

Evolution de VAMDCen fonction des retours utilisateurs : Le formatHITRAN

N.Moreau¹, C. Richard²

¹ LERMA - Observatoire de Paris

² ICQ - Univ. Bourgogne Franche-Comté

Le format XSAMS

- VAMDC : e-infrastructure pour interrogation de bases de données atomiques et moléculaires
- Utilisation d'un middleware commun installé au dessus de chaque base
- Utilisation d'un data model commun pour le langage d'interrogation et le format des données : XSAMS
- XML schema décrivant finement un grand nombre de phénomènes physiques
- Avantage : description très précise des données
- Inconvénient : difficulté à parser les résultats

Le format XSAMS

- VAMDC fournit des outils pour parser XSAMS (bibliothèques java, python)
- Il est nécessaire de bien connaître le schéma
- Point bloquant : les utilisateurs des données sont des scientifiques qui ne vont pas coder pour accéder à des données
- Ils continuent à utiliser les interfaces natives des bases et leurs sorties standards
- Formats texte adaptés à la lecture par des codes Fortran (lignes de 80 caractères)

Ex : CDMS, JPL, Hitran

Exemple HITRAN (16O)³

- Compilation de paramètres spectroscopiques pour la prédiction et la simulation de l'émission et de la transmission de la lumière dans l'atmosphère
- Utilisée pour l'étude des atmosphères planétaires

Format for HITRAN Parameters, Editions after 2001																			
Parameter	Molecule number	Isotopologue number	Transition wavenumber (cm ⁻¹)	Line intensity	Einstein A-coefficient	Air-broadened width	Self-broadened width	lower-state Energy	Temperature dependence (of air width)	Pressure shift	upper vibrational quanta	lower vibrational quanta	upper local quanta	lower local quanta	Error codes	Reference codes	Flag for line-mixing	upper statistical weight	lower statistical weight
Field Length	2	1	12	10	10	5	5	10	4	8	15	15	15	15	6	12	1	7	7
Data type	Integer	Integer	Real	Real	Real	Real	Real	Real	Real	Real	Text	Text	Text	Text	Integer	Integer	Text	Real	Real

31	5000.090000	2.386E-26	1.304E-03.07000.089	874.91960.850.000000					2 0 3	0 0 0 42 5 38			43 5 39		0055502433	5 2 3 0		85.0	87.0
31	5000.614500	2.022E-26	1.431E-03.07040.083	907.63970.820.000000					2 0 3	0 0 0 38 9 30			39 9 31		0055502433	5 2 3 0		77.0	79.0
31	5000.888400	2.410E-26	1.332E-03.07010.088	872.22300.850.000000					2 0 3	0 0 0 41 6 35			42 6 36		0055502433	5 2 3 0		83.0	85.0
31	5000.845700	2.381E-26	1.157E-03.06990.091	855.49870.860.000000					2 0 3	0 0 0 43 2 41			44 2 42		0055502433	5 2 3 0		87.0	89.0
31	5001.028400	2.217E-26	1.394E-03.07030.085	880.64850.830.000000					2 0 3	0 0 0 39 8 31			40 8 32		0055502433	5 2 3 0		79.0	81.0
31	5001.086600	2.357E-26	1.365E-03.07020.087	876.77070.840.000000					2 0 3	0 0 0 40 7 34			41 7 35		0055502433	5 2 3 0		81.0	83.0
31	5001.402500	2.678E-26	1.278E-03.07000.090	846.83320.850.000000					2 0 3	0 0 0 42 4 39			43 4 40		0055502433	5 2 3 0		85.0	87.0
31	5001.432500	2.487E-26	1.063E-03.06860.091	820.99160.860.000000					2 0 3	0 0 0 43 1 42			44 1 43		0055502433	5 2 3 0		87.0	89.0
31	5002.157300	2.007E-26	1.456E-03.07070.082	901.73790.810.000000					2 0 3	0 0 0 36 10 27			37 10 28		0055502433	5 2 3 0		73.0	75.0
31	5002.405400	2.961E-26	1.246E-03.07000.091	820.92770.850.000000					2 0 3	0 0 0 42 3 40			43 3 41		0055502433	5 2 3 0		85.0	87.0
31	5002.783200	2.768E-26	1.305E-03.07010.089	839.33290.850.000000					2 0 3	0 0 0 41 5 36			42 5 37		0055502433	5 2 3 0		83.0	85.0

Une solution : convertir les données

- Utilisation de web services pour la conversion des données
- En entrée : 1 fichier XSAMS
- En sortie : un fichier HTML, XML, CSV ...
- Définition d'une interface standard
(<http://www.vamdc.eu/documents/standards/dataConsumerProtocol>)
- Chaque service est une VOResource
- Enregistré dans le registry
- Chaque node peut lister les transformations compatibles avec les données qu'il contient

Exemple de déclaration d'interface

```
<capability standardID="ivo://vamdc/std/VAMDC-TAP" xsi:type="tx:VamdcTap">
  <interface xsi:type="vs:ParamHTTP">
    <accessURL use="base">http://vald.astro.uu.se/atoms-12.07/tap/</accessURL>
  </interface>
  <versionOfStandards>12.07</versionOfStandards>
  <versionOfSoftware>12.07r1-rc</versionOfSoftware>
  <sampleQuery>SELECT ALL WHERE AtomSymbol = 'U'</sampleQuery>
  <returnable>AtomNuclearCharge</returnable>
  <returnable>AtomSymbol</returnable>
  ...
  <application>ivo://vamdc/atomicxsams2html</application>
  <application>ivo://vamdc/xsams-mux</application>
  <application>ivo://vamdc/xsams2sme</application>
  <application>ivo://vamdc/XSAMS-bibtex</application>
  <application>ivo://vamdc/xsams-views</application>
</capability>
```

**Transformations
applicables**

Exemple : Sortie HITRAN

- Base de référence pour la spectroscopie
- Format reconnu et très utilisé, demandé régulièrement
- Implémentation par Cyril Richard d'une librairie java de conversion XSAMS→ Hitran
- Principales difficultés :
 - conversion des noms des molécules de VAMDC (InchiKey) vers format HITRAN (numérique)
 - extraire les valeurs des nombres quantiques
- Outil intégré au portail VAMDC pour faire la transformation en ligne

<http://portal.vamdc.eu>

Plot

- Autre demande des utilisateurs : visualisation du contenu des fichiers

Prérequis :

- affichage de fichiers contenant jusqu'à 10 000 transitions
 - possibilité de comparer le contenu de 2 fichiers différents
- Implémentation à travers une page web : <http://vamdc.eu/hitrans-display>
 - Utilisation de la librairie javascript HighCharts
 - Choix test de diverses librairies (plotly, chartjs, flot) :
 - supporte le mieux l'affichage de fichiers avec beaucoup de points