBase, ...
4 from java.util import ArrayList
5 import csv
6 from eu.omp.irap.cassis.common.axes import XAxisCassis
7
8
9 class MarsConnection(FileDataBaseConnection):
10
11     def __init__(self, file):
12         super(MarsConnection, self).__init__(file)
13         self.speciesDescriptionDB = None;
14         self.mols = {}
15
16     def getLineDescriptionDB(self, molecule, freqMinComp, freqMaxComp,
17                             otherThresEupMin=-1, otherThresEupMax=100000,
18                             otherThresAijMin=0, otherThresAijMax=111111):
19         list = ArrayList()
20         quanticNumbers = "?:?"
21         error = 0
22         aij = 0
23         elow = 0
24         igu = 0
25         eup = 0
26
27         for mol in molecule:
28             mymol = self.mols[mol.getName()]
29             for trans in mymol:
30                 line = LineDescriptionDB(mol.getTag(), trans['freq'],
31                                         quanticNumbers, error, trans['intens'], elow,
32                                         igu, 0, eup)
33                 list.add(line)
34         return list
35
36
37 def getAllMoleculeDescriptionDB(self):
38     if (self.speciesDescriptionDB == None):
39         self.speciesDescriptionDB = ArrayList();
40         tempList = None
41         qlogsList = None
42         spamReader = csv.reader(open(fileDataBase), delimiter=" ",
43                                 quotechar='|', skipinitialspace=True)
44
45         i = 0
46         self.mols = {}
47         for row in spamReader:
48             if i == 0:
49                 i = i + 1
50             else:
51                 i = i + 1
52                 name = str(row[0]) + " " + str(row[1])
53                 freq = XAxisCassis.getXAxisCassis("nm").
54                     convertToMHzFreq(float(row[3]))
55                 intens = float(row[4])
56
57                 if (not self.mols.has_key(name)):
58                     mol = MoleculeDescriptionDB(i, name, tempList, qlogsList)
59                     mol.setSource("MARS")
60                     self.speciesDescriptionDB.add(mol)
61                     self.mols[name] = []
62                 else:
63                     self.mols[name].append({'freq': freq, 'intens': intens})
64
65         return self.speciesDescriptionDB
66
67
68 AccessDataBase.initConnection(MarsConnection(""))
69

```

Utilisation des données spectroscopiques : Lesquelles et comment ? Pour les petites bases



Nous sommes ouverts à toutes demandes

Utilisation des données collisionnels: Pourquoi ?

- Pour faire des spectres avec le programme RADEX (Fortran) que CASSIS sait appeler
=> Voir présentation Charlotte VASTEL



Utilisation des données spectroscopiques : Lesquelles et comment ?

- En utilisant le logiciel Spectcol fourni par VAMDC pour accéder à BASECOL
 - Problème du matching entre les nombres quantiques des bases spectroscopiques et de la collisionnelles
 - Maintenance et corrections de bugs et amélioration en cours ?

Utilisation des données colisionnelles: Lesquelles et comment ? Pour les petites bases

- En utilisant des fichiers formats LAMDA (Leiden Atomic and Molecular Database)
 - Géré par Charlotte VASTEL
 - Provenant de différents producteurs
Exemple : LIQUE
 - Mise en forme et vérifié pour être utilisé avec le modèle RADEX
 - Fourni avec
 - le logiciel CASSIS
 - sur une page web du site CASSIS

Example molecular data file: HCO+

```
!MOLECULE HCO+
!MOLECULAR WEIGHT
29.0
!NUMBER OF ENERGY LEVELS
21
!LEVEL + ENERGIES(cm-1) + WEIGHT + J
1 0.000000000 1.0 0
2 2.975008479 3.0 1
(etc)
21 624.269300464 41.0 20
!NUMBER OF RADIATIVE TRANSITIONS
20
!TRANS + UP + LOW + EINSTEINA(s-1) + FREQ(GHz)
1 2 1 4.251e-05 89.18839570
2 3 2 4.081e-04 178.37481404
(etc)
20 21 20 4.955e-01 1781.13802857
!NUMBER OF COLL PARTNERS
1
!COLLISIONS BETWEEN
1 H2-HCO+ from Flower (1999)
!NUMBER OF COLL TRANS
210
!NUMBER OF COLL TEMPS
12
!COLL TEMPS
10.0 20.0 30.0 50.0 70.0 100.0 150.0 200.0 250.0 300.0 350.0 400.0
!TRANS + UP + LOW + COLLRATES(cm3 s-1)
1 2 1 2.6e-10 2.3e-10 2.1e-10 2.0e-10 1.9e-10 1.8e-10 2.0e-10 2.2e-10 ;
2 3 1 1.4e-10 1.2e-10 1.1e-10 1.0e-10 9.2e-11 8.8e-11 8.4e-11 8.2e-11 ;
(etc)
210 21 20 3.7e-10 3.6e-10 3.6e-10 3.5e-10 3.5e-10 3.5e-10 3.8e-10 4.0e-
```

Liens

- CASSIS
<http://cassis.irap.omp.eu>
- CDMS, JPL, NIST, VASTEL et collision utilisé dans CASSIS
<http://cassis.irap.omp.eu/?page=catalogs>
- Format LAMDA
<http://home.strw.leidenuniv.nl/~moldata/molformat.html>
- Portail VAMDC
<http://portal.vamdc.org/>
- BASCOL
<http://basecol.obspm.fr/>