

Des Nouvelles de l'OVGSO

Jean-Michel Glorian & Co



Sommaire

- Actualités transverses
- CASSIS/Aladin plugin
- Avancées du projet COSMIC-PAH
- Discussion sur Python
- Participation groupe de discussion LineTAP

Actualités transverses 1/2

- Gestion RH : Beaucoup de roulements dans les RH techniques en 7 mois à cause en partie de la Covid et du télétravail
 - 3 départs
 - 1 CDD IE 3 ans
 - 1 CDD IE 2 ans
 - 1 CDD IE 7 mois
 - 2 arrivées
 - 1 CDD IE
 - 1 NOEMI IE
- Maintenance des services labellisés
 - Convergence sur les outils utilisés
 - Dachs pour faire du TAP (avec aide de PADC) utilisé au CDPP, CLIMSO (à mettre à jour), Polarbase (à venir), CADE (à venir), POLLUX (ProvTAP)
 - Utilisation de la plateforme de développement OVGSO pour Intégration et livraison continue : CASSIS, Polarbase, CADE, CLIMSO, POLLUX, STORMS

Actualités transverses 2/2

- Diverses réunions en vue d'une certification des dépôts de données de certains services
 - Besoin de réponse de la DSI OMP
 - Besoin de statuer sur les licences des données
 - Mise en place de premiers DOI au CDPP avec aide du SEDOO (Service de Données OMP)
- Utilisation des outils et services OV en augmentation
 - Téléchargements des données avec le protocole TAP plutôt que des formulaires web
 - Atelier TopCat organisé à l'IRAP par le groupe thématique GAHEC
- Développement de l'accès aux simulations
 - Initiation Hervé Wozniak (POLLUX) pour organiser un meeting sur la diffusion des données de simulations avec financement de l'ASOV
 - Prestation au CDPP pour prototyper des applications utilisant des protocoles OV (UWS, SIMDAL, ...) pour lancer et accéder à des simulations

CASSIS/Aladin plugin 1/3

- Collaboration entre les équipes
 - CASSIS pour l'interprétation de spectres
 - Aladin pour l'interprétation des cubes
- Développement d'un plugin Aladin incluant CASSIS qui gère l'interaction entre les 2 outils
- Fonctionnalités
 - Affiche les spectres correspondant aux régions sélectionnées
 - Déplacement sur le plan spectral et spatial
 - Extraction d'image à partir d'une sélection d'un intervalle spectral



CASSIS/Aladin plugin 2/3

- Présentation à la dernière réunion ADASS et IVOA :

- voir extrait de la vidéo ci apres
- Ou la vidéo entière sur le site de l'IVOA



=>Session au semi-Hack-a-Thon pour voir les outils utilisés pour ce développement.

CASSIS/Aladin 3/3 : à faire

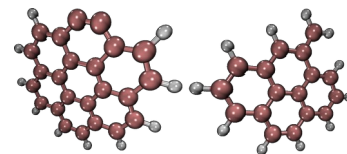
- Gestion de plusieurs cubes
- Amélioration du calcul et de l'affichage des spectres suivant les sélections des pixels et les choix des utilisateurs
- Amélioration de la gestion des actions lors de sélection/désélection dans la dimension spectrale
- ...
- Correction de bugs :-)

Avancées du projet COSMIC-PAH 1/6:Description

▪ Scientifiques

- Christine Joblin, Hassan Sabbah , Karine Demyk : IRAP
- Giacomo Mulas, (Andrea Saba) :INAF,

▪ Valorisation des outils, expériences et données liées aux molécules PAH (Polycyclic aromatic hydrocarbons)



- Portail web : <https://cosmic-pah.irap.omp.eu>

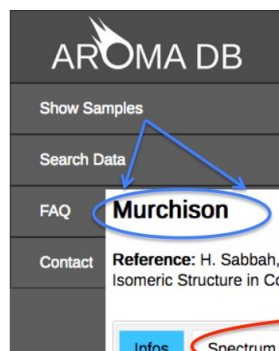
Avancées du projet COSMIC-PAH 2/6: AROMA

- Aromatic Research of Organics with Molecular Analyzer :
Plateforme d'expérience de laboratoire pour analyser des échantillons de météorites



- Outils développés
 - mMassIRAP : Mise à jour de l'application mMass vers python3 et machine 64 bits pour analyser des spectres de masse
 - Utilisation de la plate forme de développement OVGSO pour faire de la livraison continue sous Linux, Windows et Mac
 - Aroma-db : une application web pour ajouter et diffuser les résultats d'analyse des météorites
- Coté OV : VAMDC ?, TAP ?, SSAP ?

Avancées du projet COSMIC-PAH 3/6: Capture AROMA

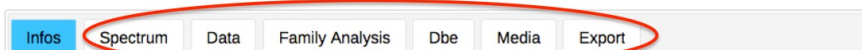


AROMA DB: Mass spectrometry

<http://aroma.irap.omp.eu/>



Reference: H. Sabbah, A. Bonnamy, D. Papanastassiou, J. Cernicharo, J.-A. Martin-Gago, C. Joblin, Identification of PAH Isomeric Structure in Cosmic Dust Analogs: The AROMA Setup. *Astrophys. J.* 843 (2017), doi:10.3847/1538-4357aa73dd



Identity

Name:	Murchison
Date:	2016-06-21
Version:	1
Operator:	Hassan Sabbah
Contact:	hassan.sabbah@irap.omp.eu
Institution:	IRAP

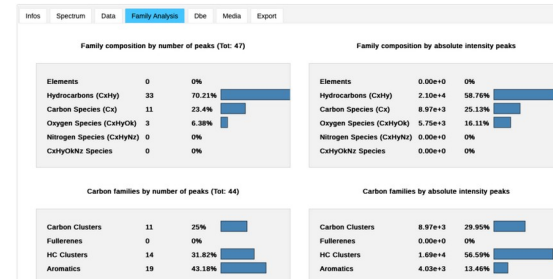
Description

Category:	meteorite
Phase:	powder
Precursors:	
Instrument:	AROMA
Preparation:	few mg of meteorite rock powdered and fixed with conductive double tape
Comments:	



Stardust_3

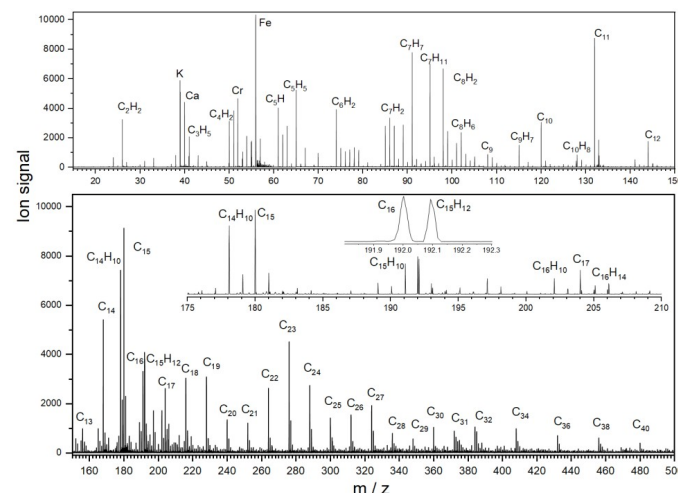
Reference: Santoro, G., Martinez, L., Lisse, K., et al. 2020, The Astrophysical Journal, 895:91, doi:10.3847/1538-4357ab0086



mMass: mass peak assignmemnt

Sabbah et al., 2021, Astrophys. J., subm

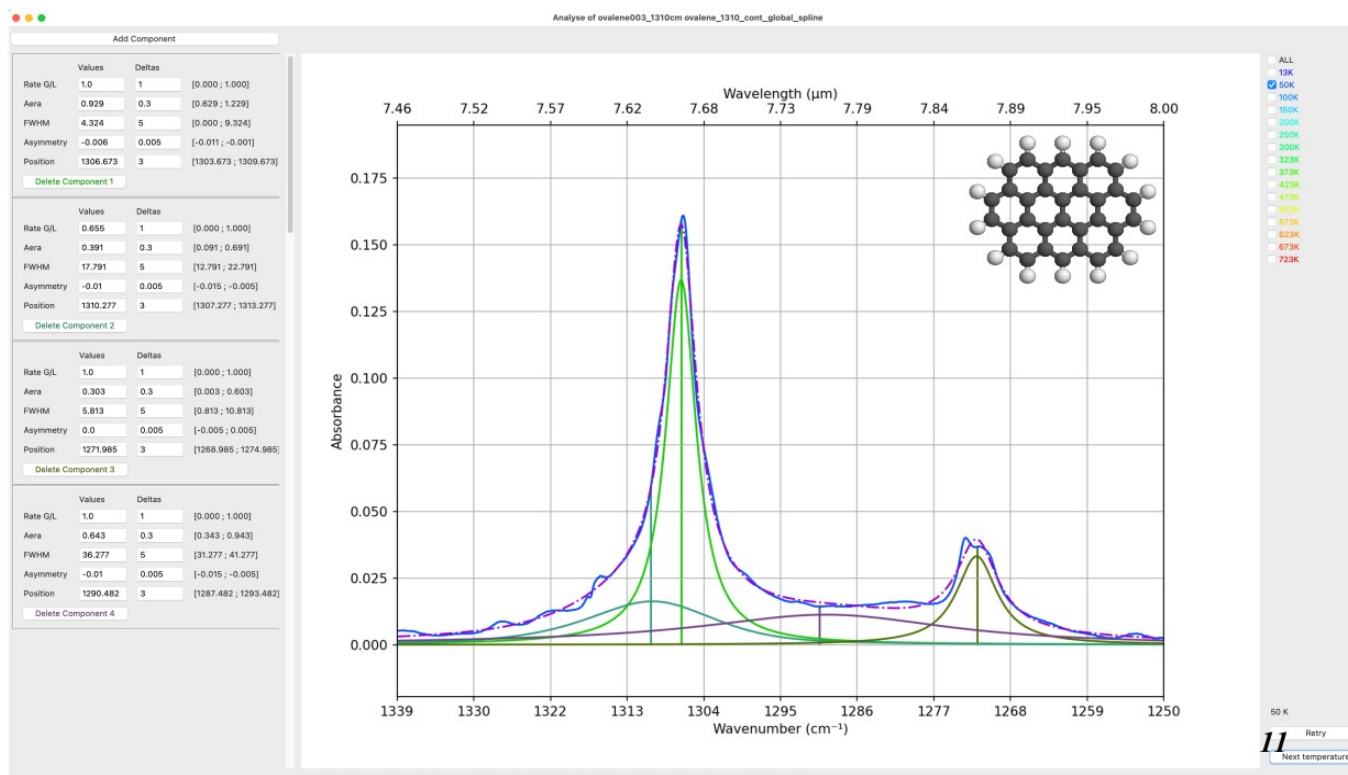
Almahata Sitta #04



Avancées du projet COSMIC-PAH 4/6 : CosmicPAHmfit

CosmicPAHmfit: multicomponent fitting tool

Python3 code
Asymmetric Gaussian + Lorentzian functions
Interactive definition of the components



Avancées du projet COSMIC-PAH 5/6

Hot PAHs IR DB: specific bands

Hot PAHs IR

Show Samples

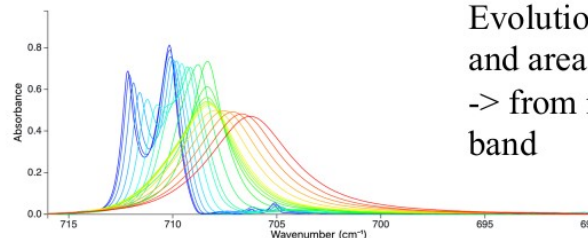
Profile

Log in

Study of mode 711 for [Pyrene](#): $C_{16}H_{10}$

Download everything:

[Pyrene \$C_{16}H_{10}\$ 711.zip](#)



Evolution of peak position, FWHM
and area with temperature
-> from multi-component fit of the
band

Method	Graph	Fit Range (K)	Empirical anharmonicity factors ($\times 10^{-3} \text{ cm}^{-1} \text{ K}^{-1}$)
Area weighted position		[150 ; 723]	-0.8
		[14 ; 150]	-0.3
Area weighted FWHM		[523 ; 723]	0.0071
Area evolution		---	---

Avancées du projet COSMIC-PAH

6/6 : autour de VAMDC

The fully relational database

- 2018: partly connected to the VAMDC portal
https://portal.vamdc.eu/vamdc_portal/home.seam



Home VAMDC databases Guided query Advanced query Saved queries | Disc

Choose a request type (reset page)

☒ By species
☐ For radiative process
☐ For collisional process

Please, enter the number of species you wish to query

Number of atoms: 0
Number of molecules: 1
Number of particles: 0

Validate Add more

Molecule Clear Remove form

Chemical name: Anthracene
Stoichiometric formula: C₁₄H₁₀
Structural formula:
Spin isomer:
Standard InChIKey: MWPLVEDNUUSJAV-UHFFFAOYSA-N, KFWDVKECJXOXHD-UHFFFAOYSA-N, YFCBZPWBTLMEG-UHFFFAOYSA-N, DEMJEXJOUZYCMJ-UHFFFAOYSA-N

Anthracene

Name	Response	Last database update	Download	Species	States
KIDA: Kinetic Database for Astrochemistry - TAP service	OK	Not available	XSAMS file	6	0
Photodissociation - MolD database	OK	Not available	XSAMS file	0	0
Theoretical spectral database of polycyclic aromatic hydrocarbons	OK	Not available	XSAMS file	4	66
VAMDC species-DB	OK	Not available	XSAMS file	4	0

To be done:

- Develop tools for automatic (supervised) data ingestion (import from QChem codes)

<https://qchitool-pah-dev.oa-cagliari.inaf.it/>

- Implement the new database at astropah-qcalcs.oa-cagliari.inaf.it and astropah-qcalcs.irap.omp.eu

Discussion Python

- Demande INSU pour remplacer l'application **IDL Dustem Wrapper** en langage **open source**
 - Demande du Pôle Thématique National MIS (diffusion des modèles de référence pour la matière interstellaire pour passer ce code en **Python** )
 - Contact avec Alain Coulais, un des développeurs de **GDL** pour le rendre compatible le code avec celui-ci
- => Faut il passer en code en python ?

Participation groupe de discussion LineTAP

- Groupe avec Markus Demleitner, Margarida Pinheiro de Castro Neves, Nicolas Moreau, Carlo Maria Zwolf, Charlotte Vastel et Jean-Michel Glorian
- Idée de partir du modèle de données de VAMDC en le simplifiant et d'utiliser le protocole d'accès TAP
- Discussion sur les paramètres minimum a demandé
- Par exemple, faut il demandé les 3 paramètres A_{ij} , other prefer oscillator strength or line strength ?
- Besoin d'avoir plus de retour notamment de la part de spectroscopistes
- <https://github.com/mmpcn/slapvamdc/wiki//LINETAP-Questions>

Liens

- OVGSO-DC
<https://ov-gso.irap.omp.eu>
- CASSIS
<http://cassis.irap.omp.eu>
- Dustem Wrapper
<http://dustemwrap.irap.omp.eu/>
- Aladin
<https://aladin.u-strasbg.fr>
- VAMDC
<http://portal.vamdc.org>
- COSMIC-PAH
<https://cosmic-pah.irap.omp.eu>
- AROMA-DB
<https://aroma.irap.omp.eu/>
- LineTAP group
<https://github.com/mmpcn/slapvamdc/>