

# Le logiciel CASSIS : réalisations et évolutions

**Emmanuel Caux  
pour l'équipe CASSIS**

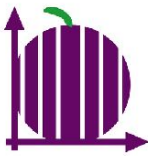




## Centre d'Analyse Scientifique de Spectres Instrumentaux et Synthétiques

- 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
- Livré avec :
  - une base de données SQLite agglomérant les données spectroscopiques d'espèces chimiques (CDMS + JPL + NIST + VASTEL) : **> 9 millions de raies**
  - une base de données moléculaire : **87 fichiers de collision**
- Mise à jour régulière du logiciel ~ tous les 6 mois (!!!)
  - Dernière version 6.2 - décembre 2021 ; version 6.3 prévue incessamment





# Présentation générale 2/2

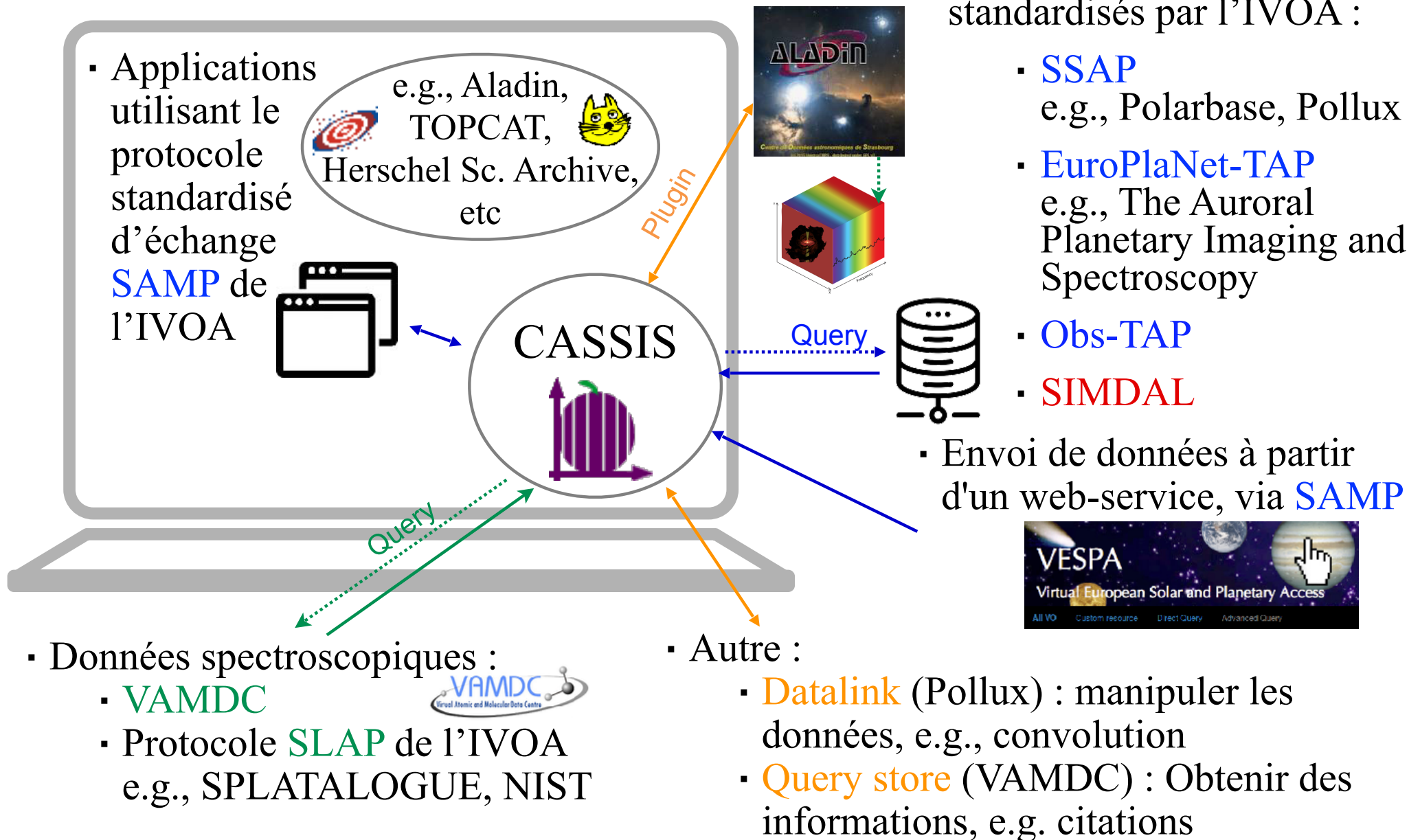
- Service d'Observation labellisé **ANO5** par l'INSU en 2013 dans l'OV-GSO-DC
  - ▶ Relabellisé pour 4 ans en 2021
- Pôles Thématiques Nationaux : Pôle Atomes et Molécules (moribond !)
- Équipe :

2020 : 5 personnes ~ 1.3 ETP	2021 : 6 personnes ~ 1.7 ETP
3 chercheurs : E. Caux (30%), S. Bottinelli (20%), C. Vastel (30%)	4 chercheurs : E. Caux (30%), S. Bottinelli (20%), A. Coutens (30%), C. Vastel (30%)
2 ingénieurs CNRS: Jean-Michel Glorian (0.3 ETP) et Mickaël Boiziot (0.2 ETP)	2 ingénieurs CNRS: Jean-Michel Glorian (0.3 ETP) et Mickaël Boiziot (0.3 ETP)
A. Aigerim, stagiaire M2 Computer Science for Aerospace UPS 6 mois (janvier-juin 2020)	T. Gaugain, stagiaire DUT 3 mois (04-06/2021) A. Boulanger stagiaire Centrale Nantes 4ème année 5 mois (04-08/2021)

- 2022 : chercheurs ~ 1.1 ETP OK (?), ingénieurs ~ 0.6 ETP, manque 0.4 ETP !
- 2023 : chercheurs ~ 1.1 ETP OK (??), ingénieurs ~ 0.6 ETP, manque > 0.4 ETP !



# Aspects OV





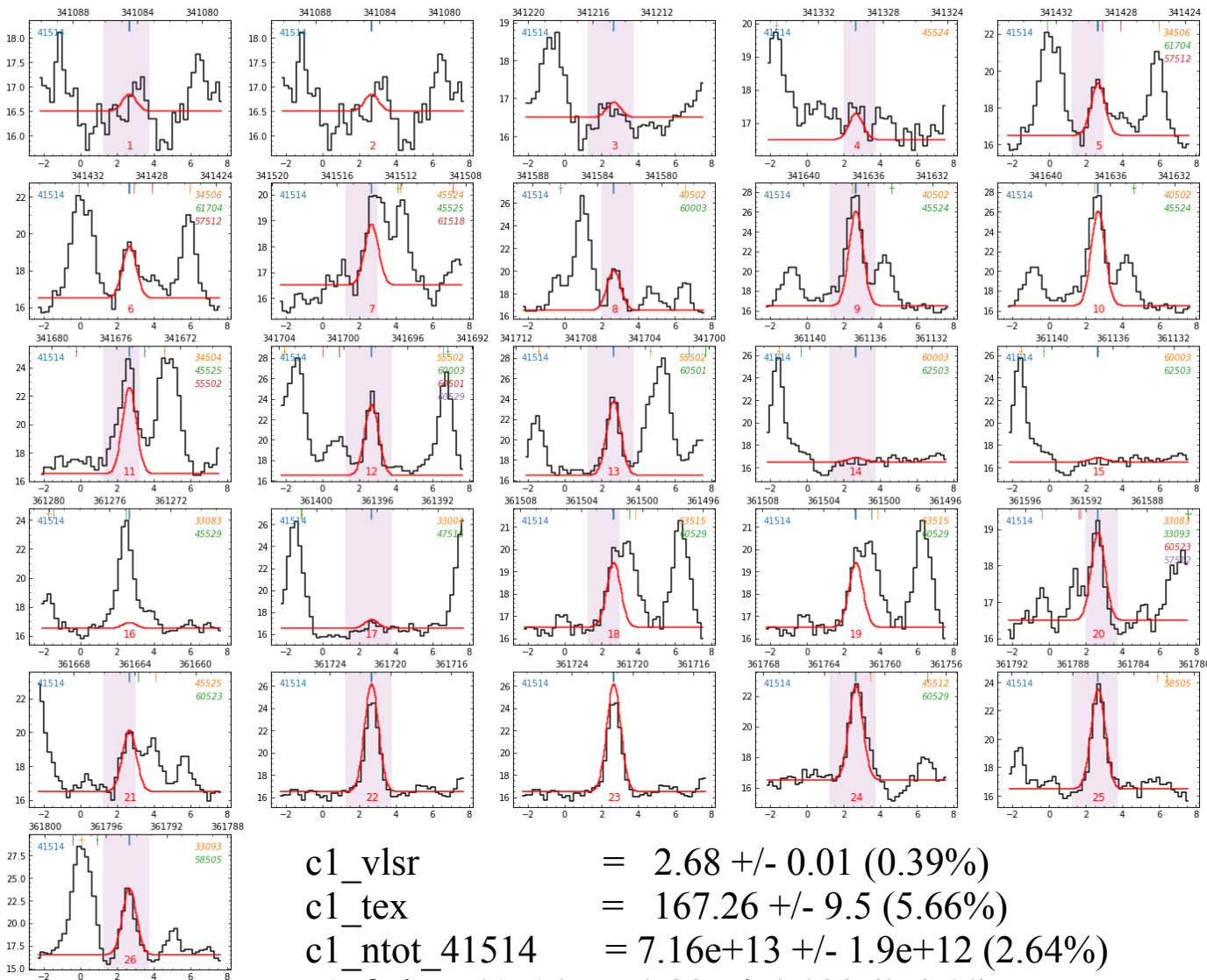
- Améliorations du modèle “LTE”
- Amélioration de la lecture de spectres (FITS; FITS Apis collaboration vizir)
- Conversion  $K \leftrightarrow Jy$  ; diagramme rotationnel en Jy (intensité intégrée vs énergie)
- Tutorial ESA “Redshift determination Tutorial with CASSIS”
- Possibilité d’interfacer une base de raies avec module dédié + à partir de fichiers ASCII lus par un script Jython
- Intégrer / convertir des modules en python
  - lancement de scripts python pour figures personnalisées (publications)



- Intégrer / convertir des modules en python
  - Module de fit multi-composants et multi-species (LTE)
  - Traitement et modélisation d'un ensemble de spectres provenant d'un cube de données
    - Cartes des paramètres physiques fittés ( $T_{\text{ex}}$ ,  $V_{\text{l sr}}$ ,  $N$ , FWHM)
- Interfaçage avec POLLUX :
  - CASSIS-POLLUX Specflow
- Interfaçage avec ALADIN :
  - CASSIS Aladin Plugin
- *ATOMIS: ALMA archive TOol for Molecular Investigations in Space (ERC Chemtrip)*



# Module python multi-fit

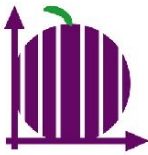


$c1\_vlsr = 2.68 \pm 0.01$  (0.39%)  
 $c1\_tex = 167.26 \pm 9.5$  (5.66%)  
 $c1\_ntot\_41514 = 7.16e+13 \pm 1.9e+12$  (2.64%)  
 $c1\_fwhm\_41514 = 0.88 \pm 0.023$  (2.67%)  
 $c1\_size = 3$  (fixed)  
reduced chi-square = 1.18

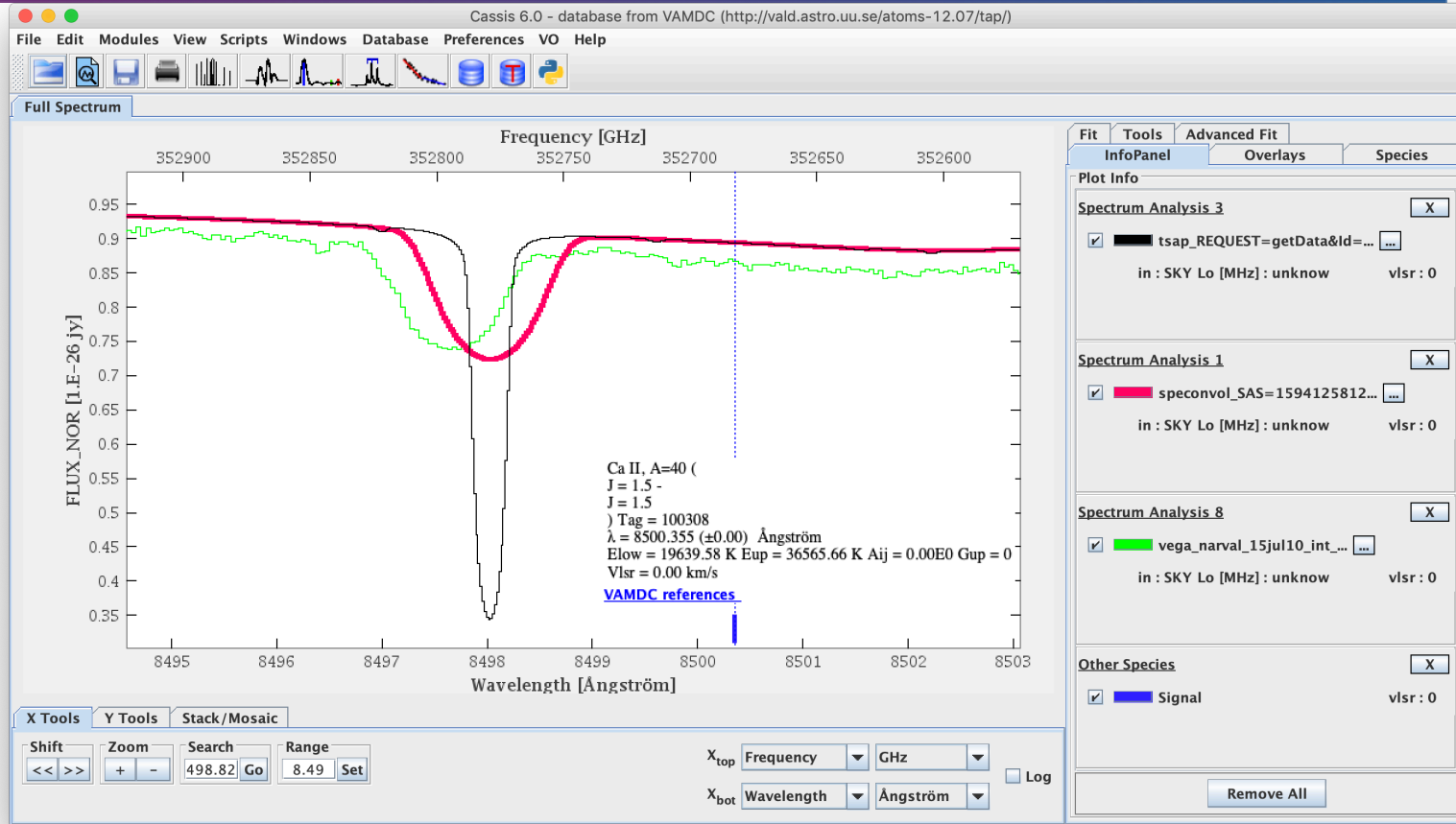
Actuellement pas  
d'interaction directe avec  
CASSIS

Utilisation de sa database  
SQLite

Scripts à "nourrir" à la main



# POLLUX-CASSIS Specflow



Convolution: radial velocity = -20.6 km/s + rotational velocity = 24 km/s and + macroturbulence = 2km/s + instrumental profile = 102 mÅ

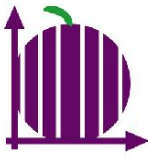
Pb1 = VAMDC : vacuum wavelength. NIST & VALD : air wavelength, very close to the observed wavelength.

Pb2 = Varying Vrad does not change anything

Pb3 = Is Vega the best use-case ? Rapid rotator with peculiarities in the spectra.

CV in Montpellier in May to work with Pollux team to produce a use case.



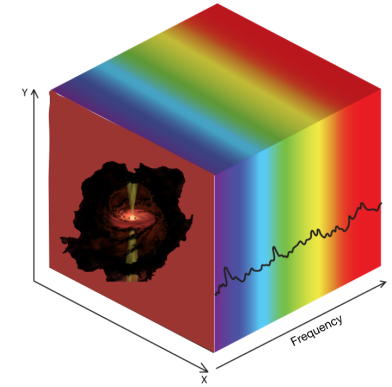


# CASSIS-ALADIN Plugin

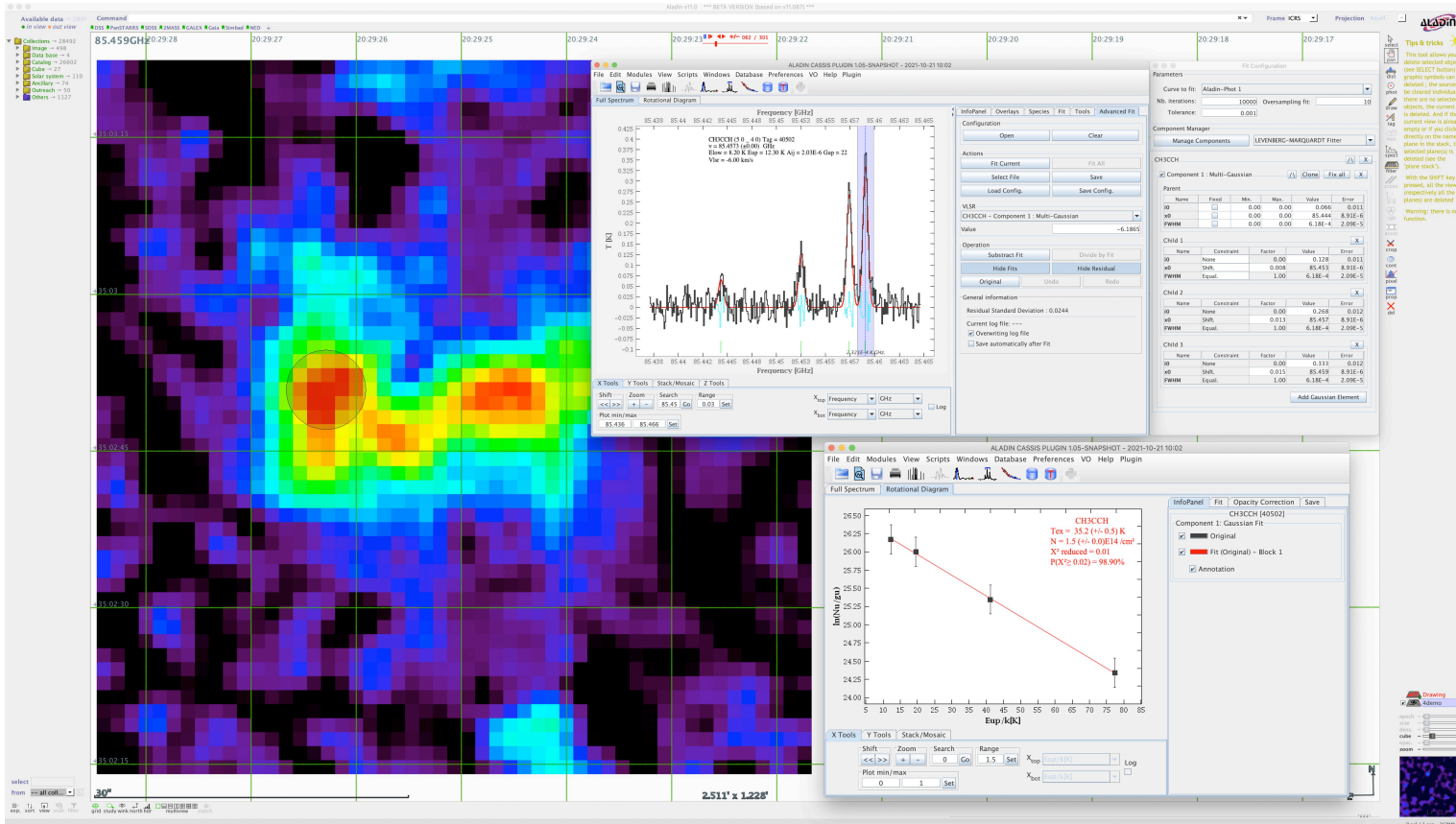


- ALADIN: visualization of datacubes
- CASSIS: analysis of spectra
- Need for an efficient analysis of spectra in ALMA /NOEMA datacubes
- Beta version on <https://aladin.u-strasbg.fr/AladinDesktop/>

Spectral datacube



ERC  
Chemtrip

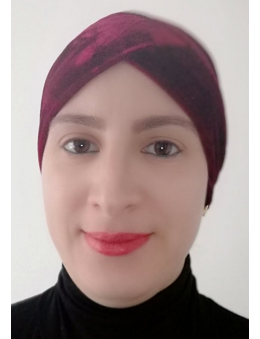




# ATOMIS (ERC Chemtrip)

- **ATOMIS:** ALMA archive TOol for Molecular Investigations in Space
- Web interface to search for data of interest in the ALMA archive using spectroscopic criteria (molecule,  $A_{ij}$ ,  $E_{up}$ , ...)
- Use of CASSIS database

Sahar Ben Hmida  
(engineer,  
ERC)



## Sources

Choose an option for Sources

- Source Names
- Source Coordinates
- Load a file for sources

Upload Source file

Browse... No file selected.

## Observation Filters

Search\_radius (")

Angular resolution (")

Spectral resolution (km.s-1)

Sensitivity (mJy beam<sup>-1</sup> per 1 km s<sup>-1</sup> channel)

## Molecular species

Molecular species

Eup Min (K)  Eup Max (K)

Aij Min (s-1)  Aij Max (s-1)

Send Request

## ALMA observations for HDO, 19002, JPL

Source name  
  Source RA  
  Source DEC  
  Source VLSR  
  ALMA source name  
 Project Code  
 RA  
 DEC  
 Separation  
 Covered Lines  
 Angular Resolution  
 Sensitivity  
 Spectral resolution  
 Max. Reco. Scale  
 Band  
 Min Frequency GHz  
 Cor. Min. Freq  
 Max Frequency GHz  
 Cor. Max. Freq  
 QA2 Passed  
 Data Rights  
 Obs Title  
 PI Name  
 Publication number  
 Bib reference  
 Proposal authors  
 Data product type  
 Access url to ALMA archive  
 Url list to download

Sensitivity range (mJy/beam)  Min: 4.4 Max: 62.6

Angular resolution (arcsec)  Min: 0.2 Max: 0.5

Validate

Show 10 entries

Search Source Name:

#	Sel	Source name	Project code	Separation (arcsec)	Covered lines	Angular Resolution (arcsec)	Sensitivity (mJy/beam per 1 km/s)	PI name	Publication number	Url list to download
1	<input type="checkbox"/>	IRAS 16293	2013.1.00061.S	3.67264	HDO (3:1:2 2:2:1), 225.89672	0.264	4.77468	Coutens, Audrey	6	List of url fits to download
2	<input type="checkbox"/>	IRAS 16293	2013.1.00061.S	3.67264	HDO (2:1:1 2:1:2), 241.56155	0.264	4.65455	Coutens, Audrey	6	List of url fits to download
5	<input type="checkbox"/>	IRAS 16293	2013.1.00061.S	6.25067	HDO (1:0:1 0:0:0), 464.92452	0.206	19.53524	Coutens, Audrey	6	List of url fits to download
6	<input type="checkbox"/>	IRAS 16293	2013.1.00061.S	1.01536	HDO (1:0:1 0:0:0), 464.92452	0.206	19.53524	Coutens, Audrey	6	List of url fits to download

Showing 1 to 4 of 4 entries (filtered from 8 total entries)

Previous 1 Next



- Intégrer / convertir des modules en python
  - Module de fit raies atomiques en absorption (Owens - PyBolt)
  - Lancement de tâches UWS (protocole IVOA pour tâches asynchrones) : projet STOP (code hors ETL “LVG-GRE”)
- Interfaçage avec de nouvelles bases de données spectroscopiques pour l’identification d’espèces chimiques :
  - Base atomique Morton, 2003, ApJ Sup 149:205-238
  - Base atomique Kentucky <https://www.pa.uky.edu/~peter/newpage/>
  - Autres bases : GEISHA, MIPAS, ExoMol, HITRAN...
- Interaction avec IPAG Grenoble pour interroger leur base de collision EMAA en cours de développement
  - TBD interaction avec new BASECOL
- Module Deep-Learning CNN pour identification automatique des raies dans un spectral survey
- Participation à la proposition d’ANR ILIT (T. Csengeri, LAB + IRAP + IRIT + IPAG)



- Déploiement :
  - Version plus simple et plus légère de CASSIS?
  - CASSIS lite sur navigateur ? (comme Aladin lite)
  - Intégrer / convertir des modules en python puis Astropy (?)
  - Intégrer / convertir des modules en Julia ?
- Affichage des erreurs sur le flux, si présentes dans les fichiers de spectres
- Prise en compte continue de nouveaux formats de spectres (HDF ?, PDS,...)
- Fourniture d'une base de données HFS, O/P et A/E ingérée automatiquement depuis CDMS
- Complétion des Partition Functions ( $T = 2.725 - 1000 \text{ K}$ ) + vibrations
- ...

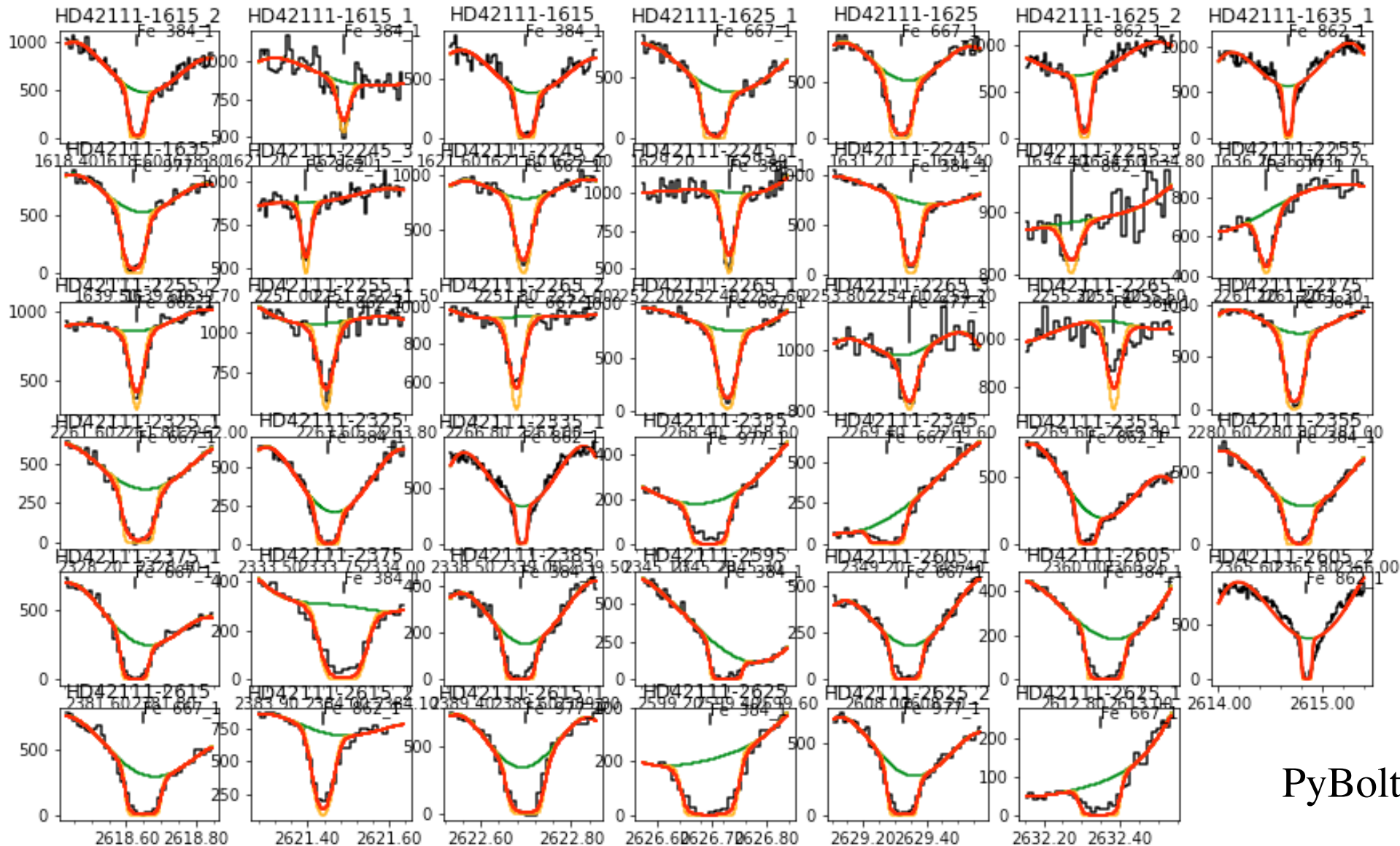


# Évolutions : du radio aux UV/X!

- A l'origine, CASSIS prévu pour les spectres FIR-(sub)mm en K  
L'ouverture vers d'autres longueurs d'ondes demande des outils supplémentaires
- JWST bientôt opérationnel, spectres et datacubes NIR à identifier et modéliser
- Optique/UV/FUV
  - largeur équivalente, “curve of growth”
  - “profile fitting” : PyBolt intégration de l'utilisation du module Fortran Owens pour la modélisation de spectres atomiques (collaboration avec C. Gry, LAM)



# Du radio/FIR aux NIR/Optical/UV/X!



PyBolt



# Link with Nautilus/KIDA

**Nahoon/Nautilus**

**CASSIS**

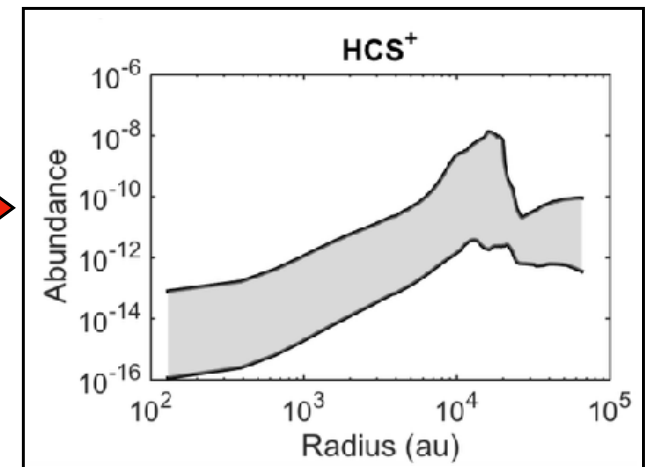
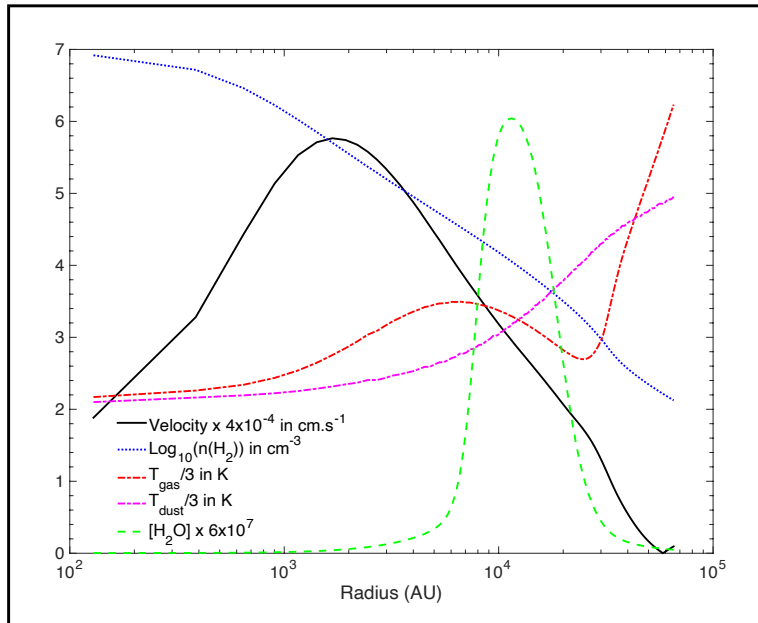
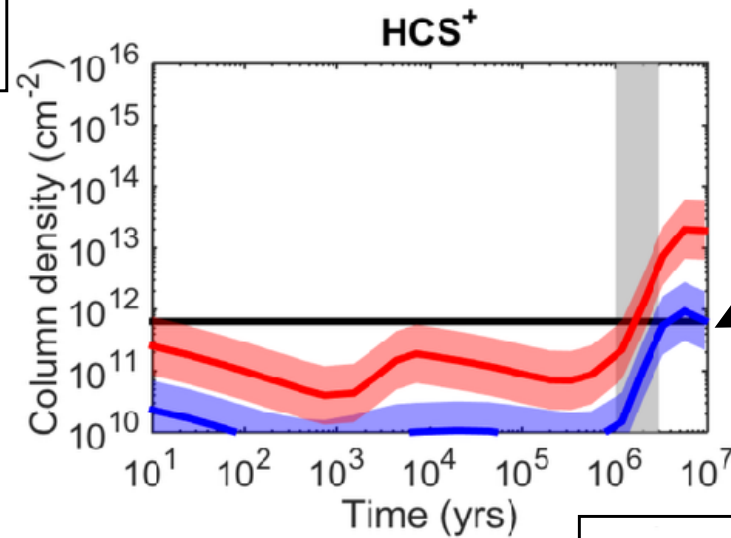
**KIDA**

abundance vs time

column densities

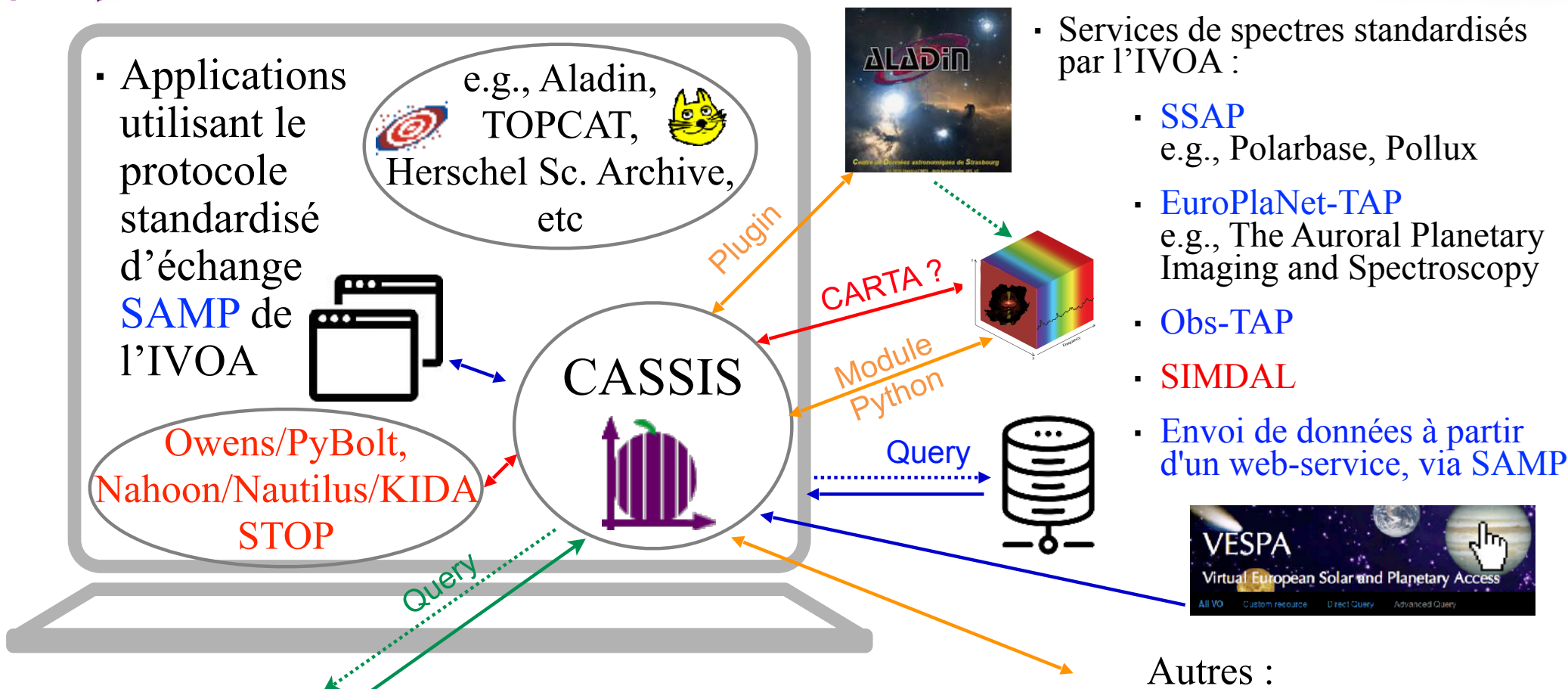
Density profile

density profile





# Help!!



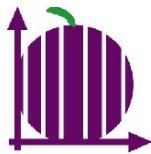
## Données spectroscopiques :

- VAMDC
- Protocole SLAP de l'IVOA e.g., SPLATALOGUE, NIST
- Plus de bases de données !

## Plus de modèles (PDR, shocks, Comets...)

- Datalink (Pollux) : manipuler les données, e.g., convolution
- Query store (VAMDC) : Obtenir des informations, e.g. citations
- UWS (Prototype STOP)
- Deep-learning CNNs et autres ?
- Artemix (LERMA)...





# Conclusions

- CASSIS de plus en plus intégré OV + couplage avec d'autres services OV-GSO
- CASSIS de plus en plus multi domaine spectral
- Besoin de personnel technique, toujours trop sous-dimensionné depuis des années, et évolution pas vraiment positive, personnel scientifique bienvenu !
  - 2022 : chercheurs ~ 1.1 ETP OK (?), ingénieurs ~ 0.6 ETP, manque 0.4 ETP !
  - 2023 : chercheurs ~ 1.1 ETP OK (??), ingénieurs ~ 0.6 ETP, manque > 0.4 ETP !
- **Réfléchir à soumettre en PI une demande européenne H2024 ?**
  - Specific Objective 2.1 : High-quality science, knowledge and innovative solutions facilitate a digital transition in Europe, including a new European approach to AI
  - Quels partenaires ?
- Questions, remarques, suggestions :

[cassis-team@irap.omp.eu](mailto:cassis-team@irap.omp.eu)



- 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/e pn/query/all/>