

# Le logiciel CASSIS et ses évolutions

**Jean-Michel Glorian & co**



- Présentation générale
- Accès, lecture et visualisation des spectres
- Accès et identification des espèces chimiques
- Modélisation et traitement des spectres
- Collaborations sur la provenance et la citation des données
- Liens

## Centre d'Analyse Scientifique de Spectres Instrumentaux et Synthétiques



- Outil de **visualisation**, de **traitement** et d'**analyse** de spectres
  - Initialement développé pour les surveys spectraux (sub)millimétriques de gamme de fréquence très large comme avec Herschel
  - Ouvert depuis plusieurs années à tous les domaines de longueur d'onde
- Différentes façons de le lancer
  - À la volée : <http://cassis.irap.omp.eu/online/cassis.jnlp>
  - Via un installateur : <http://cassis.irap.omp.eu/download/installCassis.jnlp>
  - Téléchargement d'un tar.gz et lancement du .jar par script shell ou batch
- Livré avec une base de données SQLite agglomérant les données spectroscopiques d'espèces chimiques
- <http://cassis.irap.omp.eu/?page=installation>



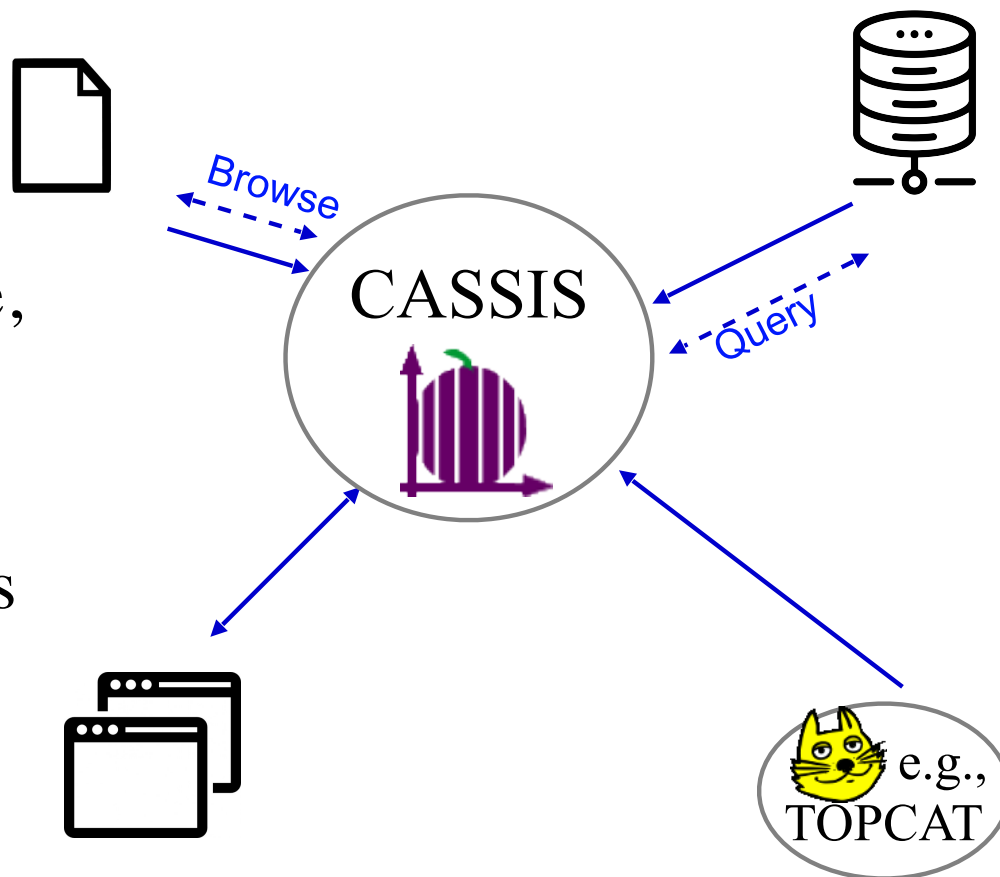
- Service d'Observation labellisé **ANO5** par l'INSU en 2013 dans l'OV-GSO-DC
- Relabellisé pour 4 ans en 2017
- Pôles Thématiques Nationaux
  - Pôle Atomes et Molécules
  - Pôle Spectroscopie (demande soumise)
- Équipe actuelle : 7 personnes ~ 2 ETP
  - 3 chercheurs : Emmanuel Caux, Sandrine Bottinelli, Charlotte Vastel
  - 2 ingénieurs : Jean-Michel Glorian (Permanent) et Mickael Boiziot (CDD)
  - 1 stagiaire longue durée : Bastien Kovac (contrat d'apprentissage 1 an)
  - 1 stagiaire courte durée, de mai à juillet 2017 : Olivier Bassene M1 MAPI3 UPS
- Mise à jour régulière du logiciel tous les 2 à 6 mois
  - Dernière version 4.2.2 - Avril 2017

- Logiciel écrit en **Java**
- Base de données intégrée d'espèces chimiques SQLite :
  - > **9 millions de raies**
- Base de données moléculaire intégrée:
  - > **90** collision files
- **220 000 lignes** de code dans **20 sous-projets** sous Gitlab
- Utilisation d'outils pour le développement du logiciel :
  - Redmine pour le **suivi** des bugs
  - JUnit, Maven, Jenkins, ... pour la **qualité** du code et l'**automatisation** de production du logiciel



# Accès aux spectres

- Fichiers locaux
- Fits, Votable, **ASCII**
- Applications utilisant le protocole standardisé d'échange **SAMP** de l'IVOA



- Services de spectres standardisés par l'IVOA :
  - **SSAP** ; e.g., Polarbase, Pollux, ...
  - **EPN-TAP** (Collaboration avec le CDPP)
- A partir d'un service en ligne, via SAMP
- e.g., VESPA



EUROPEAN SPACE AGENCY ABOUT ESAC SIGN IN

## herschel science archive

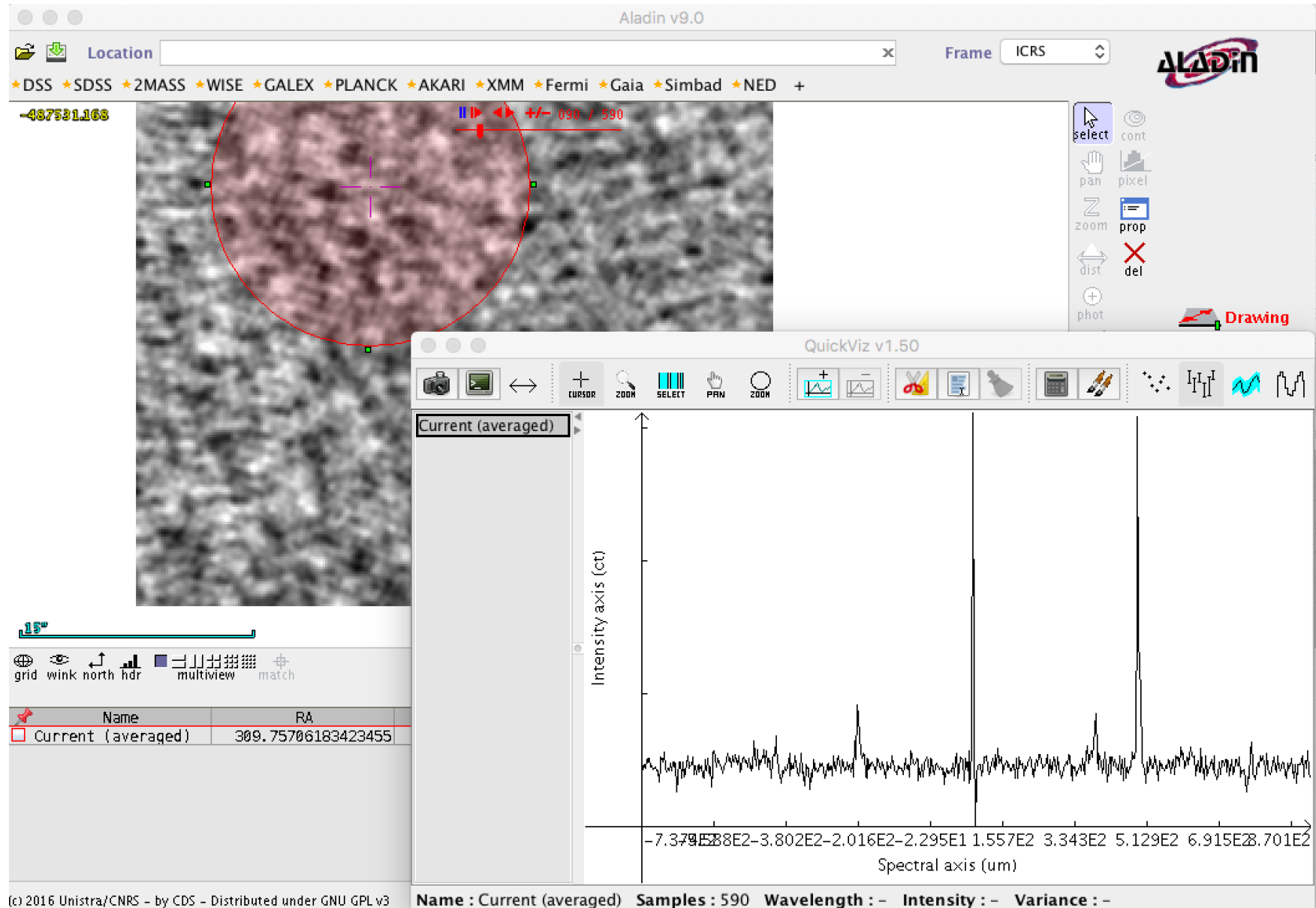
RESULTS #1 x

Pipeline (62) UPDP (0) Publications (22)

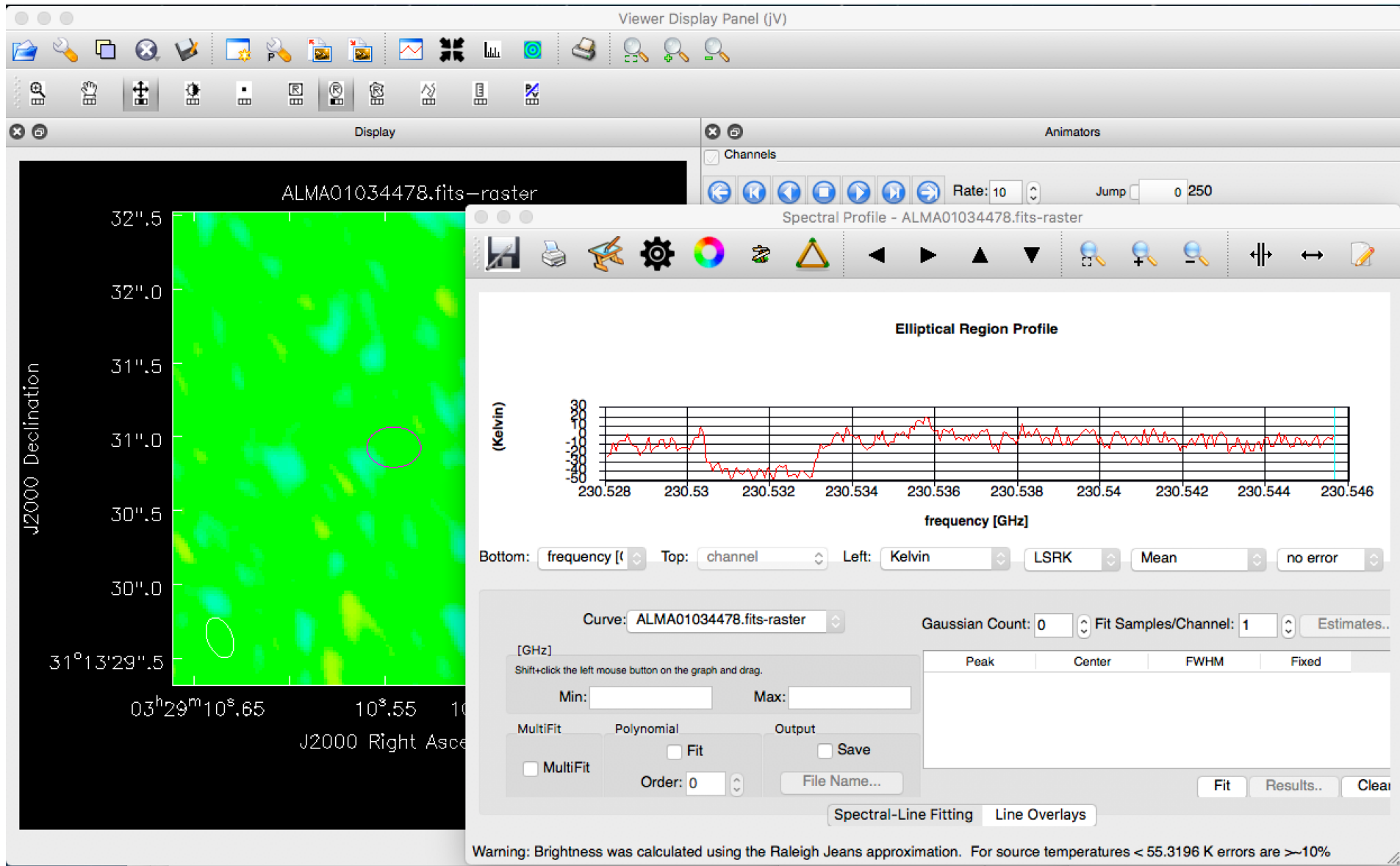
Observation ID	Dec	Distance	Instrument	Observing Mode
1342203570	4d 34' 01.03"	972.190	SPIRE	SpirePacsParallel
1342204013	4d 27' 45.43"	88.931	HIFI	HifiPointModeFastDB
1342204898	4d 28' 31.43"	1.705	SPIRE	SpireSpectroPoint
1342204899	4d 29' 15.36"	118.977	SPIRE	SpireSpectroPoint
1342204900	4d 30' 50.59"	381.790	SPIRE	SpireSpectroPoint
1342205093	4d 12' 03.36"	4144.876	PACS	SpirePacsParallel
1342205093	L1688 16h 26m 45.11s -24d 11' 15.28"	4727.142	SPIRE	SpirePacsParallel

1 of 1 Page size: 100 Displaying 1-62 of 62

COPYRIGHT 2000 - 2017 © EUROPEAN SPACE AGENCY. ALL RIGHTS RESERVED. (v8.1.1)







Simple Spectral Access (SSA)

**Registry & Services selection**

Protocol:  ▼

Registry:  ▼ Query

- ISO ESA Archive SSAP
- IUE highly processed spectra
- Kurucz ODFNEW /NOVER models
- LAMOST DR1 SPECTRUM CATALOG SERVICE
- M4AST - Modeling for Asteroids
- Magic Public Spectra SSAP Interface

Deselect all Select all Add service Find

**Request**

**Global Parameters**

Object name:  Resolve

RA:  DEC:

SEARCH RADIUS:  arcsec ▼

BAND:

TIME:

FORMAT:  ▼

**Optional Parameters**

Use	Name	Value
<input type="checkbox"/>	Age_max	
<input type="checkbox"/>	Age_min	
<input type="checkbox"/>	alfa_max	
<input type="checkbox"/>	alfa_min	
<input type="checkbox"/>	alpha_max	
<input type="checkbox"/>	alpha_min	
<input type="checkbox"/>	amax_max	
<input type="checkbox"/>	amax_min	
<input type="checkbox"/>	APERTURE	
<input type="checkbox"/>	atmosphere	
<input type="checkbox"/>	axes	
<input type="checkbox"/>	CAMERA	

**Query**

>?REQUEST=queryData&POS=83.809,-5.372639&SIZE=0.002777777777777778 Advanced Query

---

**Results**

DRIFT-PHOENIX ✕ IUE ✕ **ISO SSAP ✕** SpfD2m ✕ POLLUX SSAP2 ✕ POLLUX SSAP ✕ NED/SED ✕ TLUSTY BSTAR2006 ✕ Herschel SSAP ✕

Index	ObsId	Reference	Target_Name	S
1	69000714	http://archives.esac.esa.int/ida/aio/jsp/product.jsp?obsno=69000714&protocol=HTTP&name=lsp&level=Custom	ISO LWS04 Spectrum Target: Ori BN/KL	1997-10-01
2	68701716	http://archives.esac.esa.int/ida/aio/jsp/product.jsp?obsno=68701716&protocol=HTTP&name=lsp&level=Custom	ISO LWS04 Spectrum Target: Ori BN/KL	1997-10-01
3	69602521	http://archives.esac.esa.int/ida/aio/jsp/product.jsp?obsno=69602521&protocol=HTTP&name=swaa&level=Custom	ISO SWS06 Spectrum Target: ORION-BN	1997-10-01
4	84102038	http://archives.esac.esa.int/ida/aio/jsp/product.jsp?obsno=84102038&protocol=HTTP&name=swaa&level=Custom	ISO SWS07 Spectrum Target: Orion_PO2	1998-03-01
5	82901101	http://archives.esac.esa.int/ida/aio/jsp/product.jsp?obsno=82901101&protocol=HTTP&name=lsp&level=Custom	ISO LWS04 Spectrum Target: ORION-KL	1998-02-01
6	69602605	http://archives.esac.esa.int/ida/aio/jsp/product.jsp?obsno=69602605&protocol=HTTP&name=lsp&level=Custom	ISO LWS04 Spectrum Target: ORION	1997-10-01
7	68701301	http://archives.esac.esa.int/ida/aio/jsp/product.jsp?obsno=68701301&protocol=HTTP&name=lsp&level=Custom	ISO LWS04 Spectrum Target: ORIAIRC2	1997-10-01
8	69602606	http://archives.esac.esa.int/ida/aio/jsp/product.jsp?obsno=69602606&protocol=HTTP&name=lsp&level=Custom	ISO LWS04 Spectrum Target: ORION	1997-10-01
9	83101203	http://archives.esac.esa.int/ida/aio/jsp/product.jsp?obsno=83101203&protocol=HTTP&name=lsp&level=Custom	ISO LWS04 Spectrum Target: ORIAIRC2	1998-02-01
10	83101113	http://archives.esac.esa.int/ida/aio/jsp/product.jsp?obsno=83101113&protocol=HTTP&name=lsp&level=Custom	ISO LWS01 Spectrum Target: ORIAIRC2	1998-02-01
11	82901207	http://archives.esac.esa.int/ida/aio/jsp/product.jsp?obsno=82901207&protocol=HTTP&name=lsp&level=Custom	ISO LWS04 Spectrum Target: ORIAIRC2	1998-02-01

Deselect all Download selected Download all Display selected Display all Open Clear results

**Spectrum Manager**

**Cassis Spectrum**

- Resources
  - CL5\_499227427CCS\_F
  - ssa-results.votable
    - spSpec51816-039
      - NONE
      - SPECTRUM
      - EMISSPEC
      - EMISSPEC\_NON
      - EMIS\_PROF\_DE0
    - spSpec51900-039

**Cassis Metadata** | **Original Metadata** | **Datalink**

Name	Value	Comment	Unit
Wave unit	Frequency		Hz
Flux unit	No axis		1.0E-17 erg/cm/s/...
From	/tmp/spSpec5181...		
ssa_score	0.0	A measure of how...	
location_ra	3.9926922		deg
location_dec	-0.30350432		deg
location_arr	[F@59572cd7	Observed position...	
target_arr	[F@6a410513	Target RA and De...	
preview	http://rcsed-vo.sai...	URL of a preview f...	
accref	http://rcsed-vo.sai...	Access key for th...	
mime	image/fits	MIME type of the fi...	
accsize	357120	Size of the data in...	byte
ssa_dstile	SDSS spectrum 5...	Title or the datas...	
ssa_pubDID	ivo://voxastro.org/...	Dataset identifier ...	
ssa_pdate	2014-05-29T14:1...	Date last published.	
ssa_targname	51816 390 305	Common name of ...	
ssa_targclass	galaxy	Object class (star,...	
ssa_redshift	0.0394022	Redshift of target ...	
ssa_targetpos	[D@52b458e4	Equatorial (ICRS) ...	
ssa_snr	20.0	Signal-to-noise ra...	
ssa_location	[D@3e380b27	ICRS location of a...	deg
ssa_aperture	8.33E-4	Angular diameter ...	deg
ssa_dateObs	0.0	Midpoint of expos...	d
ssa_timeExt	NaN	Exposure duration	s
ssa_specmid	4.0E7	Midpoint of region...	m
ssa_specext	8.0E7	Width of the spec...	m
ssa_specstart	3.8E-7	Lower value of sp...	m
ssa_specend	8.0E-7	Upper value of sp...	m
ssa_length	2	Number of points ...	

Advanced ASCII Reader - /home/jglorian/OVGSOLink/Projets/Cousin/CLS\_499227427CCS\_F0500848CCAM02146P1.csv

**Headers**

**Metadata**

Check if the file contains metadata

Separator options: [=] ▾

First line: [1]

Last line: [15]

**Column values**

Check if the file contains headers

Separator options: [Comma] ▾

First line: [16]

Last line: [16]

**Data Values**

Data orientation:  Columns  Lines

Number of columns: [33]

Separator options: [Comma] ▾

First line: [17]

Last line: [\*]

NaN default value: [0.0]

**Generate spectrum**

Wave Column: [# wave] ▾ [nm] ▾

Flux Column: [median] ▾ [Normalize] ▾

**Preview**

**Metadata**

Spectrum's title: [?]7CCS\_F0500848CCAM02146P1.csv

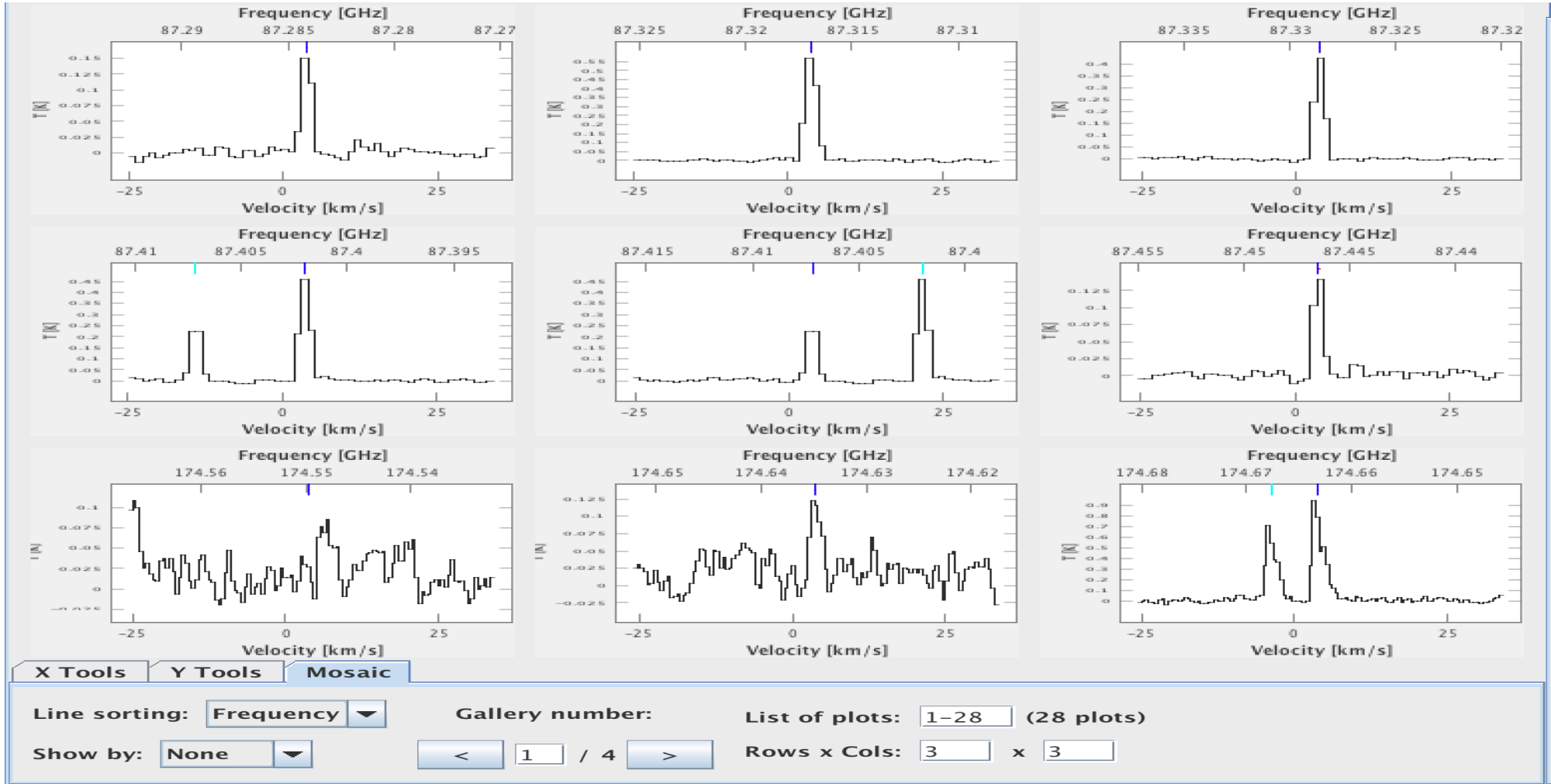
Name	Value	Unit	Comment
# PRODUCER_ID	cron		
# PRODUCT_CREATION_TIME	Tue Oct 27 18:51:23 2015		
# SOFTWARE_NAME	CCOPS		
# SOFTWARE_VERSION_ID	3.0		
# DARK	CL9_499227597EDR_F050084		

**Data**

# wave (nm)	shot1 (Unknow)	shot2 (Unknow)	shot3 (Unknow)	shot4 (Unkn)
240.811	2.4222235E11	5.2045053E11	5.8252147E11	6.0156455E11
240.86501	9.7349206E10	1.6415395E11	1.5883196E11	1.4315009E11
240.918	9.9675611E10	2.1493752E11	1.3456383E11	1.3189135E11
240.972	1.0694359E11	2.0321873E11	1.8838997E11	2.1554495E11
241.02699	3.8024131E11	6.4953818E11	6.8074614E11	6.9275314E11
241.07899	8.8951143E11	1.4899555E12	1.4535963E12	1.5717877E12
241.133	1.2893658E12	1.8558496E12	2.0524807E12	2.0367337E12
241.188	9.38977E11	1.3996967E12	1.5395441E12	1.489662E12
241.24001	3.3679217E11	5.9538338E11	6.4885741E11	5.9362178E11
241.29401	2.9			5.2940806E11
241.34801	3.3			5.9072386E11
241.401	4.7			7.688711E11
241.45599	3.8			5.6250841E11
241.508	1.8			1.4076109E11
241.562	7.5			7.5933013E10
241.616	3.0			1.0373769E11
241.66901	3.0			1.0006225E11
241.72301	4.6			1.254102E11
241.77699	6.9			1.8458925E11
241.83	8.9			2.4236074E11
241.883	8.6			2.4631904E11
241.938	6.9			1.0477993E11
241.991	3.5			3.4675711E10
242.045	9.9			2.9494337E9
242.099	-5.			2.6356967E7
242.151	-4.			1.2026185E10

Open file | Visualize raw data | Save configuration | Load config | **trium manager** | Display spectrum

- Dans des simples ou multi graphes (stacking)



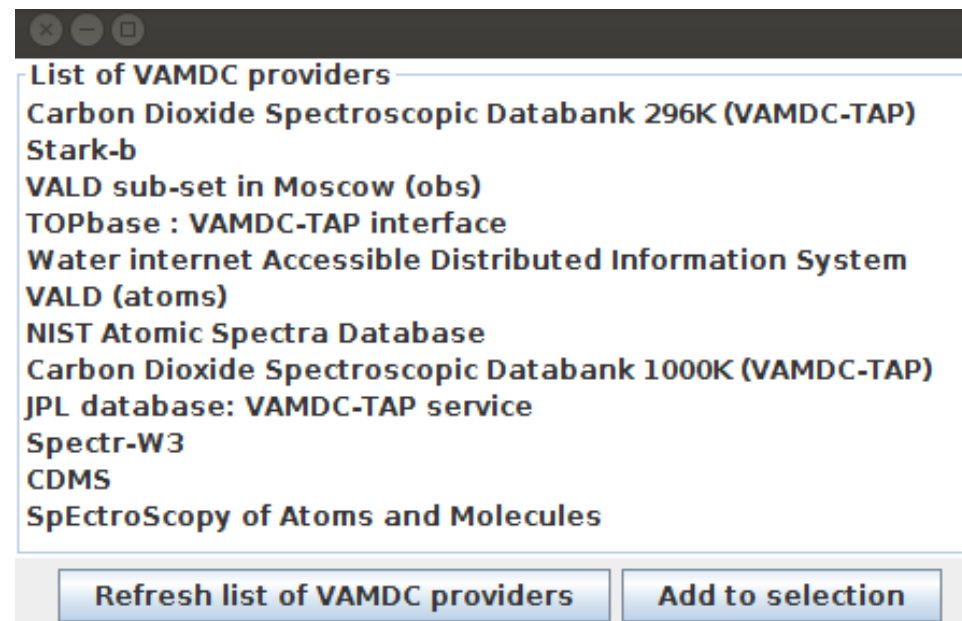
## Découpage d'un spectre iram autour des raies de CCH

# Accès et visualisations des spectres Améliorations et futures évolutions

- Prise en compte continue de nouveaux formats de spectres
  - Dernière implémentation : Fits APIS (Auroral Planetary Imaging and Spectroscopy)
- Futures évolutions au niveau de l'affichage
  - Prise en compte des erreurs sur le flux
  - Choix entre Sky ou Rest direct
- Au niveau de SAMP : prise en compte de tous les paramètres (pas seulement l'URL) pour une meilleure interaction avec Topcat
  - Utilisation de l'activation Action « View URL as Spectrum »
  - Interaction avec le multiple SSA
- Politique plus intelligente pour le choix des spectres à afficher automatiquement
- Utilisation du protocole OBS-TAP ?

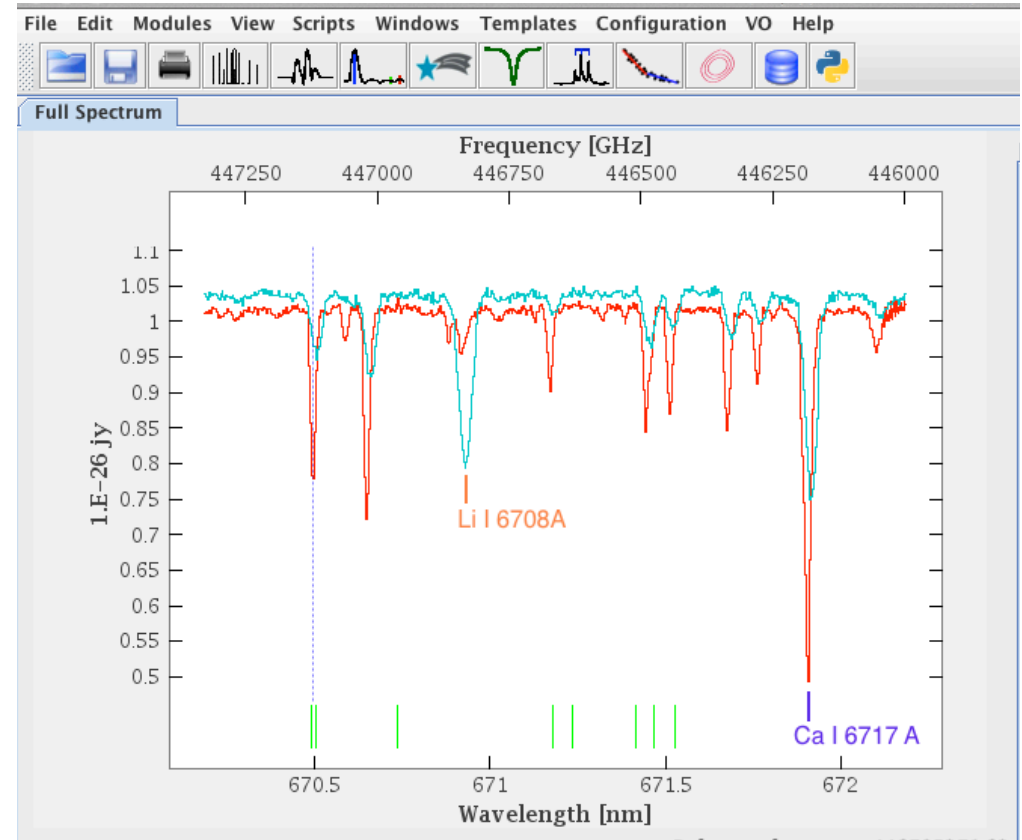
- Proposition d'un module pour personnaliser la récupération des spectres dans les fichiers fits
- Mise en place d'un outil pour valider le format des spectres et proposer d'éventuelles corrections
- Mise en place de la transformation d'unités d'intensité
  - actuellement affichage des unités trouvées dans le spectre
  - modélisation uniquement en Kelvin
  - module Jy2K-K2Jy en implémentation

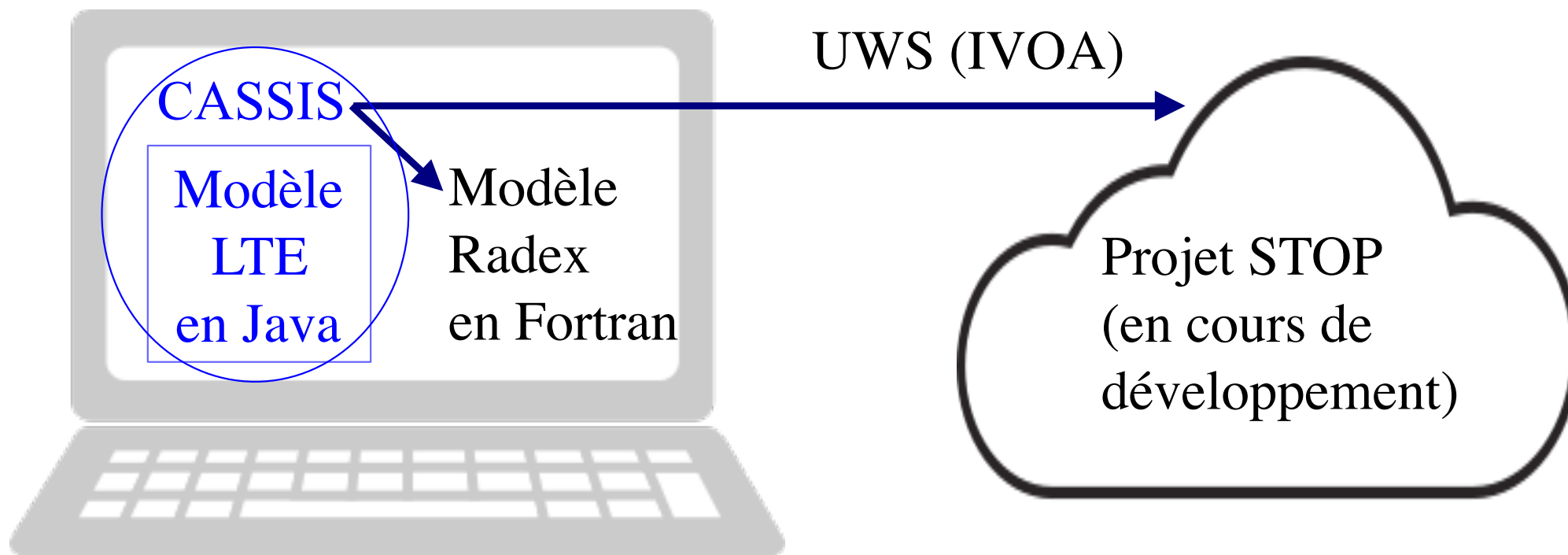
- Raies atomiques et moléculaires
  - Dans un fichier SQLite (JPL, CDMS, VASTEL, NIST) fourni avec CASSIS
  - Par VAMDC
    - 12 fournisseurs compatibles
    - 5000 espèces
    - Plusieurs millions de raies
  - Par SLAP
    - SPLATALOGUE
    - NIST





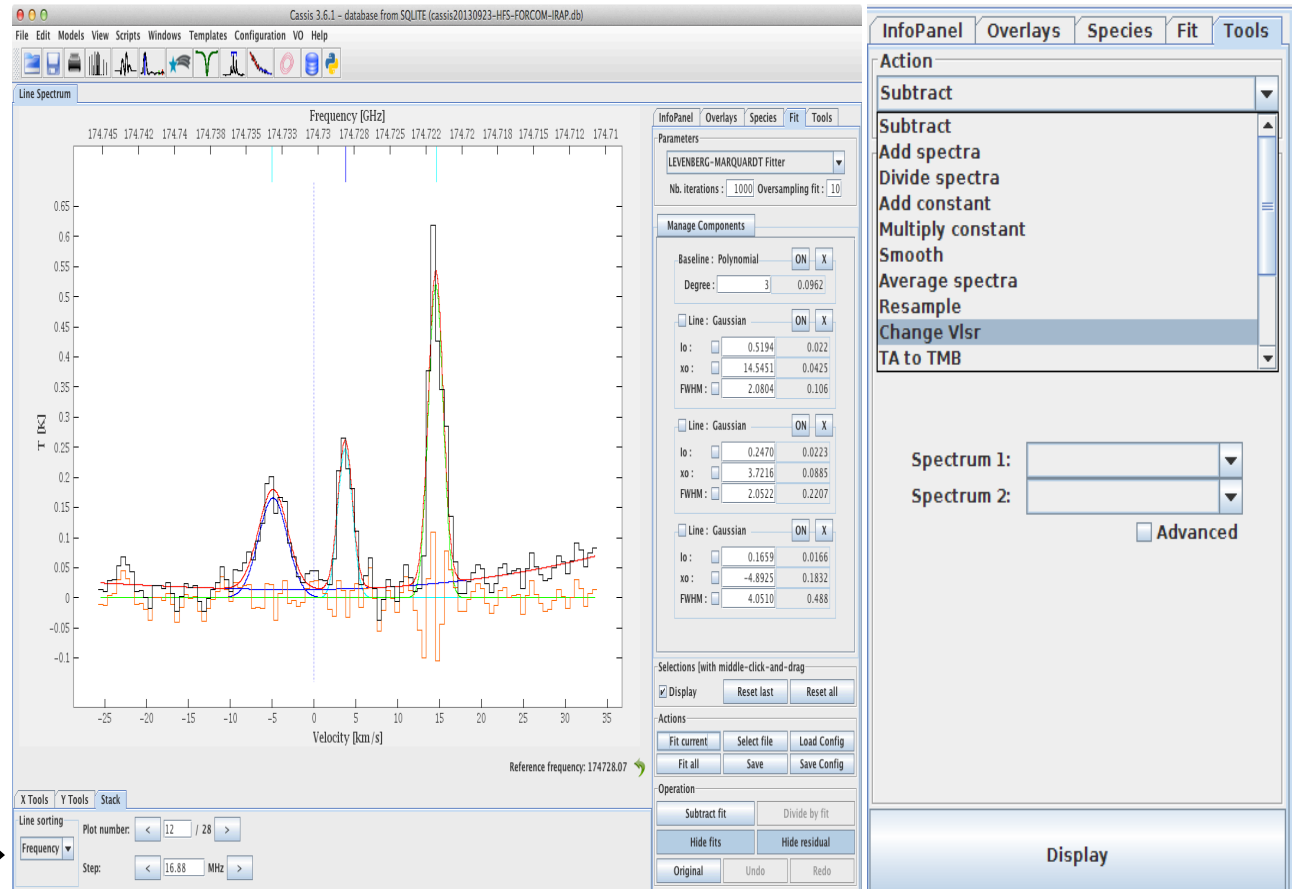
- Possibilité d'interfacer une base de raies avec module dédié + à partir de fichiers ASCII lus par un script Jython
- Interfaçage de nouvelles bases de données pour l'identification
- d'espèces chimiques
  - Base Morton Donald 2003  
ADS <http://adsabs.harvard.edu/abs/1991ApJS...77..119M>
  - Autres : GEISHA, MIPAS, ExoMol, HITRAN...





- Finalité :
  - Comparaison avec des spectres observés et recherche de meilleurs paramètres physiques
  - Script MCMC
  - Prédiction d'observation

- Ajustement de courbe multi composant (gaussienne, Sinc, Lorentzienne, polynomiale, ...)
- Décalage en vitesse
- Ré-échantillonnage
- Addition, Soustraction,
- Fusion ... de spectres
- Outils spécifiques :
- «diagramme rotationnel »
- ...



- Actuellement Vlsr et transformation rest2sky et sky2rest vac2air & air2vac
  - Décalage avec un redshift
  - Tout autre frequency frame
- Ajout d'un outil d'ajustement de courbe avec des composants contraints
  - ex : x gaussiennes avec positions relatives des gaussiennes fixes et toutes les FWHM égales
- Intégration de l'utilisation du module Owens pour la modélisation des spectres UV/FUV (largeur équivalente)
- Traitement et modélisation d'un ensemble de spectres provenant d'un cube de données
- ...

# Prise en compte de la provenance et de la citation des données

- Expérimentation du Datalink avec l'équipe POLLUX pour la Provenance des données
- Intégration de l'interrogation du « Query store » de VAMDC pour la citation des données sur les espèces chimiques

- Site OV-GSO-DC
  - <https://ov-gso.irap.omp.eu/>
- CASSIS :
  - <http://cassis.irap.omp.eu>
- Pollux
  - <http://pollux.graal.univ-montp2.fr>
- VAMDC
  - <http://portal.vamdc.org> - <http://vamdc.eu/>
- VESPA
  - <http://vespa.obspm.fr/planetary/data/epn/query/all/>