



HAL
open science

Étude des biais observationnels induits par le caractère tridimensionnel des atmosphères d'exoplanètes

Anthony Caldas

► **To cite this version:**

Anthony Caldas. Étude des biais observationnels induits par le caractère tridimensionnel des atmosphères d'exoplanètes. Astrophysique [astro-ph]. Université de Bordeaux, 2018. Français. NNT : 2018BORD0439 . tel-02090554

HAL Id: tel-02090554

<https://theses.hal.science/tel-02090554>

Submitted on 4 Apr 2019

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ DE BORDEAUX

THÈSE

présentée le 17 Décembre 2018 pour obtenir le grade de

**Docteur en Physique
de l'Université de Bordeaux
Spécialité : Astrophysique**

par Anthony CALDAS

**Étude des biais observationnels
induits par le caractère tridimensionnel
des atmosphères d'exoplanètes**

Membres du jury :

M. Jean-Marc HURÉ	Président
Mme. Magali DELEUIL	Rapporteuse
Mme. Giovanna TINETTI	Rapporteuse
Mme. Sandrine GUERLET	Examinatrice
M. Pascal BORDÉ	Directeur de thèse
M. Jérémy LECONTE	Encadrant de thèse

Thèse préparée au sein du
Laboratoire d'Astrophysique de Bordeaux
Université de Bordeaux, CNRS

Contents

1	Introduction	5
2	Simulation d'observables à partir de modèles atmosphériques 3D	9
2.1	La détection atmosphérique en transmission, chaîne observationnelle et la place de Pytmosph3R	12
2.1.1	Des astres trop éloignés de nous, la solution de la simulation	12
2.1.2	Les hypothèses limitantes du traitement du signal dans la caractérisation des exoplanètes	13
2.1.3	Utilisation des simulations atmosphériques comme terrain d'étude	14
2.1.4	Méthodes de génération des observables et parti pris de Pytmosph3R	14
2.2	Exploitation des données d'une simulation atmosphérique 3D et restructuration dans la géométrie adaptée	17
2.2.1	D'une simulation 1D à une simulation 3D	17
	Expression de la profondeur optique et de l'aire opaque d'une exoplanète et de son atmosphère	17
	Calcul des profondeurs optiques à hauteur d'échelle constante au sein des couches	19
	Calcul des profondeurs optiques en tenant compte de l'évolution de la gravité au sein des couches	20
	Calcul des profondeurs optiques en tenant compte de l'évolution de tous les paramètres	20
2.2.2	Refonte des sorties d'une simulation GCM et création du maillage cylindrique	21
	Passage d'une grille sphérique en pression à une grille sphérique en altitude	21
	Construction de la grille sphérique régulière de référence	24
2.2.3	Maillage cylindrique semi-régulier	26
2.2.4	Structure de la grille sphérique de référence et modes de tirage	28
	Structure de la grille atmosphérique de référence	28
	Les rayons peuvent être tirés comme nous le souhaitons	28
2.2.5	Correspondances entre les coordonnées de la maille cylindrique et de la grille sphérique de référence	29
	Dans le cas particulier sans inclinaison, rotation, obliquité et à la conjonction	29
2.2.6	Correspondances dans le cas le plus général	30
	Détermination des coordonnées de l'observateur avec rotation, inclinaison et/ou obliquité	30

	Équations de correspondance dans le cas général par changement de repère . . .	32
	Calculs des distances parcourues au sein des sous-parcours	33
2.3	Résolution du transfert radiatif au sein de la maille cylindrique	35
2.3.1	Méthodes de calcul des profondeurs optiques	36
	Méthode discrète du calcul des profondeurs optiques	36
	Méthode semi-intégrale du calcul des profondeurs optiques	36
2.3.2	Optimisation du calcul des opacités d'un point de vue technique	38
2.3.3	Absorption moléculaire, propriétés optiques des atomes et molécules	38
	Base de donnée des sections efficaces, ExoMol	39
	Base de donnée des coefficients en k-distributions	39
	Expression de la profondeur optique moléculaire	40
2.3.4	Absorption continuum, collisions entre molécules	41
	Calculs des coefficients d'absorption	41
	Expression de la profondeur optique continuum	42
2.3.5	La diffusion Rayleigh	43
	La diffusion Rayleigh comme une absorption	43
	Calcul des sections efficaces de diffusion Rayleigh	44
	Expression de la profondeur optique de diffusion Rayleigh	46
2.3.6	La diffusion de Mie pour les aérosols	47
	Expression de la profondeur optique de diffusion Rayleigh	47
2.4	Génération des spectres en transmission	48
2.4.1	Cartes de transmittance	48
2.4.2	Intensité lumineuse uniforme	49
	Méthode des aires, utilisée par Pytmosph3R par défaut	49
	Par intégration, approche utilisée par Tau-REx	51
	Méthodes numériques, autre méthode rencontrée dans des générateurs de spectre 1D	52
2.4.3	Intensité lumineuse non uniforme	52
	Assombrissement centre-bord et déplacement de l'exoplanète	52
2.5	Opportunités offertes par Pytmosph3R et améliorations à venir	56
2.5.1	Les autres applications possibles de la carte de transmittance	56
	Des hétérogénéités stellaires, granulations dans la distribution en luminosité . . .	56
	Génération de courbes de lumière	57
2.5.2	Utilisation des intermédiaires de calcul dans l'étude des simulations et l'interprétation des spectres	58
2.5.3	Pour aller plus loin, les améliorations à venir	59
	Réfraction et diffusion multiple dans le code ?	59
	Emission planétaire et atmosphérique, couplage avec des courbes de phase . . .	59
	Dynamico comme alternative du GCM	59
	Discussion sur l'implémentation des reliefs	60

3	Validation du générateur de spectres et discussions	63
3.1	Validation des calculs de profondeurs optiques et du générateur de spectre	65
3.1.1	Profondeur optique le long de la ligne visée en fonction de la profondeur optique verticale	66
	Méthode de validation des calculs de profondeurs optiques	67
3.2	Domaine de compatibilité lié à la géométrie de Pytmosp3R, impact du profil vertical	69
3.2.1	Méthode de calcul des profils de Tau-REx	69
3.2.2	Adaptation entre Pytmosp3R et Tau-REx	71
	Configurations des deux algorithmes	71
	Des différences qui dépendent du nombre de couches	73
	Interprétation des différences constatées	74
3.2.3	Effets systématiques entre Tau-REx et la version par défaut de Pytmosp3R	74
3.2.4	Validation azimutale, les aspects tridimensionnels	76
3.3	Validation de la génération des sections efficaces	77
3.3.1	Interpolation de l'absorption moléculaire	78
3.3.2	Vérification de la diffusion Rayleigh et du continuum	78
3.3.3	Cas particulier de la diffusion de Mie	78
3.4	Validation globale de Pytmosp3R	79
3.4.1	Contrainte des performances de l'algorithme	79
3.4.2	En résumé sur l'environnement propice à l'utilisation de la chaîne observationnelle	80
3.5	Quelques discussions d'importance	84
3.5.1	Discrétisation ou intégration du chemin optique en densité, quand l'utiliser ?	84
3.5.2	Produire une simulation GCM permettant une étude de qualité	86
4	Mise en évidence des biais observationnels liés aux hétérogénéités atmosphériques	91
4.1	GJ 1214 b comme objet d'étude	93
4.1.1	L'exoplanète GJ 1214 b	93
4.1.2	Les hétérogénéités de températures et de compositions d'une simulation de GJ 1214 b	94
4.2	Effets des hétérogénéités sur les spectres en transmission	99
4.2.1	Techniques classiques de génération de spectre	100
	Spectre 1D à partir d'un profil moyen du terminateur	100
	Moyenne des spectres 1D obtenus pour chaque colonne du terminateur	103
4.2.2	Effets azimutaux et tangentiels pour le CO ₂ et NH ₃	105
4.2.3	Effets tangentiels des aérosols	106
4.3	Résultats de l'inversion de la simulation de GJ 1214 b	107
4.3.1	Paramétrisation de Tau-REx	108
4.3.2	Interprétation des spectres et des distributions <i>a posteriori</i>	109
	Spectre solution et spectre d'entrée, comparaisons et prédictions	109
	Commentaires généraux sur les distributions <i>a posteriori</i>	112
4.3.3	Equivalent 1D, isotherme et homogène d'une simulation 3D	114

4.3.4	Température globale et température moléculaire	118
4.3.5	Quelques remarques	120
4.4	Influence de la méthode de génération de spectre et de la paramétrisation de Tau-REx sur l'inversion	120
4.4.1	Impact de la paramétrisation de Tau-REx sur la contrainte des paramètres libres	120
	Effets du changement de gamme spectrale	121
	Inversion en fixant l'abondance en espèce inactive, N ₂	125
4.4.2	Un effet d'hétérogénéités tangentielle en composition sur l'inversion	126
5	Etude de l'impact des hétérogénéités de nature thermique sur les observations et leurs inversions	133
5.1	Isolation des effets thermiques tangentiels dans les atmosphères d'exoplanètes	135
5.1.1	Discussions sur les hétérogénéités tangentielles	135
	Les biais induits par les différents types d'hétérogénéités	135
	Les angles d'ouverture et de pénétration comme indicateurs de l'expression des effets tangentiels	137
	Dans la simulation de GJ 1214 b les hétérogénéités tangentielles ne s'expriment pas (ou peu)	138
5.1.2	Structure des atmosphères synthétiques	140
	Les atmosphères aux colonnes isothermes	140
	Les atmosphères aux colonnes à deux températures	145
5.1.3	Paramétrisation de Tau-REx	145
	Système de paramètres et distributions <i>a priori</i>	145
	Discussion sur le choix des données moléculaires	149
	Calcul du bruit et des barres d'erreur associés aux spectres d'entrée	150
5.2	Impact sur les spectres en transmission	151
5.2.1	Cas de la mini-Neptune	151
	Les spectres en transmission et leurs différences	151
	Des spectres qui convergent au-delà d'un angle de convergence	151
	Effets directs de la couche isotherme sur les spectres	154
	Effets indirects de la couche isotherme sur les spectres	154
5.2.2	Cas de la géante gazeuse	155
5.3	Impact sur le retrieval	159
5.3.1	Critère de vraisemblance et remarques associées	159
5.3.2	Atmosphères à colonnes isothermes	162
	Une moitié d'atmosphère et compensations entre paramètres libres	162
	Evolution des distributions <i>a posteriori</i> avec l'angle de contraste et convergence	164
	Persistance des biais thermiques en fonction des paramètres planétaires et atmosphériques	166
	Conclusions sur les biais thermiques en l'absence d'hétérogénéités verticales	168
5.3.3	Atmosphères à deux températures	168

	Effets indirects de la couche isotherme sur les distributions <i>a posteriori</i>	170
	Effets directs de la couche isotherme, interaction avec des biais verticaux	171
	Conclusions sur les biais thermiques en présence d'hétérogénéités verticales	172
5.3.4	Approche analytique en soutien de nos conclusions	173
	Cas champignons, en l'absence de pollution directe par la couche isotherme	173
	Cas champignons, en présence de pollution directe par la couche isotherme	176
5.3.5	Impact de la résolution et du mode de fonctionnement de Tau-REx	176
	Inversion à la résolution et dans la gamme spectrale du JWST	177
	Inversion par un autre mode de fonctionnement	180
5.4	Retour sur la simulation 3D de GJ 1214 b, des biais thermiques dissimulés	182
5.4.1	Discussion sur les structures atmosphériques les plus représentatives	183
5.4.2	Des biais thermiques amoindris par les hétérogénéités de composition	184
5.4.3	Des biais thermiques qui se compensent par les effets azimutaux	185
	Un hémisphère Ouest beaucoup plus chaud	186
	Un hémisphère Est beaucoup plus froid	188
6	Conclusions et Perspectives	195
6.1	Que retenir de l'étude des biais observationnels induits par le caractère tridimensionnel des atmosphères d'exoplanètes	196
6.1.1	Mise en évidence de la signature de biais verticaux et tangentiels lors d'une ob- servation	196
6.1.2	Caractérisation des biais thermiques d'origines tangentielles	196
6.1.3	Un schéma scientifique complet et un guide pour la suite des événements	198
6.2	Perspectives	198
A	Angles d'ouverture et angles de pénétration	201
A.1	Angle d'ouverture ψ_o	201
A.2	Angles de pénétration ψ_p	203
A.3	Description de la figure Figure A.2	204
A.4	Application à une simulation atmosphérique 3D hétérogène	206
B	Interprétation des angles de pénétration dans la simulation de GJ 1214 b	209
B.1	Des valeurs cohérentes avec l'étude homogène	209
B.2	Des hétérogénéités en composition qui renforcent les effets de la dissymétrie thermique	212
B.2.1	CO ₂ à 4,28 μm	212
B.2.2	CO ₂ mixé à d'autres molécules, 2,7 - 2,9 μm et 2,02 μm	214
B.3	Les hétérogénéités compositionnelles dominent les effets thermiques	214
B.3.1	CH ₄ aux multiples hétérogénéités	216
B.3.2	Les compétitions moléculaires du méthane avec	216
	... le dioxyde de carbone	216
	... l'ammoniac	217

C	Angles de pénétration des atmosphères synthétiques	221
D	Calcul analytique des profondeurs optiques pour des exoplanètes à gradient de température	
	Jour/Nuit	235
D.1	Atmosphère à deux températures, cas champignon	235
D.1.1	$z_t > z_{T_i}$	236
D.1.2	$z_t < z_{T_i}$	237
D.1.3	Illustration avec les atmosphères champignons de Chapitre 5	237
E	Article et collaborations ayant fait l'objet d'une publication	241
	Bibliography	271

Remerciements

Tout d'abord, je tiens à remercier tout particulièrement mes directeurs de thèse, Pascal Bordé et Franck Selsis, et mon encadrant Jérémy Leconte. Dès mon arrivée au sein du laboratoire lors de mon stage de M2, vous avez eu confiance en moi et en mes qualités de travail et vous avez eu à coeur d'essayer d'en prendre pleinement conscience. Non sans mal il faut le dire. Vous m'avez confié ce projet ambitieux et j'ai joui d'une souplesse dans mon organisation de travail, une liberté dans mes actions scientifiques, d'une disponibilité et surtout d'une expertise sans pareilles que bien des doctorants rêveraient d'avoir. Ces trois années n'auront pas été un long fleuve tranquille, mais je dois ma réussite en grande partie au choix humain que j'ai fait lorsque j'ai postulé à votre projet de thèse. Sachez que durant tout ce temps, vous avez été, chacun à votre manière, une source d'inspiration que ce soit scientifique ou humaine. Un grand merci qui vient sincèrement du fond du coeur.

Je remercie également les membres de mon jury, déjà pour avoir accepté de participer à la consécration de ce travail de thèse, pour avoir fait le déplacement pour la soutenance, mais aussi pour l'ensemble des commentaires qu'ils ont formulé, positifs comme plus contrastés, à l'écrit comme à l'oral. Merci à Giovanna Tinetti et Magalie Deleuil d'avoir rapporté mon manuscrit et pour les très chaleureux avis qu'elles ont fait part et peut-être surtout pour avoir eu la patience de lire les 250 pages de cet ouvrage qui, comme diraient mes directeurs de thèse, peut parfois me demander beaucoup (trop) de mots pour exprimer les choses. Merci à Sandrine Guerlet et Jean-Marc Huré d'avoir participé à cette aventure.

Je remercie très chaleureusement Ingo Waldmann et Marco Rochetto de *l'University College London* avec qui j'ai collaboré sur le traitement du signal et qui m'ont permis de prendre en main le code qu'ils ont mis au point (Tau-REx). Merci pour nos échanges, le temps que vous nous avez consacré et l'ensemble de vos contributions. Je regrette encore aujourd'hui de ne pas m'être organisé pour vous rendre visite à Londres et présenter le fruit de notre collaboration.

Parmi mes collaborateurs, je remercie Andréa Chiavassa du Laboratoire d'Astrophysique de Nice pour le travail que nous avons réalisé sur les effets stellaires lors de la détection exoplanétaire en transit et pour avoir inspiré une partie des fonctionnalités de mon code. Un grand merci à Pierre Gay du Mésocentre de Calcul Aquitain pour ses conseils et son expertise sur l'optimisation des calculs scientifiques sous python et pour son aide lors de l'utilisation de la machine de calcul Avacast. Les performances actuelles de Pytmosph3R ainsi que, de manière plus indirecte, le caractère extrême de sa validation doivent énormément à cette collaboration, .

Merci aux membres de l'équipe ECLIPSE, anciens comme actuels. Arnaud Pierens pour nos échanges sur les systèmes binaires et ses interventions en réunion d'équipe éclairantes, Sean Raymond pour sa gentillesse et pour avoir pensé à moi comme première partie à Pint of Science, ce qui a attiré l'attention de plusieurs associations et qui a mené à plusieurs interventions extérieures. Muriel Gargaud et le RED édition 2016 qui fut une superbe expérience et merci à Franck Hersant pour sa bienveillance à mon égard (parfois ce sont les petites phrases pleines de bons sentiments et totalement inattendues qui

aident le plus à éclairer le noir que l'on peut broyer en solitaire).

Je tiens à remercier Annick Caperan, Cécile Arnaudin et Nathalie Le Roux pour votre bonne humeur à toute épreuve, en particulier avec l'ourson de l'administratif que je peux être. Merci pour votre ouverture d'esprit, votre aide, votre réactivité et les moments de folie pour certaines. Une petite mention spéciale pour toi Nathalie qui est un vrai petit rayon de Soleil et qui m'a fait sourire tellement de fois.

Le travail de thèse est parfois ingrat et on peut se sentir bien seul, voire s'isoler un peu, presque convaincu que tous les doutes qui nous tourmentent sont partagés par nos collègues. On ne m'aura pas beaucoup vu pendant ces trois années et j'ai pu sembler sauvage, mais grâce à quelques personnes, je n'ai pas eu l'impression de vivre cette expérience dans un bureau perdu au fin-fond du sous-sol du bâtiment et dont personne n'aurait eu connaissance. C'est notamment pour cela que je ne peux pas commencer à exposer mon travail de thèse sans remercier toutes ces personnes sans qui m'ont, chacun à leur manière, donné la force d'aller au bout de ce projet.

Tout d'abord Raël Delage qui a été une réelle tornade lors de son arrivée au laboratoire pour son stage de M2. Bien plus qu'un colocataire de bureau, il a réussi à sortir de sa grotte le ronchon que j'étais à son arrivée. Merci pour tous ces moments inoubliables et ces répliques bien cinglantes qui me font encore rire au quotidien. Tout cela n'aurait également pas eu le même goût sans la présence de Salomé Mignard. Tu auras été l'épaule, la confidente, la folie, la joie et l'espoir qui m'aura à maintes reprises remis sur les rails et m'aura aidé à relativiser. À vous deux je vous adresse un énorme "merci" qui n'est qu'une pâle expression de toute mon affection et de ma reconnaissance.

Et si le départ de l'un a été une réelle déchirure, j'ai pu compter sur le soutien et la générosité du digne successeur de colocation. Cette dernière année de thèse m'aura permis de rencontrer cette personne que je respecte et que j'apprécie profondément, William Pluriel. Si nos débuts ont été difficiles, je pense qu'on gardera le souvenir de nos grands débats animés, de nos fous rires sur des références communes, nos séances Miss Fortune, et tout ce qu'on a pu s'apporter l'un à l'autre d'un point de vue professionnel. Un bel humain et un bel esprit, reste comme tu es.

Je remercie toutes les personnes qui m'ont soutenu ou aidé dans cette oeuvre. Bien sûr ma famille, mes parents et ma soeur qui ont toujours cru en moi et qui ont traversé la France en voiture pour assister à ma soutenance. Mes tantes, oncles et grands-parents qui ont tous pensé à m'envoyer des encouragements, et à mes amis. Rémi qui a toujours répondu présent et qui s'est porté volontaire pour lire mon manuscrit. Aléxis qui m'a irradié de son optimisme et qui a véritablement relancé l'écriture du manuscrit, Sébastien qui a lu et relu mes chapitres pour me donner son avis, ses commentaires, ses corrections et ses conseils avisés (vraiment, mille merci !). Olivier, Ju, Federico, les Kévins et Sophie d'être venus pour assister à ma soutenance. Robin, cousin et ex-colocataire avec qui j'ai passé une première année mémorable. Et Jérémy avec qui ce projet a été initialement construit. J'adresse un remerciement un peu particulier à la famille Portier pour nous avoir accueillis la veille de la soutenance et nous avoir donné un vrai coup de main pour la confection du buffet.

Un pari est un pari, je remercie *Riot Games* et *Niantic* pour respectivement *League of Legends* et *Pokemon Go* qui m'ont permis de décompresser et de m'extraire à bien des reprises de mon travail. J'en profite pour remercier tous mes amis *geeks* avec qui j'ai pu décrocher avant de reprendre de plus belle.

Les résultats les plus importants et les plus motivant de ma thèse, reconnus par mes confrères, ne sont arrivés que très tardivement, au-delà même de la durée initiale de 3 ans. Je dois remercier à nouveau

mes directeurs de thèse d'avoir eu foi en moi et d'avoir tout fait pour qu'un prolongement soit possible et constructif. Mais je n'aurais pas pu aller au bout de mes propres exigences et ni même croire y arriver si mon compagnon n'était pas entré dans ma vie. Si l'oeuvre que vous vous apprêtez à lire vous semble de qualité ainsi que les résultats exposés, c'est en très grande partie grâce à tout le bien que cette rencontre a pu me faire. Sa confiance absolue, son admiration, sa patience, son enthousiasme, son énergie, son amour ... je souhaite à tout doctorat d'avoir à ses côtés quelqu'un capable de partager comme il l'a fait, plus ou moins consciemment, le fardeau que peut représenter la fin de thèse. À Benjamin je déclare mon amour par le biais de ce manuscrit de thèse.

Enfin, je dédie ce travail à ma grand-mère Maria Conceçao Charro Caldas que j'aimais tellement et qui nous a quittés au milieu de la thèse. Ses derniers mots à mon intention : "Fièrre. Força !".

Chapter 1

Introduction

"Parmi les thèmes en plein essor de l'astronomie contemporaine, la recherche de planètes extrasolaires soulève un enthousiasme qui dépasse largement la communauté des astrophysiciens". Vingt-trois ans après l'annonce de la première d'entre elles gravitant autour d'une étoile solaire (Mayor and Queloz 1995), plus de 4000 exoplanètes ont été découvertes. Au fil des années, la technologie et les méthodes de détection se sont affinées, permettant dans un premier temps à la spectrométrie et à la méthode des vitesses radiales d'atteindre les masses et les paramètres orbitaux de ces astres. Cette phase de détection connaît ensuite un succès des plus retentissant avec l'émergence de la méthode des transits et le lancement des télescopes spatiaux CoRoT et Kepler. C'est ici tout un art que de réussir à remonter au rayon planétaire ainsi qu'aux paramètres orbitaux à partir de l'estimation, pas toujours simple, de la surface obscurcie par la planète lors de son passage dans le champ de l'étoile hôte, et de la répétition de ses obscurcissements. Ces deux techniques combinées, quand cela est possible, permet la caractérisation complète du point de vue des paramètres orbitaux et des paramètres physiques macroscopiques. À présent, et ce depuis quelques années, nous entrons dans une nouvelle ère tout aussi prometteuse. Des paramètres physiques et essentiellement macroscopiques nous posons notre regard plein de curiosité sur la caractérisation physico-chimique de ces astres en nous intéressant tout particulièrement à leurs atmosphères.

Caractériser une atmosphère nécessite d'étudier l'exoplanète par spectroscopie, et atteindre des informations "robustes" sur sa composition chimique requiert une résolution et une couverture spectrale qu'il est difficile d'atteindre, à l'exception de quelques cibles, avec les instruments actuels (HST, Spitzer, Kepler ...). Cette technologie ne permet en effet que l'étude des atmosphères des exoplanètes les plus massives, les plus chaudes et aux rapports R_p/R_s les plus élevés parmi les centaines de cibles envisageables car elles génèrent des variations du rayon effectif de l'exoplanète avec la longueur d'onde suffisamment fortes pour ne pas se heurter aux limites de la détection (Tsiaras et al. 2018).

Grace à sa large surface collectrice, sa grande couverture spectrale et ses différents modes d'observations spectroscopiques, le *James Webb Space Telescope (JWST)*, télescope spatial de la NASA, va être un acteur clef quant à la caractérisation des exoplanètes. Ce programme vise à contraindre quantitativement, à partir d'observations spectroscopiques, l'atmosphère des exoplanètes ciblées (profil température - pression, composition moléculaire, présence de nuages ou d'aérosols, ...) et à mettre en évidence les mécanismes physiques et chimiques prépondérants (convection, instabilités chimiques, chimie hors équilibre,...). Il permettra l'étude des exoplanètes détectées par la méthode des transits comme celles par imagerie directe. L'ESA a validé cette année le financement de la mission M4 *Atmospheric Remote-sensing Infrared Exoplanet Large-survey (ARIEL)* qui suivra les traces du JWST et sera totalement dédiée à la caractérisation des atmosphères d'exoplanètes. Si jusqu'ici, les observations nous

faisaient défaut, les années à venir devraient être florissantes et nul doute que nous allons faire un pas de plus vers la compréhension de l'Univers qui nous entoure et de sa diversité.

Avoir des données, des observations, des spectres est une chose, encore faut-il que nous y soyons bien préparés. La réduction des données est difficile, tout comme la déduction de l'information atmosphérique à partir des spectres que l'instrument nous fournira. La méthode la plus efficace permettant de contraindre les propriétés, la structure et la composition chimique d'une atmosphère d'exoplanète consiste à en inverser le spectre d'absorption, c'est-à-dire, à le comparer à une grande quantité des spectres obtenus à partir de simulations atmosphériques. C'est une approche statistique de laquelle va émerger la ou les solutions les plus probables et qui reproduiront au mieux les observations. Et si la démarche semble évidente, une atmosphère est un objet physique et chimique d'une très grande complexité. La dynamique singulière qui l'anime, les structures thermiques qu'elle peut adopter, la grande quantité de gaz ou d'aérosols la constituant et la variété de leurs distributions spatiales impliquent un espace de paramètres beaucoup trop important pour que cette méthode soit efficace, voire même réalisable à partir de modèles complets. Nous ne pouvons pas tenir compte de tous ces paramètres, et devons alors formuler un certain nombre d'hypothèses sur les atmosphères que nous générerons pour réduire drastiquement l'espace à couvrir et ainsi espérer tirer, dans des temps raisonnables, le maximum d'informations de ces observations.

C'est dans cette optique que des algorithmes de traitement du signal ont été développés, comme Tau-REx (*Tau Retrieval for Exoplanets*, [Waldmann et al. \(2015\)](#)) par l'University College London. L'hypothèse névralgique de ces outils repose sur le caractère isotrope (1D) des atmosphères qu'ils produisent pour ensuite en comparer les spectres avec ceux issus des observations. C'est une hypothèse forte car nous comparons des atmosphères unidimensionnelles à des structures tridimensionnelles. Et si elle permet effectivement de contraindre très rapidement les paramètres atmosphériques, elle induit nécessairement des biais que nous avons certes acceptés dans notre démarche scientifique, finalement commune à tous les domaines de la science, mais que nous nous devons d'identifier et de quantifier en amont de la caractérisation. Ces effets que nous soulignons ne dépendent pas de l'instrument de mesure mais bel et bien du conditionnement aux hypothèses formulées.

Le meilleur moyen de percevoir les effets systématiques induits par la simplification des atmosphères que ces algorithmes génèrent serait de les appliquer à des cas concrets, autrement dit, à des planètes dont nous avons une connaissance précise des compositions chimiques et des structures. Aucun des deux astres transitant devant le Soleil, que sont Mercure et Vénus, n'offrent malheureusement la possibilité de réaliser ces études. La première ne présente pas d'atmosphère, soufflée et échappée de l'attraction de sa planète depuis longtemps, tandis que la deuxième a une atmosphère beaucoup trop dense en aérosols. L'épaisse couche de nuages qui la recouvre écrante littéralement l'information moléculaire. Et quand bien même nous serions capable de le faire au moyen de sondes observant les autres planètes de notre système, elles possèdent toutes des atmosphères homogènes (quelques dizaines de degrés entre les points les plus chauds et les plus froids) et sont très loin des types d'exoplanètes ciblées par les missions à venir. Aucune planète de notre système ne présente des hétérogénéités proches de celles que nous nous attendons à constater et qui pourraient justement affecter les observations. À défaut de pouvoir travailler avec des objets réels, nous pouvons raisonner à partir de simulations atmosphériques plus abouties dont on a déjà éprouvé la pertinence et le réalisme à maintes reprises.

Le laboratoire de Météorologie Dynamique (LMD) a développé sur cette dernière décennie un Modèle de Circulation Globale (GCM), initialement dans le but de reproduire le climat de la Terre. Ce même modèle a par la suite été rendu le plus générique possible dans le but de pouvoir simuler une large diversité d'atmosphères, pour une variété toute aussi large de planètes ou d'exoplanètes ([Lebonnois et al.](#)

2008). Ces simulations ont ainsi été réalisées, entre autres, pour Vénus, Mars et Titan, reproduisant leurs climats avec une impressionnante fidélité. Si cet outil est capable d'offrir des atmosphères réalistes, nous pouvons alors l'utiliser pour éprouver les algorithmes de traitement du signal, identifier et caractériser les effets systématiques qu'ils induisent de par leurs hypothèses, et à termes, permettre à ces derniers d'interpréter, avec encore plus de pertinence, les spectres issus d'observations réelles sans que cela ne nécessite d'en complexifier les modèles.

Si nous avons d'un côté un modèle dynamique 3D d'atmosphères d'exoplanètes et de l'autre le code de traitement du signal qui interprète les spectres en transmission, il nous faut créer le lien entre ces deux maillons de la chaîne de simulation des observations avec un algorithme capable de générer les spectres qui découleraient de l'observation de ces dites simulations par un instrument. Dans le meilleur des cas, les études utilisant des modèles 3D d'atmosphère génèrent leurs spectres associés en utilisant les colonnes du terminateur, la ligne fictive qui sépare les faces éclairées et non éclairées d'une planète, et donc sur la seule base de l'anneau dont le plan est perpendiculaire au plan de l'écliptique. Cela permet de tenir compte des hétérogénéités radiales (ou verticales) et azimutales (ou angulaires) mais néglige totalement celles portées par la ligne de visée, sur le chemin optique des rayons lumineux qui traversent les atmosphères de l'hémisphère jour à l'hémisphère nuit. La justification première de cette approche repose sur l'apparent constat que l'essentiel de l'absorption atmosphérique, et donc de l'information spectroscopique, serait contenu dans cette région.

C'est autour de ces questions que s'est articulé ce travail de thèse : quelles est la qualité des résultats retournés par un algorithme classique d'inversion 1D (par exemple Tau-REx) lorsqu'il est confronté à des atmosphères d'exoplanètes très hétérogènes, et donc très éloignées de l'isotropie sur laquelle reposent les profils qu'il génère ? L'hypothèse consistant à négliger les hétérogénéités tangentielles, portées par la ligne de visée, lors de la génération des spectres en transmission est-elle vraiment pertinente en toutes circonstances ? N'existe-t-il pas des cas, comme des exoplanètes en rotation synchrone très chaudes avec un fort contraste jour/nuit, pour lesquels nous introduisons un biais supplémentaire à l'étape de la génération des observables de par ce raccourci ? Sommes-nous certains que les investigations menées jusqu'ici visant à éprouver les capacités des algorithmes de traitement du signal à contraindre convenablement ces observables n'est pas limitée par un biais que l'on aurait écarté peut-être trop rapidement ? Est-ce toujours raisonnable de partir du principe que lorsque nous observons une atmosphère d'exoplanète en transit nous caractérisons en réalité son terminateur ?

Afin de répondre à ces questions, nous avons développé un générateur de spectre dont la vocation est de tenir compte de l'intégralité de l'information qu'une simulation atmosphérique GCM 3D fournit. Baptisé Pytmosph3R, il résout le transfert radiatif et produit la carte de transmittance des limbes à toutes les longueurs d'onde qu'il intègre ensuite pour produire un spectre en transmission. Un gros travail a été réalisé lors de sa conception pour en faire un outil générique, structuré en modules indépendants de façon à permettre des compatibilités futures avec d'autres modèles de circulation que le GCM du LMD, comme avec d'autres algorithmes de traitement du signal que Tau-REx. Un effort tout particulier a été fourni pour rendre sa prise en main la plus facile et rapide possible et il a fait l'objet d'un travail de validation rigoureux. Les options actuelles de Pytmosph3R sont conditionnées par la nécessité de minimiser les effets systématiques qu'introduisent tous les intermédiaires entre deux maillons de la chaîne de simulation des observations (GCM/Pytmosph3R/Tau-REx) ainsi que pour assurer sa robustesse. Nous avons utilisé ensuite ces outils pour tenter de mettre en évidence des biais naissant des hétérogénéités tangentielles en température ou en composition et le cas échéant, de les caractériser.

Ce manuscrit est découpé en quatre chapitres. Les deux premiers présenteront Pytmosph3R, sa structure, la manière dont il résout le transfert radiatif, comment sa géométrie a été choisie, les sources

d'absorption dont il tient compte, les options disponibles en fonction des besoins de son utilisateur, les intermédiaires qu'il génère avant de proposer des spectres, la manière dont nous pouvons les exploiter, le champ de possibilités qu'il offre en somme et une discussion sur les améliorations dont il devra faire l'objet. Nous exposerons ensuite de quelle manière il a été validé, le niveau de compatibilité atteint vis-à-vis de Tau-REx et les points à retenir en vue d'une compatibilité future avec d'autres algorithmes. Nous justifierons les choix qui ont été faits dans le but de toujours s'assurer que les biais que nous chasserons sur des simulations atmosphériques prennent naissance des propriétés de la dite simulation, et pas de l'étape de génération de son spectre.

Dans le chapitre 4 nous appliquerons Pytmosph3R à une simulation dynamique 3D de l'atmosphère de l'exoplanète GJ 1214 b décrite dans [Charnay et al. \(2015\)](#). Nous appliquerons ensuite Tau-REx sur le spectre généré comme s'il s'agissait d'une observation réelle et nous discuterons des résultats obtenus, des biais identifiés, de leurs natures et notamment de ceux naissant des hétérogénéités tangentielles négligées jusque-là. Ce chapitre se veut à la fois le guide d'utilisation de notre suite d'outils (GCM/Pytmosph3R/Tau-REx) et à la fois le prélude à la caractérisation des effets systématiques tangentiels.

Dans le dernier chapitre, nous nous intéresserons à l'impact des hétérogénéités de température tangentielles sur les observations (spectres en transmission) et sur leurs inversions (distributions *a posteriori*). Nous verrons que les biais qu'elles peuvent générer dépendent à la fois du type d'exoplanète et du type d'atmosphère, et que dans certains cas, ils ne sont pas du tout négligeables. Nous utiliserons les résultats obtenus pour finaliser l'interprétation de l'inversion du spectre de GJ 1214 b et conclure sur la manière dont les différents types de biais, notamment les thermiques, s'expriment sur le spectre solution proposé par Tau-REx et sur les distributions *a posteriori* des paramètres d'inversion.

L'ensemble de ce travail fait l'objet d'une publication qui est en révision pour *Astronomy & Astrophysics*. La version soumise de cet article est reproduite en Annexe E. Cette annexe peut être lue de manière indépendante, et peut fournir une vision plus synthétique des éléments développés dans ce manuscrit. Par ailleurs, différentes parties des codes que j'ai développé pendant cette thèse ont été utilisés dans le cadre de trois études dont j'ai été co-auteur (voir Annexe E). De plus, nous avons mis en annexe des calculs, des figures et des études de paramètres un peu plus détaillées qui serviront à supporter notre argumentation mais qui en auraient ralenti la lecture.

Chapter 2

Simulation d'observables à partir de modèles atmosphériques 3D

Sommaire

2.1	La détection atmosphérique en transmission, chaîne observationnelle et la place de Pytmosph3R	12
2.1.1	Des astres trop éloignés de nous, la solution de la simulation	12
2.1.2	Les hypothèses limitantes du traitement du signal dans la caractérisation des exoplanètes	13
2.1.3	Utilisation des simulations atmosphériques comme terrain d'étude	14
2.1.4	Méthodes de génération des observables et parti pris de Pytmosph3R	14
2.2	Exploitation des données d'une simulation atmosphérique 3D et restructuration dans la géométrie adaptée	17
2.2.1	D'une simulation 1D à une simulation 3D	17
2.2.2	Refonte des sorties d'une simulation GCM et création du maillage cylindrique	21
2.2.3	Maillage cylindrique semi-régulier	26
2.2.4	Structure de la grille sphérique de référence et modes de tirage	28
2.2.5	Correspondances entre les coordonnées de la maille cylindrique et de la grille sphérique de référence	29
2.2.6	Correspondances dans le cas le plus général	30
2.3	Résolution du transfert radiatif au sein de la maille cylindrique	35
2.3.1	Méthodes de calcul des profondeurs optiques	36
2.3.2	Optimisation du calcul des opacités d'un point de vue technique	38
2.3.3	Absorption moléculaire, propriétés optiques des atomes et molécules	38
2.3.4	Absorption continuum, collisions entre molécules	41
2.3.5	La diffusion Rayleigh	43
2.3.6	La diffusion de Mie pour les aérosols	47

2.4	Génération des spectres en transmission	48
2.4.1	Cartes de transmittance	48
2.4.2	Intensité lumineuse uniforme	49
2.4.3	Intensité lumineuse non uniforme	52
2.5	Opportunités offertes par Pytmsoph3R et améliorations à venir	56
2.5.1	Les autres applications possibles de la carte de transmittance	56
2.5.2	Utilisation des intermédiaires de calcul dans l'étude des simulations et l'interprétation des spectres	58
2.5.3	Pour aller plus loin, les améliorations à venir	59

Dans ce chapitre, nous allons dans un premier temps introduire le contexte scientifique spécifique à ce domaine qu'est l'observation des atmosphères d'exoplanètes. Bien saisir les démarches scientifiques adoptées jusqu'alors par la communauté astrophysicienne c'est aussi bien saisir la place et l'enjeu de cette thèse dans une discipline en plein essor qui devrait vivre de grandes révolutions sur les années à venir.

Ce positionnement entre les théoriciens qui génèrent des outils subtils, reposant sur une géométrie et une physique complexes et très développées, et les observateurs qui raffinent la précision de leurs mesures, utilisant des méthodes et modèles de plus en plus performants qui leur permettront d'en extraire des informations le plus rapidement possible, est en soit un challenge. Sans pour autant atteindre le degré de maîtrise de chacun des corps, il permet la liaison entre deux aspects de la science qui peuvent parfois éprouver des difficultés à s'accorder et communiquer tant les modes de raisonnement peuvent diverger. L'outil Pytmosph3R développé durant ce travail de recherche a pour vocation de créer cette liaison au plus proche de deux de ces maillons essentiels, le *Global Circulation Model* (GCM) développé par le Laboratoire de Météorologie Dynamique (LMD) de Paris, et le *Tau Retrieval for Exoplanets* (Tau-REx, [Waldmann et al. \(2015\)](#)) développé par l'University College London (UCL). Il génère des observables (spectres en transmission, courbes de lumière, cartes de transmittance) à partir des modélisations atmosphériques réalistes du GCM qui pourront faire l'objet d'une inversion par Tau-REx. De cette collaboration doit naître l'inspiration vers une génération d'algorithmes compatibles avec n'importe quel type de simulation ou n'importe quelle méthode de traitement du signal.

Nous nous concentrerons ici sur la démarche, la géométrie, la physicochimie adoptée et prise en compte dans cet algorithme tout en présentant les possibilités qu'il peut offrir. Nous soulignerons également ses limites et les améliorations dont il pourra bénéficier dans les versions futures ou lors du développement d'outils similaires. Petit à petit, nous mettrons aussi l'accent sur les limites propres aux deux maillons précités mais nous ne développerons nos propos que dans le Chapitre 3 car c'est dans la validation du code que les divergences d'approches sont mises en exergue.

À l'heure actuelle, les quelques observations à faibles résolutions effectuées par les télescopes spatiaux Hubble ou Spitzer ne sont pas en mesure de nous apporter le recul nécessaire pour appréhender une discipline aussi large et sensible à de nombreux paramètres physiques (Fu et al. (2017); Tsiaras et al. (2018); Kreidberg et al. (2018)). Les études en question concernent essentiellement des Jupiters chauds car ce sont les astres les plus faciles à étudier. En effet, les fluctuations du flux lumineux stellaire qu'elles engendrent sont intenses, suffisamment pour atteindre le niveau de précision nécessaire quant à l'identification des signatures spectroscopiques. La communauté a ainsi été capable de mettre en évidence la présence de certaines molécules dans ces atmosphères, comme par exemple de l'eau dans l'atmosphère de HD 209458 b (Beaulieu et al. (2008), Tinetti et al. (2007)), ou encore la probable détection de nuages de chlorure de potassium et de sulfure de zinc dans l'atmosphère de GJ1214 b (Kreidberg et al. (2014), Charnay et al. (2015)). La résolution et la précision des instruments actuels, tel que le *Hubble Space Telescope* à l'origine des observations majeures dans le domaine, ne sont plus suffisantes pour des caractérisations plus fines et quantitatives de ces atmosphères, et ne permettent pas l'étude des astres de plus petites dimensions ou moins chauds. La nouvelle génération de télescopes, incarnée en premier lieu par le *James Webb Space Telescope* (JWST) du côté de la NASA, puis dans un autre temps par ARIEL du côté de l'ESA, seront plus ou moins dédiés à la caractérisation de ses atmosphères d'exoplanètes. Ce travail s'inscrit donc dans un contexte d'essor et en prévision des nouvelles opportunités offertes aux astrophysiciens, mais pas seulement, par ces nouveaux instruments. Nous allons certes faire un pas de géant dans ce domaine de recherche, mais la route sera encore longue, et nous verrons au fil de cette étude qu'elle sera probablement semée d'embûches.

En attendant cette nouvelle ère, nous devons préparer les outils qui permettront d'exploiter au mieux les observations à venir. Nous allons expliquer en quoi Pytmosph3R, le générateur de spectres à partir de simulation dynamique 3D, forme le chaînon manquant du schéma scientifique, essentiel, s'inscrivant dans la démarche de soutien aux dits outils qui auront pour tâche de traduire les observations en informations atmosphériques.

2.1 La détection atmosphérique en transmission, chaîne observationnelle et la place de Pytmosph3R

2.1.1 Des astres trop éloignés de nous, la solution de la simulation

Les exoplanètes sont des objets lointains et inaccessibles à ce jour, comme probablement pour longtemps. Nous n'avons pour seules informations les concernant que la lumière qu'elles émettent, réfléchissent ou laissent passer au niveau de leurs atmosphères pour en imprégner leurs signatures. Durant les deux dernières décennies, le nombre d'exoplanètes détectées a progressivement permis d'établir des statistiques qui nous ont montré à quel point ces objets pouvaient être variés. Cette diversité a dépassé

de loin notre état de connaissance qui reposait sur celle de notre propre système planétaire. Les missions lancées dans le but d'étudier les planètes ou les satellites de notre système solaire ont d'ors-et-déjà mis en évidence une toute aussi grande diversité de structures et de compositions atmosphériques. Nous nous attendons donc à constater une multiplicité toute aussi impressionnante des types d'atmosphère d'exoplanète.

Comme pour la plupart des domaines de l'astrophysique, il est rare de pouvoir collecter des données directes des astres que nous observons permettant de les caractériser et de valider d'une certaine manière nos méthodes de modélisation et de détection. Produire des observables à partir de simulations atmosphériques offre donc l'opportunité à la fois de vérifier la pertinence de ces dites simulations face aux observations, mais aussi de compenser l'absence de données directes dans le but d'éprouver nos techniques de traitement du signal.

Le *Global Circulation Model* (GCM) est un de ces modèles dynamiques permettant la simulation tridimensionnelle d'atmosphères. Son objectif fut dans un premier temps de reproduire le climat terrestre, l'utiliser en vue de prédire des phénomènes météorologiques, puis d'étudier les atmosphères primitives de la planète. Il a par la suite été modifié dans sa version LMDZ GCM rendue générique pour permettre la modélisation des atmosphères d'autres planètes (Lebonnois et al. (2008)). Les résultats obtenus pour Mars (Forget (1998) ; Madeleine et al. (2011)), Vénus (Gilli et al. (2014)) et Titan (Charnay et al. (2014)) étaient très fidèles en comparaison avec ce que nous savions de ces atmosphères à travers les différentes missions dédiées, ce qui a ouvert la voie vers la modélisation des atmosphères d'exoplanètes.

2.1.2 Les hypothèses limitantes du traitement du signal dans la caractérisation des exoplanètes

Intuitivement, nous pourrions imaginer utiliser le LMDZ GCM comme modèle de fond pour les algorithmes de traitement du signal. Ces derniers reposent sur la méthode dite inverse qui consiste à comparer des observations, un spectre en transmission dans notre cas, à des spectres obtenus à partir de simulations atmosphériques. En parcourant l'espace des paramètres de manière intelligente (*Markov chain Monte Carlo* (MCMC, Andrieu et al. (2003)), *nested sampling* (NS, Skilling (2004)), *multimodal nested sampling* (Multinest, Feroz and Hobson (2008)..) ils établissent des distributions de probabilité, dites distributions *a posteriori*, sur les paramètres libres ayant permis la génération des dites simulations. Toutefois, l'état de l'art ne permet pas d'explorer un espace des paramètres trop complexe et même en nombre réduit, cette méthode nécessite de produire une très grande quantité d'atmosphères et de spectres pour converger vers des solutions vraisemblables (Keeton 2011).

Les simulations GCM mettent des heures, des journées, voire beaucoup plus à converger vers des climats stables et reposent sur un espace des paramètres gigantesque. Nous aurions alors beaucoup plus d'atmosphères à générer avec un modèle très lent et nous n'arriverions à établir des distributions *a posteriori* que sur des temps déraisonnables (en supposant que nous ayons les ressources pour que cela soit possible). À défaut, nous utilisons des modèles beaucoup plus simples, ne nécessitant que quelques fractions de seconde pour produire un spectre et pour en effectuer la comparaison avec celui d'entrée. L'hypothèse principale réduisant de manière drastique les temps de calculs, mais aussi le réalisme des simulations atmosphériques, est de les considérer isotropes. C'est ce que nous appelons des modèles atmosphériques 1D. Ils ne contiennent pour information que celle d'une colonne verticale, obtenue avec des concepts impliquant plus ou moins de physique ou de chimie, et qui est généralisée à toutes les directions (en tout point de latitude et de longitude). C'est comme si nous prenions la colonne atmosphérique de Bordeaux et que nous disions que quel que soit l'endroit où nous sommes sur Terre, la colonne atmosphérique serait la même, et donc que le climat serait le même qu'à Bordeaux. Nous gagnons un

facteur technique incommensurable, mais nous perdons également le caractère tridimensionnel de nos atmosphères, ce qui nous amène à comparer des structures 1D à des atmosphères réelles qui sont, elles, bel et bien en 3 dimensions.

En l'absence de spectres en transmission sur des astres dont nous avons une assez bonne connaissance de la structure et de la composition atmosphérique (les transits de Vénus et Mercure par exemple qui ne permettent pas de faire de la spectroscopie de transmission), nous n'avons qu'un recul limité quant aux biais systématiques introduits par l'hypothèse d'une atmosphère 1D, en particulier face à des atmosphères très hétérogènes avec lesquelles nous serions encore plus éloignés de la réalité.

2.1.3 Utilisation des simulations atmosphériques comme terrain d'étude

Si le LMDZ GCM est capable, au moins pour un certain type d'exoplanètes, de simuler des atmosphères de manière réaliste, nous pouvons donc imaginer utiliser ce fabuleux outil dans une chaîne observationnelle fictive visant à apporter aux algorithmes de traitement du signal les informations manquantes quant aux inversions qu'ils réalisent sur les observations réelles. Elle aurait également pour objectif d'acquérir le recul nécessaire à l'identification des forces, mais aussi et surtout des faiblesses de ces algorithmes. Nous préparons et consolidons ainsi notre capacité à interpréter les résultats qu'ils nous proposeront et à en extraire les informations pertinentes de celles qui seront très dépendantes des hypothèses qui en ont permis la contrainte.

Cette chaîne observationnelle fictive est composée :

- de l'astre en premier lieu, dont on a simulé l'atmosphère 3D au moyen du GCM,
- de l'instrument qui en effectue l'observation et qui collecte donc les photons imprégnés de la signature spectroscopique et en génère le spectre à inverser,
- enfin des algorithmes de traitement des spectres observés.

Nous travaillerons avec Tau-REx (*Tau Retrieval for Exoplanets*), développé par l'UCL ([Waldmann et al. \(2015\)](#) ; [Waldmann et al. \(2015\)](#)), comme troisième maillon de la chaîne. C'est grâce à l'étroite collaboration avec l'équipe de Giovanna Tinetti que nous serons capables de tirer les conclusions de cette étude. Il ne manque alors plus que le maillon qui fait le lien entre les simulations et le traitement du signal. L'instrument est remplacé par un générateur d'observables, et donc de spectres, qui exploite les données du GCM tout en adaptant sa méthode de résolution du transfert radiatif à celle de Tau-REx dans le but de limiter les effets systématiques propres à la dite chaîne et à ses différentes parties.

La méthode à présent serait donc de produire un grand nombre de simulations présentant des originalités potentiellement difficiles à inverser par Tau-REx et ainsi, petit à petit, éprouver sa capacité à contraindre des spectres issus d'atmosphères très loin d'être isotropes, et à termes, de déduire de la seule appréciation des résultats de Tau-REx la présence d'originalités dans l'atmosphère de l'exoplanète observée. Ces originalités peuvent être des hétérogénéités de température, d'abondance en molécules ou en aérosols, ou tout autre phénomène climatique qui ne serait pas décrit par des modèles 1D.

2.1.4 Méthodes de génération des observables et parti pris de Pytmosph3R

Dans la littérature, il a été déjà fait mention de simulations atmosphériques dont on aurait généré des spectres en transmission afin de les comparer aux observations ([Moses et al. \(2011\)](#) ; [Charnay et al. \(2015\)](#) ; [Roman and Rauscher \(2017\)](#) ; [Turbet et al. \(2018\)](#) ; [Lines et al. \(2018\)](#)). Cependant, dans le

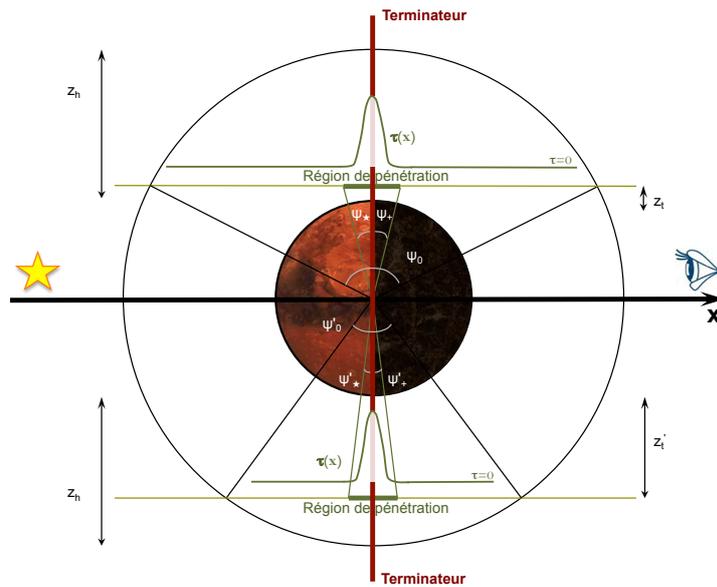


Figure 2.1: Schéma explicatif illustrant la géométrie du problème, les angles d'ouverture (ψ_0) et de pénétration (le doublet ψ_* et ψ_+). Les courbes vertes représentent la variation de la profondeur optique avec la position x . Les traits oranges correspondent à des rayons lumineux pour lesquels, à la longueur d'onde considérée pour chacun d'entre eux (elle n'est pas la même), la profondeur optique totale est égale à $\exp(-1)$

meilleur des cas, ils ne retiennent de leurs modèles que le terminateur (plan formé par l'interface jour/nuit et perpendiculaire au plan écliptique) et produisent un spectre pour chacune des colonnes qui le constitue, que l'on peut qualifier de 1D puisqu'il n'exploite qu'une colonne atmosphérique. Ils moyennent ensuite ces spectres pour reproduire le spectre totale associé à la modélisation.

La communauté argumente ce choix en indiquant que l'essentiel de l'information est contenue dans cet anneau, qu'on appelle le limbe, puisqu'il correspond à la région de plus forte densité moléculaire et donc *a priori* la plus absorbante de l'atmosphère. Ils considèrent alors que même si l'atmosphère présente des hétérogénéités fortes le long de la ligne visée, comme :

- une violente augmentation de la température du côté irradié,
- ou inversement, une chute spectaculaire de température du côté nuit,
- ou encore un appauvrissement drastique du terminateur en une espèce moléculaire qui réapparaît plus profondément dans l'hémisphère ensoleillé ou le côté nuit,

elles n'impacteraient pas suffisamment le transfert radiatif du fait de la décroissance exponentielle de la densité moléculaire. Elles sont donc négligées. Des études s'intéressent à l'impact de ces parties de l'atmosphère mais ne s'intéressent finalement qu'à l'effet d'une répartition hétérogène des nuages dans les simulations et ne se penchent pas du tout sur celui des hétérogénéités moléculaires ([Line and Parmentier \(2016\)](#)).

Nous nous sommes interrogés sur la pertinence de cette hypothèse en tentant d'estimer la région imprégnant l'information spectroscopique dans une atmosphère homogène. Cela revient à quantifier l'angle, de part et d'autre du terminateur, contenant effectivement l'essentiel de l'absorption sans générer

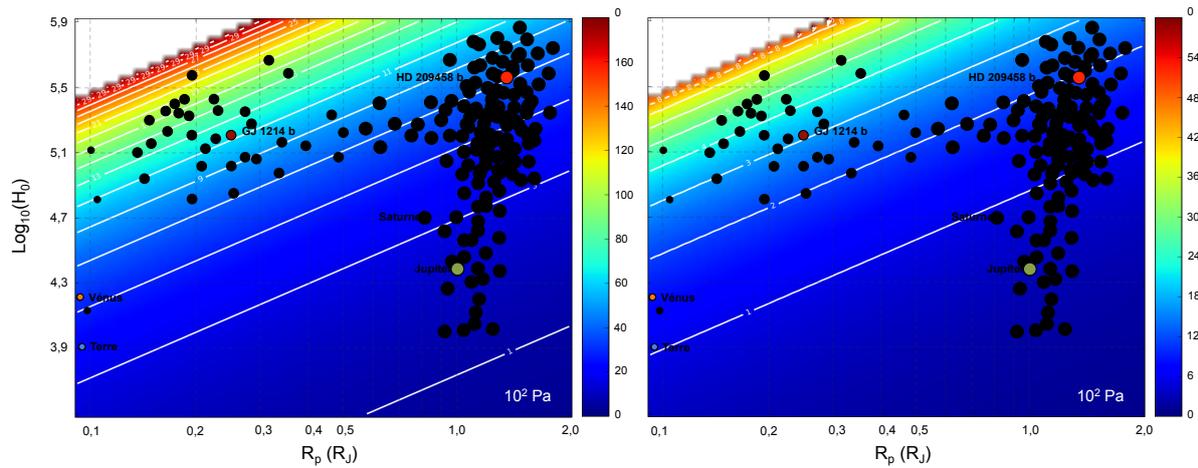


Figure 2.2: À gauche : Angle d'ouverture en fonction de la hauteur d'échelle et du rayon planétaire pour un toit à 10^{-4} Pa et une pression de surface de 10^6 Pa. À droite : Angle de pénétration en fonction de la hauteur d'échelle et du rayon planétaire pour une pression de surface de 10^6 Pa. La gravité de surface est prise à 9 m/s^2 . Nous avons placé quelques exemples précis d'exoplanètes connues et qui ont fait ou feront l'objet d'observations en spectroscopie, ainsi que des exemples moins concrets (cercles noirs) qui donne une idée de la population exoplanétaire.

une différence détectable par un instrument, autrement dit l'ouverture et la profondeur du limbe vis-à-vis du plan terminateur. Cette approche est détaillée dans l'Annexe A et illustrée par la Figure 2.1.4. Nous appelons ce paramètre l'angle de pénétration, symétrique dans le cas d'une atmosphère homogène, et nous le distinguons de l'angle d'ouverture qui correspond à la région totale traversée. Quel que soit le type d'absorption, l'angle de pénétration ne dépend que du niveau sondé et du rapport R_p/H_0 de l'exoplanète et de son atmosphère, ce rapport régissant en effet la rapidité de l'évolution de la densité moléculaire avec la distance au plan terminateur.

Comme nous pouvons le constater sur la Figure 2.2, cet angle augmente lorsque le rapport R_p/H_0 diminue. Sa dépendance avec l'altitude à laquelle nous sondons l'atmosphère n'est pas linéaire du fait de la variation de la gravité avec l'altitude. Il évolue entre des angles très faibles jusqu'à 30° dans les cas les plus extrêmes. Dans l'exemple illustré dans Charnay et al. (2015) et qui nous servira d'exemple tout au long de notre raisonnement, ils ne se focalisent que sur le terminateur, toujours sur la base de l'argumentation précédemment soulignée. Or, si nous plaçons la simulation dans les graphiques de la Figure 2.2, GJ 1214b serait associée à un angle de pénétration total de l'ordre de 18° , soit 9° de part et d'autre du terminateur. À la résolution de la simulation de l'article, cela représente 3 colonnes, celle du terminateur et les deux adjacentes (indépendamment de la structure atmosphérique). Nous sommes typiquement dans un cas de figure où en l'absence de tout autre effet lié aux hétérogénéités atmosphériques, le terminateur n'est probablement pas représentatif de l'intégralité de la simulation.

Pytmosph3R, que nous avons développé dans le cadre de cette étude, se propose d'aller plus loin en ne faisant aucune hypothèse sur le poids des différentes parties de l'atmosphère dans le transfert radiatif. Il le résout sur l'intégralité des chemins optiques, en partant de l'entrée du rayon dans l'atmosphère côté étoile, jusqu'à sa sortie du côté observateur. Dans les paragraphes qui suivent, nous présenterons la structure de l'algorithme, la méthode adoptée pour exploiter les données de la simulation, les absorptions prises en compte et enfin de quelle manière l'utiliser, ce qu'on peut faire à partir des cartes de transmittance ou des intermédiaires qu'il génère. Le code peut se diviser en 3 blocs indépendants les uns des

autres :

- le bloc de préparation de la maille et de transposition de la simulation 3D (§ 3.1),
- le bloc de calcul des sections efficaces et de résolution du transfert radiatif (§ 2.3),
- l'utilisation des données précédemment calculées pour générer un spectre (§ 2.4).

Dans l'optique de faire également de ce chapitre un guide d'utilisation de Pytmosph3R, la plupart des formules seront exprimées avec des indices. Notons que l'algorithme étant écrit en langage python, les indices partiront toujours de 0 pour rester cohérent.

2.2 Exploitation des données d'une simulation atmosphérique 3D et restructuration dans la géométrie adaptée

Nous avons modélisé une atmosphère dynamique 3D en utilisant le LMDZ GCM et nous avons les données la caractérisant. La multiplicité des profils thermiques dont il faut tenir compte demande une réelle réflexion en termes de géométrie à adopter mais aussi en termes de structure du code lui-même afin de gérer au mieux la quantité d'information. La modélisation est divisée en niveaux de pression, et nous allons voir que cela va nécessiter de les restructurer afin de pouvoir résoudre le transfert radiatif dans de bonnes conditions.

2.2.1 D'une simulation 1D à une simulation 3D

Rappelons dans un premier temps comment nous traitons les simulations unidimensionnelles avant d'expliquer de quelle manière nous allons passer au tridimensionnel dans Pytmosph3R.

Expression de la profondeur optique et de l'aire opaque d'une exoplanète et de son atmosphère

Pour une simulation unidimensionnelle, ne comportant donc qu'un unique profil généralisable à toute l'atmosphère, la résolution bidimensionnelle du problème sur une tranche atmosphérique est suffisante. La dite simulation est appliquée à une exoplanète et une atmosphère dont les grandeurs caractéristiques sont :

- Le rayon planétaire R_p , pris comme le rayon à 10 bar pour des planètes gazeuses.
- Une masse planétaire M_p , dont on en déduit la gravité de surface g_0 .
- La pression de surface P_s , ramenée à 10 bar pour les planètes gazeuses.
- Un toit atmosphérique h correspondant à l'épaisseur de l'atmosphère.
- Ce toit est associée à une pression de toit P_t .
- Un découpage régulier en log-pression sur N couches, de pas $\Delta \log(P)$.
- La structure atmosphérique est caractérisée par son profil thermique $T(P)$ et son profil en composition $\chi_e(P)$.
- De cette structure nous en déduisons également le profil vertical du poids moléculaire moyen $\mu(P)$.

Nous calculons la fonction de profondeur optique $\tau(P)$ en résolvant le transfert radiatif sur le chemin optique des rayons stellaires pour chaque couche du découpage. Si nous ne tenons compte que de l'absorption moléculaire pour illustrer notre approche et si nous notons $\sigma_e(T, P)$ la section efficace de la molécule d'indice e , N_e le nombre de molécules participant au transfert radiatif, x la distance au terminateur, et D la distance maximale ($x(P_h)$), elle se calcule comme :

$$\tau(P) = \int_{-D}^D n(x(P)) \sum_e^{N_e} \sigma_e dx(P) \quad (2.1)$$

En intégrant cette profondeur optique sur la surface de l'exoplanète et de son atmosphère, nous déterminons l'aire opaque de l'ensemble que comparons ensuite à celle de l'étoile hôte, le rapport des deux nous permettant d'évaluer le flux relatif ou à la profondeur de transit. Plusieurs méthodes d'intégration permettent de résoudre ce problème, toutes convergeant vers le même résultat lorsque l'épaisseur de couches tend vers 0, mais dont les différences vont dépendre du découpage et du nombre de couches considéré. L'écriture la plus générale de cette intégration est la suivante, avec ρ la distance au centre de l'exoplanète et z l'altitude ($\rho = R_p + z$) (voir la Figure 2.3) :

$$\delta = \int_0^{2\pi} \int_0^{R_p+h} (1 - \exp(-\tau(P(\rho)))) d\rho d\theta \quad (2.2)$$

L'exoplanète étant parfaitement opaque et en négligeant son émission, ainsi que celle de son atmosphère, nous pouvons réécrire cette expression comme une somme de contributions sur les N couches atmosphériques :

$$\delta = 2\pi \sum_{i=0}^N (1 - \exp(-\tau_i)) \Delta z_i + 2\pi R_p \quad (2.3)$$

Lorsque le découpage de l'atmosphère est effectué en niveaux d'altitude, l'épaisseur de couche est constante et égale à Δz . S'il est effectué en niveaux de pression, l'altitude des niveaux et des milieux de couche se déterminent à partir de la loi hydrostatique (tant que l'atmosphère peut être traitée comme un gaz parfait) :

$$\frac{dP}{dz} = -\frac{\mu g}{k_B T} \quad (2.4)$$

Ici réside la plus grosse source d'écart entre les différents modèles atmosphériques. La loi hydrostatique peut en effet être intégrée au sein d'une couche :

- en considérant que la température T_i , le poids moléculaire μ_i et la gravité g_i y sont constants, dans quel cas nous travaillons à hauteur d'échelle $H_i = k_B T_i / \mu_i g_i$ constante et l'intégration est simple (Eq. (2.5)).
- en considérant que la température T_i et le poids moléculaire μ_i sont constants mais en tenant compte de l'évolution de la gravité au sein de la couche avec la distance au centre de l'astre (Eq. (2.10)).
- en tenant compte du gradient de température et du poids moléculaire au sein de la couche ainsi que de l'évolution de la gravité (Eq. (2.12)).

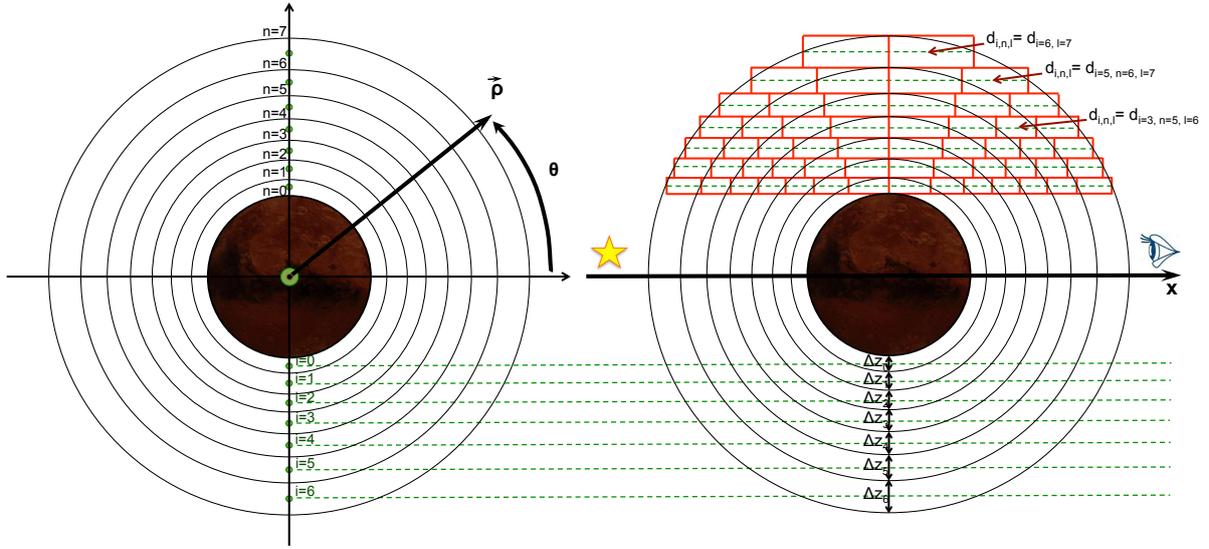


Figure 2.3: À gauche : Projection dans le plan du terminateur. À droite : Projection dans le plan porté par la ligne de visée. Les indices i des couches, les milieux de couche (en vert), les indices n des niveaux (en noir), les épaisseurs de couche Δz_i , ainsi que quelques exemples des distances intervenant dans le calcul de la profondeur optique $d_{i,n,l}$ y sont spécifiés.

Calcul des profondeurs optiques à hauteur d'échelle constante au sein des couches

Dans le premier cas, lorsque nous travaillons à hauteur d'échelle constante, si i est l'indice de la couche, n l'indice du niveau bas qui la délimite, et $n + 1$ l'indice du niveau haut (ainsi $z_{n=0} = 0$ et $z_{n=N+1} = h$), alors l'épaisseur de cette couche se calcule comme :

$$\Delta z_i = z_{n+1} - z_n = \frac{k_B T_i}{\mu_i g_i} \ln \left(\frac{P_n}{P_{n+1}} \right) \quad (2.5)$$

De la détermination de ce Δz_i nous en déduisons l'altitude des niveaux ou des milieux de couches. Cette manière de construire spatialement la structure atmosphérique a l'avantage d'être rapide et simple à appliquer. Toutefois, on comprend bien que les altitudes z_i sont dépendantes de l'estimation de l'accélération de la pesanteur au niveau inférieur g_n , recalculé après estimation du Δz_{i-1} comme :

$$g_n = \frac{GM_p}{(R_p + z_n + \Delta z_{i-1})^2} = g_0 \left(\frac{1}{1 + \frac{z_n + \Delta z_{i-1}}{R_p}} \right) \quad (2.6)$$

avec g_0 la gravité de surface qui correspond au premier niveau ($n = 0$). Les erreurs sur chaque couche se cumulent et lorsque le nombre de couches est faible, les altitudes obtenues peuvent être très éloignées de l'intégration propre de Eq. (A.1). Si on considère à présent un rayon lumineux traversant l'atmosphère et passant au milieu de la couche i , $d_{i,n,l}$ est définie comme la distance parcourue entre les niveaux n et l , et donc au sein de la couche d'indice n :

$$d_{i,n,l} = \sqrt{(R_p + z_i)^2 - (R_p + z_l)^2} - \sqrt{(R_p + z_i)^2 - (R_p + z_n)^2} \quad (2.7)$$

avec $z_i = (z_{n+1} + z_n)/2$. Nous en déduisons la profondeur optique τ_i :

$$\tau_i = 2 \sum_n^N \sum_e^{N_e} \sigma_e(P_n, T_n) \chi_{e,n} d_{i,n,l=n+1} \quad (2.8)$$

Nous n'avons plus qu'à utiliser l'équation Eq. (2.3) pour déterminer l'aire effective opaque δ de l'exoplanète et de son atmosphère.

Calcul des profondeurs optiques en tenant compte de l'évolution de la gravité au sein des couches

Effectuons ce même travail, mais cette fois-ci en tenant compte de l'évolution de la gravité au sein des couches, les autres paramètres T_i et μ_i restant constants. Repartons de la loi hydrostatique que nous réécrivons de manière à mettre en évidence la dépendance avec l'altitude de l'accélération de la pesanteur :

$$\frac{dP}{dz} = -\frac{\mu g_0}{k_B T} \left(\frac{1}{1 + \frac{z}{R_p}} \right)^2 \quad (2.9)$$

En intégrant Eq. (2.9) par rapport à z au sein de la couche d'indice i , nous pouvons réexprimer Δz_i tel que :

$$\Delta z_i = z_{n+1} - z_n = \alpha_i \left(\frac{1 + z_n/R_p}{1 - \alpha_i/R_p} \right) \quad (2.10)$$

Avec :

$$\alpha_i = \left(1 + \frac{z_n}{R_p} \right) \frac{k_B T_n}{\mu_n g_0} \ln \left(\frac{P_n}{P_{n+1}} \right) \quad (2.11)$$

De ces Δz_i nous en déduisons les altitudes des niveaux, puis celles des milieux de couche et nous pouvons appliquer les équations Eqs. (2.7) et (2.8) pour calculer les profondeurs optiques et en déduire δ . Notons qu'avec cette méthode de calculs, nous ne sommes plus dépendant du choix de l'accélération de la pesanteur représentative de la couche.

Calcul des profondeurs optiques en tenant compte de l'évolution de tous les paramètres

Enfin, nous pouvons également tenir compte du fait que la température varie entre le niveau inférieur et le niveau supérieur qui délimitent une couche. Le plus simple ici est de considérer une évolution linéaire avec la pression. L'épaisseur de la couche se déduit de la correction du facteur α_i comme :

$$\alpha_i = \left(1 + \frac{z_n}{R_p} \right) \frac{k_B}{\mu_n g_0} \left(\frac{(T_{n+1} - T_n)}{\ln(T_{n+1}/T_n)} \right) \ln \left(\frac{P_n}{P_{n+1}} \right) \quad (2.12)$$

Dans Eq. (2.10) comme dans Eq. (2.12) nous pourrions aussi bien remplacer T_n et μ_n par la moyenne en température entre les deux niveaux $(T_{n+1} + T_n)/2$ et la moyenne des poids moléculaires $(\mu_{n+1} + \mu_n)/2$. Comme pour les autres méthodes de calculs, le résultat est ensuite intégré circulairement et nous en déduisons l'aire opaque associée à l'atmosphère de l'exoplanète considérée.

Tout cela n'est rendu possible que parce que le calcul de la profondeur optique est équivalent quelle que soit la tranche de l'atmosphère considérée puisqu'elle est isotrope. Le problème se complexifie lorsque nous passons au tridimensionnel. Chaque point de latitude et de longitude possède son propre profil thermique, toujours construit en niveau de pression. De ce fait, nous brisons la symétrie qu'offrait le caractère isotrope des simulations 1D. Les profils thermiques varient également dans l'axe d'observation, et nous ne pouvons donc plus utiliser les méthodes 1D pour résoudre le transfert radiatif pour chaque azimut (angle θ). Nous allons donc devoir restructurer les données du GCM dans une géométrie plus adaptée. Nous allons voir que nous récupérerons la symétrie que nous venons de perdre par le passage du 1D au 3D en utilisant un découpage en niveaux d'altitude plutôt qu'en niveaux de pression.

2.2.2 Refonte des sorties d'une simulation GCM et création du maillage cylindrique

Les sorties du GCM fournissent un ensemble d'informations et de tableaux permettant l'étude et la visualisation de leurs simulations atmosphériques. Ces données sont établies dans une grille sphérique dont le découpage vertical est effectué en pression (log-pression plus précisément) comme pour les atmosphères 1D. La Figure 2.4 montre une coupe méridionale au terminateur de l'exoplanète et de son atmosphère issue d'une simulation 3D issue de la littérature. Comme nous pouvons le constater, les extensions spatiales des colonnes du GCM sont toutes différentes les unes des autres, et notre atmosphère n'a plus du tout une forme sphérique, elle est devenue irrégulière et compliquée à exploiter. Il devient en effet délicat de tirer des rayons au travers d'une grille en altitude qui perd ses éléments de symétrie. Où doit-on les tirer, au milieu des cellules du terminateur ? Comment calcule-t-on les distances parcourues au sein de chaque cellule alors qu'elles sont déformées ? N'y a-t-il pas un moyen de refondre cette atmosphère sans perdre d'informations mais en nous simplifiant grandement la tâche ?

Une des solutions consiste à reconstruire l'exoplanète et son environnement à partir des informations générales (rayon planétaire, rayon stellaire, gravité de surface, résolution en longitude, latitude et niveaux de pression ...) et d'effectuer un nouveau découpage de notre atmosphère, plus adapté à la résolution du transfert radiatif et à la géométrie de celui-ci. Un découpage en altitude nous permettrait de simplifier tous les calculs intermédiaires (les Δz , les $d_{i,n,l}$, g ...) et offrirait une visualisation spatiale de l'atmosphère plus claire. Contrairement au cas 1D, chaque tranche atmosphérique étudiée est unique et doit faire l'objet d'un calcul spécifique. Nous devons donc structurer nos calculs de manière à traiter au mieux tous les azimuts. Nous devons également tenir compte de la longitude et de la latitude de chaque colonne atmosphérique traversée par un rayon lumineux, ce qui n'était pas le cas pour les atmosphères 1D.

Lorsqu'un observateur étudie l'exoplanète entourée de son atmosphère, il étudie finalement la transmittance d'un anneau entourant le cercle formé par l'exoplanète, la géométrie la plus adaptée en conséquence est une géométrie cylindrique.

Passage d'une grille sphérique en pression à une grille sphérique en altitude

Avant de s'intéresser au transfert radiatif, nous transformons les sorties d'une simulation GCM en une grille sphérique spatiale caractérisée par les coordonnées (r, φ, λ) , où r est la distance au centre de l'exoplanète, φ est la latitude et λ la longitude, ce qui revient à calculer pour chaque point de latitude et de longitude les altitudes associées à chaque niveau de pression. Ces altitudes, déduites des épaisseurs de couches, s'obtiennent comme précédemment en intégrant la loi hydrostatique (Eq. (2.5), Eq. (2.10) et Eq. (2.12) suivant la méthode adoptée). Le code laisse la possibilité d'utiliser l'une ou l'autre des méthodes de calculs dans un soucis de cohérence avec la philosophie de l'utilisateur ou des logiciels auxquels il aurait été couplé. Si la dynamique du modèle atmosphérique est résolue à partir de distances calculées au moyen de l'équation Eq. (2.5) par exemple, nous utiliserons cette méthode pour convertir ses sorties. Cela dit, rien n'empêche l'utilisateur de lui préférer une version plus précise de l'estimation des altitudes.

Quatre types de tableaux en pression sont disponibles dans les sorties d'une simulation GCM, leurs appellations pouvant varier avec la version utilisée :

- "p" : tableaux aux dimensions $(N_t, N_r, N_\varphi, N_\lambda)$ avec N_t le nombre de points en temps retenus, N_r le nombre de couches, N_φ la résolution en points de latitude, et N_λ la résolution en points de longitude. Ces pressions sont calculées au milieu des couches à partir des pressions hybrides

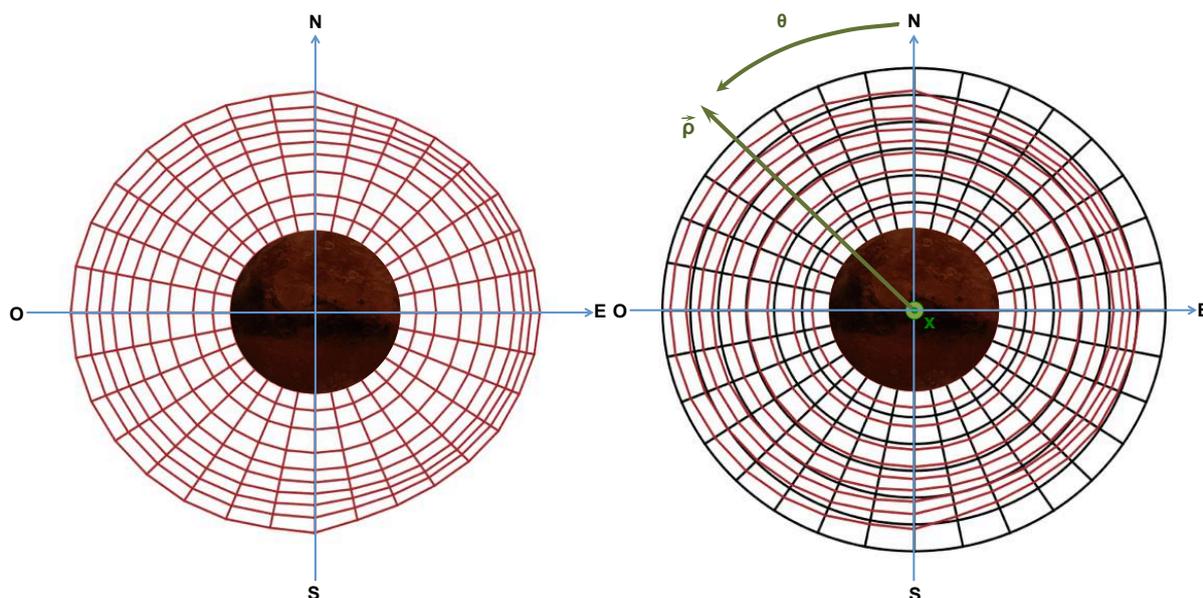


Figure 2.4: La figure de gauche montre la projection cylindrique transversale pour une simulation GCM. Celle de droite illustre le système de coordonnées adopté pour effectuer la projection. La résolution en ρ dépend du nombre de couches ou de l'épaisseur choisie. La résolution en θ s'identifie à la résolution en latitude de la simulation. La résolution en x est adaptative, elle adopte localement la valeur résultant du nombre de sous-parcours effectués par les rayons traversant l'atmosphère au milieu des couches au terminateur.

ci-dessous. Lorsque ce tableau n'est pas disponible, nous utilisons les pressions hybrides pour retrouver soit celles aux niveaux, soit celles en milieu de couche.

- "ps" : tableaux aux dimensions (N_t, N_ϕ, N_λ) qui indiquent la pression de surface en tout point et tout temps de la simulation. Lorsque ce tableau n'est pas disponible, la pression de surface est réévaluée à partir de la pression de la première couche ou à partir des pressions hybrides.
- "ap" et "bp" : tableaux aux dimensions $(N_t, N_r, N_\phi, N_\lambda)$ correspondant aux pressions hybrides à partir desquels nous pouvons retrouver la pression de n'importe quel niveau d'indice n :

$$P_n = ap_n + bp_n P_s \quad (2.13)$$

- "aps" et "bps" : tableaux aux dimensions $(N_t, N_r, N_\phi, N_\lambda)$ correspondant aux pressions hybrides à partir desquels nous pouvons retrouver au milieu des couches d'indice i :

$$P_i = ap_i + bp_i P_s \quad (2.14)$$

La simulation fournit les tableaux pour la température et les fractions massiques des éventuels aérosols. À partir des données de température, nous évaluons la hauteur d'échelle locale et nous pouvons commencer à construire la grille spatiale. Cette dernière dépendant également du poids moléculaire moyen, nous devons définir la composition de chaque cellule de la simulation. Suivant les versions du GCM, la chimie est plus ou moins implantée, raison pour laquelle nous n'avons pas fait mention de tableaux déclinant cette composition moléculaire.

Dans les versions du code que nous avons utilisé, les fractions molaires de chaque espèce présente se déterminent à partir de grilles d'équilibre thermodynamique. Cet équilibre est pré-calculé pour un

échantillon de pressions et de températures données. Pour obtenir ses abondances, le GCM interpole la grille de composition linéairement par rapport à la température et par rapport au logarithme de la pression. Ceci permet de soulager le code des longs calculs dont les réseaux chimiques résolvant la cinétique et la thermodynamique ont besoin, mais d'un autre côté, présupposer que toutes les cellules de l'atmosphère puissent être à l'équilibre thermodynamique peut s'avérer discutable, en particulier lorsque les temps caractéristiques des mélanges, aux températures considérées, sont plus courts que les temps thermodynamiques.

Pytmosph3R exploite les entrées et les sorties du GCM, et en l'absence de chimie, il calcule la composition atmosphérique de la même manière. Ces tables ne fournissant que les abondances des molécules actives, nous déduisons de l'interpolation de ces dernières, le cas échéant, celles des molécules inactives (qui ne contribuent pas à l'absorption moléculaire mais à d'autres types d'absorption) comme le dihydrogène et l'hélium. Cela dit, il nous faut avoir connaissance du ratio en abondance qui les lient, x_{He/H_2} par exemple, dans quel cas :

$$\chi_{\text{H}_2} = \left(1 - \sum_e^{N_e} \chi_e\right) \frac{1}{1 + x_{\text{He}/\text{H}_2}} \quad (2.15)$$

$$\chi_{\text{He}} = \left(1 - \sum_e^{N_e} \chi_e\right) \frac{x_{\text{He}/\text{H}_2}}{1 + x_{\text{He}/\text{H}_2}} \quad (2.16)$$

Il se peut que l'atmosphère ne présente que du dihydrogène ou de l'hélium, il suffit alors dans ces cas de figure de modifier le ratio x_{He/H_2} . En le fixant à 0, l'atmosphère est exempt d'hélium, et en le fixant à une valeur très grande (∞) nous ramenons le dihydrogène à une fraction molaire nulle. Il se peut également que ces espèces ne soient pas présentes du tout, dans quel cas une option permet de ramener ces quantités à 0, tout en vérifiant que l'interpolation respecte bien la conservation de la matière (la somme des fractions molaires doit être égale à 1). Si ce n'est pas le cas, une correction est appliquée consistant simplement à diviser l'ensemble des fractions molaires par leur somme, ce qui permet d'en conserver les proportions.

Enfin, certaines simulations ne sont pas associées à une table d'équilibre chimique, notamment lorsqu'il y a peu de molécules dans l'atmosphère. Le GCM retrouve les abondances par l'intermédiaire d'un traceur moléculaire dont on en connaît la fraction massique en tout point de la grille. La connaissance des ratios d'abondance entre les autres espèces permet de retrouver toutes les fractions molaires. À titre d'exemple, considérons une atmosphère de dioxyde de carbone, d'eau et de méthane pour laquelle l'eau serait le traceur moléculaire, et pour un ratio $x_{\text{CO}_2/\text{CH}_4}$ connu. Par définition, la fraction massique w d'une espèce s'exprime comme :

$$w_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{m_{\text{H}_2\text{O}}}{m_{\text{air}}} = \frac{x_{\text{H}_2\text{O}}\mu_{\text{H}_2\text{O}}}{m_{\text{air}}} = \frac{x_{\text{H}_2\text{O}}\mu_{\text{H}_2\text{O}}}{\sum_e x_e \mu_e} \quad (2.17)$$

et dans notre exemple :

$$\begin{aligned} m_{\text{air}} &= x_{\text{H}_2\text{O}}\mu_{\text{H}_2\text{O}} + x_{\text{CO}_2}\mu_{\text{CO}_2} + x_{\text{CH}_4}\mu_{\text{CH}_4} \\ 1 - x_{\text{H}_2\text{O}} &= x_{\text{CO}_2} + x_{\text{CH}_4} = x_{\text{CO}_2}(1 + x_{\text{CO}_2/\text{CH}_4}) \\ x_{\text{CO}_2} &= \frac{1 - x_{\text{H}_2\text{O}}}{1 + x_{\text{CO}_2/\text{CH}_4}} \end{aligned} \quad (2.18)$$

$$(2.19)$$

$$x_{\text{CH}_4} = \frac{(1 - x_{\text{H}_2\text{O}})x_{\text{CO}_2/\text{CH}_4}}{1 + x_{\text{CO}_2/\text{CH}_4}} \quad (2.20)$$

$$\begin{aligned} m_{\text{air}} &= x_{\text{H}_2\text{O}}\mu_{\text{H}_2\text{O}} + \frac{1 - x_{\text{H}_2\text{O}}}{1 + x_{\text{CO}_2/\text{CH}_4}}\mu_{\text{CO}_2} + \frac{(1 - x_{\text{H}_2\text{O}})x_{\text{CO}_2/\text{CH}_4}}{1 + x_{\text{CO}_2/\text{CH}_4}}\mu_{\text{CH}_4} \\ &= x_{\text{H}_2\text{O}} \left(\mu_{\text{H}_2\text{O}} - \frac{\mu_{\text{CO}_2}}{1 + x_{\text{CO}_2/\text{CH}_4}} - \frac{\mu_{\text{CH}_4}x_{\text{CO}_2/\text{CH}_4}}{1 + x_{\text{CO}_2/\text{CH}_4}} \right) + \frac{\mu_{\text{CO}_2}}{1 + x_{\text{CO}_2/\text{CH}_4}} + \frac{\mu_{\text{CH}_4}x_{\text{CO}_2/\text{CH}_4}}{1 + x_{\text{CO}_2/\text{CH}_4}} \end{aligned} \quad (2.21)$$

En remplaçant dans Eq. (2.20) l'expression de la masse d'un kilogramme d'air donnée par Eq. (2.21), nous pouvons isoler la fraction molaire en eau et l'exprimer en fonction des poids moléculaires, des abondances relatives et de la fraction massique en traceur :

$$x_{\text{H}_2\text{O}} = \frac{w_{\text{H}_2\text{O}}(\mu_{\text{CO}_2} + \mu_{\text{CH}_4}x_{\text{CO}_2/\text{CH}_4})}{\mu_{\text{H}_2\text{O}}(1 + x_{\text{CO}_2/\text{CH}_4}) + w_{\text{H}_2\text{O}}(\mu_{\text{CO}_2} + \mu_{\text{CH}_4}x_{\text{CO}_2/\text{CH}_4} - 1)} \quad (2.22)$$

Eq. (2.18) et Eq. (2.19) permettent de calculer les fractions molaires manquantes. Cette méthode est tout à fait adaptée aux atmosphères chimiquement inertes ou à la composition relativement homogène comme c'est le cas pour l'atmosphère terrestre par exemple (on remplacerait alors le dioxyde de carbone et le méthane par du diazote et du dioxygène). Elle est encore plus simple lorsqu'il n'y a que deux molécules dans l'atmosphère. Lorsque la chimie est vive ou que la composition est très variable, les rapports d'abondance peuvent évoluer fortement entre deux points de la simulation, et nous devons : soit connaître en tout point ses ratios ; soit être capable de les déduire de la température et de la pression (dans une grille d'interpolation par exemple).

Le poids moléculaire moyen μ est ensuite calculé à partir de ces fractions molaires.

Construction de la grille sphérique régulière de référence

Une fois ses sorties extraites et les altitudes déterminées, nous obtenons notre grille sphérique spatiale équivalente à la grille sphérique en pression du GCM. Nous construisons à partir de là une nouvelle grille, toujours sphérique mais régulière, qui servira de référence finale pour la résolution du transfert radiatif. Pour que les correspondances entre le maillage cylindrique dans lequel nous effectuerons cette résolution et la grille de données sphérique soient optimales, et pour que les calculs soient moins fastidieux, nous choisissons un découpage en couches d'égales épaisseurs. Pour ce faire, nous relevons l'altitude la plus élevée de la grille spatiale irrégulière et nous la définissons comme toit (h_0) de notre grille régulière.

Le nombre de couches déterminera également la résolution du maillage cylindrique. Le code fonctionne sur plusieurs modes possibles :

- **N fixé** : le nombre de couches est imposé à partir de la connaissance de l'altitude maximale. Cette même altitude peut être réduite si par exemple il a été montré que les dernières couches du modèle n'avaient pas d'influence sur le spectre et que l'on pouvait s'en séparer.
- **Épaisseur de couche fixée** : nous pouvons aussi imposer l'épaisseur des couches, dans ce cas leur nombre est déduit de l'altitude maximale h_0 , qui est ensuite réévaluée pour correspondre à un multiple de cette épaisseur.

Plutôt qu'à partir d'une altitude maximale, l'algorithme peut également découper le modèle avec une pression de toit imposée (P_t). Il se peut qu'elle soit inférieure aux pressions du GCM, dans quel

cas nous effectuons une extrapolation de la partie de l'atmosphère qui n'est pas simulée. Il est déjà nécessaire d'extrapoler la plupart des colonnes du modèle dans une grille régulière en altitude puisque, le toit étant défini comme l'altitude maximale que le modèle peut atteindre, toutes les autres colonnes sont en conséquence plus basses et quelques couches ne sont probablement pas représentées par les données du GCM (voir la Figure 2.4). Pour tous les points tels que $h_{\varphi,\lambda} < z < h$ où $h_{\varphi,\lambda}$ est le toit de la colonne considérée, nous effectuons une extrapolation isotherme. La température du dernier niveau de la simulation sert donc à estimer la pression et la composition des couches manquantes. Ainsi, si n_g est l'indice de la dernière couche représentée par les données de la simulation à la latitude φ et longitude λ :

$$P_{n_g+i,\varphi,\lambda} = P_{n_g} \exp \left(-\frac{1}{H_{g,\varphi,\lambda}} \left(\frac{1}{1 + i \frac{\Delta z}{R_p}} \right) \right) \quad (2.23)$$

$$H_{g,\varphi,\lambda} = \frac{k_B T_{g,\varphi,\lambda}}{\mu_{g,\varphi,\lambda} g_{g,\varphi,\lambda}} \quad (2.24)$$

où g_g , T_g et μ_g sont respectivement l'accélération de la pesanteur, la température et le poids moléculaire moyen du toit de la simulation GCM d'origine. Les abondances sont ensuite déduites de la grille d'interpolation, toujours en faisant bien attention à respecter la conservation de la matière avec Eq. (2.15). Les fractions massiques des aérosols sont identifiées, comme la température, à celles de la dernière couche représentée. Elles peuvent également être ramenées à 0 dans le cas où ces quantités seraient trop importantes, ce qui peut se produire pour des simulations qui ne seraient pas descendues assez bas en pression et qui comporteraient encore des nuages sur leurs derniers niveaux.

Dans le cas de figure où la pression de toit que l'on impose serait inférieure à celle de la simulation, nous extrapolons la haute atmosphère de la même manière. Nous pouvons spécifier une fonction de température code si nous ne voulons pas d'une haute atmosphère isotherme. Cette extrapolation est réalisée une fois que l'épaisseur finale de l'atmosphère dans la grille de référence h est obtenue à partir de la pression de toit P_t imposée, P_h et de h_0 . Elle peut être définie de plusieurs manière, conditionnant le calcul de h . Nous pouvons la choisir comme :

- **la pression minimale que l'on souhaite sonder dans l'atmosphère** : nous voulons que toutes les pressions de la dernière couche de notre grille de référence soient inférieures ou égales à cette pression, dans ce cas nous prenons la hauteur d'échelle H_{max} la plus élevée de la dernière couche et nous l'utilisons pour estimer l'altitude supplémentaire nécessaire pour atteindre cette pression. Si h_0 est le toit du modèle seul et P_h la pression associée à la cellule de toit, alors :

$$h = h_0 + \Delta z = h_0 + \alpha \left(\frac{1 + h_0/R_p}{1 - \alpha/R_p} \right) \quad (2.25)$$

avec :

$$\alpha = \left(1 + \frac{h_0}{R_p} \right) \frac{1}{H_{max}} \ln \left(\frac{P_h}{P_t} \right) \quad (2.26)$$

- **la pression minimale observable** : toutes les pressions de notre toit doivent être supérieures ou égales. Pour cela il suffit de remplacer H_{max} dans Eq. (2.25) par H_{min} qui est donc la hauteur d'échelle la plus faible à l'altitude h_0 .
- **une pression moyenne** : nous calculons la hauteur d'échelle moyenne et nous déduisons l'altitude en remplaçant H_{max} par H_{moy} dans Eq. (2.25).

Une fois que le toit de la grille est fixé, suivant le mode utilisé, le code recalcule l'épaisseur des couches en conservant le nombre désiré ou en rajoute jusqu'à être au plus près de l'altitude souhaitée. Chaque cellule supplémentaire est extrapolée. Dorénavant, nous noterons P_h la pression de toit de la grille sphérique régulière de référence et h son épaisseur. Notons que la manière dont nous allons résoudre le transfert radiatif va également influencer sur la génération de cette grille, nous présentons donc la maille dans laquelle nous allons travailler.

2.2.3 Maillage cylindrique semi-régulier

Comme l'illustrent les Figures 2.4 et 2.5, nous définissons un repère cylindrique tel que l'axe x corresponde à l'axe astre-observateur, dirigé vers l'observateur. ρ n'est autre que la distance du point considéré à l'axe x et l'angle θ est défini comme l'angle formé par le vecteur $\rho = \rho \mathbf{u}_\rho$ et l'axe polaire. Ainsi le point de coordonnée $(R_p, 0, 0)$ est associé à la surface du pôle Nord, le point $(R_p, \frac{\pi}{2}, 0)$ à celle de l'équateur Ouest, et ainsi de suite. On remarquera que la nouvelle grille atmosphérique est beaucoup mieux adaptée à notre maillage. Elle posera d'ailleurs beaucoup moins de problèmes lorsque nous ajouterons l'inclinaison et l'obliquité.

La résolution radiale N_ρ , donc en ρ , est régulière, c'est-à-dire que les cylindres creux dans lesquels nous allons résoudre le transfert radiatif seront d'égale épaisseur. Sa valeur dépend du découpage que l'on souhaite faire de la simulation, et inversement. Pour produire un spectre en perdant le moins d'information possible, il est préférable de prévoir au moins autant de couches que dans le GCM. Comme la plupart du temps, les dernières couches de la simulation sont aussi celles qui imposent la signature spectrale de l'atmosphère, il est important qu'elles soient correctement résolues. Pour s'assurer de la participation de toutes les couches de la grille sphérique, il est même judicieux de doubler cette résolution. Ainsi les premières couches, moins épaisses que celles de la grille cylindrique puisqu'à résolution égale un découpage en pression induit aussi un découpage en altitude croissant, seront elles aussi résolues.

La résolution azimutale N_θ , donc en θ , est aussi régulière. Le pas angulaire est calculé de manière à s'identifier à celui en latitude de la simulation. Si nous pouvons augmenter cette résolution, il se trouve que cela n'apporterait pas chose dans la génération du spectre si ce n'est la multiplication du temps de calcul. Une simulation à 49 points de latitude sera donc projetée dans une maille cylindrique de résolution azimutale de 96. L'origine est donc l'ensemble des rayons de coordonnée $\theta = 0^\circ$, ce qui coïncide avec le pôle Nord lorsque l'on est observateur.

La résolution tangente N_x , donc en x , est quant à elle adaptative. Figure 2.5 illustre cela pour une coupe transversale de l'atmosphère sur la figure de droite. Si on tire un rayon de telle manière à ce qu'il passe par le milieu de la cellule au terminateur, il traverse un ensemble de cellules de la grille de latitudes, de longitudes et d'altitudes différentes. Chaque fois que l'une de ces coordonnées change, la résolution est augmentée de 1. Nous subdivisons ainsi le trajet optique du rayon en sous-parcours dans lesquels nous avons pleine connaissance des propriétés atmosphériques. Sur l'exemple illustré, le trajet du rayon rasant voit 10 changements d'altitude, 10 changement de latitude et 1 changement de longitude au terminateur, il est donc subdivisé en 22 parcours (21 + 1 initial) et la résolution de la ligne visée ($\rho = 0, \theta = 0$) est de 22. Il peut arriver que des changements surviennent en même temps dans quel cas le code n'en considère qu'un seul (le changement d'altitude étant numériquement le plus simple à utiliser il le favorisera le cas échéant).

Le maillage sur la dimension x nécessite d'être révisé si l'exoplanète présente une inclinaison par rapport au plan écliptique et/ou une obliquité. Nous discutons de ce point en détails dans § 2.2.6.

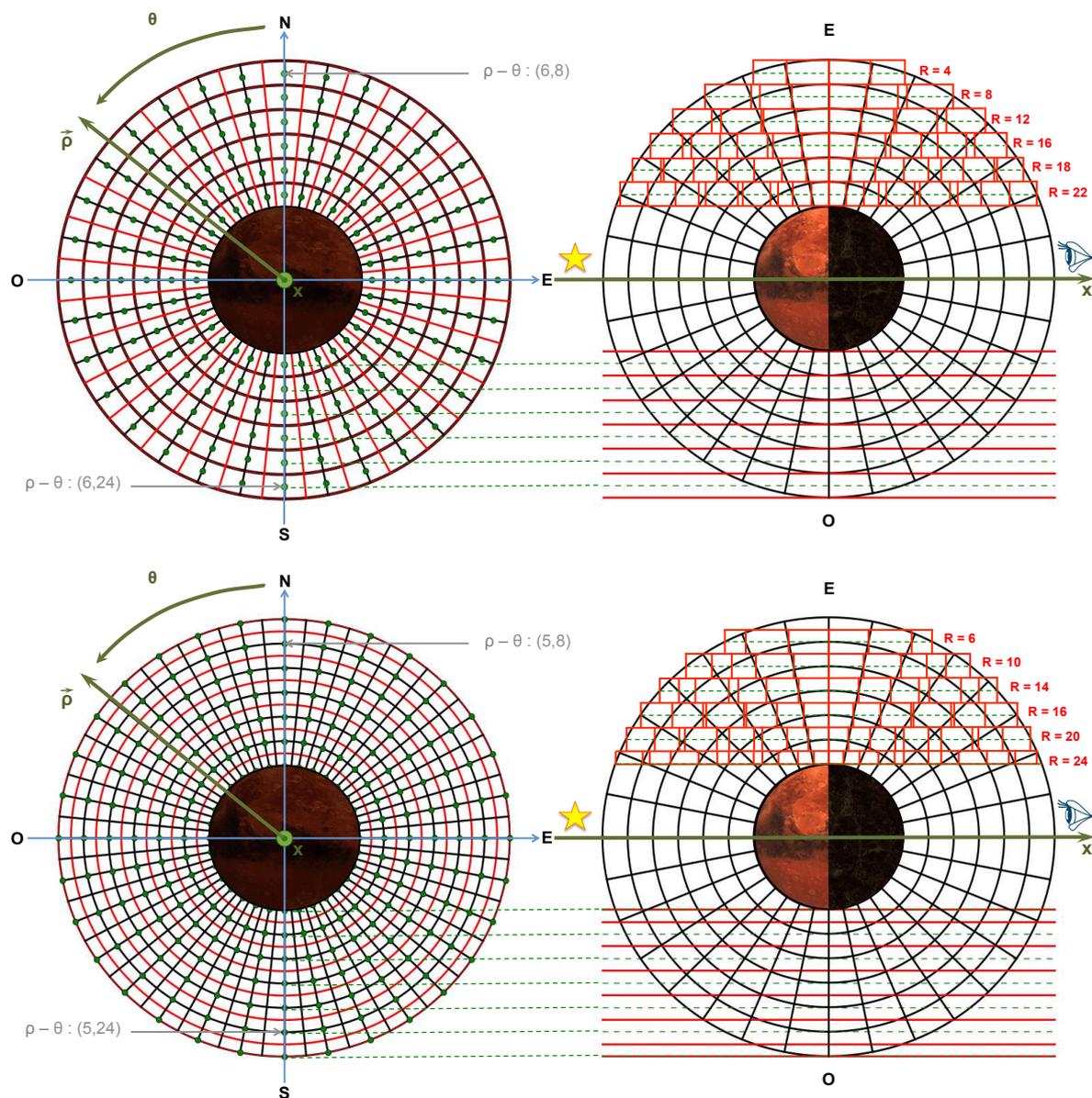


Figure 2.5: Ces figures illustrent la même projection que pour Figure 2.4, mais cette fois-ci avec la grille en altitude construite à partir de la simulation GCM. Les résolutions en ρ et θ sont les mêmes, tandis que la résolution en x gagne en symétrie et les distances au sein des sous-parcours deviennent nettement plus simple à calculer. La figure du haut permet de visualiser le maillage dans le cas où nous tirons les rayons de telle sorte qu'ils passent par le milieu des couches au terminateur. La figure du bas, quant à elle, concerne le cas où nous tirons les rayons de telle sorte qu'ils passent par les niveaux et non plus les milieux de couche. On remarquera que dans ce cas de figure, la première enveloppe est une demi-enveloppe et que le dernier niveau n'est pas représenté puisque le rayon passe au niveau du toit.

2.2.4 Structure de la grille sphérique de référence et modes de tirage

Structure de la grille atmosphérique de référence

La maille cylindrique précédemment définie va permettre une correspondance rapide avec la grille atmosphérique de par les choix qui ont été faits ici. Comme nous le développerons dans la section suivante (§ 2.3), le code peut effectuer la résolution du transfert radiatif de manière discrète, en considérant que l'atmosphère est homogène au sein d'un sous-parcours, ou de manière semi-intégrale en tenant compte de l'évolution de la densité moléculaire avec l'altitude. Le tableau contenant l'ensemble des informations de la grille atmosphérique finale, les *data convert* dans le code, adopte une structure en conséquence stricte :

- Ce sont des tableaux de dimensions $(n_v, n_t, n_l, n_\phi, n_\lambda)$ où n_v est le nombre de variables qui nous seront utiles : 1 pour chaque molécule entrant dans la composition atmosphérique, 1 pour la pression, 1 pour la température, 1 pour chaque aérosol, 1 pour le traceur si nous utilisons les mêmes opacités que le GCM, et 1 pour la masse molaire. n_t est le nombre d'instant t contenus dans la simulation, n_l est égal au nombre de couches augmenté de 2 pour un tirage en milieu de couche et de 1 pour un tirage aux niveaux, n_ϕ est la résolution en latitude de la simulation et n_λ celle en longitude.
- Les données sont toujours rangées dans l'ordre suivant :
 - l'indice $i_v = 0$ est toujours la pression en Pa,
 - l'indice $i_v = 1$ est toujours la température en K.
 - Si la simulation utilise un traceur, alors $i_v = 2$ correspond à la fraction massique de ce traceur en kg/kg(air).
 - Les indices suivants sont réservés aux aérosols, s'ils sont au nombre de n_a alors nous retrouvons leurs quantités aux indices $i_v = 2 + n_q$ jusqu'à $i_v = 2 + n_q + n_a$, avec $n_q = 1$ s'il y a un traceur, et $n_q = 0$ dans le cas contraire. Ils sont également exprimés en kg/kg(air).
 - Si l'atmosphère est composée de n_e espèces, alors les indices $i_v = 2 + n_q + n_a$ à $i_n = 2 + n_q + n_a + n_e$ correspondent à leurs fractions molaires. Le premier indice correspond toujours à l'abondance en dihydrogène et le deuxième à l'hélium. Quand les simulations ne présentent pas l'un et/ou l'autre, ces indices comportent des tableaux de 0.
 - Enfin le dernier indice $i_v = n - 1$ correspond à la masse molaire en kg/mol.
- n_l est égal à $N + 2$ pour un tirage en milieu de couche car le premier point d'indice $i_{n_l} = 0$ va correspondre aux caractéristiques de surface de l'atmosphère tandis que le dernier point $i_{n_l} = n_l - 1$ nous informe des propriétés du toit. Pour un tirage sur les niveaux, leur nombre est de $N + 1$, d'où $n_l = N + 1$.
- Toutes les quantités (pression, température ...) associées à des indices différents de $i_{n_l} = 0$ et $i_{n_l} = n_l - 1$ (respectivement les quantités de surface et les quantités du toit) sont interpolées/extrapolées en milieu de couche ou sur les niveaux. La grille sphérique est structurée de manière à ce que nous n'ayons plus qu'à la lire pour calculer les opacités dans la maille cylindrique.

Les rayons peuvent être tirés comme nous le souhaitons

Nous appelons tirage le mode de traversée des rayons stellaires dans l'atmosphère. Le maillage prédétermine la manière dont il est effectué de par la définition de ρ . Jusque-là nous n'avions illustré

que le cas de figure où le découpage en cylindre creux était parfaitement régulier, ce qui sous-entendait un tirage tel que chaque rayon d'échantillonnage, représentés par les points verts Figure 2.5, passait par le milieu de couche au terminateur. Sur la carte de transmittance $T(\rho, \theta)$ résultante, ce découpage affecte des surfaces correspondant à des anneaux d'épaisseur $\Delta\rho = \Delta z$ et de rayons internes $R_{min} = R_p + i\Delta z$ et externes $R_{min} = R_p + (i + 1)\Delta z$, où nous rappelons que i est l'indice de la couche (voir la Figure 2.4) allant de 0 à $N - 1$.

Par défaut c'est en effet le choix effectué par Pytmosph3R, mais nous pouvons également imaginer n'importe quel découpage en fonction de la position où nous souhaitons tirer nos rayons. Ainsi, la Figure 2.5 illustre également l'autre cas de figure que l'on peut couramment rencontrer et qui consiste à faire en sorte que les rayons passent par les niveaux au terminateur, incluant la surface et le toit. Ici les données sont donc calculées pour les niveaux et non plus pour les milieux de couche, et le premier comme le dernier anneau ne sont plus que des demi-anneaux. On considère donc que les propriétés atmosphériques sont homogènes entre deux milieux de couche successifs alors que dans le découpage précédent, elles l'étaient entre deux niveaux successifs.

Au-delà de ces deux options intuitives, toutes les autres possibilités intermédiaires sont réalisables. On note ω la position du rayon d'échantillonnage par rapport aux niveaux tel que :

- si $\omega = 0$, alors le tirage s'effectue sur les niveaux, avec toutes les conséquences sur le maillage et la refonte des sorties de la simulation,
- si $\omega = 0,5$ alors le tirage s'effectue au milieu des couches.

En précisant ce paramètre à Pytmosph3R, il peut générer alors des maillages adaptés. Par exemple nous pouvons imaginer un tirage en milieu de couche mais en pression cette fois-ci, et non plus en altitude. En faisant l'approximation qu'entre deux niveaux l'accélération de la pesanteur est constante et que la hauteur d'échelle l'est également, cela revient à effectuer un tirage à $\omega = 0,37$, nous repassons à une structure $n_l = N + 2$ et hormis le premier et le dernier point, tous les autres sont calculés à $(i + 0,37)\Delta z$, i allant de 0 à $N - 1$. Le premier et le dernier anneau voient également leurs contributions changer, ce qu'il ne faudra pas oublier lors de l'intégration qui permettra l'estimation de l'aire opaque de l'atmosphère.

2.2.5 Correspondances entre les coordonnées de la maille cylindrique et de la grille sphérique de référence

Quel que soit le mode de tirage, une fois la refonte des sorties du GCM effectuée, extrapolée ou non, nous assignons à la maille une matrice de correspondance de manière à faire correspondre aux cellules de la maille cylindrique, de coordonnées (ρ, θ, x) , les propriétés atmosphériques correspondantes dans la grille sphérique de référence contenues dans les cellules de coordonnées (r, φ, λ) . Elle permet ainsi de travailler non plus avec l'ensemble des paramètres atmosphériques de l'atmosphère, mais avec des indices de tableau, et donc, des entiers, et exclusivement ceux qui interviendront dans le transfert radiatif. D'un point de vue technique, il est alors très simple et rapide de stocker une très grande quantité d'information dans un tableau aux dimensions plus raisonnables tout en limitant les calculs inutiles.

Dans le cas particulier sans inclinaison, rotation, obliquité et à la conjonction

En l'absence d'inclinaison ou d'obliquité, à la conjonction avec l'étoile hôte, le point sub-stellaire se situe au niveau de l'équateur. Considérons le centre d'une cellule de la maille cylindrique de coordonnées

(ρ, θ, x) , les coordonnées associées dans la grille sphérique $(r_c, \varphi_c, \lambda_c)$ s'obtiennent par les équations :

$$r_c = \sqrt{\rho^2 + x^2} \quad (2.27)$$

$$\lambda_c = \arctan\left(\frac{\rho \cos \theta}{x}\right) \quad (2.28)$$

$$\varphi_c = \arcsin\left(\frac{r \sin \theta}{r_c}\right) \quad (2.29)$$

Pour obtenir la correspondance avec la cellule de la grille atmosphérique, il suffit de retrouver les indices de la cellule i_{n_r} , i_{n_φ} et i_{n_λ} contenant le point de coordonnées $(r_c, \varphi_c, \lambda_c)$. Comme nous l'expliquions dans le paragraphe précédent, la résolution en x de la maille est adaptative car elle dépend du nombre de sous-parcours effectués par les rayons d'échantillonnage. Elle est donc déterminée à cette étape du traitement de la simulation. Pour déterminer cette résolution, calculer les distances parcourues et assigner les indices correspondant, nous posons pour critère que le rayon change :

- de champ de longitude lorsqu'il intercepte le demi-disque caractérisé par la longitude $\lambda_i = (i_\lambda + 0,5)\Delta\lambda$,
- de champ de latitude lorsqu'il intercepte le cône de demi-angle égale à $\varphi_i = -\pi/2 + (i_\varphi + 0,5)\Delta\varphi$
- de couche lorsqu'il intercepte la sphère de rayon $z = i_{n_r}\Delta r$.

Avec un paramètre de tirage ω , et une simulation de résolution $(n_r, n_\varphi, n_\lambda)$, les pas associés sont donc $\Delta\rho = \Delta x$, $\Delta\lambda = \frac{2\pi}{n_\lambda}$ et $\Delta\varphi = \frac{\pi}{n_\varphi}$. Ainsi, nous pouvons aussi écrire $r - R_p = (i_r + \omega)\Delta r$, $\theta = i_\theta\Delta\theta$ et :

$$i_{n_r} = \frac{r - R_p}{\Delta r} - (r - R_p) \bmod \Delta r + \left(1 - \delta(\omega = 0) + \delta\left((r - R_p) \bmod \Delta r > \frac{\Delta r}{2}\right)\right) \quad (2.30)$$

$$i_{n_\lambda} = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} - \lambda \bmod \Delta\lambda + \delta\left(\lambda \bmod \Delta\lambda > \frac{\Delta\lambda}{2}\right) \quad (2.31)$$

$$i_{n_\varphi} = \frac{\varphi}{\Delta\varphi} - \varphi \bmod \Delta\varphi + \delta\left(\varphi \bmod \Delta\varphi > \frac{\Delta\varphi}{2}\right) \quad (2.32)$$

Dans tous les autres cas, nous devons résoudre ce système d'équations dans la maille orientée par la position du point observateur et résoudre un système d'équations plus exhaustif. Nous traitons de cela dans le paragraphe suivant.

2.2.6 Correspondances dans le cas le plus général

Nous admettons à présent la possibilité que la planète ait une obliquité (φ_o, λ_o) , qu'elle soit inclinée par rapport au plan écliptique i et que la simulation ait subi une rotation λ_{rot} (soit du fait de la rotation propre de l'exoplanète contrôlée par ω_{rot} , soit parce que nous ne résolvons pas le transfert radiatif à la conjonction).

Détermination des coordonnées de l'observateur avec rotation, inclinaison et/ou obliquité

Les simulations GCM tournent effectivement indépendamment de la position de l'observateur, les grandeurs essentielles permettant de retrouver cette position ne sont autres que les coordonnées du point sub-stellaire. Ce point contient l'information de l'orientation de l'exoplanète par rapport au plan écliptique, autrement dit l'obliquité (φ_o, λ_o) de l'exoplanète et l'angle de rotation propre λ_{rot} . Il ne contient

pas en revanche l'information sur l'inclinaison i ou l'angle de phase. Il nous faut donc dans un premier temps définir un instant de référence t_c , une simulation en particulier qui correspondra temporellement au cas de figure où l'exoplanète est en conjonction avec son étoile du point de vue de l'observateur. La connaissance des coordonnées du point sub-stellaire (φ^*, λ^*) à cet instant nous renseigne donc sur l'état de la rotation propre et sur l'obliquité.

En l'absence d'inclinaison et pour un angle de phase nul, à la conjonction parfaite, l'observateur est donc parfaitement à l'opposé du point sub-stellaire et nous pouvons résoudre le transfert radiatif dans un cylindrique porté par la direction étoile/observateur comme présenté dans § 2.2.5.

Avec une rotation

Lorsque l'on n'est pas à la conjonction, la position du point sub-stellaire change dans le temps du fait de la rotation propre de l'exoplanète et de sa rotation autour de l'étoile. Comme nous travaillerons sur une unique simulation au sein d'un même transit, faisant l'hypothèse que sur l'échelle de temps considérée le climat change peu, et en définissant t_0 comme l'instant pour lequel l'étoile est à son périastre et L^* la longitude de l'étoile dans le plan orbital à cet instant précis, nous pouvons établir à tout moment t la longitude du point sub-stellaire λ^* par la connaissance de sa vitesse de rotation orbitale ω_{rot} :

$$\lambda^* = L^* - \omega_{rot}(t - t_0) \quad (2.33)$$

De la même manière, la longitude de l'observateur λ_{obs} se déduit de la longitude L_{obs} de l'exoplanète dans le plan orbital comme :

$$\lambda_{obs} = L_{obs} - \omega_{rot}(t - t_0) \quad (2.34)$$

La combinaison de ces deux équations montre que :

$$\lambda_{obs} = L_{obs} - L^* + \lambda^* \quad (2.35)$$

Si nous exprimons cette longitude à partir de la longitude de conjonction λ_c^* du point sub-stellaire et non plus L_{obs} :

$$\lambda_{obs} = \pi + \lambda_c^* - \omega_{rot}(t - t_c) \quad (2.36)$$

$$\varphi_{obs} = 0 \quad (2.37)$$

Avec une inclinaison

Si le système est incliné maintenant, une correction est alors à effectuer sur la latitude de l'observateur pour en tenir compte. Si b est le paramètre d'impact, soit la distance entre les centres des deux astres, qui les éloignent donc de la conjonction parfaite et a le demi-grand axe de l'orbite, alors l'inclinaison i n'est autre que :

$$i = \arccos\left(\frac{b}{a}\right) \quad (2.38)$$

La correction sur la latitude observateur est donc de $\pi/2 - i$:

$$\lambda_{obs} = \pi + \lambda_c^* - \omega_{rot}(t - t_c) \quad (2.39)$$

$$\varphi_{obs} = \pi/2 - i \quad (2.40)$$

Avec une obliquité

Enfin, en ce qui concerne l'obliquité, cette dernière est la composition d'une rotation sur deux angles λ_o et φ_o . Ces deux composantes s'identifient à λ_c^* et de φ_c^* à la conjonction. Nous avons pris le parti de minimiser les rotations lors de la transposition de la maille cylindrique et pour ce faire, la grille sphérique obtenue lors de l'étape précédente subit la rotation longitudinale totale, c'est-à-dire comprenant la rotation propre, le mouvement orbital et l'obliquité, et ce comme un multiple du pas de longitude. De cette manière, nous travaillons avec des angles faibles et nous pouvons faire abstraction d'un ensemble de difficultés qui seront rencontrées lors de la résolution du transfert radiatif (voir § 2.2.5). Il est plus aisé d'effectuer une rotation en latitude directement sur la grille sphérique étant donné sa géométrie. Au final, avec l'ensemble de ces paramètres, la position de l'observateur $(\varphi_{obs}, \lambda_{obs})$ dans la nouvelle grille atmosphérique devient :

$$\lambda_{obs} = \pi + \lambda_{c,corr}^* - \omega_{rot}(t - t_c) \quad (2.41)$$

$$\varphi_{obs} = \pi/2 - i - \varphi_c^* \quad (2.42)$$

où $\lambda_{c,corr}^*$ est la longitude résiduelle du point sub-stellaire (inférieure à un pas) après applications de la rotation propre et de la composante λ_o :

$$\lambda_{c,corr}^* = \lambda_c^* - \lambda_o - \lambda_{rot} \quad (2.43)$$

L'axe x de la maille cylindrique est alors porté par la droite qui relie le centre de l'exoplanète et l'observateur.

Équations de correspondance dans le cas général par changement de repère

Avant de commencer le calcul des distances mises en jeu au sein de chaque sous-parcours nous devons établir le jeu d'équations qui permettra la détermination de l'ensemble des positions théoriques x associées aux changements de cellule dans la grille sphérique. Nous définissons (X, Y, Z) le repère géographique de l'exoplanète et O son centre. La longitude λ est définie dans ce repère comme étant l'angle formé par la projection du vecteur **OM**, M étant un point quelconque dans le plan XOY, sur l'axe OX. La latitude φ est quant à elle définie comme l'angle formé entre cette même projection et le vecteur **OM**. Pour un observateur dont les coordonnées angulaires seraient $(\varphi_{obs}, \lambda_{obs})$, l'axe x de la maille cylindrique est porté par un vecteur unitaire noté **u_{obs}** de coordonnées :

$$\begin{aligned} u_{obs}^X &= \cos \varphi_{obs} \cos \lambda_{obs} \\ u_{obs}^Y &= \cos \varphi_{obs} \sin \lambda_{obs} \\ u_{obs}^Z &= \sin \varphi_{obs} \end{aligned} \quad (2.44)$$

Si M est un point du rayon d'échantillonnage à la position x, alors nous pouvons décomposer le vecteur **OM** comme **OR** + x**u_{obs}** où **OR** n'est autre que **OR** = $\rho \mathbf{u}_\rho$. Il nous faut donc dans un premier temps déterminer pour chaque rayon d'échantillonnage les coordonnées de ce vecteur **OR** dans la base (X, Y, Z) afin de remonter à celles de **OM**, nous les noterons X_o, Y_o et Z_o. **OR** et **u_{obs}** étant orthogonaux entre eux :

$$\mathbf{u}_{obs} \cdot \mathbf{OR} = X_o \cos \varphi_{obs} \cos \lambda_{obs} + Y_o \cos \varphi_{obs} \sin \lambda_{obs} + Z_o \sin \varphi_{obs} \quad (2.45)$$

Nous connaissons également la norme du vecteur **OR** puisque :

$$\|\mathbf{OR}\| = \rho = \sqrt{X_o^2 + Y_o^2 + Z_o^2} \quad (2.46)$$

Enfin, si nous définissons le vecteur \mathbf{u}_z dans le plan perpendiculaire à \mathbf{u}_{obs} , et Z_z la projection de l'axe OZ porté par le vecteur unitaire \mathbf{u}_z :

$$Z_z \mathbf{u}_z = \mathbf{u}_z - (\mathbf{u}_z \cdot \mathbf{u}_{obs}) \cdot \mathbf{u}_{obs} = \mathbf{u}_z - \sin \varphi_{obs} \mathbf{u}_{obs} \quad (2.47)$$

$$\begin{aligned} \|Z_z \mathbf{u}_z\| &= Z \sqrt{\mathbf{u}_{obs}^X \sin^2 \varphi_{obs} + \mathbf{u}_{obs}^Y \sin^2 \varphi_{obs} + (1 - \sin^2 \varphi_{obs} \mathbf{u}_{obs}^Z)^2} \\ &= \sqrt{\sin^2 \varphi_{obs} - 2 \sin^2 \varphi_{obs} + 1} = \cos \varphi_{obs} \end{aligned} \quad (2.48)$$

Nous pouvons alors isoler la composante Z_o de \mathbf{OR} grâce à ce vecteur $Z_z \mathbf{u}_z$:

$$Z_z \mathbf{u}_z \cdot \mathbf{OR} = \mathbf{u}_z \cdot \mathbf{OR} - \sin \varphi_{obs} \mathbf{u}_{obs} \cdot \mathbf{OR} = \mathbf{u}_z \cdot \mathbf{OR} = Z_o = \|\mathbf{u}_z\| \cdot \|\mathbf{OR}\| \cos \theta = \rho \cos \theta \cos \varphi_{obs} \quad (2.49)$$

puisque l'angle θ est défini par rapport à cet axe porté par \mathbf{u}_z . À partir de Eq. (2.45), Eq. (2.46) et de Eq. (2.49), nous pouvons résoudre ce système de 3 équations à 3 inconnues et déterminer Y_o , et X_o :

$$X_o = -\frac{\rho \sin \varphi_{obs} \cos \theta + Y_o \sin \lambda_{obs}}{\cos \lambda_{obs}} \quad (2.50)$$

$$X_o^2 = \rho^2 \cos^2 \theta \frac{\sin^2 \varphi_{obs}}{\cos^2 \lambda_{obs}} + 2\rho Y_o \sin \varphi_{obs} \cos \theta \frac{\tan \lambda_{obs}}{\cos \lambda_{obs}} + Y_o^2 \tan^2 \lambda_{obs} \quad (2.51)$$

Nous remplaçons dans Eq. (2.46) X_o et Z_o de façon à isoler Y_o et finir la résolution de ces équations :

$$\begin{aligned} \rho^2 \cos^2 \theta \frac{\sin^2 \varphi_{obs}}{\cos^2 \lambda_{obs}} + 2\rho Y_o \sin \varphi_{obs} \cos \theta \frac{\tan \lambda_{obs}}{\cos \lambda_{obs}} + Y_o^2 (1 + \tan^2 \lambda_{obs}) + \rho^2 \cos^2 \theta \cos^2 \varphi_{obs} - \rho^2 &= 0 \\ Y_o^2 + Y_o (2\rho \cos \theta \sin \varphi_{obs} \sin \lambda_{obs}) + \rho^2 (\cos^2 \theta (\sin^2 \varphi_{obs} + \cos^2 \varphi_{obs} \cos^2 \lambda_{obs}) - \cos^2 \lambda_{obs}) &= 0 \end{aligned} \quad (2.52)$$

Cette équation accepte deux solutions pour Y_o . Dans la moitié de plan pour lequel $\theta < 0$, c'est la racine positive qui est solution, dans l'autre moitié $\theta > 0$, c'est la racine négative. Eq. (2.50) nous permet d'en déduire la solution associée à X_o et Eq. (2.49) nous donnait déjà Z_o . À noter qu'en l'absence de toute rotation, et en supposant que l'observateur est à $\varphi_{obs} = 0$ et $\lambda_{obs} = 0$, les coordonnées du vecteur \mathbf{OR} ne sont autres que :

$$\begin{aligned} X_o &= 0 \\ Y_o &= -\rho \sin \theta \\ Z_o &= \rho \cos \theta \end{aligned} \quad (2.53)$$

ce qui correspond au comportement attendu de \mathbf{OR} .

À présent que nous avons établi les correspondances entre la maille cylindrique et la grille sphérique de référence, la connaissance de (X_o, Y_o, Z_o) va nous permettre de déterminer les positions x des changements d'indices dans le repère (r, φ, λ) le long des chemins optiques correspondant aux rayons d'échantillonnage (ρ, θ) . De leurs positions nous en déduisons les distances parcourues par les rayons au sein de chaque sous-parcours.

Calculs des distances parcourues au sein des sous-parcours

Changement d'indice en altitude, i_r

Les surfaces traduisant du passage d'une couche d'altitude à une autre sont des sphères caractérisées par $r = \sqrt{\rho^2 + x^2}$, on peut en déduire immédiatement la position $x_{n|n+1}$ sur la ligne de visée caractérisée par la coordonnée $\rho = i_\rho \Delta\rho$, l'angle θ n'ayant pas d'influence étant donné la symétrie :

$$x_{n|n+1} = \sqrt{r^2 - \rho^2} \quad (2.54)$$

$$\begin{aligned} &= \sqrt{(R_p + (n+1)\Delta\rho)^2 - (R_p + (i_\rho + \omega)\Delta\rho)^2} \\ &= \sqrt{2R_p\Delta\rho((n+1) - (i_\rho + \omega)) + \Delta\rho^2((n+1)^2 - (i_\rho + \omega)^2)} \end{aligned} \quad (2.55)$$

$x_{n|n+1}$ est une grandeur positive de par son écriture, elle est néanmoins rendue négative si nous n'avons pas encore dépassé le terminateur et que nous sommes du côté étoile. Si cette distance correspond au premier changement d'indice dans la simulation atmosphérique et que le toit du modèle est à l'altitude h , la distance parcourue par le rayon lumineux dans ce sous-parcours est donc :

$$\begin{aligned} \Delta x &= x_h - x_{n|n+1} \\ &= \sqrt{(R_p + h)^2 - (R_p + (i_r + \omega)\Delta\rho)^2} - \sqrt{2R_p\Delta\rho(i_{n_l} - i_r - \omega) + \Delta\rho^2(i_{n_l}^2 - (i_r + \omega)^2)} \end{aligned} \quad (2.56)$$

Changement d'indice en longitude, λ_i

Le changement de la longitude lors d'un parcours n'étant autre que l'intersection de la ligne de visée et du méridien intermédiaire, le code détermine tous les méridiens présentant une solution sur une position x sauf lorsque le rayon est dans le plan méridional, ce qui est le cas par exemple pour les rayons $\theta = 0$ ou $\theta = \pi$ en l'absence de rotation, puisque sur la moitié de leurs trajets ils évoluent dans la longitude $\lambda = \pi$, puis dans la longitude $\lambda = 0$ sur l'autre moitié.

$$\begin{aligned} \tan \lambda_i &= \frac{OM^Y}{OM^X} = \frac{Y_o + x_{i_\lambda|i_\lambda+1} \cos \varphi_{obs} \sin \lambda_{obs}}{X_o + x_{i_\lambda|i_\lambda+1} \cos \varphi_{obs} \cos \lambda_{obs}} \\ x_{i_\lambda|i_\lambda+1} &= \frac{Y_o - X_o \tan \lambda_i}{\cos \varphi_{obs} (\cos \lambda_{obs} \tan \lambda_i - \sin \lambda_{obs})} \end{aligned} \quad (2.57)$$

Changement d'indice en latitude, φ_i

Le changement de la latitude lors d'un parcours n'étant que l'intersection de la ligne de visée et du cône de latitude intermédiaire, le code détermine pour chaque cône l'existence ou non de positions solutions x . Les équations ci-dessous sont écartées dans le cas de figure où le rayon évolue sur une même latitude, ce qui se produit notamment en l'absence de rotation pour les rayons $\theta = \pi/2$ et $\theta = 3\pi/2$.

$$\begin{aligned} \sin \varphi_i &= \frac{OM^Z}{r} = \frac{Z_o + x_{i_\varphi|i_\varphi+1} \sin \varphi_{obs}}{\sqrt{\rho^2 + x_{i_\varphi|i_\varphi+1}^2}} \\ x_{i_\varphi|i_\varphi+1}^2 (\sin^2 \varphi_i - \sin^2 \varphi_{obs}) - x_{i_\varphi|i_\varphi+1} (2Z_o \sin \varphi_{obs}) + (\rho^2 \sin^2 \varphi_i - Z_o^2) &= 0 \end{aligned} \quad (2.58)$$

Comme la latitude est symétrique par rapport à l'axe OZ , les deux solutions $x_{i_\varphi|i_\varphi+1}$ sont retenues et associées à φ_i . La racine négative correspondra à la première intersection et la racine positive à la deuxième intersection.

Une fois l'ensemble des x établis pour un rayon (ρ, θ) , ces distances sont rangées dans l'ordre croissant, et les distances des sous-parcours correspondent alors la différence entre deux x solutions

successifs. Lorsque ces distances sont identiques parce que le rayon a intercepté une arête ou un coin de cellule, seul l'un des changements est retenu. Comme il est finalement délicat de tout le temps retrouver les indices i_{n_l} , i_{n_φ} , et i_{n_λ} , en particulier lorsque φ_{obs} est grand, nous les évaluons juste avant les intersections à partir de Eq. (2.54), Eq. (2.57) et de Eq. (2.58).

De ces quantités précédemment déterminées, nous pouvons en déduire également les altitudes z associées en retournant Eq. (2.59) puisque $z = r - R_p$ (notons que $\Delta r = \Delta \rho$) :

$$z_{i_\rho, n|n+1} = r - R_p = (n + 1)\Delta\rho \quad (2.59)$$

$$z_{i_\rho, i_\theta, i_\lambda | i_{\lambda+1}} = r \left(1 + \left(\frac{\cos \theta}{\tan \left(\frac{\lambda_{i_\lambda} + \lambda_{i_{\lambda+1}}}{2} \right)} \right)^2 \right) - R_p \quad (2.60)$$

$$= (R_p + (n + 1)\Delta\rho) \left(1 + \left(\frac{\cos(i_\theta \Delta\theta)}{\tan \left(\frac{(2i_\lambda + 1)\pi}{n_\lambda} - \pi \right)} \right)^2 \right) - R_p$$

$$z_{i_\rho, i_\theta, i_\varphi | i_{\varphi+1}} = r \left(\frac{\sin \theta}{\sin \left(\frac{\alpha_{i_\varphi} + \alpha_{i_{\varphi+1}}}{2} - \frac{\pi}{2} \right)} \right) \quad (2.61)$$

$$= (R_p + (n + 1)\Delta\rho) \left(\frac{\sin(i_\theta \Delta\theta)}{\sin \left(\frac{(2i_\lambda + 1)\pi}{2n_\varphi} - \frac{\pi}{2} \right)} \right)$$

À l'issue de ce premier travail, nous avons préparé toutes les informations nécessaires quant à la résolution du transfert radiatif qui sera géré par le deuxième bloc de Pytmosph3R. Ce bloc dépend du type de modèle dynamique 3D utilisé dans la chaîne observationnelle et des choix effectués lors de sa refonte. Nous rappelons qu'il est indépendant des deux autres de manière à pouvoir le substituer ou le modifier si nous souhaitons changer de modèle ou d'approche.

2.3 Résolution du transfert radiatif au sein de la maille cylindrique

Le deuxième bloc de Pytmosph3R gère la résolution du transfert radiatif. Le code l'effectue dans la maille cylindrique à partir des informations collectées lors de la refonte de la simulation et lors de l'étape de correspondance entre les deux. Le transfert radiatif consiste à calculer pour chaque rayon d'échantillonnage la profondeur optique sur l'ensemble de son parcours puis d'en déduire la transmittance,

$$\tau_{\rho, \theta} = \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(T, P)n(P, T)dx \quad (2.62)$$

$$T_{\rho, \theta} = \exp(-\tau_{\rho, \theta}) \quad (2.63)$$

$$\delta = \int_0^{2\pi} \int_0^{R_p+h} (1 - \exp(-\tau_{\rho, \theta})) d\rho d\theta \quad (2.64)$$

Le code dans sa forme actuelle prend en compte dans le transfert radiatif :

- l'absorption moléculaire, τ_{ml}
- le continuum résultant des collisions entre certaines espèces moléculaires et/ou atomiques, τ_{ct}

- la diffusion Rayleigh, τ_{sc}
- la diffusion de Mie pour les aérosols, τ_{ae}

Nous écrivons donc la profondeur optique totale le long d'un rayon de coordonnées (ρ, θ) :

$$\tau_{\rho, \theta} = \tau_{ml} + \tau_{ct} + \tau_{sc} + \tau_{ae} \quad (2.65)$$

A l'heure actuelle, il ne tient donc pas compte d'autres effets insidieux et qui ne sont pas forcément négligeables. Ainsi nous avons fait abstraction de l'effet de la réfraction et de la diffusion multiple par exemple, qui est la déviation des rayons stellaires à l'interface avec l'atmosphère puis à l'intérieur de celle-ci du fait des variations de l'indice optique. Comme les chemins optiques des rayons émergents ne seraient plus les mêmes que dans notre approche, pour laquelle ils se propagent en ligne droite, la profondeur optique et donc la transmittance de l'atmosphère ne seraient également plus les mêmes (Bétrémieux and Kaltenegger (2014), Bétrémieux and Kaltenegger (2015)). Nous ne calculons pas non plus l'émission, cela nécessiterait un module supplémentaire qui estimerait cette part pour chaque position (ρ, θ) , une ébauche de ce travail a été réalisé mais pas encore rendu fonctionnelle et inspirée de Waldmann et al. (2015).

Le calcul des profondeurs optiques peut être traité de manière discrète ou de manière intégrale (ou du moins partiellement). Ces deux options sont offertes par le code en fonction du niveau de précision souhaité sur les spectres à générer.

2.3.1 Méthodes de calcul des profondeurs optiques

Méthode discrète du calcul des profondeurs optiques

La méthode discrète considère que la portion d'atmosphère traversée dans chaque sous-parcours est parfaitement homogène. La pression, la température, les abondances et donc le poids moléculaire moyen, ainsi que les sources d'opacité sont constants et s'identifient aux propriétés du centre de la cellule traversée dans la grille sphérique de référence. Nous les récupérons par le biais des indices i_n , i_λ et i_φ collectés lors de l'étape de correspondance.

Si nous considérons le sous-parcours d'indice i_x , correspondant à la traversée de la cellule de coordonnées $(r = i_n \Delta \rho, \varphi = i_\varphi \Delta \varphi, \lambda = i_\lambda \Delta \lambda)$ caractérisée par la température T_c , la pression P_c et la densité $n(P_c, T_c)$, la profondeur optique associée à l'absorption du mélange gazeux de sections efficaces $\sigma(T_c, P_c)$ est donc :

$$\tau_{i_x} = \sigma(P_c, T_c) n(P_c, T_c) \Delta x_{i_x} \quad (2.66)$$

avec $\Delta x_{i_x} = x_{i_x} - x_{i_x-1}$. Sur l'ensemble du parcours cela revient à écrire :

$$\tau_{i_\rho, i_\theta} = \sum_{i_x=0}^{N_x-1} \sigma(P_c, T_c) n(P_c, T_c) \Delta x_{i_x} \quad (2.67)$$

Méthode semi-intégrale du calcul des profondeurs optiques

La méthode semi-intégrale consiste quant à elle à être un peu plus précis sur le calcul de la profondeur optique pour un sous-parcours donné. En effet, par définition :

$$\tau_{i_x} = \int_{x_1}^{x_2} \sigma(P_c, T_c) n(P_c, T_c) dx \quad (2.68)$$

où x_1 et x_2 correspondent aux positions lors des changements de coordonnées à l'origine du sous-parcours que l'on étudie. En toute rigueur, nous devrions intégrer numériquement par petits pas cette expression et à chaque pas donner une estimation de la densité moléculaire connaissant l'évolution de la pression et celle de la température avec x . En ce qui concerne la température, nous pourrions imaginer une fonction complexe qui l'interpôlerait en tout point de la cellule par la connaissance de la température en son centre et de celles des cellules adjacentes. Ainsi, nous contrôlerions également l'évolution de la pression par la résolution locale de la loi hydrostatique :

- Nous connaissons l'altitude donc nous pouvons calculer l'accélération de la pesanteur en tout point.
- Les grilles d'équilibre thermodynamique nous permettent de connaître l'abondance $\chi_{i_{spe}}$ pour chaque espèce.
- Les abondances nous donnent le poids moléculaire moyen μ .
- Nous pouvons donc localement calculer la hauteur d'échelle $H = k_B T / \mu g$ et en déduire la pression.
- La connaissance de la pression et de la température permet également par interpolation d'en déduire la section efficace σ locale.

Aux résolutions auxquelles nous travaillerons, cette approche pose plus de soucis techniques que d'apport physique. Les variations de température ou de pression au sein d'une couche ne sont pas assez fortes pour engendrer des différences fondamentales sur la section efficace d'absorption et peuvent donc être négligées. Les abondances non plus ne sont pas affectées au point d'en justifier la prise en compte dans l'intégration. Le parti qui a été pris ici fut de se focaliser sur le facteur le plus déterminant sur les spectres générés, et nous pouvions nous approcher au mieux de l'intégration rigoureuse de Eq. (2.68) en ne tenant compte que de la dépendance de n avec x . Nous considérons donc que les sections efficaces et les fractions molaires sont effectivement homogènes sur tout le sous-parcours, ce qui se traduit par :

$$\tau_{ix} = \sigma(P_c, T_c) \int_{x_1}^{x_2} n(P(x), T_c) dx \quad (2.69)$$

$$= \sigma(P_c, T_c) \int_{x_1}^{x_2} \frac{P(x)}{k_B T_c} dx \quad (2.70)$$

où nous pouvons effectuer un changement de variable afin d'exprimer cette intégrale en fonction de l'altitude z :

$$\begin{aligned} \tau_{ix} &= \sigma(P_c, T_c) \int_{z_1}^{z_2} \frac{P(z)}{k_B T_c} \frac{(R_p + z) dz}{\sqrt{(R_p + z)^2 - \rho^2}} \\ &= \sigma(P_c, T_c) \frac{P_1}{k_B T_c} \int_{z_1}^{z_2} \exp\left(-\frac{\mu g_1}{k_B T_c} \left(\frac{z - z_1}{1 + \frac{z - z_1}{R_p + z_1}}\right)\right) \frac{(R_p + z) dz}{\sqrt{(R_p + z)^2 - \rho^2}} \\ &= \sigma(P_c, T_c) \frac{P_1}{k_B T_c} \int_0^{z_2 - z_1} \exp\left(-\frac{\mu g_1}{k_B T_c} \left(\frac{z}{1 + \frac{z}{R_p + z_1}}\right)\right) \frac{(R_p + z + z_1) dz}{\sqrt{(R_p + z + z_1)^2 - (R_p + \rho)^2}} \end{aligned} \quad (2.71)$$

où P_1 est la pression au début du sous-parcours, estimée à partir de la pression au centre de la cellule limitrophe, g_1 l'accélération de la pesanteur et z_1 l'altitude à cette même position. L'indice 2 indique la fin de parcours. La température T_c est celle du centre de la cellule qui est traversée. Dans certains cas de figure, notamment lorsque les altitudes z_1 et z_2 sont très proches, cette intégrale diverge. Lorsque c'est le cas, le résultat est remplacé par le calcul discret pour le sous-parcours concerné. Ceci se traduit par une légère surestimation de la profondeur optique mais qui n'engendre pas de variations remarquables tant que ces sous-parcours problématiques ne sont pas nombreux.

2.3.2 Optimisation du calcul des opacités d'un point de vue technique

Si résoudre le transfert radiatif consiste en effet à effectuer les calculs de Eq. (2.66) ou Eq. (2.71) pour chaque sous-parcours, le réaliser localement au cas par cas n'est pas optimal. Nous n'avons pas non plus les outils ou la puissance de calculs nécessaire pour effectuer un calcul rigoureux des sections efficaces associées à chacune des sources d'absorption, en particulier pour le moléculaire ou le continu. Par conséquent, comme dans le GCM, à l'exception de la diffusion Rayleigh, ces sections efficaces sont pré-calculées pour des échantillons de pressions et de températures, et nous estimons nos sections efficaces par interpolation de ces données. Pour alléger numériquement cette tâche, l'interpolation est réalisée une fois le maillage et la transposition terminés, et avant le calcul des profondeurs optiques. Nous collectons tous les couples (T,P) représentés au sein de la maille cylindrique et nous effectuons les interpolations nécessaires pour chacun d'entre eux avant de ranger judicieusement les informations générées et ainsi pouvoir les retrouver rapidement lorsque nous arrivons au calcul de τ .

D'un point de vue technique, cette méthode permet de gagner un temps non négligeable sur cette étape, pour une centaine de couches cela représente un facteur 100 d'amélioration de temps de calculs sur les boucles qui estiment les profondeurs optiques et ce pour deux raisons : nous travaillons avec des tableaux plus petits et en calculant tout d'un coup, nous pouvons utiliser les opérations les plus rapides. Cette écriture a fait suite à la collaboration du laboratoire avec Pierre Gay, ingénieur informaticien du Mésocentre Aquitaine de Calculs Numériques. La parallélisation de l'algorithme a encore davantage optimisé cette manière d'effectuer nos calculs.

À présent, nous allons présenter et détailler plus précisément les différentes sources d'opacité et la manière dont elles sont calculées ou interpolées.

2.3.3 Absorption moléculaire, propriétés optiques des atomes et molécules

Lorsque le rayonnement traverse une couche atmosphérique, il entre en collision avec les molécules présentes dans l'atmosphère et peut être en totalité ou en partie absorbé. L'énergie du rayonnement est transférée aux molécules avec lesquelles il est entré en collision. Ayant perdu de l'énergie, le rayonnement subit une atténuation dans sa direction de propagation et c'est en cela que l'on parle d'absorption moléculaire. Cette absorption est possible par le changement d'état quantique des molécules et leurs transitions d'un niveau bas à un niveau de plus haute énergie. Suivant l'énergie portée par ce dernier, et donc la longueur d'onde λ , nous déterminons l'intensité de cette absorption par la connaissance de la structure énergétique d'une molécule donnée qui dépend évidemment de sa nature, mais aussi des conditions dans lesquelles elle se trouve (pression et température). Dans la gamme de l'UV-Visible, nous toucherons davantage les transitions électroniques, tandis que dans l'infra-rouge nous atteignons les transitions vibrationnelles.

L'absorption moléculaire peut être traitée de deux manières :

- par l'utilisation d'une base de donnée de type *line by line*, c'est-à-dire que pour chaque molécule nous avons les données de section efficace pour des longueurs d'onde spécifiques, auxquelles nous appliquons Eq. (2.66) ou Eq. (2.71)
- par l'utilisation des coefficients en k-distributions exploités par les GCM, ce qui revient à travailler sur des bandes pour des mélanges spécifiques.

Le premier permet la génération de spectres haute résolution, tandis que le deuxième permet soit de rester cohérent avec la physique du rayonnement des simulations, soit de se placer à la résolution et dans

les bandes d'observation d'un instrument. En fonction des besoins de l'utilisateur :

- Si nous travaillons avec des algorithmes développés spécifiquement pour traiter des observations effectuées par un instrument spécifique, l'option en k-distributions est recommandée.
- Pour avoir un aperçu plus fin du spectre en transmission de la simulation atmosphérique, les sections efficaces monochromatiques seront plus adaptées.

Base de donnée des sections efficaces, ExoMol

Le projet ExoMol ([Tennyson and Yurchenko 2012](#)) fournit des données spectroscopiques sur toutes les transitions moléculaires d'importance et pour une variété grandissante de molécules. Ces données sont applicables à une large diversité de problèmes et sont utilisées pour des études sur les étoiles froides, les naines brunes et les atmosphères d'exoplanètes. La force du projet est de pouvoir générer ces données sur des plages de température étendues pour des molécules comme l'eau ([Polyansky et al. \(2018\)](#) ; [Barber et al. \(2006\)](#)), l'ammoniac ([Yurchenko et al. \(2011\)](#) ; [Barton et al. \(2016\)](#)), le méthane ([Yurchenko and Tennyson \(2014\)](#) ; [Wong et al. \(2017\)](#)) , le dioxyde de carbone ([Tennyson and Yurchenko \(2012\)](#)) et une variété de molécules diatomiques ([Yadin et al. \(2012\)](#) ; [Barton et al. \(2013\)](#) ; [Barton et al. \(2013\)](#) ; [Barber et al. \(2014\)](#) ; [Yurchenko et al. \(2017\)](#)).

Le set de données que nous utiliserons dans les Chapitres 4 et 5, que l'on a appelé 10_{wno} , contient des sections efficaces pré-calculées dans une grille $T - \log P$ allant de 200 K à 2800 K tous les 100 K et de 10^{-3} à 10 bar toutes les 0,3 décades. Deux modes d'interpolation sont à la disposition de l'utilisateur :

- linéaire en température et log-linéaire en pression,
- *optimal* en température et log-linéaire en pression.

La version *optimal* suit [Hill et al. \(2013\)](#) qui conseille :

$$\sigma_{e,\lambda}(T) = a_{e,\lambda} \exp\left(-\frac{b_{e,\lambda}}{T}\right), \quad (2.72)$$

où e est l'espèce moléculaire ou atomique, λ la longueur d'onde, et T la température de la cellule. Les facteurs d'interpolation (a, b) sont quant à eux obtenus comme :

$$b_{e,\lambda} = \left(\frac{1}{T_l} - \frac{1}{T_u}\right)^{-1} \ln \frac{\sigma_{e,\lambda}(T_u)}{\sigma_{e,\lambda}(T_l)} \quad (2.73)$$

$$a_{e,\lambda} = a_{e,\lambda}(T_u) \exp\left(\frac{b_{e,\lambda}}{T_u}\right), \quad (2.74)$$

où T_u et T_l sont respectivement les températures supérieures et inférieures dans la grille $T - \log P$. Nous avons ainsi pu travailler avec les molécules suivantes : H_2O , CO_2 , CO , NH_3 , CH_4 , TiO , O_3 , O_2 , NO_2 , NO , HCOOH , HCN , C_2H_6 , VO et C_2H_2 . Nous avons également des données pour les atomes : Na et K.

Base de donnée des coefficients en k-distributions

Si le transfert radiatif obtient les résultats les plus précis à partir des calculs raie par raie, ils nécessitent toutefois un effort de calcul prohibitif. En conséquence, un certain nombre de modèles globaux et de bandes ont été proposés. Actuellement, les plus précis d'entre eux reposent sur la méthode dite

k-distribution method (CKD) (Clough et al. 1989) appliquée à l'absorption atmosphérique comme décrit dans Laciš and Oinas (1991) ou dans Qiang and Liou (1992) pour les atmosphères hétérogènes. Les distributions sont calculées à partir de bases de données à haute résolution, telles que HITRAN (Rothman et al. 1992) ou HITEMP (Rothman et al. 2010). Le principe est de les utiliser afin de générer des grilles d'opacité pour des mélanges moléculaires précis, tenant ainsi compte des interactions entre molécules (et notamment des élargissements de raie).

Ces données sont pré-calculées dans des grilles de température, pression et de fraction massique en traceur lorsque nous en utilisons un (T, P, w) . L'interpolation des distributions est linéaire par rapport à la température et log-linéaire par rapport à la pression et à la fraction massique w en traceur. Utiliser les *k*-distribution plutôt que les sections efficaces monochromatiques réduit considérablement le temps de calculs mais en contre-partie, comme elles dépendent du mélange que nous avons choisi, elles nécessitent d'être recalculées à chaque fois que nous changeons de composition moléculaire ou de résolution spectrale. Ce mélange est également conditionné par l'équilibre thermodynamique, rendant la chimie hors-équilibre impossible.

Les *k*-distributions sont générées sous un format $N_b \times N_G$ où N_b est le nombre de bande et N_G est le nombre de points dans la distribution $f_G(k)$ décrivant la contribution des $k(b, G)$ au coefficient d'extinction d'absorption b

Expression de la profondeur optique moléculaire

Considérons le rayon de coordonnées (ρ, θ) et le sous-parcours d'indice i_x . Il est associé à la cellule de coordonnées (r, φ, λ) caractérisée par la température au centre T_c , la pression au centre P_c , la densité au centre $n(P_c, T_c)$ et un mélange de N_e espèces moléculaires ou atomiques optiquement actives aux abondances $\chi_{c,e}$ et aux sections efficaces $\sigma_{c,e}$.

Si nous utilisons les données de sections efficaces monochromatiques, la profondeur optique moléculaire τ_{ml, i_x} du sous-parcours s'écrit, suivant le mode de calcul adopté (respectivement discret ou semi-intégré) :

$$\tau_{ml, i_x}(\lambda) = \sum_e^{N_e} \sigma_{c,e}(P_c, T_c, \lambda) \frac{P_c \chi_{c,e}}{k_B T_c} \Delta x_{i_x} \quad (2.75)$$

$$\tau_{ml, i_x}(\lambda) = \sum_e^{N_e} \sigma_{c,e}(P_c, T_c, \lambda) \frac{P_{c1} \chi_{c,e}}{k_B T_c} \times \int_0^{z_{c2} - z_{c1}} \exp\left(-\frac{\mu g_{c1}}{k_B T_c} \left(\frac{z}{1 + \frac{z}{R_p + z_{c1}}}\right)\right) \frac{(R_p + z + z_{c1}) dz}{\sqrt{(R_p + z + z_{c1})^2 - (R_p + \rho)^2}} \quad (2.76)$$

où toutes les grandeurs indexées de c correspondent à celles du centre de la cellule traversée lors du sous-parcours d'indice i_x . P_{c1} , g_{c1} et z_{c1} sont respectivement la pression, l'accélération de la pesanteur et l'altitude au début du sous-parcours correspondant à la dite cellule, représenté par l'indice $c1$, et z_{c2} l'altitude en fin de sous-parcours représentée par l'indice $c2$.

Si nous utilisons les *k*-distributions : si N_G est le nombre de points de Gauss, $f(G)$ la fonction de

distribution associée, σ_G la section efficace du point de Gauss d'indice G , alors :

$$\tau_{ml,i_x}(\lambda) = \sum_{G=0}^{N_G} \sigma_{c,G}(P_c, T_c, \lambda) f_G \frac{P_c}{k_B T_c} \Delta x_{i_x} \quad (2.77)$$

$$\begin{aligned} \tau_{ml,i_x}(\lambda) &= \sum_{G=0}^{N_G} \sigma_{c,G}(P_c, T_c, \lambda) f_G \frac{P_{c1}}{k_B T_c} \times \\ &\times \int_0^{z_{c2}-z_{c1}} \exp\left(-\frac{\mu g_{c1}}{k_B T_c} \left(\frac{z}{1 + \frac{z}{R_p + z_{c1}}}\right)\right) \frac{(R_p + z + z_{c1}) dz}{\sqrt{(R_p + z + z_{c1})^2 - (R_p + \rho)^2}} \end{aligned} \quad (2.78)$$

La somme de ces sous-parcours nous donne alors la contribution moléculaire pour le point (ρ, θ) à la transmittance :

$$\tau_{ml,\rho,\theta}(\lambda) = \sum_{i_x=0}^{N_x} \tau_{ml,i_x}(\lambda) \quad (2.79)$$

$$T_{ml,\rho,\theta}(\lambda) = \exp(-\tau_{ml,\rho,\theta}(\lambda)) \quad (2.80)$$

La résolution spectrale des données moléculaires, qu'il s'agisse de sections efficaces haute résolution ou de bande en k-distribution, impose celle des autres sources d'opacité (continuum, diffusion Rayleigh et de Mie). Les longueurs d'onde λ ou les bandes (λ_l, λ_u) servent donc de référence pour tous les calculs à venir.

2.3.4 Absorption continuum, collisions entre molécules

La source d'opacité dite continuum est due à l'absorption induite par les collisions entre molécules. Nous tenons compte de ce processus pour toutes les espèces pour lesquelles ces informations sont disponibles dans la base de données HITRAN (Rothman et al. 1992) et suivant les prescriptions de Richard et al. (2011). En outre, pour des espèces spécifiques telles que la vapeur d'eau, on peut ajouter un continuum qui représente la troncature des ailes éloignées des raies et la négligence de nombreuses raies faibles dans certains de nos ensembles de sections ou de tables en k-distribution. Dans ce cas, le continuum d'eau est ajouté en utilisant le modèle CKD (Clough et al. 1989). Nous veillerons toutefois à ce que les opacités moléculaires utilisées soient calculées de manière cohérente pour ne pas les compter deux fois (dans l'absorption moléculaire et dans le continuum).

Calculs des coefficients d'absorption

Actuellement, Pytmsoph3R peut tenir compte de l'absorption continuum pour les collisions H_2/H_2 , H_2/He , H_2/CH_4 , H_2/N_2 , N_2/N_2 , H_2O/H_2O et H_2O/X avec X le reste de l'environnement atmosphérique. Les données HITRAN étant à très haute résolution, nous ne calculons pas de la même manière les coefficients d'absorption k_c si nous travaillons en raie par raie ou en bandes (k-distributions).

- En raie par raie, nous déterminons la longueur d'onde la plus proche de λ dans les données HITRAN. Nous effectuons ensuite toutes les opérations d'interpolation et de mixage de manière monochromatique.
- En bandes, les longueurs d'onde extrême λ_l et λ_u permettent de regrouper les données HITRAN comprises entre. Nous effectuons l'interpolation pour chaque longueur d'onde HITRAN appartenant à la bande, et nous moyennons leurs contributions. Nous appliquons ensuite les équations de mixage pour générer les coefficients d'extinction.

L'absorption continuum ne dépend que de la température, les données sont donc pré-calculées pour un échantillon de températures qui dépend du collisionneur ou du type de source utilisé. L'interpolation est linéaire par rapport à la température.

Une fois les données interpolées, nous effectuons l'étape de mixage qui consiste à calculer les contributions liées aux collisions de la molécule avec elle-même et celles liées à ses collisions avec le reste de l'environnement atmosphérique. Dans le cas d'une atmosphère présentant du dihydrogène et de l'hélium, si nous notons $\kappa_{\text{H}_2/\text{H}_2}$ le coefficient d'absorption propre correspondant à l'opacité induite par les collisions du dihydrogène avec lui-même H_2/H_2 et $\kappa_{\text{H}_2/\text{He}}$ celui correspondant aux collisions H_2/He , nous obtenons $k_{c,\text{H}_2,\text{He}}(\lambda)$ en m^{-2} comme suit :

$$k_{c,\text{H}_2,\text{He}}(\lambda) = N_L 100(\text{amg})^2 (\chi_{c,\text{H}_2}^2 \kappa_{\text{H}_2/\text{H}_2}(\lambda) + \chi_{c,\text{H}_2} \chi_{c,\text{He}} \kappa_{\text{H}_2/\text{He}}(\lambda)) \quad (2.81)$$

$$k_{c,\text{H}_2,\text{He}}(\lambda) = k_{c,\text{H}_2/\text{H}_2}(\lambda) + k_{c,\text{H}_2/\text{He}}(\lambda) \quad (2.82)$$

où $N_L = 2,6867774 \cdot 10^{19}$ est le nombre de Loschmidt correspondant au nombre de particules dans un volume molaire d'air, le facteur 100 permet d'être dans les bonnes unités (les κ étant exprimés en $\text{cm}^{-5}/\text{molécules}^2$), amg est un amagat densité tel que $\text{amg} = 2,69578 \cdot 10^{-3} P_c/T_c$, χ_{H_2} et χ_{He} sont respectivement les fractions molaires en dihydrogène et en hélium. En l'absence de dihydrogène, ce coefficient est nul, et en l'absence d'hélium, le deuxième terme s'annule.

Toutes les autres contributions du type $k_{c,\text{H}_2/Y}$, où Y est une autre espèce de l'atmosphère se calculent de la même manière que dans Eq. (2.81) :

$$k_{c,\text{H}_2/Y}(\lambda) = N_L 100(\text{amg})^2 \chi_{c,\text{H}_2} \chi_{c,Y} \kappa_{\text{H}_2/Y}(\lambda) \quad (2.83)$$

Le cas de l'eau est, comme nous le disions, un peu différent puisque les coefficients κ ne sont pas pré-calculés avec la même méthode. Nous appliquons alors l'équation de mixage ci-dessous, avec X le reste de l'environnement atmosphérique :

$$k_{c,\text{H}_2\text{O}}(\lambda) = 10^{-4}(\text{amg}) \frac{P_c}{k_B T_c} (\chi_{c,\text{H}_2\text{O}}^2 \kappa_{\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2\text{O}}(\lambda) + \chi_{c,X} \chi_{c,\text{H}_2\text{O}} \kappa_{\text{H}_2\text{O}/X}(\lambda)) \quad (2.84)$$

$$k_{c,\text{H}_2\text{O}}(\lambda) = 10^{-4}(\text{amg}) \frac{P_c}{k_B T_c} (\chi_{c,\text{H}_2\text{O}}^2 \kappa_{\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2\text{O}}(\lambda) + (1 - \chi_{c,\text{H}_2\text{O}}) \chi_{c,\text{H}_2\text{O}} \kappa_{\text{H}_2\text{O}/X}(\lambda)) \quad (2.85)$$

Expression de la profondeur optique continuum

Nous considérons le rayon de coordonnées (ρ, θ) et le sous-parcours d'indice i_x . Il est associé à la cellule de coordonnées (r, φ, λ) caractérisée par la température au centre T_c , la pression au centre P_c , la densité au centre $n(P_c, T_c)$ et un mélange de N_{ct} couples (X_{ct}/Y_{ct}) d'espèces moléculaires participant au continuum (H_2/H_2 , H_2/N_2 , ...). La profondeur optique du continuum τ_{ct,i_x} du sous-parcours s'écrit :

$$\tau_{ct,i_x}(\lambda) = \sum_{ct}^{N_{ct}} k_{c,X_{ct}/Y_{ct}}(P_c, T_c, \lambda) \Delta x_{i_x} \quad (2.86)$$

Notons que nous pouvons tenir compte de l'évolution de la densité moléculaire (méthode semi-intégrée) par le biais des calculs de amg lors des calculs de coefficients d'absorption (Eqs. (2.81) et (2.84)). Nous devons alors juste remplacer tous les P_c par :

$$P_c = P_{c1} \int_0^{z_{c2}-z_{c1}} \exp\left(-\frac{\mu g_{c1}}{k_B T_c} \left(\frac{z}{1 + \frac{z}{R_p + z_{c1}}}\right)\right) dz \quad (2.87)$$

où P_{c1} , g_{c1} et z_{c1} sont respectivement la pression, l'accélération de la pesanteur et l'altitude au début du sous-parcours correspondant à la cellule d'indice i_x traversée, représenté par l'indice $c1$, et z_{c2} l'altitude en fin de sous-parcours représentée par l'indice $c2$.

La somme de ces sous-parcours nous donne alors la contribution continuum pour le point (ρ, θ) à la transmittance :

$$\tau_{ct,\rho,\theta}(\lambda) = \sum_{i_x=0}^{N_x} \tau_{ct,i_x}(\lambda) \quad (2.88)$$

$$T_{ct,\rho,\theta}(\lambda) = \exp(-\tau_{ct,\rho,\theta}(\lambda)) \quad (2.89)$$

2.3.5 La diffusion Rayleigh

La diffusion de Rayleigh est due aux molécules et atomes gazeux présents dans l'atmosphère ou aux fines particules de poussière. Elle se produit lorsque la taille des molécules diffusantes est très inférieure à la longueur d'onde du rayonnement et concerne essentiellement la gamme UV/Visible et le très proche infra-rouge.

La diffusion Rayleigh comme une absorption

Lorsqu'une onde électromagnétique rencontre le diffuseur, elle génère un dipôle électrostatique de moment $\vec{P} = \alpha \vec{E}$, où \vec{E} est le champ électrique incident et α la polarisabilité du diffuseur. Ce dipôle va rayonner une onde de même fréquence dans toutes les directions, cependant, l'intensité et la polarisation de l'onde rayonnée vont dépendre de l'angle de diffusion par rapport à la direction de propagation de l'onde incidente et de la longueur d'onde. De l'écriture du champ électrique du dipôle diffusant, nous en déduisons la puissance rayonnée en fonction de la longueur d'onde :

$$E = \frac{\mu_0}{r} \sin(\theta) \omega^2 p_0 \cos\left(\frac{2\pi r}{\lambda} - \omega t\right) \quad (2.90)$$

$$\|\vec{\Pi}\| = \frac{EB}{\mu_0} = \frac{\mu_0 \sin^2(\theta) \omega^4 p_0^2 \alpha^2}{16\pi^2 c r^2} \cos^2\left(\frac{2\pi r}{\lambda} - \omega t\right) \quad (2.91)$$

$$\langle P \rangle = \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} \langle \|\vec{\Pi}\| \rangle d^2S = \frac{\mu_0 \alpha^2}{12\pi c} \omega^4 p_0^2 \quad (2.92)$$

où r est la distance au dipôle, μ_0 est la perméabilité du vide, ω la pulsation de l'onde incidence, k son vecteur d'onde et p_0 l'amplitude de la polarisation.

L'expression de la puissance moyenne diffusée montre la dépendance en $1/\lambda^4$ puisque $\omega = 2\pi\mu = 2\pi c/\lambda$. La fonction de phase de la puissance rayonnée est quant à elle proportionnelle à $1 + \cos^2(\theta)$, ce qui indique que la diffusion est optimale dans la direction de propagation du rayon incident et qu'elle est de même intensité dans le plan perpendiculaire au dipôle. Dans un milieu de propagation qui n'est plus le vide, les propriétés diélectriques du milieu modifient cette puissance par la dépendance avec l'indice de réfraction. Le fait de répartir le rayonnement dans l'espace induit une perte d'énergie dans la direction de propagation qui est en somme celle qui nous intéresse dans la résolution du transfert radiatif. Cette perte d'énergie que l'on assimile à une section efficace d'absorption traduit de l'atténuation du rayonnement sur son parcours par la diffusion des particules. L'expression de cette section efficace est décrite dans [Strutt \(1899\)](#) bien qu'elle ait fait l'objet de corrections tenant compte de l'effet Lorentz-Lorentz (décrit dans [Jackson \(1999\)](#)) et de l'effet de dépolarisation dû à la non-sphéricité des molécules, analysé et

quantifié par King et qui prend donc naturellement le nom de facteur de correction de King (King 1923) :

$$\sigma = \frac{32\pi^3}{3N^2\lambda^4}(n-1)^2 \quad (2.93)$$

$$\sigma = \frac{128\pi^5}{3\lambda^4}\alpha_{LL}^2 F_k(\lambda) \quad (2.94)$$

où N est la densité moléculaire dans les conditions normales de température et de pression (pour $T = 273,15$ K et $P = 101325$ Pa) et n_λ est l'indice de réfraction de la molécule à la longueur d'onde λ . L'expression Eq. (2.94) met en évidence la prise en compte des deux corrections précitées : la correction de non-sphéricité des molécules est traduite par la fonction $F_k(\lambda)$, qui dépend essentiellement de la longueur d'onde, et l'effet de dépolarisation par la redéfinition de la polarisabilité α_{LL} tel que :

$$\alpha_{LL} = \frac{3}{4\pi N} \left(\frac{n_\lambda^2 - 1}{n_\lambda^2 + 2} \right) \quad (2.95)$$

On peut donc réécrire la section efficace comme :

$$\sigma = \frac{24\pi^3}{N^2\lambda^4} \left(\frac{n_\lambda^2 - 1}{n_\lambda^2 + 2} \right)^2 F_k(\lambda) \quad (2.96)$$

Le tout est donc de pouvoir calculer l'indice de réfraction pour chaque molécule et à toutes les longueurs d'onde, ainsi que d'avoir une expression du facteur de correction de King. Ces informations sont tabulées, vérifiées et/ou corrigés par l'expérimentation.

Calcul des sections efficaces de diffusion Rayleigh

Nous utilisons les données les plus récentes référencées dans la littérature expérimentale. De manière générale, l'indice de réfraction d'une molécule suit l'expression suivante :

$$(n-1)10^8 = A + \frac{B}{C - 1/\lambda^2} \quad (2.97)$$

dont les valeurs des coefficients A, B et C sont précisées dans le tableau Table 2.1, les deux derniers étant exprimés en μm^{-2} si la longueur d'onde λ est elle-même exprimée en μm . La convention dans le domaine des atmosphères est de travailler préférentiellement avec des nombres d'onde $\nu = 1/\lambda$ en cm^{-1} , mais nous avons pris le parti de ne travailler qu'avec des longueurs d'onde, et dans notre discipline, il est plus simple de raisonner en microns qu'en cm^{-1} . Le passage d'une unité à l'autre consiste seulement à ajuster les coefficients B et C d'un facteur 10^8 . La dépendance avec la longueur du facteur de correction de King est précisée dans la Table 2.2, qui, comme on peut le voir, est égal à 1 pour les gaz monoatomiques et sont calculés *ab initio* pour les gaz diatomiques comme cela est décrit dans Bates (1984). Pour les molécules et atomes de l'atmosphère terrestre, Eq. (2.97) est suffisante, les autres nécessitent une description moins générale :

- Pour le dioxyde de carbone CO₂ (Sneep and Ubachs (2005)) :

$$(n_\lambda - 1) = 1,1427 \cdot 10^{-5} \left(\frac{5,79925 \cdot 10^3}{(12,89089)^2 - 1/\lambda^2} + \frac{1,2005 \cdot 10^2}{(8,92238)^2 - 1/\lambda^2} \right. \\ \left. + \frac{5,3334}{(7,50375)^2 - 1/\lambda^2} + \frac{4,3244}{(6,78377)^2 - 1/\lambda^2} + \frac{1,2181 \cdot 10^{-5}}{(2,418136)^2 - 1/\lambda^2} \right) \quad (2.98)$$

Table 2.1: Valeurs pour les coefficients de Eq. (2.97).

Gaz	λ (μm)	A/ 10^4	B/ $10^6(\mu\text{m}^{-2})$	C/ $10^2(\mu\text{m}^{-2})$	Références
He	toutes	0,2283	0,2283	1,532	Thalman et al. (2014)
N ₂	$\lambda > 0,460$	0,6498	3,0740	1,44	Thalman et al. (2014)
	$0,460 > \lambda > 0,254$	0,6677	3,1882	1,44	Bates (1984)
	$\lambda < 0,254$	0,6999	3,2336	1,44	
O ₂	$\lambda > 0,546$	2,1351	0,218567	0,409	Thalman et al. (2014)
	$0,546 > \lambda > 0,288$	2,0564	0,248090	0,409	Bates (1984)
	$0,288 > \lambda > 0,221$	2,21204	0,203187	0,409	Sneep and Ubachs (2005)
	$\lambda < 0,221$	2,37967	0,268988	0,409	
CO	toutes	2,2851	0,0456	0,51018	Sneep and Ubachs (2005)
Ar	toutes	0,6432135	0,028606	1,44	Thalman et al. (2014)

Table 2.2: Valeurs pour les coefficients de Eq. (2.97).

Gas	Facteur de King F_k	References
N ₂	$1,034 + 3,17 \cdot 10^{-4}/\lambda^2$	Bates (1984)
O ₂	$1,096 + 1,385 \cdot 10^{-3}/\lambda^2 + 1,448 \cdot 10^{-4}/\lambda^4$	Bates (1984)
CO	1,016	Sneep and Ubachs (2005)
CO ₂	$1,1364 + 2,53 \cdot 10^{-3}/\lambda^2$	Sneep and Ubachs (2005)
H ₂ O	1,35343	Marshall and Smith (1990)

- Pour le méthane CH₄ (Sneep and Ubachs (2005)) :

$$(n_\lambda - 1) = 4,6662 \cdot 10^{-4} + \frac{4,02 \cdot 10^{-6}}{\lambda^2} \quad (2.99)$$

- Pour l'eau H₂O, si $\lambda > 0,23 \mu\text{m}$:

$$(n_\lambda - 1) = \frac{4,92303 \cdot 10^{-2}}{2,380185 \cdot 10^2 - 1/\lambda^2} + \frac{1,42723 \cdot 10^{-3}}{5,73262 \cdot 10^1 - 1/\lambda^2} \quad (2.100)$$

et si $\lambda < 0,23 \mu\text{m}$:

$$(n_\lambda - 1) = 0,85(8,06051 \cdot 10^{-4} + \frac{2,48099 \cdot 10^{-2}}{1,32274 \cdot 10^2 - 1/\lambda^2} + \frac{1,74557 \cdot 10^{-2}}{3,932957 \cdot 10^1 - 1/\lambda^2}) \quad (2.101)$$

- Pour l'hydrogène moléculaire H₂, nous calculons la section efficace de diffusion directement, comme cela est décrit dans Dalgarno and Williams (1962), si $\lambda > 30 \mu\text{m}$

$$\sigma_s(\lambda) = \frac{8,49 \cdot 10^{-33}}{\lambda^4} \quad (2.102)$$

et si $\lambda < 30 \mu\text{m}$

$$\sigma_s(\lambda) = \frac{8,14 \cdot 10^{-33}}{\lambda^4} + \frac{1,28 \cdot 10^{-34}}{\lambda^6} + \frac{1,61 \cdot 10^{-35}}{\lambda^8} \quad (2.103)$$

Pour le moment, seules ces neuf molécules/atomes sont pris en compte pour la diffusion Rayleigh, ce sont aussi les espèces les plus fréquentes dans les simulations atmosphériques. Il est cependant très simple de rajouter d'autres espèces, il suffit pour cela d'avoir une bonne connaissance de l'évolution de l'indice de réfraction avec la longueur d'onde.

Expression de la profondeur optique de diffusion Rayleigh

Maintenant que les sections efficaces ont été calculées, il ne reste plus qu'à en déduire la profondeur optique associée. Considérons toujours le rayon de coordonnées (ρ, θ) et le sous-parcours d'indice i_x . Il est associé à la cellule de coordonnées (r, φ, λ) caractérisée par la température au centre T_c , la pression au centre P_c , la densité au centre $n(P_c, T_c)$ et un mélange de N_e espèces diffusantes avec pour fractions molaires $\chi_{c,e}$ et donc un poids moléculaire μ_c :

$$\sigma_{sc}(P_c, T_c, \lambda) = \sum_e^{N_e} \sigma_{sc,e}(P_c, T_c, \lambda) \chi_{c,e} \quad (2.104)$$

où σ_{sc} est la section efficace totale liée à la diffusion Rayleigh et $\sigma_{sc,e}$ est la section efficace propre à la molécule ou l'atome e . Par conséquent, sur le parcours d'un rayon d'échantillonnage caractérisé par ses coordonnées (ρ, θ) , La profondeur optique moléculaire τ_{sc,i_x} du sous-parcours s'écrit, suivant le mode de calcul adopté (respectivement discret ou semi-intégré) :

$$\tau_{sc,i_x}(\lambda) = \sum_e^{N_e} \sigma_{sc,e}(P_c, T_c, \lambda) \frac{P_c \chi_{c,e}}{k_B T_c} \Delta x_{i_x} \quad (2.105)$$

$$\tau_{sc,i_x}(\lambda) = \sum_e^{N_e} \sigma_{sc,e}(P_c, T_c, \lambda) \frac{P_{c1} \chi_{c,e}}{k_B T_c} \int_0^{z_{c2}-z_{c1}} \exp\left(-\frac{\mu g_{c1}}{k_B T_c} \left(\frac{z}{1 + \frac{z}{R_p + z_{c1}}}\right)\right) \frac{(R_p + z + z_{c1}) dz}{\sqrt{(R_p + z + z_{c1})^2 - (R_p + \rho)^2}} \quad (2.106)$$

où toutes les grandeurs indexées de c correspondent à celles du centre de la cellule traversée lors du sous-parcours d'indice i_x . P_{c1} , g_{c1} et z_{c1} sont respectivement la pression, l'accélération de la pesanteur et l'altitude au début du sous-parcours correspondant à la dite cellule, représenté par l'indice $c1$, et z_{c2} l'altitude en fin de sous-parcours représentée par l'indice $c2$.

La somme de ces sous-parcours nous donne alors la contribution Rayleigh pour le point (ρ, θ) à la transmittance :

$$\tau_{sc,\rho,\theta}(\lambda) = \sum_{i_x=0}^{N_x} \tau_{sc,i_x}(\lambda) \quad (2.107)$$

$$T_{sc,\rho,\theta}(\lambda) = \exp(-\tau_{sc,\rho,\theta}(\lambda)) \quad (2.108)$$

La diffusion Rayleigh va avoir de l'impact sur les spectres essentiellement dans le visible et le proche IR étant donné sa dépendance en $1/\lambda^4$. Il ne concerne donc qu'une toute petite partie du spectre d'observation du JWST (NIRspec principalement). Toutefois, nous gardons à l'esprit que si les instruments de caractérisation des atmosphères d'exoplanètes se concentreront sur l'infra-rouge dans le but d'atteindre les signatures moléculaires de celles-ci, ils peuvent être soutenus par d'autres instruments opérant dans le visible. La diffusion Rayleigh servirait alors de support à la contrainte des compositions atmosphériques par la détermination de la pente caractéristique qu'elle implique dans cette gamme de longueur d'onde. Elle est également très utile lorsqu'il s'agit de lever les dégénérescences des résultats obtenus lors de la résolution du problème inverse puisqu'elle est très sensible quantitativement aux abondances des diffuseurs.

À titre d'exemple, si nous étudions une atmosphère dominée par un mélange H_2/He présentant quelques absorbants forts comme le CH_4 ou H_2O , si quantitativement le dihydrogène est clairement le diffuseur dominant, son abondance est directement corrélée avec celle des absorbants précités et le spectre dans la gamme du visible s'en voit fortement altéré à la moindre de ses variations. L'absorption

moléculaire peut présenter de fortes dégénérescences avec la hauteur d'échelle par de simples effets de compensation entre les abondances et le rayon à 10 bar de l'exoplanète, en particulier si nous effectuons l'inversion exclusivement dans la gamme des infra-rouges où ce type d'absorption est dominant. *A contrario*, la diffusion Rayleigh la contraint beaucoup mieux dans sa gamme puisque ses sections efficaces sont indépendantes de la température et de la pression.

2.3.6 La diffusion de Mie pour les aérosols

Les spectres en transmission sont affectés par les nuages et les brumes photochimiques et nous devons absolument en tenir compte (Rogers and Seager (2010) ; Demory et al. (2013) ; Line and Parmentier (2016)). Le LMDZ GCM peut inclure la physique des nuages et fournir les propriétés ainsi que la distribution 3D de condensats et aérosols. En supposant que les particules sont sphériques et qu'elles sont de tailles similaires ou supérieures aux longueurs d'onde considérées, nous utilisons le formalisme de la diffusion Mie pour calculer son facteur d'extinction, ou facteur d'efficacité, noté Q_{ext} , définis comme le rapport des sections efficaces d'extinction et de la projection géométrique des particules (πr^2 si elles sont sphériques). Nous en déduisons les opacités en suivant la même méthode que dans le module de traitement du transfert radiatif du GCM décrite dans Madeleine et al. (2011).

Des tables de Q_{ext} , pour chaque espèce ont été pré-calculées sur un échantillon de rayons effectifs et de longueurs d'onde puis nous les interpolons linéairement par rapport au rayon effectif et à la longueur d'onde pour calculer les sections efficaces σ_{ae} associées à toutes les cellules de notre maille cylindrique. Notons que ces facteurs sont indépendants de la température et de la pression, et que seule les informations sur la fraction massique en aérosol et la densité moléculaire nous sont nécessaires. La section efficace d'absorption σ_{ae} d'une espèce notée cl de masse volumique ρ_{cl} et de rayon effectif moyen $r_{\text{eff},cl}$ se détermine comme :

$$\sigma_{ae,cl} = \frac{3}{4} \left(\frac{Q_{\text{ext},cl}(r_{\text{eff},cl}, \lambda)}{\rho_{cl} r_{\text{eff},cl}} \right) \quad (2.109)$$

Expression de la profondeur optique de diffusion Rayleigh

Une fois les sections efficaces $\sigma_{ae,cl}$ calculées, il ne reste plus qu'à en déduire la profondeur optique correspondante. Nous travaillons toujours avec le rayon de coordonnées (ρ, θ) et le sous-parcours d'indice i_x . Il est associé à la cellule de coordonnées (r, φ, λ) caractérisée par la température au centre T_c , la pression au centre P_c , la densité au centre $n(P_c, T_c)$ et un mélange de N_{cl} de condensats et d'aérosols avec pour fractions massiques w_c et donc un poids moléculaire μ_c :

$$\sigma_{ae}(\lambda) = \sum_{cl}^{N_{cl}} \sigma_{ae,cl}(\lambda) w_{ae,cl} \quad (2.110)$$

où σ_{ae} est la section efficace totale liée à la diffusion de Mie et $\sigma_{sc,cl}$ est la section efficace propre à l'aérosol cl . Par conséquent, sur le parcours d'un rayon d'échantillonnage caractérisé par ses coordonnées (ρ, θ) , La profondeur optique de diffusion τ_{ae,i_x} du sous-parcours s'écrit, suivant le mode de calcul adopté (respectivement discret ou semi-intégré) :

$$\tau_{ae,i_x}(\lambda) = \sigma_{ae}(\lambda) \frac{P_c}{k_B T_c} \Delta x_{i_x} \quad (2.111)$$

$$\tau_{ae,i_x}(\lambda) = \sigma_{ae}(\lambda) \frac{P_{c1}}{k_B T_c} \int_0^{z_{c2}-z_{c1}} \exp \left(- \frac{\mu g_{c1}}{k_B T_c} \left(\frac{z}{1 + \frac{z}{R_p + z_{c1}}} \right) \right) \frac{(R_p + z + z_{c1}) dz}{\sqrt{(R_p + z + z_{c1})^2 - (R_p + \rho)^2}} \quad (2.112)$$

où toutes les grandeurs indexées de c correspondent à celles du centre de la cellule traversée lors du sous-parcours d'indice i_x . P_{c1} , g_{c1} et z_{c1} sont respectivement la pression, l'accélération de la pesanteur et l'altitude au début du sous-parcours correspondant à la dite cellule, représenté par l'indice $c1$, et z_{c2} l'altitude en fin de sous-parcours représentée par l'indice $c2$.

La somme de ces sous-parcours nous donne alors la contribution de Mie pour le point (ρ, θ) à la transmittance :

$$\tau_{ae,\rho,\theta}(\lambda) = \sum_{i_x=0}^{N_x} \tau_{ae,i_x}(\lambda) \quad (2.113)$$

$$T_{ae,\rho,\theta}(\lambda) = \exp(-\tau_{ae,\rho,\theta}(\lambda)) \quad (2.114)$$

Maintenant que nous avons calculé toutes les sections efficaces de chacune des contributions et que nous avons déterminé les profondeurs optiques pour chaque point de la maille cylindrique (ρ, θ) , nous allons pouvoir calculer δ comme la surface obscurcie par l'exoplanète et son atmosphère. Cette partie était indépendante du modèle atmosphérique débutant la chaîne observationnelle mais dépendait néanmoins des choix faits sur les sources d'opacités (sections efficaces, k-distributions, ExoMol, Hitemp, Hitran ...), les références utilisées (diffusion Rayleigh notamment), les distributions sur le rayon effectif des aérosols (diffusion de Mie) ou encore des données du continuum. Le dernier bloc de Pytmosph3R va gérer la génération des spectres à partir des cartes de transmittance et peut également être utilisé de manière isolée.

2.4 Génération des spectres en transmission

Dans cette partie, nous présentons les différents modes de génération de spectres que nous avons pu rencontrer et dont le choix dépendra de la méthode employée par l'algorithme de traitement du signal qui ferme la chaîne observationnelle. Toutes ces méthodes consistent à intégrer la carte de transmittance $T(\rho, \theta)$ et donnent des résultats similaires lorsque $\Delta\rho$ tend vers 0. Toutefois, dans l'optique de toujours trouver le bon compromis entre un nombre de couches suffisant pour bien décrire notre atmosphère, et pas trop grands pour ne pas augmenter drastiquement les temps de calculs, que ce soit pour Pytmosph3R ou pour l'algorithme de traitement du signal, nous travaillons toujours avec 100 - 200 couches. La méthode d'intégration des cartes de transmittance a une influence sur les spectres qui peut ne pas être négligeable suivant le type d'atmosphère (notamment lorsqu'elles ont une grande hauteur d'échelle, soit la plupart des cibles futures du JWST).

2.4.1 Cartes de transmittance

Une carte de transmittance n'est autre que la représentation 2D en tout point (ρ, θ) de notre maille cylindrique du rapport entre l'intensité lumineuse transmise et l'intensité lumineuse incidente. La transmittance est liée à la profondeur optique en ces points par l'expression :

$$T_{\rho,\theta} = \exp(-\tau_{\rho,\theta}) = \exp(-(\tau_{m,\rho,\theta} + \tau_{ct,\rho,\theta} + \tau_{sc,\rho,\theta} + \tau_{ae,\rho,\theta})) = T_{m,\rho,\theta} T_{ct,\rho,\theta} T_{sc,\rho,\theta} T_{ae,\rho,\theta} \quad (2.115)$$

Elle permet de pondérer le rayonnement provenant de l'étoile et traversant l'atmosphère, l'exoplanète étant considérée comme parfaitement opaque. Cette carte est temporelle et à tout instant du transit, tenant compte des paramètres d'obliquité, d'inclinaison et de rotation, nous pouvons générer

la transmittance correspondante après l'avoir positionnée convenablement devant l'étoile hôte. C'est ainsi que l'on est capable de produire des spectres dans le temps des simulations GCM. C'est un outil permettant entre autre de visualiser à toutes les longueurs d'onde les hétérogénéités azimutales (selon θ) et radiales (selon ρ) d'absorption (voir la Figure 2.6).

L'intégration de cette carte de transmittance multipliée par la carte de distribution en luminosité de l'étoile hôte $I_{\rho,\theta}^s$ permet de calculer la surface opaque équivalente δ de l'exoplanète et de son atmosphère :

$$\delta = \int_0^{2\pi} \int_0^{R_p+h} (1 - I_{\rho,\theta}^s T_{\rho,\theta}) d\rho d\theta \quad (2.116)$$

Plusieurs méthodes permettent de réaliser cette intégration. Une fois δ déterminé, nous en déduisons le rayon effectif R_{eff} et le flux relatif $\Delta F/F$, où F est le flux hors-transit de l'étoile et ΔF la profondeur en flux du transit à une longueur d'onde donnée, à partir des équations suivantes :

$$R_{\text{eff}}(\lambda) = \sqrt{\frac{\delta(\lambda)}{\pi}} \quad (2.117)$$

$$\frac{\Delta F}{F}(\lambda) = \left(\frac{R_{\text{eff}}(\lambda)}{R_s} \right)^2 = \frac{\delta}{\pi R_s^2} \quad (2.118)$$

$R_{\text{eff}}(\lambda)$ comme $\Delta F/F(\lambda)$ constituent tous deux le spectre en transmission de la simulation atmosphérique à l'instant considéré.

2.4.2 Intensité lumineuse uniforme

Considérons dans un premier temps que l'étoile a une intensité lumineuse uniforme, ce qui se traduit par une distribution uniforme et égale à 1 en tout point de la surface de l'étoile $I_{\rho,\theta}^s = I^s = 1$.

Méthode des aires, utilisée par Pytmosph3R par défaut

Dans l'hypothèse où l'intensité lumineuse de l'étoile est uniforme, le passage de ces cartes à des spectres est alors très simple puisque nous n'avons qu'à estimer l'aire représentative d'un faisceau (ρ, θ) donné, associé aux indices (i_ρ, i_θ) et de la multiplier par $1 - T_{i_\rho, i_\theta}$. Cette aire dépend de la résolution radiale N et azimutale N_θ de notre maillage, mais aussi du paramètre de tirage ω :

$$A_{i_\rho} = \frac{\pi(R_p + (i_\rho + 0,5 + \omega)\Delta\rho)^2 - \pi(R_p + (i_\rho - 0,5 + \omega)\Delta\rho)^2}{N_\theta} \quad (2.119)$$

si $i_\rho \neq 0$, sinon :

$$A_{i_\rho} = \frac{\pi(R_p + (i_\rho + 0,5 + \omega)\Delta\rho)^2 - \pi(R_p)^2}{N_\theta} \quad (2.120)$$

De par la géométrie cylindrique adoptée, ces aires sont indépendantes de θ . Dans le cas de figure où les rayons ne sont pas tirés au milieu des couches, soit lorsque $\omega \neq 0,5$, nous perdons un petit peu d'information pour le dernier cylindrique concentrique. Cela n'a pas d'influence sur les spectres si cette partie de l'atmosphère est transparente, ce qui est le cas lorsque le toit du modèle (en pression ou en altitude) a été choisi convenablement. Comme la transmittance est comprise entre 0 (atmosphère

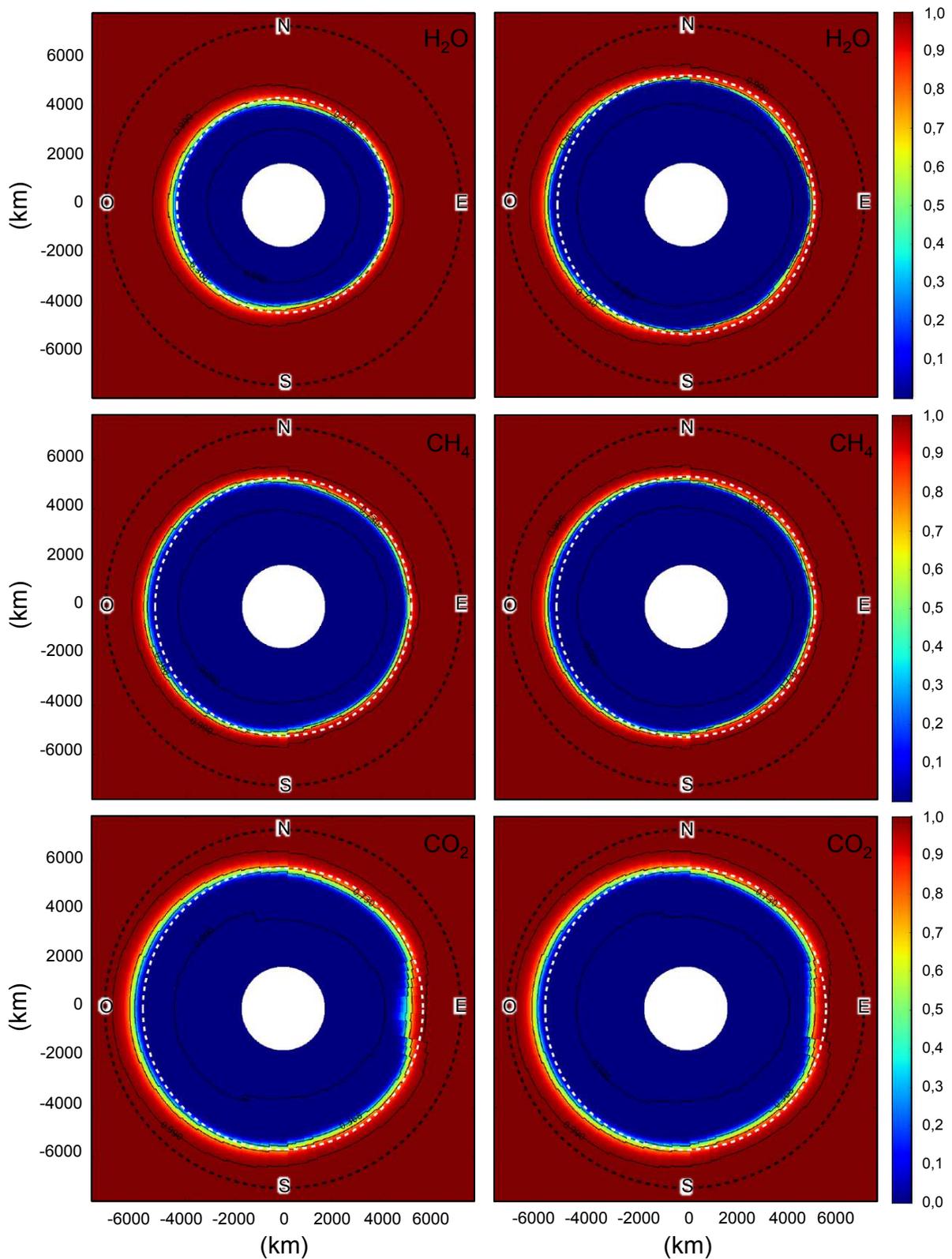


Figure 2.6: Cartes de transmittance d'une simulation atmosphérique de GJ 1214 b (Charnay et al. 2015) pour 3 longueurs d'onde respectivement associées à une bande d'absorption de H₂O, CH₄ et CO₂ (0,95 μm , 2,31 μm et 4,28 μm). À gauche : en ne tenant pas compte de la diffusion de Mie par les aérosols. À droite : en tenant compte de la diffusion de Mie.

opaque) et 1 (atmosphère transparente), la portion de surface $\delta_{i_\rho, i_\theta}$ à ajouter à la section de l'exoplanète est :

$$\delta_{i_\rho, i_\theta} = \frac{A_{i_\rho}(1 - T_{i_\rho, i_\theta})}{\pi R_s^2} \quad (2.121)$$

Nous en déduisons le flux relatif $\Delta F/F(\lambda)$ pour chaque longueur d'onde et nous produisons le spectre en flux :

$$\frac{\Delta F}{F}(\lambda) = \left(\frac{R_p}{R_s}\right)^2 + \sum_{i_\rho=0}^{N-1} \sum_{i_\theta=0}^{N_\theta-1} \delta_{i_\rho, i_\theta}(\lambda) = \left(\frac{R_p}{R_s}\right)^2 + \sum_{i_\rho=0}^{N-1} \sum_{i_\theta=0}^{N_\theta-1} \frac{A_{i_\rho}(1 - T_{i_\rho, i_\theta}(\lambda))}{\pi R_s^2} \quad (2.122)$$

où rappelons-le ΔF est la profondeur du transit à la longueur d'onde considérée et F le flux hors transit de l'étoile. Du rayon stellaire nous pouvons également retrouver le rayon effectif R_{eff} qui est par définition le rayon qui serait observé pour chaque longueur d'onde :

$$R_{\text{eff}}(\lambda) = \sqrt{\frac{\Delta F}{F}(\lambda) R_s} = \sqrt{R_p^2 + \frac{1}{\pi} \sum_{i_\rho=0}^{N-1} \sum_{i_\theta=0}^{N_\theta-1} A_{i_\rho}(1 - T_{i_\rho, i_\theta}(\lambda))} \quad (2.123)$$

Nous produisons ainsi le spectre en rayon effectif de la simulation.

Par intégration, approche utilisée par Tau-REx

Une autre manière de raisonner et de calculer les spectres est de repartir de la définition intégrale de $\Delta F/F(\lambda)$, qui est le raisonnement adopté dans l'algorithme Tau-REx (Waldmann et al. 2015) :

$$\frac{\Delta F}{F}(\lambda) = \frac{1}{\pi R_s^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{R_p+h} (1 - \exp(-\tau(\rho, \lambda))) \rho d\rho d\theta = \frac{1}{\pi R_s^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{R_p+h} (1 - T(\rho, \lambda)) \rho d\rho d\theta \quad (2.124)$$

$$= \left(\frac{R_p}{R_s}\right)^2 + \frac{1}{\pi R_s^2} \int_0^{2\pi} \int_{R_p}^{R_p+h} (1 - T(\rho, \lambda)) \rho d\rho d\theta \quad (2.125)$$

$$\approx \left(\frac{R_p}{R_s}\right)^2 + \sum_{i_\theta=0}^{N_\theta-1} \left(\frac{2}{N_\theta R_s^2} \sum_{i_\rho=0}^{N-1} (R_p + i_\rho \Delta\rho) (1 - T_{i_\rho, i_\theta}(\lambda)) \Delta\rho \right) \quad (2.126)$$

Cette expression du flux relatif s'identifie à un décalage près à celle obtenue par la méthode des aires. En développant Eq. (2.122) :

$$\frac{\Delta F}{F}(\lambda) = \left(\frac{R_p}{R_s}\right)^2 + \sum_{i_\rho=0}^{N-1} \sum_{i_\theta=0}^{N_\theta-1} \frac{2\pi \Delta\rho (R_p + \Delta\rho(i_\rho + \omega))(1 - T_{i_\rho, i_\theta}(\lambda))}{\pi N_\theta R_s^2} \quad (2.127)$$

$$= \left(\frac{R_p}{R_s}\right)^2 + \sum_{i_\theta=0}^{N_\theta-1} \left(\frac{2}{N_\theta R_s^2} \sum_{i_\rho=0}^{N-1} (R_p + (i_\rho + \omega)\Delta\rho) (1 - T_{i_\rho, i_\theta}(\lambda)) \Delta\rho \right) \quad (2.128)$$

L'écart entre les deux approches est contenu dans la présence du paramètre de tirage ω et donc dans le choix des altitudes z , qui sont d'ailleurs prises aux niveaux dans Tau-REx. Dans le cas d'un tirage sur les niveaux, ces deux expressions sont parfaitement identiques, dans tous les autres cas, il faut garder à l'esprit l'existence de cette petite sous-estimation du spectre par l'approche intégrale. Étant donné que les outils de Tau-REx utilise ce formalisme pour calculer leurs flux relatifs, il était important de souligner la divergence de méthode, et surtout de proposer une adaptation systématique lors de cette étape qui peut générer des biais de l'ordre de plusieurs ppm (voire dizaines de ppm) dont nous pourrions aisément nous soustraire.

Méthodes numériques, autre méthode rencontrée dans des générateurs de spectre 1D

De la même manière que précédemment, on peut trouver dans certains générateurs de spectres, notamment NEMESIS développé par University Oxford (Barstow et al. (2013) ; Barstow et al. (2017)) et certains codes 1D *open source*, des fonctions proposées par des bibliothèques Python comme *Numpy* ou *Astropy* qui permettent d'intégrer nos cartes de transmittance pour ensuite nous proposer un spectre. La fonction *integ.trapz* de *Numpy* par exemple offre la possibilité d'effectuer l'intégration :

$$f(z, \theta) = \int_0^{\frac{2\pi}{N_\theta}} \int_{R_p}^{R_p+h} (1 - T(\rho, \lambda)) \rho d\rho d\theta = \pi R_p^2 + \int_0^{\frac{2\pi}{N_\theta}} \int_0^h (1 - T(z, \lambda)) z dz d\theta \quad (2.129)$$

Ce module effectue une interpolation trapézoïdale de $T(\rho, \lambda)$ par rapport à ρ . Entre chaque niveau d'altitude, elle génère une fonction $T(\rho, \lambda)$ linéaire en ρ à partir de la connaissance des transmittances à ces niveaux, respectivement T_{i_ρ, i_θ} et $T_{i_\rho+1, i_\theta}$. Cette même interpolation peut être effectuée par rapport à θ . Cette méthode crée des tendances internes dans la transmittance et est donc à manipuler avec précaution. Elle s'adapte cependant parfaitement aux modes de tirages variables. Pour qu'elle soit la plus générique possible, il suffit d'agrandir les tableaux afin d'avoir un point représentatif de la surface et un autre pour le toit. La transmittance à la surface est assimilée à celle des points $i_\rho = 0$, et ce pour chaque θ , chaque longueur d'onde λ et pour chaque contribution. Celle au toit est identifiée aux points $i_\rho = N - 1$.

Le plus important dans cette étape est de choisir la technique la plus proche de celle de l'algorithme qui traitera le spectre comme une observation.

2.4.3 Intensité lumineuse non uniforme

Le cas d'une luminosité uniforme n'est pas un cas réaliste. Elle décroît déjà lorsqu'on se rapproche des bords par l'effet d'assombrissement centre-bord, et une étoile présente à sa surface des hétérogénéités de température et de composition qui créent des facules, des tâches ou de la granulation qui peut avoir une influence sur les profondeurs de transit (Chiavassa et al. 2017). Toutes ces variations de la luminosité d'une étoile viennent donc modifier le spectre en transmission de l'exoplanète. Contrairement à la situation précédente, la position de l'exoplanète et de son atmosphère dans le champ de l'étoile hôte devient essentielle.

Assombrissement centre-bord et déplacement de l'exoplanète

L'atténuation de la luminosité de l'étoile dépend de sa température effective T_{eff} , de sa gravité à la photosphère $\log g$ et de sa métallicité $[M/H]$ (Mandel and Agol 2002). Nous pouvons l'exprimer suivant une loi quadratique comme :

$$\frac{I^s(\mu)}{I^s(0)} = 1 - a(1 - \mu) - b(1 - \mu)^2 \quad (2.130)$$

où $\mu = \cos \phi$ avec ϕ l'angle formé entre l'axe d'observation et la normale à la surface stellaire (cet angle est nul lorsque la planète est à la conjonction), a et b sont les coefficients quadratiques d'assombrissement centre-bord. Nous pouvons également l'exprimer suivant une loi non linéaire plus exhaustive du type :

$$\frac{I^s(\mu)}{I^s(0)} = 1 - c_1(1 - \mu^{1/2}) - c_2(1 - \mu) - c_3(1 - \mu^{3/2}) - c_4(1 - \mu^2) \quad (2.131)$$

où cette fois-ci c_1 , c_2 , c_3 et c_4 sont les coefficients non-linéaires d'assombrissement centre-bord (Sing (2010)). L'argument de Sing est d'éliminer le terme en $\mu^{1/2}$ car il n'influe que pour les très petites valeurs

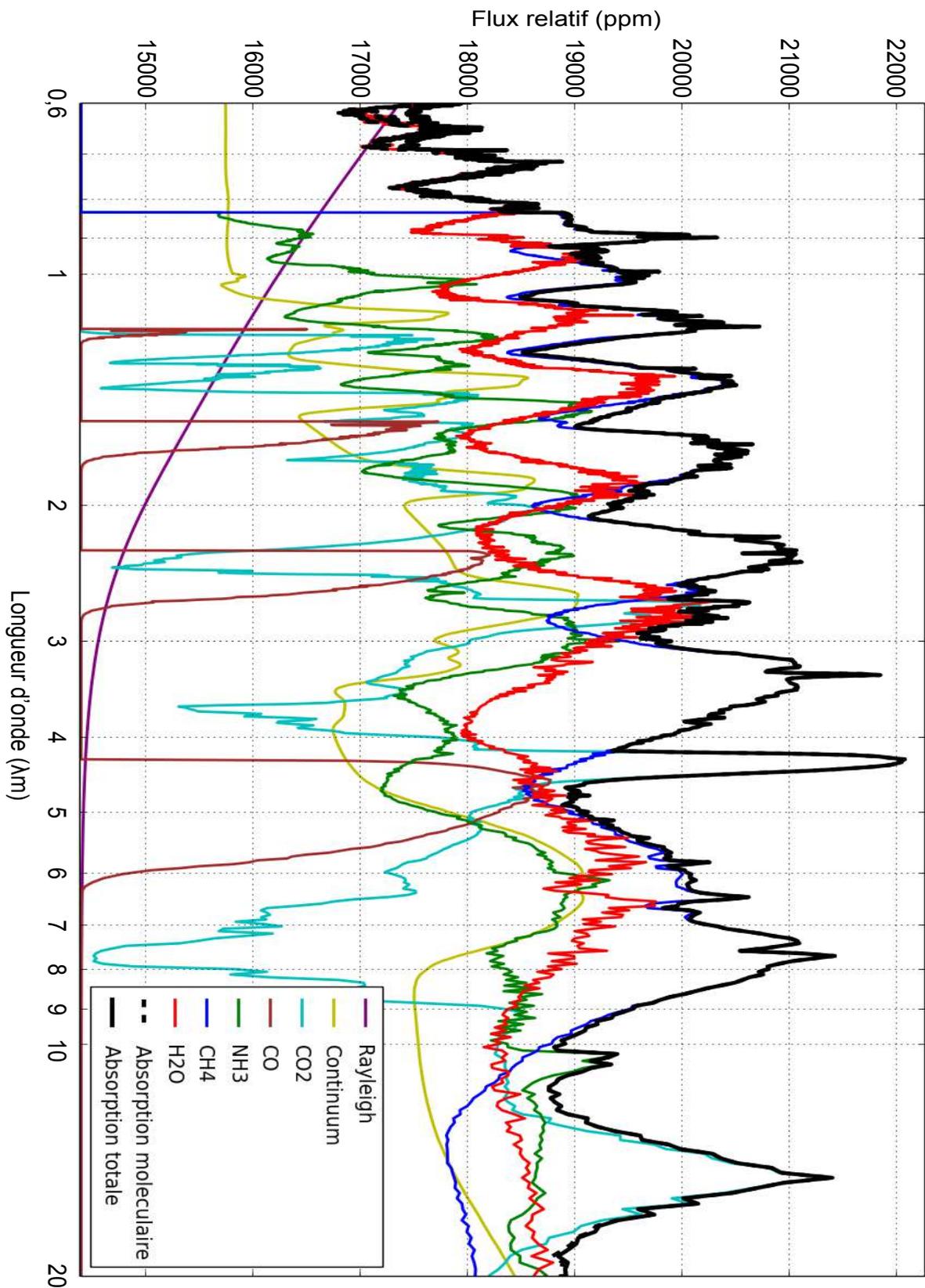


Figure 2.7: Spectre en transmission d'une simulation atmosphérique dynamique 3D. Nous ne tenons pas compte de la diffusion de Mie des aérosols.

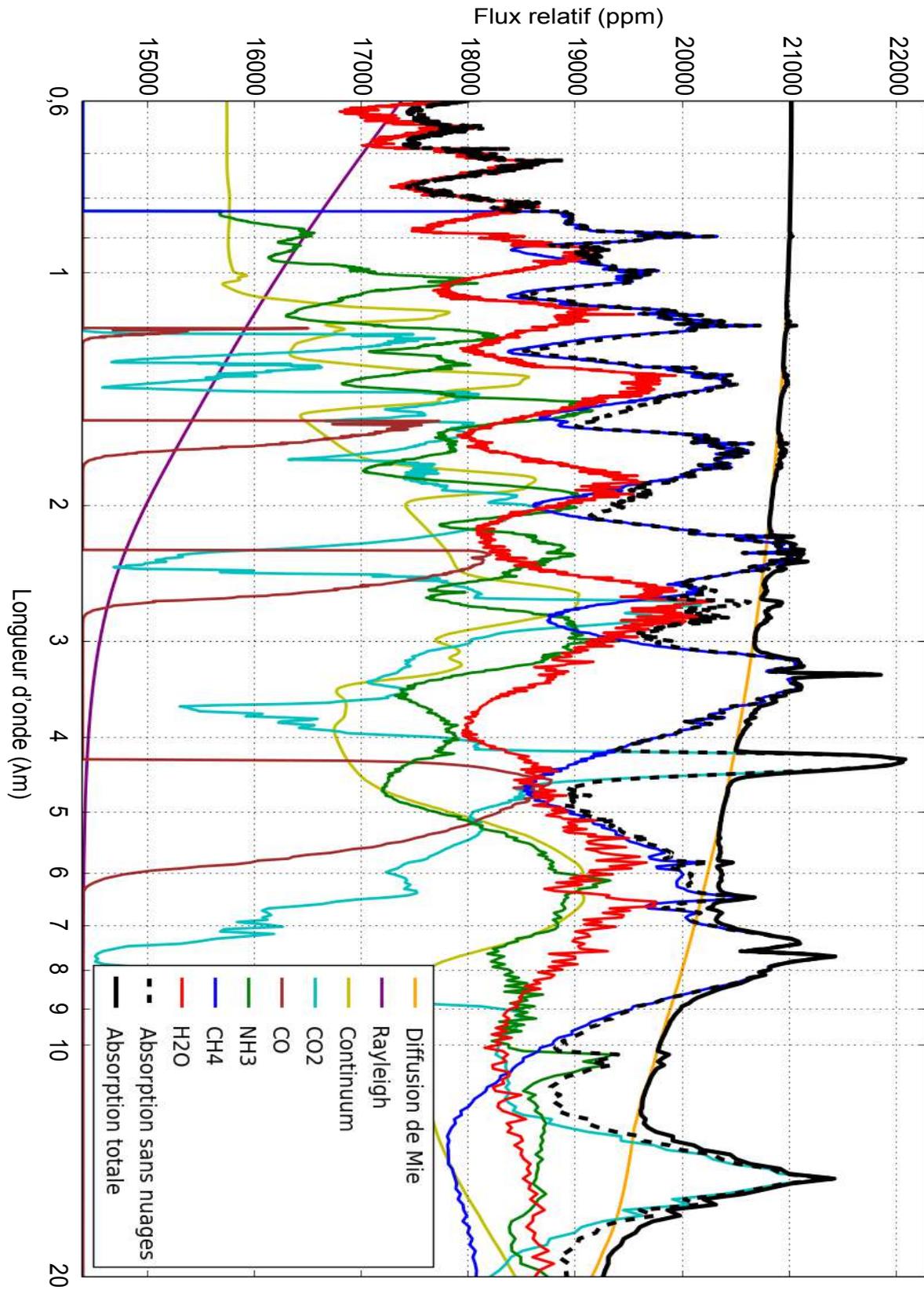


Figure 2.8: Spectre en transmission d'une simulation atmosphérique dynamique 3D en présence de nuage. Nous tenons compte de la diffusion de Mie des aérosols.

de μ et que la contrainte des coefficients est plus simple. À partir de cette expression à 3 coefficients, des tables ont été produites sur un large échantillon d'étoiles en fonction donc de T_{eff} , $\log g$ et $[M/H]$.

Pytmosph3R exploite ces tables et résout les équations du mouvement de l'exoplanète pour tenir compte de cet effet. Si nous connaissons l'excentricité e de l'orbite de la planète, la position du périastre ω_p , son inclinaison i , sa période de rotation T_{rot} , ainsi que les paramètres que l'étude de ses transits permet de contraindre avec plus ou moins de précision (notamment en ce qui concerne l'excentricité et la position du périastre), nous sommes capables de déterminer à tout moment la position du centre de l'exoplanète par rapport au centre de l'étoile et donc, de connaître celles des rayons d'échantillonnage de la maille cylindrique. Tout d'abord, nous déduisons du rayon, de la masse stellaire et de la période orbitale le demi-grand axe a normalisé à R_s :

$$a = \left(G \frac{T_{\text{rot}}^2 M_s}{R_s 4\pi^2} \right)^{1/3} \quad (2.132)$$

Nous introduisons par ailleurs le paramètre $r_h = \frac{R_p + h}{R_s}$ comme le rayon totale de la grille sphérique, toujours normalisé par rapport au rayon de l'étoile. La phase orbitale est obtenue à partir de la période orbitale et de la connaissance du temps de référence t_0 que l'on prend comme l'instant correspondant au premier transit :

$$\chi = 2\pi \left(\frac{t - t_0}{T_{\text{rot}}} \right) \quad (2.133)$$

La distance projetée ρ_{se} entre le centre de l'étoile à un instant t considéré et le centre de l'exoplanète se détermine donc comme :

$$\rho_{se} = a \sqrt{u^2 + v^2} \left(\frac{1 - e^2}{1 - e \sin(\chi - \omega_p)} \right) \quad (2.134)$$

avec

$$u = -\cos i \cos \chi \quad (2.135)$$

$$v = \sin \chi \quad (2.136)$$

En conséquence, si nous notons $x_{i\rho, i\theta}$ et $y_{i\rho, i\theta}$ les coordonnées des rayons d'échantillonnage dans le repère cartésien centré sur l'exoplanète :

$$x_{i\rho, i\theta} = \left(\frac{R_p}{R_s} + (i\rho + \omega) \frac{\Delta\rho}{R_s} \right) \cos(i\theta\Delta\theta) \quad (2.137)$$

$$y_{i\rho, i\theta} = \left(\frac{R_p}{R_s} + (i\rho + \omega) \frac{\Delta\rho}{R_s} \right) \sin(i\theta\Delta\theta) \quad (2.138)$$

$$\mu_{i\rho, i\theta} = \cos \left(\sqrt{(\rho_{se} + x_{i\rho, i\theta})^2 + y_{i\rho, i\theta}^2} \right) \quad (2.139)$$

À présent nous effectuons le produit matriciel entre la carte de transmittance atmosphérique T et la carte de luminosité stellaire I^s que nous produisons à partir des $I^s(\mu_{i\rho, i\theta})$. Le spectre est réaliste quelle que soit la position de l'exoplanète dans le champ de l'étoile, toutefois nous définirons comme spectre de "référence" celui correspondant la position centrale de l'exoplanète. Notons que le module qui gère la génération des observables tient compte du fait que pour des positions extrêmes de l'exoplanète certains rayons d'échantillonnage soient en dehors du champ de l'étoile. Dans ce cas de figure, ces

points sont exclus et n'interviennent plus dans le calcul du flux relatif. Il suffit pour cela de ramener à 0 la contribution surfacique A_{i_ρ, i_θ} associée. L'obscurcissement atmosphérique est donc :

$$\eta_a = \sum_{i_\theta=0}^{N_\theta-1} \sum_{i_\rho=0}^{N-1} I^s(\mu_{i_\rho, i_\theta}) A_{i_\rho, i_\theta} \quad (2.140)$$

C'est exactement le même travail qui est réalisé avec la surface rocheuse de la planète qui est complètement opaque, nous devons cela-dit estimer quelle part réelle du rayonnement stellaire est à soustraire et pour ce faire :

- nous définissons une résolution interne pour découper en anneaux l'aire projetée de la planète,
- nous conservons la résolution angulaire pour optimiser les calculs,
- nous collectons ainsi $I^s(\mu_{i'_\rho, i_\theta})$ et $A_{i'_\rho, i_\theta}$,
- lorsque l'on est en dehors du champ de l'étoile, $A_{i'_\rho, i_\theta} = 0$,
- en conséquence l'obscurcissement planétaire n'est autre que :

$$\eta_p = \sum_{i_\theta=0}^{N_\theta-1} \sum_{i'_\rho=0}^{N'-1} I^s(\mu_{i'_\rho, i_\theta}) A_{i'_\rho, i_\theta} \quad (2.141)$$

Pour établir le flux hors-transit, nous intégrons $I^s(\mu)$ sur l'aire de l'étoile, ce qui revient à calculer une aire pondérée de l'étoile (qui serait égale à πR_s^2 si sa luminosité était uniforme) :

$$\eta_s = \int_0^{2\pi} \int_0^1 I^s(\mu) \mu d\mu d\phi \approx \sum_{i_s=0}^{N_s-1} \pi(\mu_{i_s+1}^2 - \mu_{i_s}^2) R_s^2 I_s(\mu_{i_s}) \quad (2.142)$$

où N_s est le nombre de pas en μ pour décomposer l'intégrale. Le flux relatif à l'instant t et à la longueur d'onde λ considérée est donc :

$$\frac{\Delta F}{F}(t, \lambda) = \left(\frac{\eta_p(t, \lambda) + \eta_a(t, \lambda)}{\eta_s(t, \lambda)} \right) \quad (2.143)$$

Cette formulation qui tient compte de la distribution de luminosité de l'étoile n'est pas nécessaire lorsque nous voulons produire un spectre brut et l'étudier. Elle peut le devenir lorsque nous souhaitons étudier l'effet des variations de luminosité de l'étoile où lorsque nous voulons produire des spectres temporels. Si les coefficients d'assombrissement centre-bord de l'étoile hôte sont à l'origine d'un contraste conséquent en luminosité et que notre exoplanète est supposée inclinée par rapport au plan écliptique, cette formulation peut mettre en évidence de fortes variations du spectre avec l'hypothèse d'une distribution homogène. C'est d'autant plus vrai que les coefficients d'assombrissement centre-bord dépendent également de la longueur d'onde.

2.5 Opportunités offertes par Pytmsoph3R et améliorations à venir

2.5.1 Les autres applications possibles de la carte de transmittance

Des hétérogénéités stellaires, granulations dans la distribution en luminosité

Nous avons tenté de coupler un générateur de granulation (Chiavassa et al. 2017) avec la routine de génération des courbes de lumière. Initialement prévu pour des exoplanètes dépourvues d'atmosphère,

la granulation est décrite comme une distribution spatiale des variations de luminosité de l'étoile, par conséquent, il est aisé de les prendre en compte dans $I^s(\mu_{i_\rho, i_\theta})$ connaissant la position de l'exoplanète. Les tâches et les facules par exemple demanderont évidemment la prise en compte de la rotation propre de l'étoile.

Pytmosph3R ne génère aucunement ces matrices, d'autres codes de physique stellaire doivent être là en appui, il ne fait qu'exploiter leurs résultats pour les intégrer dans le générateur de spectre. Quel que soit le type d'hétérogénéité stellaire que nous souhaitons étudier, nous n'avons besoin que d'une description matricielle de la luminosité stellaire, fixe et ou évoluant dans le temps, pour en tenir compte lors de la génération du spectre, faisant des cartes de transmittance la clé de voûte des champs de recherche envisageables.

Génération de courbes de lumière

La courbe de lumière d'un système correspond à la représentation dans le temps du flux lumineux. Si nous sommes capables à tout moment de calculer un flux relatif ou un rayon effectif, nous pouvons donc corriger le flux lumineux de l'étoile à tout instant du transit. La routine développée dans ce sens permet de déterminer avec précision la position du centre de l'exoplanète, ce qui nous apporte deux informations :

- Cela nous permet de tenir compte des hétérogénéités de luminosité de l'étoile et de calculer en tout point (ρ, θ) la valeur de la luminosité normalisée. La position exacte des centres de cellule se déterminent à partir de la position de l'exoplanète et des paramètres ρ et θ et nous générons $I^s(\rho, \theta, t)$.
- Entre le moment où l'exoplanète arrive dans le champ de son étoile hôte, et le moment où elle en sort, elle a tourné sur elle-même, mais aussi autour de l'étoile, et nous devons en tenir compte. À chaque instant t , la phase orbitale ainsi que la connaissance de la période de rotation propre de l'exoplanète permettent d'assigner un angle de rotation global λ_{rot} à la longitude de l'observateur lors de l'étape de correspondance entre les mailles. Nous tenons également compte du paramètre d'impact, qui varie légèrement pour des orbites inclinées, et donc de l'inclinaison résultante sur la latitude observateur, et nous corrigeons ces coordonnées des angles d'obliquité (§ 2.2.6).

Ceci nous permet de générer les cartes de transmittance les plus cohérentes possible pour chacun de ses instants. Nous pouvons ainsi à la fois tenir compte de la variabilité stellaire et des évolutions atmosphériques (si nous avons plusieurs instant t à notre disposition dans les sorties de la simulation GCM) et/ou des effets purement liés à la légère rotation de l'exoplanète. Dans le cas des exoplanètes en rotation synchrone, qui va nous intéresser dans les Chapitres 4 et 5, le terminateur qui correspond à l'interface entre le côté jour (chaud) et le côté nuit (froid), n'est plus tout à fait au plan d'observation. Nous voyons un petit morceau de l'hémisphère jour que nous perdons de l'autre côté sur l'hémisphère nuit et qui pourrait être détectable pour des atmosphères à fort contraste jour/nuit, en température par exemple.

Etant donné le nombre de points nécessaire et le temps que demande la génération des cartes de transmittance, indépendamment de celui que pourrait prendre le modèle stellaire pour produire les $I^s(\rho, \theta, t)$, construire des courbes de lumière est en conséquence un processus long. Il présente néanmoins l'intérêt de pouvoir comparer les spectres au cours du transit et, pour des atmosphères présentant de fortes hétérogénéités azimutales dans le plan du terminateur, de visualiser les différences entre l'entrée (*ingress*) et la sortie (*egress*) de l'exoplanète du champ de son étoile correspondant

L'objectif principal serait à terme de compléter la transmission par les autres processus lumineux : l'émission et la réfraction, pendant le transit ou hors-transit.

2.5.2 Utilisation des intermédiaires de calcul dans l'étude des simulations et l'interprétation des spectres

Tous les intermédiaires de calculs sont conservés par Pytmosph3R lorsqu'il traite une simulation. Ainsi, les matrices de correspondance, la grille sphérique régulière et les profondeurs optiques des sous-parcours sont tous sauvegardés dans des fichiers prévus à cet effet. Cela peut présenter plusieurs intérêts :

- Conserver la grille sphérique régulière découpée en niveaux d'altitude en facilite grandement la représentation spatiale. Si en climatologie nous préférons raisonner sur des isobares, en transmission nous préférons utiliser des cartes spatiales qui permettent de localiser les rayons lumineux et de les comparer directement aux rayons effectifs.
- Les matrices de correspondance qui permettent la reconstruction des chemins optiques au sein de la maille cylindrique sont tout à fait réutilisables pour une même exoplanète, en particulier si nous travaillons à $\Delta\rho$ imposé (et pas à pression de toit P_t fixée). Conserver ces mêmes chemins optiques permettent également des visualisations précieuses, comme celle de la densité, de la température ou des abondances avec x . Lorsque nous cherchons à raisonner sur des effets liés à des hétérogénéités le long des chemins optiques par exemple, nous n'avons qu'à identifier les indices i_ρ et i_θ de la ou des parties de la carte de transmittance que nous étudions (ou les faisceaux correspondants), ou visualiser le cylindre i_ρ dans son intégralité.
- Tous ces intermédiaires de calculs vont nous permettre de calculer des grandeurs moyennes lorsque nous chercherons à trouver un équivalent d'atmosphère 1D à nos simulations 3D. Tout ceci sera expliqué en détail dans le Chapitre 4.
- Les profondeurs optiques de chacune des contributions sont également conservées dans des tableaux aux dimensions de la maille cylindrique. Nous pouvons visualiser l'évolution de la profondeur optique au sein des parcours et identifier rapidement les régions dominantes sur le transfert radiatif, pour toutes les longueurs d'onde et quelles que soient la ou les contributions qui nous intéressent. Nous exploitons notamment ces tableaux lorsque nous tentons de calculer les angles de pénétration jour ψ_* et nuit ψ_+ traduisant justement de la région contenant l'essentiel de l'information spectroscopique, retirer le reste du chemin optique n'engendrant pas de différences détectables (elles sont inférieures au bruit). Nous expliquons dans le détail la démarche adoptée en Annexe A, avant de l'appliquer pour une simulation dynamique 3D de GJ 1214 b en Annexe B. L'ensemble de ces résultats n'étant obtenus qu'à partir des intermédiaires de calcul.
- Pytmosph3R génère séparément les cartes de transmittance de chacune des contributions avant de produire la carte associée au spectre qui nous intéresse. Par exemple, si nous voulons étudier le spectre en l'absence de diffusion de Mie, l'algorithme effectue le calcul séparément pour le moléculaire $T_{m,\rho,\theta}$, le continuum $T_{ct,\rho,\theta}$ et la diffusion Rayleigh $T_{sc,\rho,\theta}$ puis en déduit $T_{\rho,\theta} = T_{m,\rho,\theta}T_{ct,\rho,\theta}T_{sc,\rho,\theta}$. Les 3 contributions sont sauvegardées, et si nous désirons ensuite tenir compte de la diffusion de Mie, le code n'a plus qu'à déterminer $T_{ae,\rho,\theta}$, télécharger les cartes déjà produites et appliquer $T_{\rho,\theta} = T_{m,\rho,\theta}T_{ct,\rho,\theta}T_{sc,\rho,\theta}T_{ae,\rho,\theta}$.

Les sorties de Pytmosph3R offrent donc un certain nombre d'opportunités et sont très éclairantes quand il s'agit d'interpréter les spectres. Comme elles contiennent à la fois toute l'information sur la simulation elle-même et toute celle sur le transfert radiatif, conservant les éléments de transition entre

l'un et l'autre, elles nous permettent de déterminer rapidement les origines, dans la simulation, des observations faites sur ses spectres.

2.5.3 Pour aller plus loin, les améliorations à venir

Un certain nombre de paramètres sont déjà implémentés dans Pytmosph3R, mais le code fera probablement l'objet de bon nombre d'améliorations dans le temps afin d'être de plus en plus fiable et de plus en plus exhaustif.

Réfraction et diffusion multiple dans le code ?

Son écriture ne permet pas en l'état la détermination simple des effets de la réfraction, tout simplement parce que la géométrie de la maille est adaptée à des rayons en propagation rectiligne. La refonte du mode tirage des rayons serait donc nécessaire, avec toutes les conséquences que cela engendrerait. Toutefois, la seconde partie du code qui calcule les sections efficaces et résout le transfert radiatif est écrite de manière à s'adapter avec très peu de modifications à des trajectoires courbes des rayons d'échantillonnage puisque les calculs n'utilisent que des indices rangés dans des tableaux aux dimensions du maillage (et est donc totalement indépendant de sa géométrie). Il en va de même pour la diffusion multiple qui n'est pas prise en compte dans le code et qui mériterait une réflexion plus profonde (Bétrémieux and Kaltenecker (2014), Bétrémieux and Kaltenecker (2015)).

Emission planétaire et atmosphérique, couplage avec des courbes de phase

Les cartes de transmittance que produit Pytmosph3R doivent être complétées par l'émission planétaire et atmosphérique des simulations. Les données GCM sont compliquées à exploiter, du moins dans les directions qui nous intéressent qui sont celles de notre maille. Une amélioration considérable est donc à envisager sur ce point. Toujours au-delà de la transmission, des modèles en émission et réflexion peuvent parfaitement se coupler à la routine de génération de courbes de lumière pour ajouter la modulation temporelle du flux totale émis par le système étoile/exoplanète, principalement sur la partie hors-transit. Il suffirait donc de soustraire sur la durée du transit les variations de flux ΔF produites par la routine de Pytmosph3R à la courbe de phase. Un début de réflexion a été réalisé s'inspirant de l'approche en émission de Tau-REx décrite dans Waldmann et al. (2015).

Dynamico comme alternative du GCM

La nouvelle version du GCM qui change de maillage, baptisé Dynamico (Dubos et al. (2015), Dubos et al. (2017)) ne sera plus compatible avec Pytmosph3R. Toutefois, les modifications ne concernent qu'une bibliothèque sur les 8 nécessaires pour faire fonctionner le code. L'adaptation à un maillage autre qu'un repère sphérique ne devrait pas être trop compliqué. Comme nous l'avons déjà souligné, une grande partie de l'algorithme est indépendante de la géométrie du maillage adoptée, et n'est donc pas à adapter. Le plus délicat sera de remplacer toutes les formules permettant d'associer les coordonnées cylindriques aux coordonnées propres aux simulations Dynamico. Il existe d'autres simulateurs atmosphériques 3D, et la compatibilité reste là encore une question de philosophie adoptée, que ce soit sur la géométrie de la maille, ou la manière de résoudre les équations physiques.

Discussion sur l'implémentation des reliefs

Un module prévoit la possibilité d'ajouter une option de relief, comme c'est déjà le cas dans les simulations GCM. Il consiste à remplacer le rayon planétaire par un tableau aux dimensions de la grille sphérique, le module résout alors les équations fluides pour permettre de retrouver l'équivalent en grille d'altitude. La difficulté principale ici concerne les massifs les plus imposants et qui pourraient croiser plusieurs couches dans la maille cylindrique, que ce soit à l'échelle du calcul de pression locale, ou que ce soit en terme de transfert radiatif : comment dans le cas d'une maille cylindrique comme celle de Pytmosph3R, traduire la part obscurcie par un massif au terminateur, et la part qui passe quand même ? Sachant que nos rayons d'échantillonnage peuvent l'intercepter, avec le problème donc d'avoir un "trou" dans le sous-parcours le plus important en termes de signature spectrale, et celui de l'estimation de la pression aux abords du dit relief. Comment rendre ce parcours représentatif ? Le module fonctionne bien en l'état pour des altitudes inférieures à celle du premier rayon d'échantillonnage au terminateur $\omega\Delta\rho$ mais est à repenser dans les autres cas.

Pour conclure sur ce chapitre, nous complétons le schéma scientifique que nous voulons mettre en place en développant un algorithme capable de produire des spectres en transmission à partir de simulations dynamiques 3D tels que des GCM pour ensuite en permettre l'inversion par un algorithme de traitement du signal tel que Tau-REx. Nous sommes entrés dans le détail de la structure, des méthodes adoptées et du fonctionnement de ce code, baptisé Pytmosph3R, permettant ainsi une meilleure prise en main et facilitant son utilisation et ses mises à jour, dans le cadre de cette étude comme par-delà.

Nous avons fourni un effort tout particulier à rendre Pytmosph3R le plus générique possible vis-à-vis des simulations GCM dont nous souhaiterions obtenir un spectre en transmission. Son optimisation et son découpage ont grandement amélioré ses performances et la possibilité de l'intégrer aisément dans d'autres chaînes observationnelles. Les différents modules qui le constituent gèrent indépendamment les aspects atmosphériques, l'application des paramètres orbitaux, le calcul des opacités et l'exploitation des cartes de transmittance en vue de la génération des spectres. Nous pouvons aisément isoler chacune des contributions (moléculaire, continuum, diffusion Rayleigh et diffusion de Mie) et compléter la simulation d'un ensemble d'informations le plus exhaustif possible et optimiser la phase d'interprétation des spectres, mais aussi de leurs inversions.

Nous avons à coeur de conserver le maximum d'intermédiaires de calculs lors de la génération des spectres. Ces mêmes intermédiaires peuvent être réutilisés pour interpréter l'impact de la structure atmosphérique sur le spectre final et c'est notamment ce qui sera effectué dans les Chapitres 4 et 5. La conservation des profondeurs optiques et des caractéristiques de la maille cylindrique permettra de donner une estimation, à tout azimut et à toute longueur d'onde, de l'angle d'ouverture et des angles de pénétration (voir Annexe A). Ces mêmes données intermédiaires permettront de calculer des abondances et des températures moyennes tenant compte du poids radiatif des cellules de la maille cylindrique. Enfin, les cartes de transmittance sont probablement l'outil le plus puissant généré par Pytmosph3R car au-delà de leurs rôles dans la génération des spectres, elles s'ouvrent sur un champ d'étude plus large (courbes de lumière, entrée et sortie du transit primaire, modulation de l'intensité stellaire ...).

Avant d'être directement appliqué sur des simulations, nous avons validé Pytmosph3R et établi l'environnement optimal quant à l'exploitation de la chaîne de simulation des observations et de celles à venir.

Chapter 3

Validation du générateur de spectres et discussions

Sommaire

3.1	Validation des calculs de profondeurs optiques et du générateur de spectre	65
3.1.1	Profondeur optique le long de la ligne visée en fonction de la profondeur optique verticale	66
3.2	Domaine de compatibilité lié à la géométrie de Pytmosp3R, impact du profil vertical	69
3.2.1	Méthode de calcul des profils de Tau-REx	69
3.2.2	Adaptation entre Pytmosp3R et Tau-REx	71
3.2.3	Effets systématiques entre Tau-REx et la version par défaut de Pytmosp3R	74
3.2.4	Validation azimutale, les aspects tridimensionnels	76
3.3	Validation de la génération des sections efficaces	77
3.3.1	Interpolation de l'absorption moléculaire	78
3.3.2	Vérification de la diffusion Rayleigh et du continuum	78
3.3.3	Cas particulier de la diffusion de Mie	78
3.4	Validation globale de Pytmosp3R	79
3.4.1	Contrainte des performances de l'algorithme	79
3.4.2	En résumé sur l'environnement propice à l'utilisation de la chaîne observationnelle	80
3.5	Quelques discussions d'importance	84
3.5.1	Discretisation ou intégration du chemin optique en densité, quand l'utiliser ?	84
3.5.2	Produire une simulation GCM permettant une étude de qualité	86

Le plus délicat lorsque nous proposons un algorithme de la consistance de Pytmosph3R, c'est de réussir à le valider avec les outils qui sont à notre disposition. La contrainte de l'efficacité et de la performance du code, du fait de sa singularité, a nécessité d'adopter une démarche rigoureuse dans le but d'isoler tous les biais qui lui sont propres de ceux liés à d'éventuels dysfonctionnements. Ce fut un travail long, probablement le plus important, le plus nécessaire et qui aura demandé le plus d'investissement durant ces études.

Pytmosph3R a véritablement vu le jour lorsqu'il a passé avec brio toutes les étapes de la validation que nous allons développer ci-dessous. Nous n'entrerons pas toujours dans le détail car ce chapitre n'a pas pour vocation de pointer les malfaçons passées de Pytmosph3R ou d'en expliquer les causes et les conséquences, mais plutôt de détailler la méthode adoptée lors de la validation pour en assurer le bon fonctionnement et souligner l'ensemble des facteurs qui peuvent introduire des biais entre l'étape de génération du spectre et celle de son traitement. L'approche globale adoptée par le code, aussi proche puisse-t-elle être de celle de l'algorithme de traitement du signal, peut malgré tout être à l'origine d'écarts qui, suivant leurs ordres de grandeur, peuvent se répercuter sur les distributions *a posteriori* issues de l'inversion. Quantifier ces écarts tout en assurant la nature systématique et non dysfonctionnelle permet de mieux interpréter les futurs résultats obtenus à partir de la chaîne de simulation des observations que nous cherchons à compléter et ainsi de se prémunir de ses faiblesses.

Cette étape essentielle permet également de discuter d'autres considérations à ne pas négliger : l'importance des choix faits aux étapes antérieures à celle de Pytmosph3R, notamment celui du toit du modèle, des résolutions des simulations ou des maillages avec lesquels nous limitons les biais systématiques sans corrompre en termes de temps de calcul les algorithmes de traitement du signal, et comment utiliser les différentes options, dans quels cas et pourquoi.

Ce chapitre veut installer l'environnement propice à l'utilisation du schéma scientifique mis en place et souligner ses exigences. Nous souhaitons placer l'utilisateur dans les meilleures conditions pour que les incompatibilités fonctionnelles et structurelles avec lesquelles nous devons composer n'aient qu'un impact faible, voire négligeable ou dans tous les cas contrôlé, sur ses résultats.

Développer un générateur de spectre 1D peut être très rapide et tenir sur quelques centaines de lignes de code. Pytmosph3R repose sur 6 bibliothèques interdépendantes de plusieurs milliers de lignes pour extraire les données des simulations et traduire le passage de l'exoplanète devant son étoile. Pour valider le code, nous nous sommes reposés sur ce que nous contrôlions, à savoir l'expérience unidimensionnelle de la résolution du transfert radiatif. Si Pytmosph3R est capable de reproduire le spectre d'un générateur 1D appliqué à une atmosphère 1D, alors nous pouvons considérer qu'il fonctionne. Là où l'inclinaison, l'obliquité, l'angle θ considéré, la rotation propre ou la phase orbitale n'avaient aucune importance, ils deviennent essentiels avec une atmosphère hétérogène. Là également où une résolution verticale raisonnable permettait d'effectuer rapidement les calculs et de proposer un spectre à très grande vitesse, la quantité de données et de calculs, ainsi que l'adaptation qui en découle pour ne pas saturer les machines, créent tout autant d'opportunité de provoquer des erreurs. Pytmosph3R peut se diviser en trois blocs distincts :

- Le bloc de préparation de la maille et de transposition de la simulation (§ 3.1, nous l'appellerons le bloc M.
- Le bloc de calcul des sections efficaces et des transmittances (§ 2.3, nous l'appellerons le bloc T.
- Le bloc d'utilisation des données précédemment calculées pour générer un spectre (§ 2.4, nous l'appellerons le bloc S.

Nous avons procédé de manière à valider les blocs indépendamment les uns des autres. L'outil de référence lorsque le problème ne proposera pas de solution analytique sera le générateur de spectre 1D de Tau-REx (Waldmann et al. (2015) et Waldmann et al. (2015)), et nos arguments de précision reposeront sur des niveaux de bruits calculés à partir des instruments du JWST (Cowan et al. (2015))

3.1 Validation des calculs de profondeurs optiques et du générateur de spectre

Dans un premier temps, nous allons éprouver les modules de calcul des profondeurs optiques du deuxième bloc de Pytmosph3R puis les modules de génération des spectres du troisième bloc. Il est fondamental de valider ces deux parties en premier lieu pour pouvoir ensuite tester tous les autres blocs à travers la comparaison des spectres.

3.1.1 Profondeur optique le long de la ligne visée en fonction de la profondeur optique verticale

Nous partons de la configuration la plus simple possible. Nous supposons une exoplanète et son atmosphère avec les caractéristiques et hypothèses suivantes :

- Un rayon à 10 bar noté R_p , une masse planétaire notée M_p , et donc une gravité de surface g_0 .
- Nous supposerons la gravité constante au sein de l'atmosphère.
- L'atmosphère est homogène, dominée par un mélange H_2/He de ratio, $x_{H_2/He}$ en présence d'un absorbant, par exemple H_2O , à une quantité fixée à $\chi_{H_2O} = 0,05$. Son poids moléculaire est donc constant et noté μ_0
- L'atmosphère est également isotherme à une température T_0 et la pression de surface est fixée à 10^6 Pa.
- L'étoile hôte a un rayon noté R_s , une masse notée M_s , et une température effective notée T_{eff}

Concernant le transfert radiatif, nous considérons que le mélange a une section efficace indépendante de la pression et de la température égale à σ_0 et nous travaillerons en monochromatique. Ceci va nous permettre de comparer les résultats que nous obtiendrons avec une forme légèrement modifiée des résultats décrits dans [Guillot \(2010\)](#). Nous commençons par calculer la profondeur optique le long d'un rayon traversant l'atmosphère d'une planète à une altitude $z_{||}$. La gravité et la hauteur d'échelle atmosphérique $H_0 = k_B T_0 / \mu_0 g_0$ constants impliquent que la densité moléculaire du gaz soit donnée par :

$$n = n_0 \exp -z/H, \quad (3.1)$$

où n_0 est la densité au rayon de référence (R_p). Pour un rayon avec une altitude tangente donnée $z_{||}$, l'altitude dans l'atmosphère à une distance x du terminateur est donnée au premier ordre (tant que $R_p \gg z_{||}$) par :

$$z = z_{||} + \frac{x^2}{2R_p} \quad (3.2)$$

La profondeur optique induite par l'absorption par l'eau, dans notre exemple, le long de la ligne de visée $\tau_{||}$ jusqu'à une position x est en conséquence :

$$\begin{aligned} \tau_{||}(z_{||}) &= \int_{-\infty}^x \sigma_{H_2O} \chi_{H_2O} n \exp -z_{||}/H_0 \exp -x'^2/(2R_p H_0) dx' \\ &= \sigma_{H_2O} \chi_{H_2O} n \exp -z_{||}/H_0 \int_{-\infty}^x \exp -x'^2/(2R_p H_0) dx' \\ &= \sqrt{2\pi R_p H_0} \sigma_{H_2O} \chi_{H_2O} n \exp -z_{||}/H_0 \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{2R_p H_0}} \right) \right) \\ &\xrightarrow{x \rightarrow \infty} \sqrt{2\pi R_p H_0} \sqrt{2\pi R_p H_0} \sigma_{H_2O} \chi_{H_2O} n \exp -z_{||}/H_0 \end{aligned} \quad (3.3)$$

Notons que la profondeur optique verticale est donnée quant à elle par :

$$\tau_{\perp}(z_{||}) = H_0 \sigma_{H_2O} \chi_{H_2O} n \exp -z_{||}/H_0 \quad (3.4)$$

Nous retrouvons ainsi les résultats de [Guillot \(2010\)](#)

$$\tau_{\parallel} = \left(\frac{2\pi R_p}{H_0} \right) \tau_{\perp} \quad (3.5)$$

$$T_{\parallel} = \exp(-\tau_{\parallel}) \quad (3.6)$$

Nous déduisons de ces expressions la profondeur du transit associée à l'exoplanète et à son atmosphère $\Delta F/F$, toujours à la longueur d'onde considérée, comme :

$$\frac{\Delta F}{F} = \left(\left(\frac{R_p}{R_s} \right)^2 + \frac{2}{R_s^2} \int_{R_p}^{\infty} (1 - \exp(-\tau_{\parallel}(\rho))) \rho d\rho \right) \quad (3.7)$$

où $\rho = R_p + z_{\parallel}$. Nous choisissons donc une température, une pression de toit P_h et une section efficace de telle sorte que l'atmosphère soit rapidement transparente au rayonnement, tout en nous assurant que les premières couches soient opaques.

Méthode de validation des calculs de profondeurs optiques

Par itération, nous pouvons reconstruire couche après couche la transmittance de l'atmosphère. Pour travailler de manière indépendante du bloc M et des modules d'interpolation des sections efficaces (bloc T), nous utilisons les profils générés par Tau-REx comme substitut, et nous appliquons les modules que nous souhaitons tester. Le module de calcul des profondeurs optiques, et donc des transmittances, sera comparé aux résultats obtenus à partir des équations Eqs. (3.5) et (3.6) et une fois validé, nous pouvons comparer le flux relatif, ou le rayon effectif, avec celui obtenu à partir de l'équation Eq. (3.7).

Rappelons que cette partie que nous cherchons à valider est indépendante de la géométrie de la maille, et donc aussi du caractère unidimensionnel ou tridimensionnel de notre approche. Nous avons répété ces essais pour une variété de paramètres planétaires représentatifs :

- R_p varie entre $0,5 R_T$ et $20 R_T$.
- H_0 varie entre 1 et 300 km.

Comme nous pouvons le constater sur la [Figure 3.1](#), les transmittances obtenues avec nos modules et ceux calculés analytiquement sont toujours très proches. Dans le pire des cas, lorsque le rapport R_p/H_0 est très petit (ce qui correspond aux petits rayons de la figure pour $H_0 = 300$ km), nous atteignons une différence de 0,1 dans la région de transition (passage de $T = 0$ à $T = 1$). Dans le domaine des rayons et des rapports R_p/H_0 des objets qui nous intéresseront (> 100), l'erreur est toujours inférieure à 0,05 (cas de GJ 1214 b). Notons que dans ces cas de figures, l'approximation faite reposant sur $R_p \gg H_0$ n'est plus tout à fait valable. Sur la [Figure 3.2](#) nous avons représenté la différence entre les flux relatifs ($\Delta F/F$) obtenus à partir des modules de Pytmsoph3R et ceux à partir de l'équation analytique. Même dans le pire des cas, les différences sur les fonctions de transmittance n'engendrent pas d'écart supérieur à 0,03 ppm entre les deux résultats, et cela ne concerne que des rapports R_p/H_0 extrêmes.

Cette première approche montre que les fonctions chargées de calculer les transmittances puis le flux relatif à une longueur d'onde donnée fournissent d'excellents résultats. Nous avons à l'occasion simulé la structure polychromatique des données que peut exploiter ce module, et nous avons obtenus des spectres qui concordent avec les prévisions analytiques. On peut donc considérer que le bloc S est valide ainsi que le module s'occupant du calcul des profondeurs optiques dans le bloc T. Les différents effets dont nous discuterons dans ce chapitre découleront essentiellement des philosophies propres au bloc M ou aux modules de calcul des opacités.

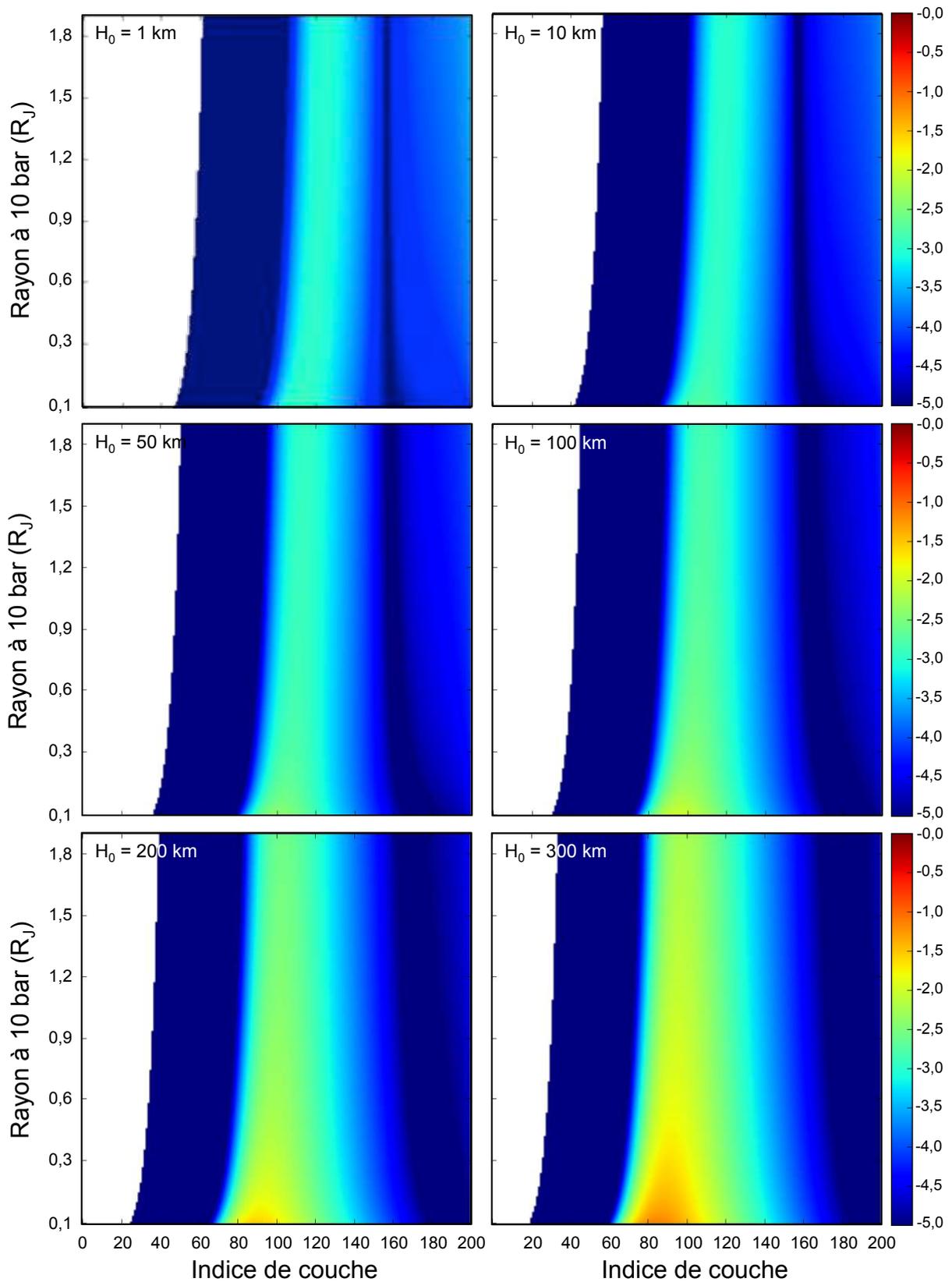


Figure 3.1: Différences entre la transmittance calculée analytiquement et celle obtenue par les modules de Pytmosph3R en fonction du rayon à 10 bar. Nous avons représenté ces différences pour 6 hauteurs d'échelle : 1, 10, 50, 100, 200 et 300 km. Les parties bleues foncées ont des différences inférieures à 10^{-5} tandis que les parties en blanc correspondent à une différence au niveau de la précision numérique.

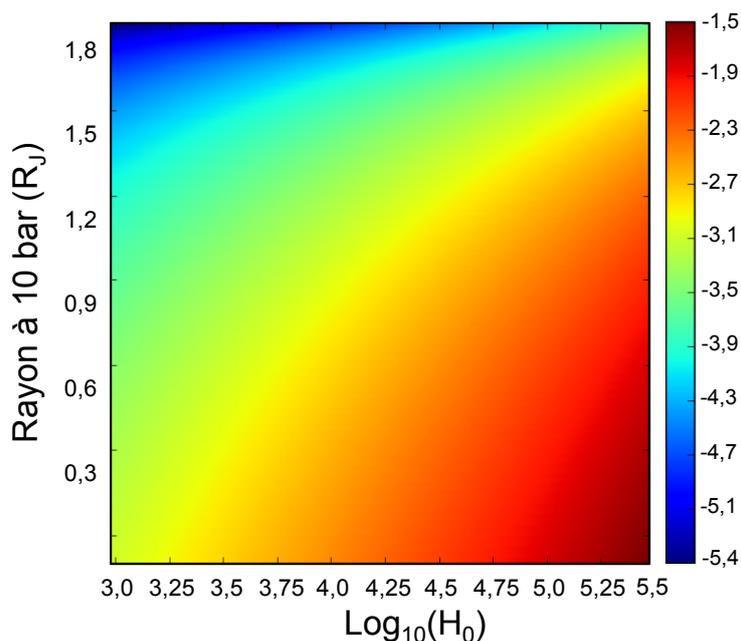


Figure 3.2: Différences entre les flux relatifs calculée analytiquement et obtenus par les modules de Pytmosp3R en fonction du rayon à 10 bar et de la hauteur d'échelle. Cette différence est exprimée en ppm.

3.2 Domaine de compatibilité lié à la géométrie de Pytmosp3R, impact du profil vertical

L'approche de [Guillot \(2010\)](#) n'accepte de solution analytique simple que lorsque nous considérons la gravité constante au sein de l'atmosphère. Les simulations atmosphériques et la physique de Pytmosp3R ne fonctionnent pas à gravité constante, nous devons donc utiliser d'autres outils pour valider le bloc M et les modules de calculs des opacités du bloc T. Nous utilisons en conséquence les outils de Tau-REx pour générer les résultats de référence en partant du principe qu'ils ont eux-mêmes été validés avant la présentation du code à la communauté ([Waldmann et al. 2015](#)). Tau-REx faisant partie intégrante de la chaîne observationnelle que nous mettons en place pour les études à venir (Chapitres 4 et 5), contraindre notre algorithme avec lui permet également de préciser le domaine de compatibilité entre les deux. Nous allons voir dans ce paragraphe que le fait de travailler en niveaux d'altitude d'un côté (Pytmosp3R) et en niveaux de pression de l'autre (Tau-REx) peut générer des différences systématiques à ne pas sous-estimer.

3.2.1 Méthode de calcul des profils de Tau-REx

Tau-REx opte pour un découpage en iso-log-pression, les niveaux sont déterminés par des pressions pré-établies et l'écart en pression entre deux niveaux est maintenu constant. Comme nous l'avons signalé dans § 2.2.1, la symétrie des modèles 1D permet aussi bien les découpages en altitudes que ceux en pression, les iso-altitudes et isobares étant tous des sphères concentriques. Les développeurs de Tau-REx ont fait un certain nombre de choix qu'il est important de souligner pour les discussions à venir :

- Ils ont opté pour une construction des profils sans intégration, c'est-à-dire qu'ils considèrent les couches homogènes et à gravité constante en leurs seins.

- La pression représentative d'une couche, et qui sera utilisée notamment lors des calculs de profondeurs optiques, est la moyenne logarithmique des pressions des niveaux qui la délimite.

$$\log(P_i) = \frac{\log(P_n) + \log(P_{n+1})}{2} \quad (3.8)$$

avec i l'indice de la couche et n l'indice du niveau. Ce choix de pression conditionne aussi le choix de la densité moléculaire qui intervient dans le calcul des opacités.

- Pour calculer les épaisseurs de couches Δz , nécessaires au transfert radiatif, nous avons besoin des altitudes des niveaux. En conséquence, il nous faut aussi la connaissance de l'accélération de la pesanteur. $g(z)$ est d'abord calculée au niveau inférieur d'une couche, d'altitude z_n , puis la loi hydrostatique est intégrée entre les pressions des niveaux qui délimitent la couche pour retrouver z_{n+1} . Comme la hauteur d'échelle est constante, Δz_i se déduit :

$$\Delta z_i = H_n \log\left(\frac{P_n}{P_{n+1}}\right) \quad (3.9)$$

Nous réitérons jusqu'à la dernière couche.

- Le module qui effectue le calcul de la profondeur optique pour chaque ligne de visée utilise les altitudes en milieu de couche :

$$z_i = \frac{z_{n+1} + z_n}{2} = z_n + \frac{\Delta z_i}{2} = z_n + \frac{H_i}{2} \log\left(\frac{P_n}{P_{n+1}}\right) \quad (3.10)$$

et tirent donc leurs rayons de manière à ce qu'ils passent par le milieu des couches, en altitude, au terminateur.

Certain de ces choix prêtent à la discussion, en particulier celui concernant la construction des profils et le mode de tirage des rayons. La densité moléculaire à la pression moyenne n'est pas la même que celle à l'altitude moyenne. À l'échelle des observations qui seront faites, ce genre de détails pourraient ne pas avoir des effets systématiques assez forts, mais dans notre étude, nous cherchons à éliminer tous les systématiques superflus. Nous avons en conséquence ajouté une option "Tau-REx" pour se rapprocher au maximum de la méthode employée par l'algorithme.

Concernant la génération de spectre, les concepteurs ont opté pour la version intégrale présentée dans le chapitre précédent (§ 2.4.2). Nous en rappelons l'expression :

$$\frac{\Delta F}{F}(\lambda) = \frac{1}{\pi R_s^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{R_p+h} (1 - \exp(-\tau(\rho, \lambda))) \rho d\rho d\theta \quad (3.11)$$

$$\frac{\Delta F}{F}(\lambda) = \left(\frac{R_p}{R_s}\right)^2 + \left(\frac{2}{R_s}\right) \sum_i^N (1 - T(\rho)) z_i \Delta z_i d\theta \quad (3.12)$$

où on notera que les altitudes z utilisées pour effectuer le calcul correspondent aux niveaux inférieurs et non celles des milieux de couche.

À présent, nous replaçons le problème dans les mêmes conditions que dans le paragraphe précédent, mais à gravité variable. Tau-REx ne prend pas les hauteurs d'échelle comme entrée, nous jouons donc sur la température et la gravité de surface pour obtenir les hauteurs d'échelle qui nous intéressent.

3.2.2 Adaptation entre Pytmosp3R et Tau-REx

La volonté ici étant d'éviter de créer des écarts sur des divergences d'approche au niveau des équations, une version "Tau-REx" de Pytmosp3R a été créée dans le bloc M. Le seul point sur lequel nous ne pouvons pas effectuer d'adaptation repose sur la nature du découpage lui-même et le choix de la densité moléculaire pour les couches. En effet, dans Pytmosp3R, le choix effectué sur le tirage est le seul lien entre les blocs. Si nous souhaitons tirer les rayons en milieu de couche ($\omega = 0,5$), alors la grille sphérique de référence assigne aux couches les densités en milieu de couche (en altitude et non en pression).

Configurations des deux algorithmes

Avant de commencer cette étude, nous avons vérifié que les deux modules que nous avons validé précédemment donnaient les mêmes résultats que Tau-REx avec les données intermédiaires de celui-ci, et donc, sans utiliser le bloc M. En utilisant le mode "intégral" du générateur de spectre de Pytmosp3R, nous obtenons, à la précision numérique près, les mêmes résultats.

Nous appliquons ensuite Tau-REx en lui donnant pour entrées celles détaillées ci-dessous. Il génère ainsi un ensemble de spectres, en sauvegarde les profils et nous les utilisons comme s'il s'agissait de simulations GCM (une atmosphère 1D dans une grille sphérique 3D). L'algorithme refait la simulation pour en produire un équivalent mais avec un découpage en altitude comme décrit dans § 2.2.2. Nous adoptons exactement la même méthode que Tau-REx quant au calcul de l'accélération de la pesanteur et des épaisseurs de couche. Nous tirons nos rayons avec un paramètre de tirage $\omega = 0,37$, correspondant à une densité moléculaire homogène à partir des isobares moyens, mais en faisant cela, le bloc S considère que les rayons sont tirés à $\omega\Delta z$ du niveau inférieur. Enfin nous limitons l'étude à un seul azimut θ pour être sûr de ne pas ajouter d'autres effets, nous reviendrons sur la vérification de la cohérence azimutale.

Nous effectuons une première étude en configurant les algorithmes de la manière suivante :

- Le rayon à 10 bar prend 4 valeurs : $R_p = R_J$, $R_p = 0,5R_J$, $R_p = 0,2R_J$ et $R_p = 0,1R_J$,
- La gravité de surface est égale à 10 m/s^2 .
- L'atmosphère est homogène, dominée par un mélange H_2/He de ratio, $x_{\text{H}_2/\text{He}}$ en présence d'un absorbant, par exemple H_2O , à une quantité fixée à $\chi_{\text{H}_2\text{O}} = 0,05$. Son poids moléculaire est donc constant et noté μ_0
- L'atmosphère est également isotherme à une température T_0 et la pression de surface est fixée à 10^6 Pa .
- Nous travaillons avec 6 hauteurs d'échelle de surface choisie de manière à ce que le rapport R_p/H_0 soit égal respectivement à : 100, 180, 300, 750, 1600 et 2500. Nous jouons sur T_0 pour obtenir ces valeurs.
- Nous ne considérons qu'une longueur d'onde et la section efficace de l'absorbant est choisie de manière à ce que la zone de transition soit comprise dans la première moitié de l'atmosphère. Cette section efficace est toujours indépendante de T et P.
- Nous faisons varier le nombre de couches entre 10 et 2000.
- L'étoile hôte a un rayon $R_s = 0,2R_*$, une masse notée M_s , et une température effective notée T_{eff}

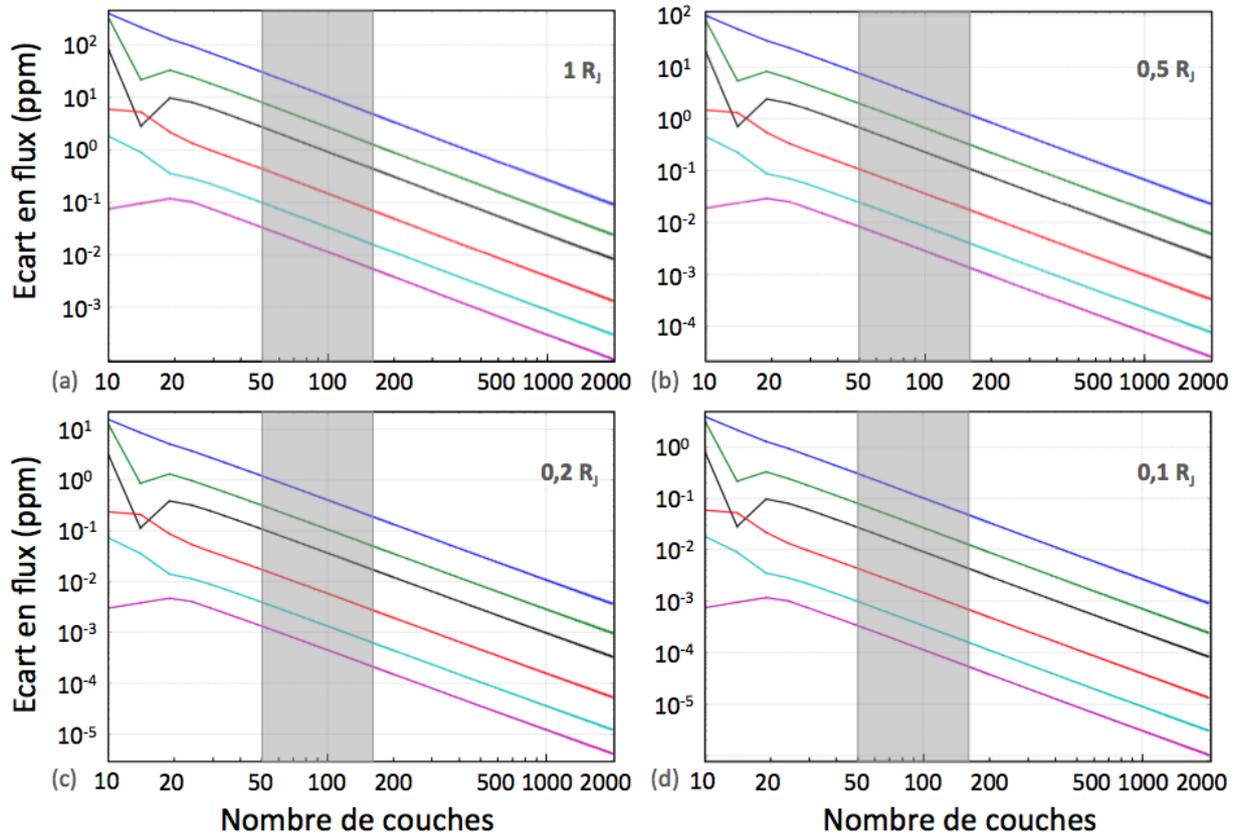


Figure 3.3: Ces figures montrent la différence sur le calcul du flux relatif entre l’outil 1D Tau-REx et le premier azimuth ($\theta = 0^\circ$) de Pytmosph3R. Comme indiqué sur la figure, les essais ont été effectués sur des exoplanètes de dimensions décroissantes : (a) $R_p = 1R_J$, (b) $R_p = 0,5R_J$, (c) $R_p = 0,2R_J$, (d) $R_p = 0,1R_J$. Les différentes courbes représentent des essais similaires mais avec des rapport R_p/H_0 de : 100 en bleu, 180 en vert, 300 en noir, 750 en rouge, 1600 en cyan et 2500 en magenta. Si les allures de ces courbes sont quasiment identiques, les ordres de grandeur ne sont pas les mêmes. Le rayon stellaire choisi étant de $R_s = 0,2R_*$, nous reproduisons ces courbes pour chaque rayon planétaire ou rapport R_p/H_0 en multipliant les résultats par $(R_s/(0,2R_*))^2$. La zone grisée correspond quant à elle à l’intervalle nominal en nombre de couches des deux algorithmes.

Des différences qui dépendent du nombre de couches

La Figure 3.3 montre l'écart entre les deux codes pour les différents découpages atmosphériques. Notons que les écarts entre les flux relatifs obtenus par les deux algorithmes sont directement impactés par le rapport R_p/R_s . À rayon planétaire constant, les différences s'amoindrissent d'un facteur $(R_s/(0,2R_*)^2)$ lorsqu'on modifie les dimensions de l'étoile, ce qui est normal puisque cette dernière n'intervient que lors du calcul de la profondeur du transit et non lors de l'évaluation du rayon effectif de l'exoplanète.

Ces figures permettent de conclure sur un certain nombre de points :

- **Influence du rayon à R_p/H_0 constant** : plus le rayon est faible, et plus l'écart est faible. La variation de la différence évolue en $(R_{\text{eff}}/R_{\text{eff,ref}})^2$, où $R_{\text{eff,ref}}$ serait l'un des rayons effectifs de la Figure 3.3.
- **Influence du nombre de couche** : plus le nombre de couches est grand et plus l'écart diminue. En effet, tendre l'épaisseur de couche $\Delta\rho$ vers 0 tend également à identifier les découpages entre les deux approches.
- **Influence de la hauteur d'échelle** : plus la hauteur d'échelle est grande et plus les écarts le sont également. C'est l'effet inverse du nombre de couche car à nombre de couche constant, augmenter H_0 signifie augmenter $\Delta\rho$.

Dans le cas des géantes gazeuses, qui est le type d'exoplanète prédominant des cibles du JWST, avec $R_p = 1R_J$, ces écarts peuvent être particulièrement élevés pour un nombre de couches inférieur à 50 et un rapport R_p/H_0 faible. Ainsi, à $R_p/H_0 = 100$, nous avons une différence de l'ordre de 100 ppm qui peut suivant le cas s'approcher ou être supérieur au bruit dans les observations. Une exoplanète de ces dimensions, pour une gravité de 10 m/s^2 , avec une hauteur d'échelle aussi importante nécessiteraient une température moyenne aux alentours de 2000 K dans le cas d'une atmosphère dominée par du H_2 . Nous sommes donc typiquement dans le domaine des Jupiters chauds. Pour des atmosphères plus lourdes et très métalliques, la température nécessaire augmente très rapidement, linéairement avec le poids moléculaire moyen, et peut atteindre les 3000 - 4000 K, ce qui est déjà moins probable. Les autres rapport R_p/H_0 sont eux-aussi tout à fait représentatifs des futurs cibles de la génération de télescopes à venir. À titre d'exemple, avec un rayon légèrement plus élevé ($R_p \approx 1,4R_J$) on trouverait HD 209458 b avec un rapport $R_p/H_0 = 180$, et HD 189733 b à $R_p/H_0 = 300$ (Moses et al. 2011). Pour les rapports plus élevés, nous passons progressivement des Jupiters tempérées au cas de la planète Jupiter pour laquelle $R_p/H_0 = 2800$. Pour des exoplanètes de ces dimensions, dans tous les cas nous devrions réussir à atteindre un maximum de 1 ppm de différence entre les deux codes tant que le nombre de couche est supérieur à 150 (tout en pensant à diviser ce résultat par $(R_s/0,2R_*)^2$ si nous changeons d'étoile hôte).

Cette tendance se vérifie pour tous les autres rayons testés, et déjà à partir de $R_p = 0,5R_J$, nous pouvons aisément atteindre le ppm de différence avec 100 couches avec les astres les plus chauds. Pour les plus petites exoplanètes, dès 50 couches nous convergions à 0,1 ppm dans le pire des cas. Par exemple, pour $R_p/H_0 = 750$ et $R_p = 0,1R_J$, qui correspondrait au cas d'une Terre, nous obtenons une différence d'environ $2 \cdot 10^{-3}$ ppm à 50 couches, que l'on divise par 5^2 , soit de l'ordre de 10^{-4} ppm. Sachant que l'atmosphère terrestre ne pèserait que pour à peu près 0,1 ppm dans la profondeur relative du transit de la planète, nous avons une précision entre les deux codes 1000 à 10000 (à 50 ou 100 couches) plus petite, ce qui est amplement suffisant pour ne pas introduire de biais.

La résolution verticale des simulations GCM et la résolution nominale de Tau-REx se situent toujours entre 50 et 150 couches. Ces différences sont dans presque tous les cas, au pire, raisonnables, au

mieux, sans influence sur le spectre ou son interprétation. Cela est vrai même à rapports R_p/H_0 faibles, et en particulier lorsque ces astres gravitent autour d'étoiles plus brillantes ($R_s > 0,2R_*$, WASP-12b (Kreidberg et al. 2015) et Kepler-7b (Demory et al. 2011) (Roman and Rauscher 2017) par exemple).

Enfin, un travail similaire de vérification a été effectué à gravité constante, dans quels cas les deux approches amènent à des découpages identiques. Nous trouvons alors des spectres parfaitement identiques, à la résolution numérique près. Le fait que dans toutes les situations, l'augmentation du nombre de couches tende à la convergence des spectres Tau-REx et Pytmosph3R montre bien que le bloc de reconfiguration de la simulation d'entrée fonctionne correctement, au moins à composition moléculaire homogène et dans le cas isotherme. Cela montre aussi que les différences constatées ne peuvent être compensées qu'en augmentant le nombre de couches ou en changeant d'approche pour les deux codes (en utilisant l'intégration propre de la pression comme expliqué dans § 2.2.1).

Interprétation des différences constatées

Les disparités remarquées sont directement liées à la manière donc la courbe de transmittance est décrite dans l'atmosphère. Les deux codes tournant avec le même nombre de couches, la seule chose qui les distingue est le poids que nous accordons à chaque couche comprise dans la zone qui impose la signature spectrale. Pour un découpage en niveaux de pression, les premières couches de l'atmosphère sont plus fines que dans un découpage en niveaux d'altitude, et inversement pour les dernières. Par conséquent, si la région de transition caractérisée par une transmittance qui passe de $T_p = 0$ à $T_p = 1$ est comprise dans le premier tiers des couches ou sur le dernier, les rayons ne sont pas tirés aux mêmes points, ils n'ont pas les même T_p et nous ne leur accordons pas la même pondération lors de la génération du spectre (les anneaux n'ayant pas les mêmes aires).

Typiquement, Pytmosph3R résout mieux les fonctions $T(\rho)$ lorsque la transition intervient sur le dernier tiers des couches, ce qui correspondrait en polychromatique aux longueurs d'onde où l'absorption est la plus intense, alors que Tau-REx converge plus vite lorsqu'elle intervient sur le premier tiers, aux longueurs d'onde où l'atmosphère absorberait moins. Lorsque nous augmentons le rayon de l'exoplanète, nous limitons par la même occasion la variation de l'accélération de la pesanteur et les différences diminuent. À très grands rayons et grands rapport R_p/H_0 , les découpages tendent à s'identifier entre les deux codes et les différences tendent vers 0.

3.2.3 Effets systématiques entre Tau-REx et la version par défaut de Pytmosph3R

Montrer qu'en utilisant la même physique que l'algorithme de référence nous reproduisons ses résultats nous mène tout de même à nous poser la question de savoir ce qu'il se passerait si nous n'avions pas cherché à nous adapter à cet outil. Comme nous l'avons présenté dans le chapitre précédent, Pytmosph3R peut calculer ces grilles sphériques en altitude de plusieurs manières possibles :

- en tenant compte ou pas de l'évolution de la gravité au sein de la couche,
- en tenant compte également de l'évolution de la température et/ou du poids moléculaire moyen entre les deux niveaux qui la délimite,
- en tenant compte dans les cas extrême de la masse atmosphérique.

Les équations sont certes plus raffinées, mais mènent à de nouvelles estimations des épaisseurs des couches, et par conséquent, à une nouvelle version du profil vertical. Dans le cas homogène qui nous

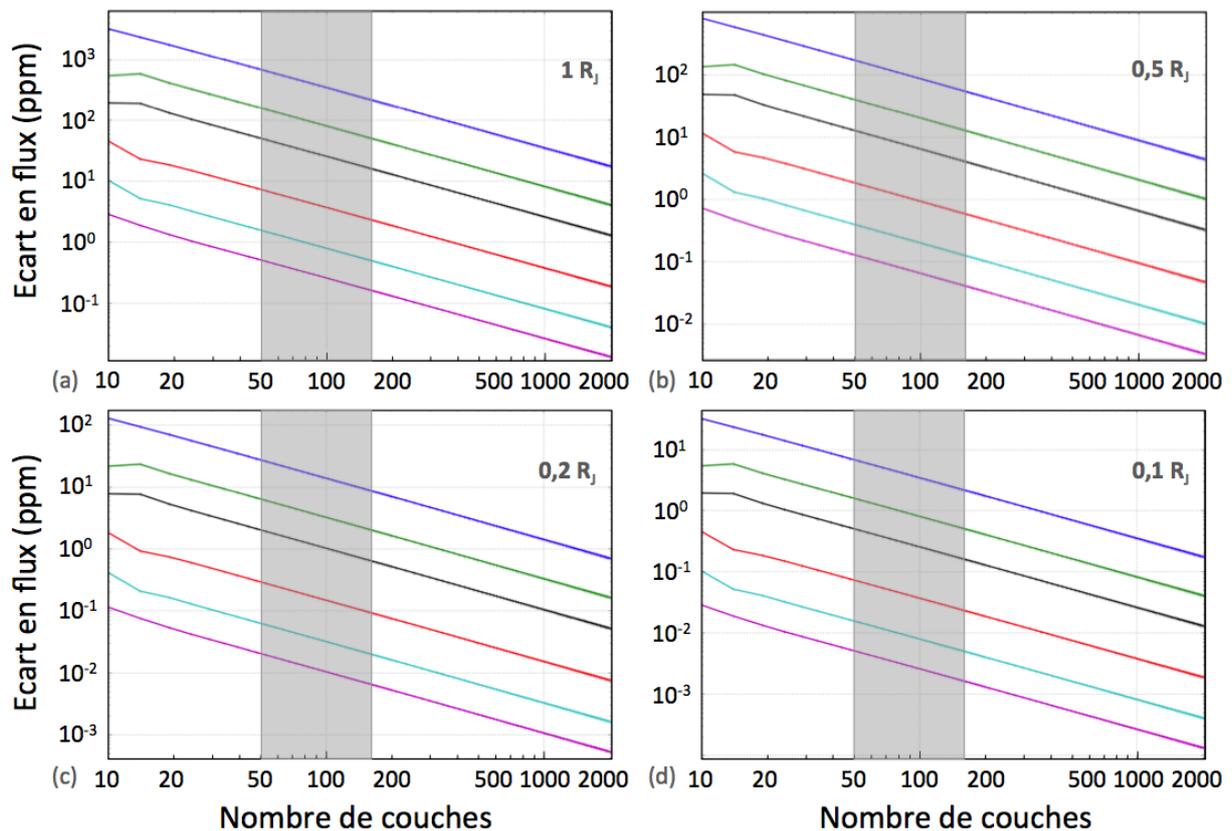


Figure 3.4: Ces figures montrent la différence sur le calcul du flux relatif entre l'outil 1D Tau-REx et le premier azimuth $\theta = 0^\circ$ de Pytmosph3R dans sa version la plus générale (et qui n'a donc pas subi d'adaptation particulière vis-à-vis de Tau-REx). Comme indiqué sur la figure, les essais ont été effectués sur des exoplanètes de dimensions décroissantes : (a) $R_p = 1R_J$, (b) $R_p = 0,5R_J$, (c) $R_p = 0,2R_J$, (d) $R_p = 0,1R_J$. Les différentes courbes représentent des essais similaires mais avec des rapports R_p/H_0 de : 100 en bleu, 180 en vert, 300 en noir, 750 en rouge, 1600 en cyan et 2500 en magenta. Le rayon stellaire choisi étant de $R_s = 0,2R_\star$, nous reproduisons ces courbes pour chaque rayon planétaire ou rapport R_p/H_0 en multipliant les résultats par $(R_s/(0,2R_\star))^2$. La zone grisée correspond quant à elle à l'intervalle nominal en nombre de couches de Pytmosph3R et Tau-REx.

intéresse, seule la prise en compte de l'évolution de la gravité au sein de la couche peut être testée, nous travaillons donc à partir de Eq. (2.11) plutôt que Eq. (2.5).

La Figure 3.4 montre la même étude que dans le paragraphe précédent (§ 3.2.2), mais en confrontant cette fois-ci Tau-REx et cet autre choix de reconstruction du profil en altitude (prise en compte de l'évolution de la gravité). Comme nous pouvons le remarquer, les différences sont nettement supérieures, et la convergence entre les deux approches nécessite, dans les mêmes conditions que précédemment, des résolutions nettement plus élevées. À titre d'exemple, pour $R_p = 0,2R_J$, avec un rapport $R_p/H_0 = 100$, nous obtenions une différence inférieure au ppm entre Pytmosph3R et Tau-REx à partir de 60 couches, il nous en faut désormais plus de 1200 pour atteindre ce même niveau de convergence, soit un facteur 20 sur la résolution verticale. À une précision donnée, mettons 1 ppm, dans le cas $R_p = 0,2R_J$ par exemple, si nous augmentons le rapport R_p/H_0 , et donc diminuons l'extension spatiale de l'atmosphère, nous passons pour les 3 premiers cas de 60 (comme nous l'avons déjà spécifié), 28 et 12 à respectivement 1200, 300 et 100 couches. Donc nous devons les multiplier par 20, 11 et 8 pour obtenir des écarts similaires. Ces facteurs suivent toujours cette décroissance avec R_p/H_0 , mais s'accroissent dans le même temps avec le niveau de précision désiré. Ainsi pour une précision de 0,1 ppm, toujours pour $R_p = 0,2R_J$, nous passons de 230, 100 et 50 à 19000, 4000, et 1000 couches, soit des facteurs en résolution de 83, 40 et 20.

Ceci s'explique tout d'abord par le fait que les deux simulations n'ont plus le même toit de modèle en altitude. L'écart engendrée par la manière dont la gravité est prise en compte se cumule de couche en couche. La méthode de Tau-REx surestime à chaque itération la gravité et son toit est en conséquence plus important. L'effet s'accroît toujours pour les mêmes raisons que précédemment :

- lorsque nous augmentons notre exigence sur la précision entre les deux modèles,
- lorsque le rapport R_p/H_0 diminue,
- lorsque le rayon planétaire diminue.

Puisqu'il s'agit d'un effet de $g(z)$, moins il évolue entre la surface et le toit, et moins la divergence d'approche prend de l'importance. Ainsi, augmenter le rapport R_p/H_0 ou le rayon planétaire ont tout deux pour effets de limiter les variations de la pesanteur au sein des atmosphères.

Un choix est donc à faire lors de l'utilisation de Pytmosph3R en fonction de la manière dont on souhaite l'utiliser :

- Si nous ne cherchons qu'à produire des spectres associés à des simulations, il est préférable d'utiliser la méthode la plus proche de la physique et donc celle qui intègre de la plus précise des manières le profil et nous opterons pour la méthode par défaut du code (prise en compte de l'évolution des paramètres). Nous pouvons également faire le choix de l'adapter aux choix faits dans le GCM lui-même.
- Si nous comptons utiliser ces spectres pour étudier les résultats obtenus de leurs inversions, il est préférable d'adopter la méthode de l'algorithme de traitement du signal et limiter ainsi les biais qui en résultent. L'interprétation des résultats et des effets que l'on souhaiterait mettre en évidence devient plus pertinente car nous avons fait en sorte de les isoler des incompatibilités naturelles entre les deux chaînes.

3.2.4 Validation azimutale, les aspects tridimensionnels

Jusqu'ici nous avons travaillé exclusivement sur le premier angle θ et ignoré les autres en le généralisant. Sa validation avec Tau-REx permet de l'utiliser comme référence pour vérifier que tous les autres

azimuts fonctionnent aussi bien. Ici la source principale de contrariétés repose sur la difficulté à définir convenablement les angles avec lesquels nous appliquons les équations géométriques permettant de calculer les longueurs de sous-parcours et les altitudes associées à leurs extrémités. Ceci concerne donc essentiellement les changements de latitude ou de longitude. La précision des modules permettant d'appliquer les fonctions trigonométriques sur les différents paramètres qui entrent en jeu peut générer des divergences lorsque leurs applications se répètent. Ainsi, dans un cas particulier où le cosinus appliqué à un angle devrait donner parfaitement 1, il se peut qu'un chiffre au *énième* rang après la virgule, un artefact de l'imprécision numérique, fasse son apparition et nous nous retrouvons avec une valeur impossible à gérer par la suite. Les situations pouvant entraîner ce genre de problèmes sont donc systématiquement écartées, et les modules ne sont alors plus appliqués. Nous précisons dans ces cas les résultats attendus.

Un autre problème peut survenir lorsque l'intégrale la densité moléculaire dans la version intégrée du code diverge. Certains sous-parcours peuvent être tellement petits que la variation d'altitude Δz du sous-parcours est quasi-nulle. Cette divergence survient essentiellement lorsque le rayon croise une arête de cellule ou un coin, ce qui se traduit par des changements de cellules brusques. Nous ne parlons pas ici d'un changement de coordonnées simultanés, dans quel cas nous n'appliquons les formules que pour un changement (l'autre donnant exactement le même résultat, nous l'ignorons), mais bien de deux changements distincts, nous avons donc un sous-parcours sur une très petite distance. Le cas échéant, le code a pour instruction de ne pas effectuer l'intégration et d'appliquer le calcul discret.

La stabilité des azimuts par rapport à celui de référence est très bonne et les écarts générés quasi-inexistants à la suite de nos correctifs, et proches de la précision numérique en l'absence de sous-parcours divergents. Nous avons testé une large gamme de rayons planétaires et de hauteurs d'échelle, sans jamais noter de différence impliquant plus d'1 millimètre de différence sur le rayon effectif entre les azimuts les plus éloignés. La version intégrale du code est encore plus stable que la version discrète puisqu'elle adoucit les discontinuités de densité moléculaire. Seule l'augmentation de la résolution de la maille ou de la grille sphérique de référence peut accentuer ces écarts car ils multiplient par la même occasion le nombre de corrections à effectuer. Le calcul discret surestime toujours très légèrement la profondeur optique du sous-parcours par rapport à la méthode semi-intégrée, mais les parcours étant très petits, même à répétition, les écarts peuvent être négligés en toutes circonstances.

Au vu de ces résultats, nous validons la partie géométrique du code.

3.3 Validation de la génération des sections efficaces

Les bloc M et S ont été validés, il ne reste plus qu'à valider les modules restants du bloc T qui sont chargés de pré-estimer pour chaque longueur d'onde et pour chaque couple de (T,P) les sections efficaces ou les coefficients d'extinction de chacune des contributions. Nous avons travaillé jusqu'ici en monochromatique, et qui plus est, avec des sections efficaces qui ne dépendaient ni de la pression, ni de la température. Le bloc a été vérifié dans un premier temps en monochromatique, afin de s'assurer du bon fonctionnement des fonction d'interpolation, puis en polychromatique pour éprouver la consistance des modules d'optimisation des calculs (qui ne sont pas les mêmes si on travaille à une ou plusieurs longueurs d'onde).

Pour chaque type d'opacité, nous utiliserons les mêmes types d'interpolation (que l'on précisera dans chaque cas), les mêmes sources d'opacité, les mêmes profils verticaux, et les mêmes formulations (notamment pour le continuum et la diffusion Rayleigh). Si les équations sont *a priori* les mêmes, alors :

- Nous devrions atteindre la précision numérique sur les différences entre les opacités calculées par Tau-REx et les nôtres.
- Si ce n'est pas le cas, nous nous devons d'expliquer pourquoi nos résultats ne sont pas identiques

3.3.1 Interpolation de l'absorption moléculaire

La contribution moléculaire est calculée à partir d'une interpolation effectuée dans une grille réalisée sur des échantillons températures et de pressions. Comme nous l'avons vu dans la partie précédente, si nous travaillons en raie par raie, nous effectuons une double interpolation : une première sur le logarithme de la pression et une deuxième par rapport à la température, soit linéaire, soit suivant une loi spécifique. En monochromatique, comme en polychromatique, nous obtenons des résultats identiques, à la précision numérique près, pour les deux types d'interpolation.

Concernant l'utilisation des coefficients en k-distributions, la validation est plus délicate car Tau-REx s'est converti à ce mode de calcul des opacités moléculaires qu'assez tardivement, à un moment où la structure de base du code était écrite pour se conformer aux méthodes appliquées dans le GCM. Typiquement, les coefficients proposés par Tau-REx n'utilisent pas les mêmes pondérations, et donc pas le même découpage de ses distributions et ne sont donc pas compatibles avec Pytmosph3R. Les sources utilisées ne sont également pas les mêmes. Comme nous n'utiliserons pas ces coefficients pour les études des deux prochains chapitres, nous n'avons pas cherché à effectuer de vérification autre que celle de spectres aux mêmes allures que les spectres à hautes résolutions.

3.3.2 Vérification de la diffusion Rayleigh et du continuum

Dans le cas de la diffusion Rayleigh, nous avons produit les contributions associées à nos exemples précédents, et du moment où les sources sont les mêmes, les spectres obtenus sont parfaitement identiques. Concernant ces contributions, comme elles sont dépendantes des variations de l'indice optique que l'on peut trouver dans la littérature, la mise à jour des équations ou l'utilisation de sources différentes peuvent évidemment mener à des écarts. Pytmosph3R s'est aligné avec les références Tau-REx pour He, H₂ et H₂O. Pour toutes les autres molécules, nous utilisons les mêmes références.

Tau-REx ne prenant en compte que le continuum H₂/He et H₂/H₂, nous n'avons effectué les tests et validé que les fonctions d'interpolation pour ces deux sources.

Nous obtenons dans les deux cas des résultats parfaitement similaires.

3.3.3 Cas particulier de la diffusion de Mie

Dans le cas de la diffusion de Mie, Tau-REx n'utilise pas le même formalisme que nous, il se réfère à [Lee et al. \(2013\)](#). Le code considère des nuages localisés à une pression donnée et calcul l'opacité qui lui est associée. La formulation et les sources qu'il utilise n'étant pas les mêmes, nous n'avons pas été en mesure de valider nos modules par le biais de Tau-REx. Nous avons en conséquence utilisé les modules du GCM qui interpolent les Q_{ext} afin de vérifier qu'avec un même échantillon de rayons effectifs et de longueurs d'onde, nous obtenions des résultats similaires. Les interpolations donnent des valeurs identiques pour les deux codes.

A l'issue de cette étape, nous avons validé, quand nous le pouvions, l'ensemble des blocs de Pytmosph3R et de ses modules. Nous avons montré que les différences que nous pourrions être amené à

constater ne concernent que le bloc M et l'étape de génération des profils verticaux. Le découpage en couche de Pytmosph3R induit un effet systématique qui se dilue lorsque l'épaisseur des couches est suffisamment petit. Et si les écarts que cela pourrait engendrer sur le profil lui-même peuvent être amoindris par l'option "Tau-REx", ils se répercutent sur les deux autres blocs. En effet, en proposant un profil thermique différent du fait de la nature du découpage, nous n'effectuons pas les mêmes interpolations dans le bloc T, et donc nous ne générons pas le même échantillon de sections efficaces, comme nous n'intégrons pas la transmittance avec la même discrétisation dans le bloc S. Nous devons donc nous assurer que, dans sa globalité, Pytmosph3R est capable de produire des spectres proches de ceux générés par Tau-REx dans des conditions paramétriques acceptables (et notamment, pour un nombre de couche inférieur à 200).

3.4 Validation globale de Pytmosph3R

3.4.1 Contrainte des performances de l'algorithme

Nous nous plaçons dans les mêmes conditions que jusqu'alors, soit dans le cas d'une atmosphère isotherme et homogène et nous utilisons l'eau comme absorbant. Nous avons travaillé en polychromatique sur le set de section efficace 10_{wno} et généré les spectres associés à des atmosphères sur des ensembles de paramètres :

- La température varie entre 200 et 2600 K, couvrant ainsi la majorité de la gamme de température que l'on peut observer dans les atmosphères que nous étudierons.
- Le rapport R_p/H_0 compris entre 40 et 260. Avec des rapports aussi faibles, si nous obtenons des résultats satisfaisants, tous les autres rapports le seront encore davantage.

Nous nous plaçons dans le cas d'une exoplanète de rayon $R_p = R_J$ en transit autour d'une étoile de type solaire. Afin de quantifier les différences obtenues entre les spectres de Pytmosph3R et ceux de Tau-REx, nous avons calculé pour chaque couple $(T, R_p/H_0)$ un coefficient du type χ^2 réduit. Pour ce faire, nous avons évalué le bruit de photon de l'étoile en admettant qu'elle émettait comme un corps noir pour chaque longueur d'onde de la gamme du set 10_{wno} . Ce bruit se calcule aisément à partir de la formule :

$$\sigma_{obs,\lambda} = \frac{1}{\sqrt{N_{obs,\lambda}}} \quad (3.13)$$

$$N_{obs,\lambda} = \frac{\pi \tau_\lambda c \Delta t R_s^2 A}{2d_x^2} \int_{\lambda_{wl}}^{\lambda_{wl+1}} \frac{d\lambda}{\lambda^4 \left(\exp\left(\frac{hpc}{k_B T_s \lambda} - 1\right) \right)} \quad (3.14)$$

où $\sigma_{obs,\lambda}$ est le bruit de photon de l'étoile, $N_{obs,\lambda}$ est le nombre de photons collectés à une longueur d'onde donnée, τ_λ le rendement de photon de l'instrument (ici identifié à celui des instruments du JWST), A est la surface de captation de ce dernier (également prise à 25 m^2 comme le JWST), Δt le temps d'intégration que nous avons établi à 1 heure, d_x la distance de l'étoile ici à 100 années lumière et T_s sa température effective. Cette dernière permet de calculer la densité spectrale de l'étoile assimilée à un corps noir porté à cette température, comme nous avons considéré une étoile solaire nous l'avons fixée à 5770 K. Si $\delta_{3D,\lambda}$ est le flux relative à la longueur d'onde λ obtenu à partir de Pytmosph3R, et $\delta_{1D,\lambda}$ est celui obtenu à partir de Tau-REx, alors nous calculons le coefficient χ^2 comme :

$$\chi^2 = \sum_{\lambda}^{N_\lambda} \frac{(\delta_{3D,\lambda} - \delta_{1D,\lambda})^2}{\sigma_{obs,\lambda}^2} \frac{1}{N_\lambda} \quad (3.15)$$

Lorsque ce coefficient est inférieur ou égal à 1, nous considérons que le biais entre la version 3D et la version 1D est au pire acceptable et au mieux négligeable. La Figure 3.5 illustre les résultats obtenus dans l'espace des paramètres que nous avons exploré. L'expérience a été réalisée pour 50, 100, 200 et 500 couches. Les isocontours noirs délimitent les domaines pour lesquels nous obtenons des χ^2 inférieurs ou supérieurs à 1. Comme nous pouvions nous en douter, le biais diminue avec le nombre de couche que nous utilisons pour générer le profil vertical, avec le rapport R_p/H_0 et lorsque la température diminue. Concernant l'effet de la température, nous pouvons noter une inversion de la tendance aux alentours de 700 K qui est très probablement due à la forte sensibilité des sections efficaces entre 200 et 1000 K. S'il est encore possible d'imaginer des exoplanètes pour lesquelles les biais seraient trop importants à 50 couches, elles deviennent peu probables à 100 couches et improbables à partir de 200 couches.

Nous revenons donc à ce que nous préconisons, à savoir des modélisations avec un nombre de couches compris entre 100 à 200. Notons tout de même que ce coefficient dépend de $\sigma_{obs,\lambda}$ et qu'en multipliant le temps d'intégration par 2 par exemple, nous multiplions également le χ^2 par 4, puisque le bruit est multiplié par 2 et qu'il est au carré dans l'expression du χ^2 . En divisant par 2 la distance à l'étoile, on multiplie par 8 le χ^2 , et ainsi de suite. Nous évaluerons systématiquement ce coefficient pour les atmosphères synthétiques ou issues de modèles tridimensionnels afin de quantifier le biais systématique purement lié à la compatibilité entre Pytmosph3R et le modèle utilisé par l'algorithme d'inversion (ici Tau-REx).

Prenons 2 exemples extrêmes pour illustrer nos propos : GJ 1214 b qui a un rapport R_p/H_0 proche de 100 - 130 (Charnay et al. 2015), et WASP-121 b (Parmentier et al. 2018) pour laquelle il devrait être proche de 150. Dans le premier cas, l'étoile est à une distance 2 fois plus faible, mais dans le même temps, elle est aussi 5 fois plus petite que le Soleil. Le bruit stellaire est en conséquence beaucoup élevé, d'autant plus que sa température effective avoisine les 3000 K. Notre coefficient devrait alors être encore plus faible que celui de la Figure 3.5 (0,015 à 100 couches) et nous pouvons sans problème générer nos spectres et effectuer les inversions avec 100 couches. Dans le deuxième cas, l'étoile est plus grande (1,5 fois le rayon du Soleil), plus chaude également (6460 K) mais également beaucoup plus éloignée (850 a.l.). Le bruit stellaire de WASP-121 devrait donc être du même ordre de grandeur que celui que nous avons calculé (0,025 à 100 couches et 0,004 à 200 couches). Ici encore, nous pouvons travailler sans problèmes avec des grilles de 100 à 200 couches.

Pour finaliser notre validation, nous avons vérifié que les différences, aussi faibles semblent-elles être, entre les spectres Pytmosph3R et Tau-REx n'engendraient pas de biais sur l'inversion. Dans ce sens, nous avons repris les atmosphères précédentes et nous les avons inversées avec 100 couches. La Figure 3.6 donne l'écart relatif entre les paramètres initiaux et les paramètres retournés par Tau-REx. Même avec la sensibilité apparente de la température, et même dans les deux cas extrêmes que représentent GJ 1214 b et WASP-121 b, nous avons toujours des écarts relatifs inférieurs à 0,1%.

Nous pouvons donc considérer que dans la gamme nominale de Tau-REx et de Pytmosph3R, nous ne générons pas de biais détectables.

3.4.2 En résumé sur l'environnement propice à l'utilisation de la chaîne observationnelle

Le trio d'algorithme formé par le GCM, Pytmosph3R et Tau-REx nous a permis de réaliser les études que nous sommes sur le point de décrire. Des 3, le plus contraignant en termes de temps de calcul est le GCM car il peut mettre des jours avant de converger vers un climat stable pour sa planète. Son exploitation complète prendra probablement autant de temps si ce n'est davantage, et ce de manière inversement proportionnelle à la qualité de l'environnement fonctionnel dans lequel nous nous sommes

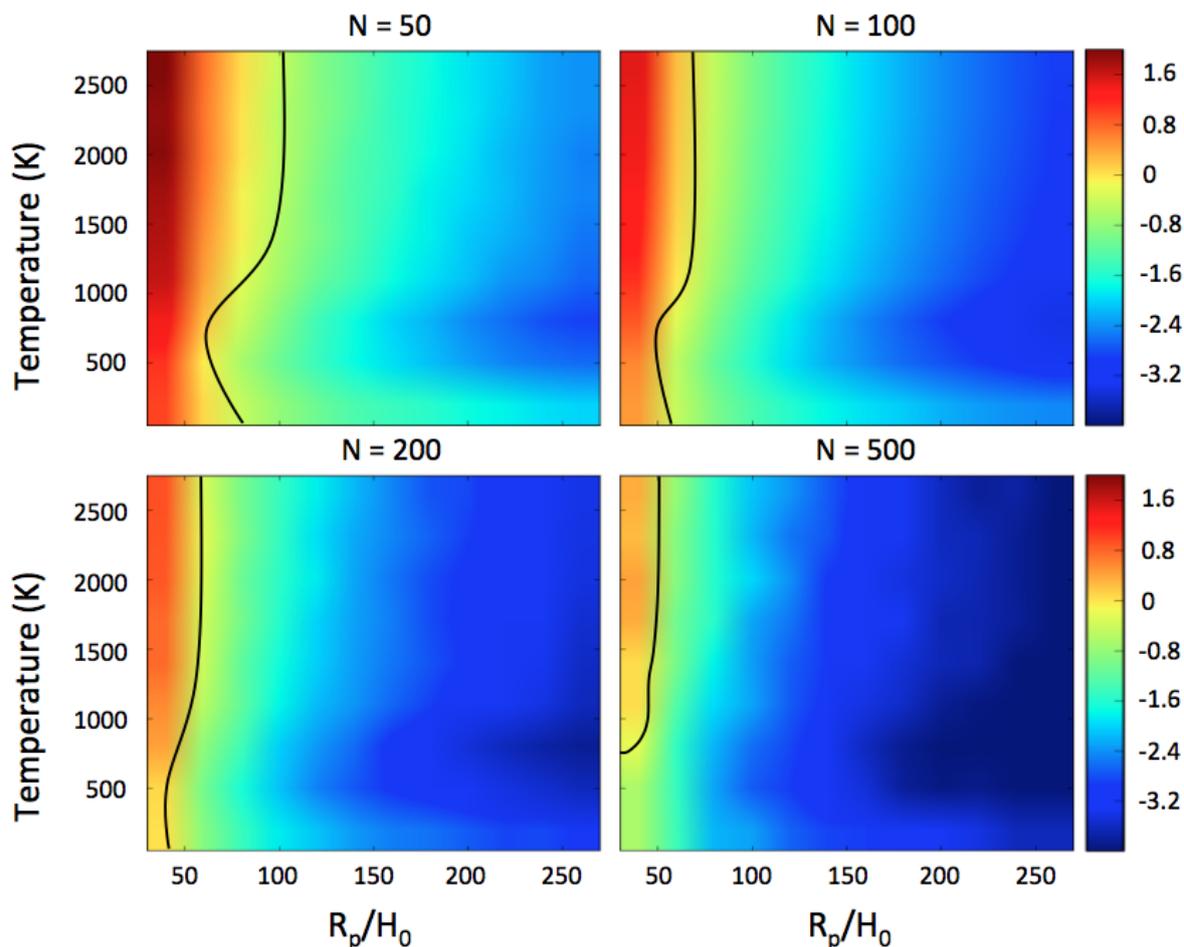


Figure 3.5: La figure donne le coefficient χ^2 réduit sur le rayon effectif entre les spectres produits par Pytmosph3R et le générateur de spectres de Tau-REx sur toute la gamme spectrale du set 10wno. Ces coefficients sont calculés pour des atmosphères isothermes de températures comprises entre 200 et 2600 K et pour des rapports R_p/H_0 compris entre 40 et 260, le rayon planétaire de l'exoplanète est égal à R_J . Les lignes noires indiquent lorsque le χ^2 est égal à 1, soit lorsque la différence entre les deux spectres est proche du bruit de photon de l'étoile. Nous avons considéré un bruit calculé pour une étoile de type solaire, à 100 années lumière de nous et sur une durée d'intégration d'1 heure. Les caractéristiques instrumentales ont été identifiées à celles du JWST. Nous avons réitéré les calculs pour des résolutions verticales de 50, 100, 200 et 500 couches.

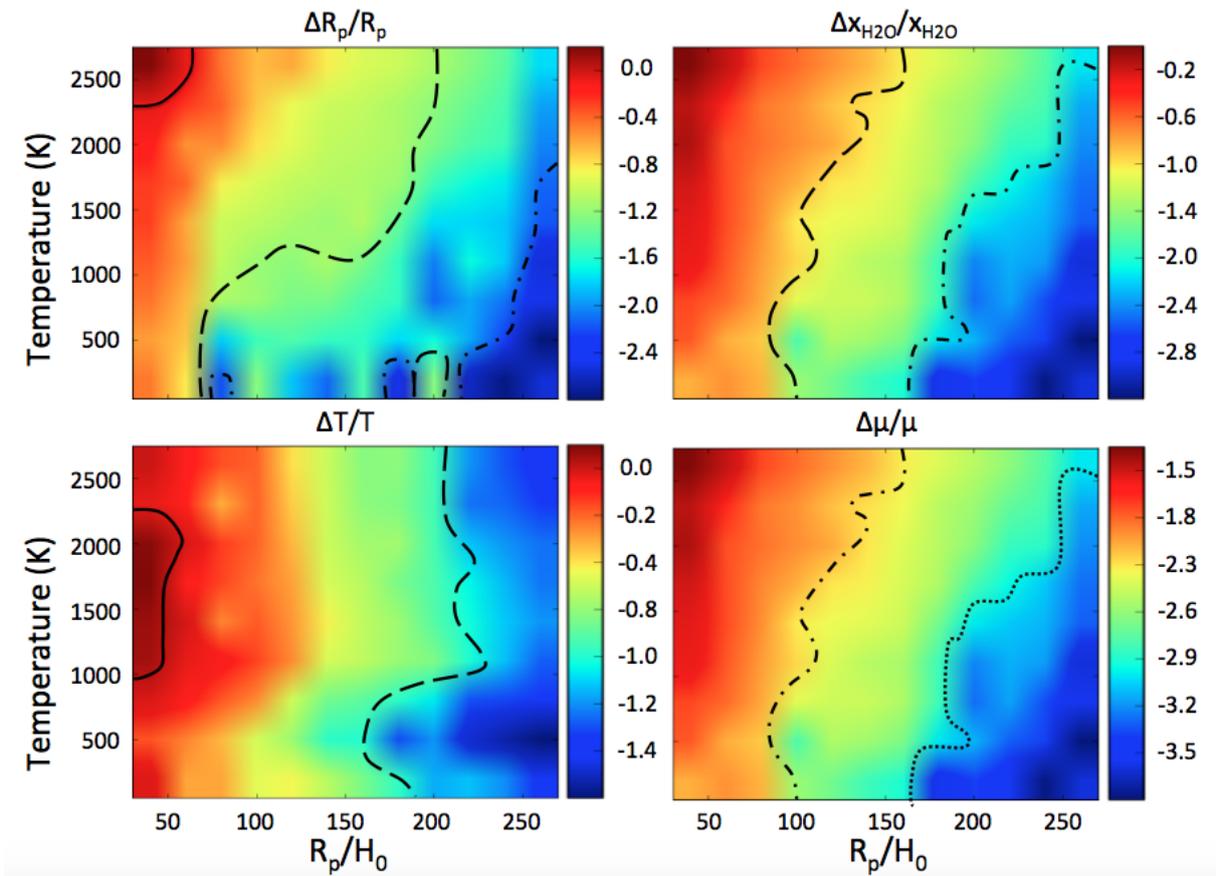


Figure 3.6: La figure donne l'écart relatif en pourcentage (puissance de 10) entre les valeurs des paramètres d'entrée de Pytmosph3R et les paramètres retournés par Tau-REx suite à l'inversion des spectres associés. Les spectres et l'inversion ont été réalisés sur la base d'un découpage en 100 couches. Les figures illustrent ces écarts en fonction de la température de l'atmosphère et du rapport R_p/H_0 . Les paramètres en question sont : le rayon à 10 bar R_p , l'abondance en eau χ_{H_2O} , la température T et le poids moléculaire moyen μ . Les isocontours indiquent la délimitation pour des écarts relatifs de : trait plein 1%, tirets 0,1%, alterné 0,01% ou pointillés 0,001 %.

placés pour tout le restant de la chaîne. La génération de spectre doit pouvoir s'effectuer au plus vite pour ensuite permettre l'inversion par Tau-REx et débiter le travail d'interprétation. Ce dernier est un code d'inversion qui peut rapidement être gourmand en ressources comme en temps de calcul et ses performances vont essentiellement être liées au nombre de paramètres (et plus précisément au nombre de molécules présentes dans l'atmosphère) et à la résolution verticale des modèles qu'il doit générer. Nous devons en conséquence faire un certain nombre de choix en amont.

Suite à ce travail de validation, nous pouvons formuler un certain nombre de conclusions quant au bon fonctionnement du doublet Pytmosph3R/Tau-REx :

- **Un effort d'adaptation** : la génération des profils verticaux et l'intégration des cartes de transmittance, au-delà de la divergence inhérente reposant sur le mode de découpage (en pression ou en altitude), sont très dépendantes du conditionnement aux hypothèses. Un gros travail d'harmonisation entre les méthodes employées par Tau-REx et celles de Pytmosph3R a permis de réduire les effets systématiques. Cet effort devra être reconduit chaque fois que notre algorithme interviendra dans une autre chaîne observationnelle. Il dépend également du niveau de précision que nous souhaitons atteindre sur les paramètres à contraindre, mais étant donné les objectifs des missions à venir et la finesse des effets que nous voulons mettre en évidence, il apparaît clairement que cette étape est cruciale.
- **Le bon choix du nombre de couches** : nous venons de le constater, la géométrie de la maille engendre des biais que nous ne pouvons pas éliminer si ce n'est en multipliant drastiquement notre nombre de couche. Ceci n'est pas envisageable pour Tau-REx, nous devons rester dans une gamme confortable sans que l'inversion ne prenne des jours avant de nous proposer des solutions. Le nombre de couche nominal pour l'algorithme se situe entre 50 et 100. En dessous de 50, nous risquons de perdre de l'information sur les profils verticaux du GCM (chaque niveau doit être représenté par au moins une couche de Pytmosph3R, et donc de Tau-REx). En fonction du rapport R_p/H_0 de l'atmosphère d'exoplanète que nous simulons, nous favoriserons la tranche 50 - 100 plutôt que la tranche 100-150. Ainsi :
 - quand ce rapport est inférieur à 100, nous conseillons 150 couches pour la génération de spectre et l'inversion,
 - qu'il est compris entre 100 et 200, nous conseillons au moins 100 couches,
 - et pour tout rapport supérieur à 200 nous pouvons descendre jusqu'à 50 couches (et gagner en temps de calculs).

Ces préconisations valent pour une étoile solaire et un système à 100 a.l., elles sont aussi à moduler en fonction du système dans lequel nous replaçons la simulation.

- **Limiter le nombre de paramètres** : il peut être intéressant de tenter des inversions en partant du principe que nous n'avons pas d'informations sur sa composition chimique, dans quel cas l'algorithme devrait aboutir à la non-détection des molécules absentes. Néanmoins, en augmentant le nombre de paramètres d'inversion, nous ajoutons une dimension à l'espace des paramètres que doit explorer l'algorithme avant de se rapprocher d'une solution acceptable. En fonction de ce que nous souhaitons mettre en évidence au moyen des résultats de l'inversion, nous feront en sorte de limiter ce nombre de paramètre.
Le code permet également la contrainte des molécules inactives, d'ajouter le poids moléculaire moyen comme paramètre libre ou encore le ratio He/H₂. Chacune de ces options augmente significativement les temps de calcul et n'a de réel intérêt que lorsque nous n'avons qu'une connaissance limitée de l'objet que nous observons, ce qui n'est pas le cas dans le cadre de cette chaîne observationnelle.

- **Une paramétrisation identique** : cela paraît évident, mais l'ensemble des dispositions précédentes ne seront efficaces que si nous paramétrisons Pytmosph3R et Tau-REx de manière identique : mêmes rayons à 10 bar, la pression de surface pouvant ne pas être la même le tout étant d'avoir la même gravité de surface à 10 bar, même nombre de couche, même pression de toit, même ratio He/H₂, le même jeu e constantes

Par exemple avec la simulation de GJ 1214 b sur laquelle nous allons travailler (Charnay et al. 2015), nous nous sommes placé dans un environnement convenable avec 8 paramètres libres à contraindre (nous n'avons conservé que les abondances des 6 molécules, le rayon à 10 bar et la température, nous aurions pu écarter l'inversion de N₂) et un découpage en 100 couches, puisque le rapport R_p/H_0 est à peine supérieur à 100. Pytmosph3R met alors 20 min à générer les contributions au spectre d'absorption, tandis que Tau-REx, a nécessité 15h pour l'inverser. Nous avons ainsi trouvé un bon compromis, d'autant plus qu'avec 150 couches, nous aurions multiplié par 2 - 3 les temps de calculs des deux algorithmes.

3.5 Quelques discussions d'importance

Dans ce paragraphes, nous allons un peu plus loin dans notre réflexion en testant des options offertes par le code ou en discuter de certains aspects qui peuvent altérer la qualité de l'ensemble GCM/Pytmosph3R/Tau-REx.

3.5.1 Discrétisation ou intégration du chemin optique en densité, quand l'utiliser ?

Nous avons cherché à tester les deux modes de calcul des profondeurs optiques proposés par Pytmosph3R. La méthode dite discrète consiste à considérer les propriétés atmosphériques constantes au sein des sous-parcours, y compris la pression et donc, la densité moléculaire. La deuxième méthode dite semi-intégrale veut intégrer la densité moléculaire sur les sous-parcours pour palier à la surestimation des profondeurs optiques. Ces deux méthodes sont censées se rejoindre lorsque nous augmentons la résolution verticale, soit lorsque $\Delta\rho$ tend vers 0. Le même genre d'essais que ceux réalisés jusqu'ici ont été effectués pour comparer les deux méthodes. Nous nous plaçons dans les mêmes conditions mais cette fois-ci, nous comparons leurs résultats à une valeur de flux relatif correspondant à une simulation Tau-REx effectuée sur 50000 couches, gageant que nous atteignons dans ces conditions la valeur réellement attendue. Comme le montre la Figure 3.8, la convergence entre les deux approches peut être tardive lorsque le rapport R_p/H_0 est faible. Ceci s'explique tout simplement par le fait qu'à résolution constante, augmenter la hauteur d'échelle revient à augmenter l'épaisseur des couches et donc à s'éloigner de la limite $\Delta\rho \rightarrow 0$. Elle montre également que pour des rapport R_p/H_0 plus élevés, comme ceux attendus pour les Jupiter chauds (autour de 150), nous obtenons des différences inférieures à 1 ppm pour à partir de 150 couches. Nous sommes donc dans la gamme nominale de Tau-REx et de Pytmosph3R.

Outre les différences entre les deux approches, cette figure met en évidence une question de convergence que nous n'avons pas traitée jusque-là. En effet, nous n'avons fait que comparer les algorithmes entre eux, sans se demander s'ils proposaient des valeurs à la convergence du flux relatif. Si nous nous concentrons sur la gamme de résolution verticale qui nous intéresse, entre 50 et 150 couches, nous constatons des écarts supérieurs à 1 ppm pour :

- des rapports $R_p/H_0 < 300$ pour des exoplanètes de rayons $R_p > 0,2R_J$
- des rapports $R_p/H_0 < 180$ pour des exoplanètes de rayons $R_p > 0,5R_J$
- des rapports $R_p/H_0 < 100$ pour des exoplanètes de rayons $R_p > R_J$

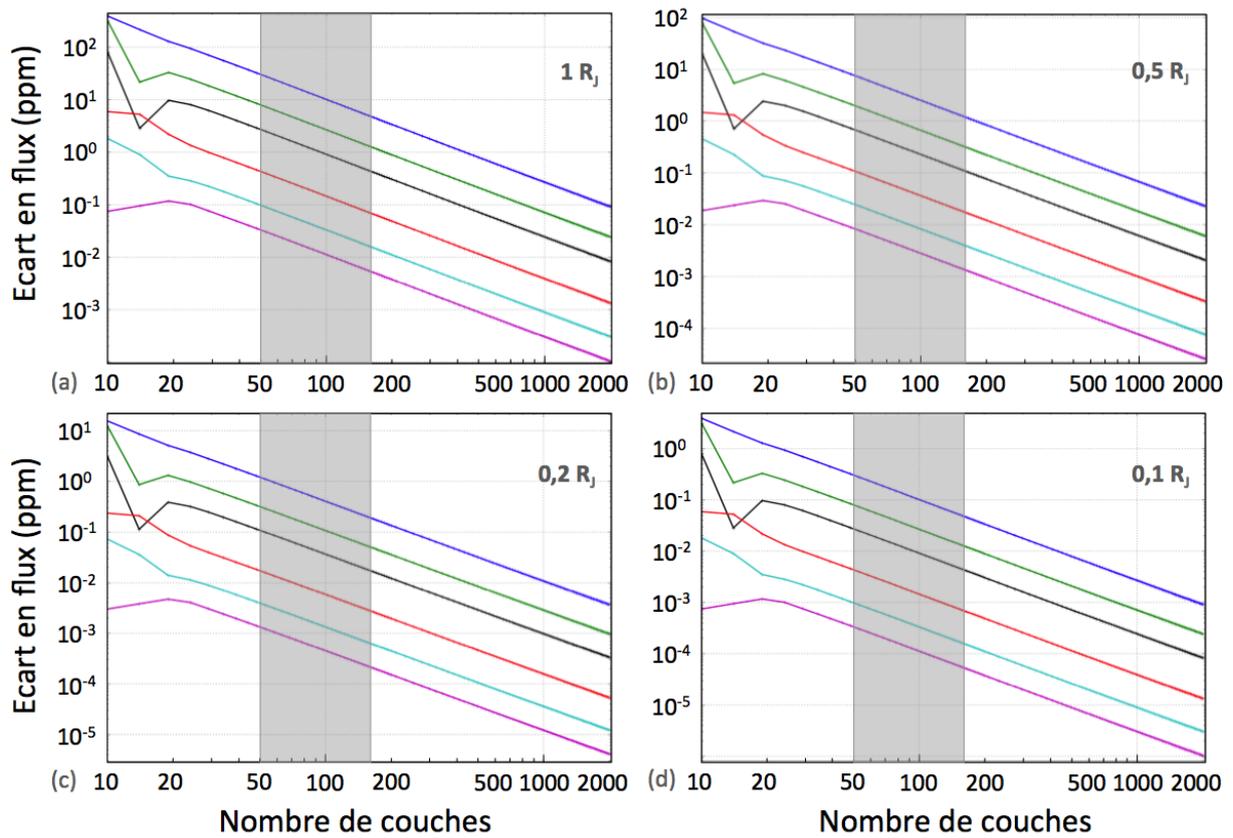


Figure 3.7: Ces figures montrent la différence sur le calcul du flux relatif entre Pytmosph3R sur sa version discrétisée et sur sa version intégrée. Comme indiqué sur la figure, les essais ont été effectués sur des exoplanètes de dimensions décroissantes : (a) $R_p = 1R_J$, (b) $R_p = 0,5R_J$, (c) $R_p = 0,2R_J$, (d) $R_p = 0,1R_J$. Les différentes courbes représentent des essais similaires mais avec des rapport R_p/H_0 de : 100 en bleu, 180 en vert, 300 en noir, 750 en rouge, 1600 en cyan et 2500 en magenta. Le rayon stellaire choisi étant de $R_s = 0,2R_*$, nous reproduisons ces courbes pour chaque rayon planétaire ou rapport R_p/H_0 en multipliant les résultats par $(R_s/(0,2R_*))^2$. La zone grisée correspond quant à elle à l'intervalle nominal en nombre de couches de Pytmosph3R et Tau-REx.

Nos arguments dépendent essentiellement de la précision que l'on souhaite atteindre sur nos spectres, ou sur la proximité entre les deux codes. Les résultats de cette étude ne s'appliquent que si nous cherchons à produire un spectre au plus proche de ce qu'il devrait être, en dépit de tous les facteurs qui n'ont pas été pris en compte. Dans le cas discret, en supposant que la précision attendue soit de quelques dizaines de ppm maximum, alors tourner les deux codes à 100 couches est raisonnable dans tous les cas. Pour des précisions plus faibles, de l'ordre du ppm, les exoplanètes présentant un rapport R_p/H_0 inférieur à 300 poseront plus de problèmes et demanderont un effort supplémentaire. Dans tous les cas, la version intégrale, bien qu'instable numériquement (elle fluctue lorsque l'épaisseur de couche est trop grande) sur des résolutions inférieures à 50 couches, converge beaucoup plus rapidement vers les valeurs attendues et ne nécessite dans aucun cas un nombre de couches supérieur à 100 (voir Figure 3.8).

Concernant le choix entre les deux méthodes, là encore cela dépendra de ce que nous voulons faire de nos spectres. Dans la suite de ce travail, nous allons chercher à mettre en évidence des biais propres aux structures tridimensionnelles des atmosphères, par conséquent, nous avons tout intérêt à nous rapprocher de la cohérence entre Pytmosph3R et Tau-REx de manière à limiter au maximum les biais propres à la méthode de génération de spectre. Dans ce cas nous utiliserons systématiquement la version discrète puisque les outils de Tau-REx utilisent cette approche. *A contrario*, si nous sommes dans un cas où la convergence est lente et que nous voulions produire un spectre au plus proche des observations qu'on en ferait (toujours en l'absence des effets qui ne sont pas pris en compte), alors nous avons plutôt intérêt à utiliser la version intégrale.

3.5.2 Produire une simulation GCM permettant une étude de qualité

Si nous avons beaucoup parlé de la cohérence entre Pytmosph3R et Tau-REx dans ce chapitre, nous n'avons finalement que très peu parlé de celle entre ces deux codes et le maillon, à savoir le GCM. Comme nous le disions, ce modèle a besoin de beaucoup de ressources pour produire une simulation atmosphériques, et les temps de calcul que cela peut représenter vont être très dépendant de la résolution du maillage sphérique adopté. Augmenter cette résolution c'est aussi permettre au GCM de modéliser des effets plus fins et d'augmenter le réalisme physico-chimique de ses atmosphères. De notre côté, étant donné les effets que nous souhaitons mettre en évidence et qui, dans la plupart des cas, ne reposeront que dans une région finalement assez resserrée autour du terminateur de l'exoplanète et s'étalant sur des angles faibles, augmenter les dimensions au moins angulaires de la maille du GCM permettrait de les étudier avec plus de précision. Une résolution 24x32 (24 points de latitude et 32 points de longitude) nous poserait des problèmes dans nos investigations car les pas en longitude et en latitude, respectivement de $11,25^\circ$ et de $7,5^\circ$, seraient du même ordre de grandeur que les angles de pénétration, et nous n'aurions qu'une à trois colonnes atmosphériques dans le meilleur des cas pour raisonner sur cette région de nos atmosphères. Nous avons besoin de résoudre au mieux ces régions, et nous devons donc travailler à plus haute résolution. La simulation de GJ 1214 b sur laquelle nous allons nous concentrer dans le prochain chapitre est de résolution 48x64, ce qui est certes mieux mais pas encore optimal.

Concernant le découpage vertical, le GCM comme les autres maillons de la chaîne n'ont pas nécessairement besoin d'un nombre de couches trop élevé, et 50 couches est un bon compromis entre une bonne résolution des profils verticaux et des temps de calculs raisonnables. Le plus important en ce qui concerne cette dimension c'est de s'assurer que le toit du modèle est suffisamment bas en pression (et donc haut en altitude) pour être à la convergence du point de vue du transfert radiatif. En effet, s'il n'est pas nécessaire de descendre plus bas que le Pa ou le mPa du point de vue de la physique du GCM, ce toit peut s'avérer être trop bas pour assurer la convergence des spectres générés par Pytmosph3R.

Toujours dans notre exemple de GJ 1214 b, ce toit s'arrête à 0,3 Pa. Si la convergence spectro-

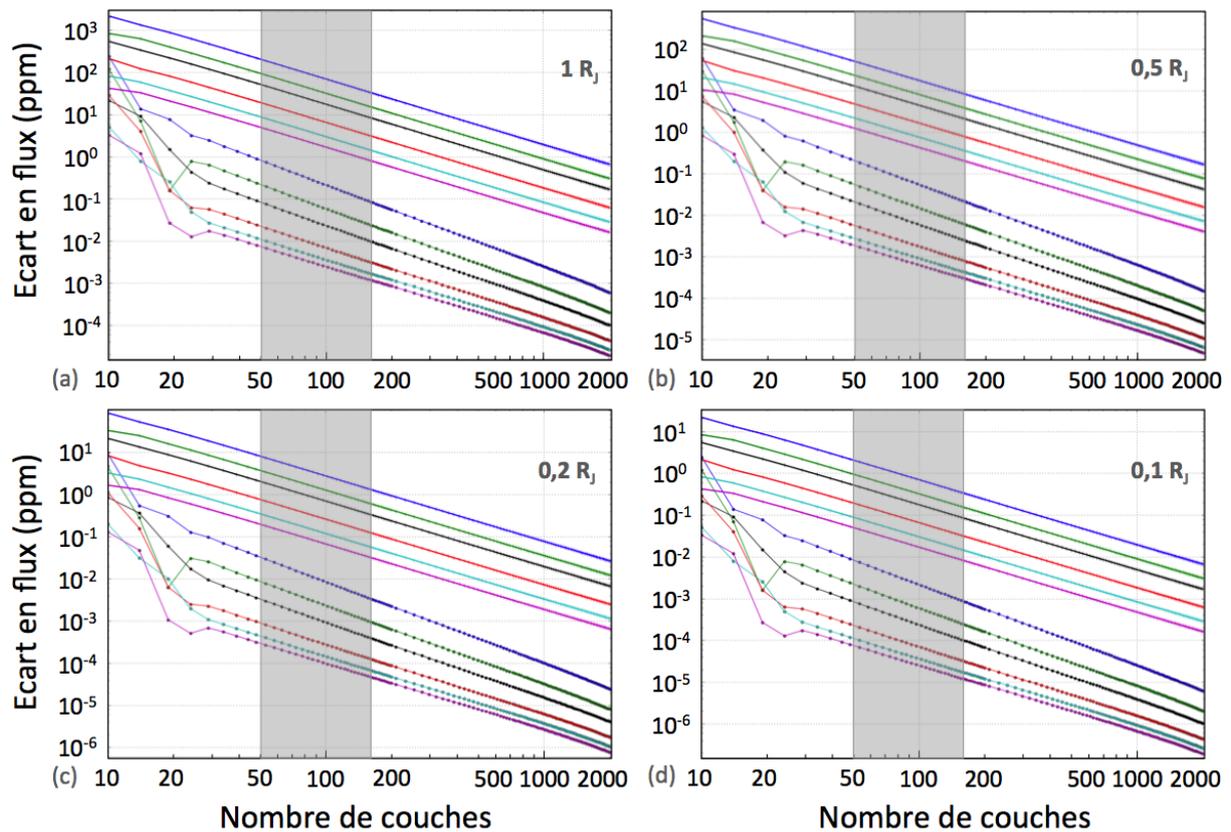


Figure 3.8: Ces figures montrent la différence sur le calcul du flux relatif entre Pytmosph3R sur sa version discrétisée, sur sa version intégrée et la valeur de flux attendue. Comme indiqué sur la figure, les essais ont été effectués sur des exoplanètes de dimensions décroissantes : (a) $R_p = 1 R_J$, (b) $R_p = 0,5 R_J$, (c) $R_p = 0,2 R_J$, (d) $R_p = 0,1 R_J$. Les différentes courbes représentent des essais similaires mais avec des rapport R_p/H_0 de : 100 en bleu, 180 en vert, 300 en noir, 750 en rouge, 1600 en cyan et 2500 en magenta. Le rayon stellaire choisi étant de $R_s = 0,2 R_*$, nous reproduisons ces courbes pour chaque rayon planétaire ou rapport R_p/H_0 en multipliant les résultats par $(R_s/(0,2 R_*))^2$. La zone grisée correspond quant à elle à l'intervalle nominal en nombre de couches de Pytmosph3R et Tau-REx.

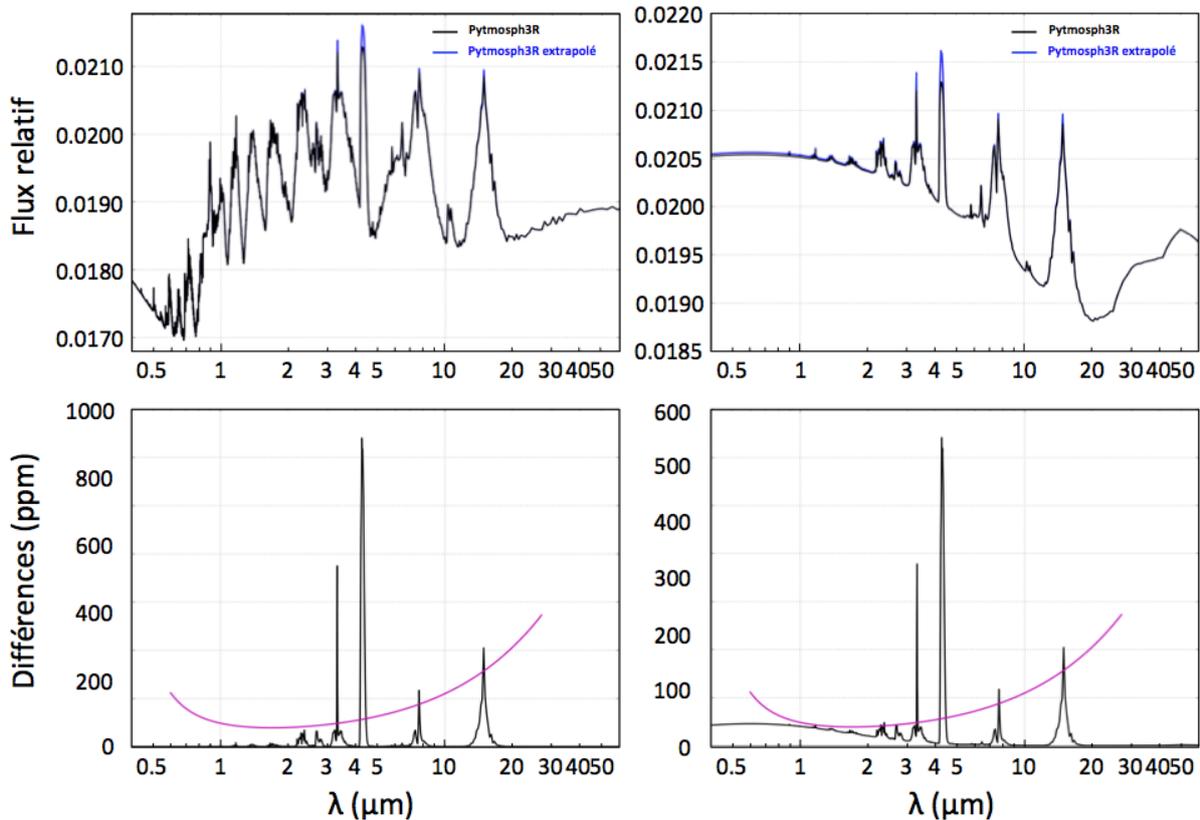


Figure 3.9: Comparaison entre la méthode du profil moyen et les spectres Pytmosph3R. À gauche : en haut : superposition du spectre en transmission obtenu par la méthode (en vert) et du spectre Pytmosph3R (en noir) à partir de la simulation de GJ1214 b en l'absence de diffusion de Mie ; en bas : différences entre les spectres exprimées en ppm. À droite : en haut : superposition du spectre en transmission obtenu par la méthode (en vert) et du spectre Pytmosph3R (en noir) à partir de la simulation de GJ 1214 b en tenant compte de la diffusion de Mie des nuages de KCl et de ZnS ; en bas : différences entre les spectres exprimées en ppm. Les courbes magenta donnent l'ordre de grandeur en fonction de la longueur d'onde du bruit de photon de GJ 1214 pour 1h30 d'intégration, des instruments semblables à ceux du JWST et une résolution $R = 100$.

scopique en transmission de la simulation est atteinte, le fait de rajouter une couche par extrapolation de la haute atmosphère ne devrait avoir aucun effet sur les spectres obtenus avec et sans extrapolation. Comme nous le mettons en évidence avec la Figure 3.9, ce n'est pas le cas pour notre simulation d'étude. Nous devons effectivement descendre à 0,01 Pa pour que les variations engendrées par l'extrapolation soient inférieures au niveau de bruit stellaire estimé à partir des instruments du JWST. Ces variations ne concernent que les molécules les plus abondantes à haute altitude et les bandes d'absorption les plus intenses (centrée à $4,28 \mu\text{m}$ qui est une bande du CO_2). La présence de nuages peut également retarder cette convergence, même si dans notre exemple nous restons toujours en dessous du niveau de bruit.

En somme, nous ne nous sommes pas forcément placés dans les meilleures conditions quant au type d'étude que nous allons fournir, mais cela nous a permis de souligner un point à ne surtout pas négliger pour les utilisations futures de cette chaîne observationnelle : réajuster le toit du modèle de manière à ce que la convergence du point de vue du transfert radiatif soit entièrement assurée par l'objet physico-chimique que représente la simulation atmosphérique et non pas par, en partie et pour certaines gammes

spectrales, son extrapolation.

Pour conclure sur ce chapitre, nous avons validé Pytmosph3R au moyen des outils qui étaient à notre disposition et nous avons mis en évidence comment sa structure pouvait en simplifier la réécriture si nous souhaitons l'utiliser avec d'autres maillons que le GCM (Dubos et al. 2015) ou Tau-REx (Irwin et al. 2008). Nous utiliserons cet atout dans le Chapitre 5 lorsque nous délaierons les simulations dynamiques 3D pour des atmosphères synthétiques beaucoup moins complexes.

Le travail de compatibilité entre le générateur de spectre et l'algorithme de traitement du signal est une étape cruciale. Les effets que nous chercherons à mettre en évidence ne doivent pas être noyés dans des systématiques qui ne reposeraient que sur une divergence de méthode. Nous nous devons de laisser la possibilité à Pytmosph3R d'adapter son approche, notamment lors des étapes de génération des profils verticaux, lors de l'interpolation des sections efficaces (en pression ou en logarithme de cette pression) ou même de par le jeu de constantes ou de références utilisées pour calculer les opacités (on pense notamment au Rayleigh).

Nous avons subi chacun de ses problèmes de compatibilité lors de cette étude, ce qui nous a amené à proposer l'option 'Tau-REx' du code. Cette adaptation a permis de réduire les systématiques au niveau le plus bas. Ne subsistent alors que les biais dérivant de la géométrie adoptée par les deux codes, Pytmosph3R résolvant le transfert radiatif sur une grille en altitude et Tau-REx sur une grille en pression. À l'issue de ce chapitre, nous avons établi les conditions dans lesquelles ces biais n'auront aucune influence sur l'inversion, qui dépendent du rapport R_p/H_0 et du découpage vertical, sans que cela ne soit prohibitif en termes de ressources ou de temps de calculs.

Soulignons que l'algorithme existe dans une version optimisée et parallélisée. Il a également été rendu le plus générique et le plus accessible possible.

Chapter 4

Mise en évidence des biais observationnels liés aux hétérogénéités atmosphériques

Sommaire

4.1 GJ 1214 b comme objet d'étude	93
4.1.1 L'exoplanète GJ 1214 b	93
4.1.2 Les hétérogénéités de températures et de compositions d'une simulation de GJ 1214 b	94
4.2 Effets des hétérogénéités sur les spectres en transmission	99
4.2.1 Techniques classiques de génération de spectre	100
4.2.2 Effets azimutaux et tangentiels pour le CO ₂ et NH ₃	105
4.2.3 Effets tangentiels des aérosols	106
4.3 Résultats de l'inversion de la simulation de GJ 1214 b	107
4.3.1 Paramétrisation de Tau-REx	108
4.3.2 Interprétation des spectres et des distributions <i>a posteriori</i>	109
4.3.3 Equivalent 1D, isotherme et homogène d'une simulation 3D	114
4.3.4 Température globale et température moléculaire	118
4.3.5 Quelques remarques	120
4.4 Influence de la méthode de génération de spectre et de la paramétrisation de Tau-REx sur l'inversion	120
4.4.1 Impact de la paramétrisation de Tau-REx sur la contrainte des paramètres libres	120
4.4.2 Un effet d'hétérogénéités tangentielle en composition sur l'inversion	126

À présent que Pytmosph3R est mis au point et qu'il existe sous une version stable et générique, nous pouvons produire les spectres et tous les intermédiaires de calcul (profondeurs optiques de chaque contribution, cartes de transmittance, courbes de lumière ...) à partir de n'importe quelle simulation tridimensionnelle. Nous cherchons dans ce chapitre à souligner d'un côté l'apport du logiciel dans la chaîne scientifique, et d'un autre, à mettre en évidence les limites de la science actuelle quant à la caractérisation des atmosphères d'exoplanètes. Lorsque nous effectuons une observation, l'atmosphère de l'astre observé nous est parfaitement inconnue et nous la caractérisons par l'empreinte qu'elle laisse sur la lumière de son étoile. L'utilisation des algorithmes résolvant le problème inverse sur les spectres ainsi obtenus n'est pas optimale pour des instruments à faibles résolutions ou effectuant leurs mesures sur des gammes spectrales très restreintes. Nous caractérisons en conséquence le spectre en résolvant le problème de manière directe, soit en proposant des simulations atmosphériques compatibles avec les observations. Nous avons donc finalement peu de recul sur la pertinence des outils qui seront employés lors du traitement des observations effectuées par les instruments à venir, à partir desquelles nous pouvons avoir recours aux méthodes d'inversion. Le meilleur moyen de les éprouver resterait encore de les utiliser sur des exoplanètes pour lesquelles nous avons toute l'information sur leurs atmosphères. Comme cela n'est pas possible avec de vrais objets, l'astuce consiste à les remplacer par des simulations atmosphériques.

Les algorithmes actuels mis au point en prévision des observations futures, tel que Tau-REx, sont validés à partir de simulations 1D, dont nous généralisons l'utilisation sur des objets ou des modèles tridimensionnels. L'expérience dans ce chapitre va consister à remplacer une exoplanète ayant déjà fait l'objet d'un grand nombre d'observations et d'études par une de ses simulations compatibles et ainsi pouvoir la comparer avec les résultats obtenus lors de son inversion. Pytmosph3R génère les observables associées et fait l'intermédiaire entre Tau-REx et le GCM. L'ensemble des réflexions détaillées lors des chapitres précédents nous ont permis de limiter les biais observationnels découlant d'approches divergentes dans la physique ou le transfert radiatif, et grâce à cela, nous allons donc pouvoir relier ceux subsistants aux propriétés et/ou particularités atmosphériques, et uniquement à elles.

Ces biais découlent essentiellement du caractère hétérogène des atmosphères. Nous allons dans ce sens redéfinir les différents types d'hétérogénéités rencontrées et tenter de les associer à des biais spécifiques. Nous effectuerons ce travail sur les observables elle-mêmes, et donc sur les spectres en transmission, puis sur les résultats de l'inversion par Tau-REx. Nous appliquerons notre démarche sur une simulation dynamique 3D de l'atmosphère de l'exoplanète GJ 1214 b, obtenue à partir d'un GCM, dont nous discuterons de la pertinence, de la manière dont elle a été utilisée jusque-là et de la manière dont nous avons appliqué les différentes parties de la chaîne observationnelle. Les hétérogénéités thermiques et de composition seront au centre de notre étude, et nous appuierons tout particulièrement sur les hétérogénéités tangentielles très largement sous-estimées par la communauté astrophysique et pour lesquelles Pytmosph3R apporte une plus-value intéressante.

Ce chapitre n'est que l'introduction d'une dernière partie plus technique visant davantage à servir d'exemple sur une manière d'utiliser ces trois logiciels et d'en tirer des informations importantes pour les observations futures. C'est une prise de recul nécessaire à l'aube d'une ère prometteuse, mais aussi ambitieuse, et qui aidera très certainement à porter un regard plus critique sur les résultats qui en découleront.

La chaîne observationnelle est complète, nous avons d'un côté le simulateur atmosphérique tridimensionnel qu'est le GCM ; le logiciel permettant de générer des spectres en transmission à partir de ses simulations, Pytmosph3R ; et enfin l'algorithme de traitement du signal dédié à l'inversion des spectres dans le but de caractériser les atmosphères d'exoplanète, à savoir TauREx. Posséder en local l'ensemble de ces outils a permis les études présentées et discutées dans les paragraphes à venir. Au-delà des résultats scientifiques qui en découlent, nous allons avoir l'occasion de souligner l'apport de Pytmosph3R dans cette chaîne déjà existante, et c'est aussi dans cette optique que nous nous sommes focalisés sur des effets que seul un générateur de spectre complet comme celui-ci peut mettre en évidence. Si les précédents chapitres se concentraient sur la conception, le fonctionnement et la validation de l'algorithme, celui-ci peut faire office de guide pour les études qui suivront ce travail de thèse et les publications associées. Nous aboutirons à une conclusion forte et une perspective très ouverte étant donné la somme d'études ou d'informations que nous pourrions envisager sur la base de notre approche.

4.1 GJ 1214 b comme objet d'étude

Afin de représenter la diversité des objets cibles des prochaines missions spatiales, nous avons concentré notre étude sur deux exoplanètes type que sont : GJ 1214 b et HD 209458 b. Des observations soutenues sont d'ores-et-déjà programmées pour ces astres et ils ont également déjà fait l'objet d'études très poussées. Nous couvrons ainsi deux des grandes gammes de rapport R_p/H_0 ainsi que deux des grandes types d'exoplanètes, à savoir les planètes intermédiaires pouvant à la fois être des planètes gazeuses ou des planètes de type super-Terre, et les géantes gazeuses chaudes (les Jupiter chauds). Nous avons finalement écarté le cas des planètes telluriques, sur lesquelles nous avons fourni un gros travail dans le cadre de la caractérisation de leurs atmosphères (système de Trappist 1) car nous ne sommes pas entrés dans le tridimensionnel, ce qui sort du cadre du sujet de thèse. Les conclusions de cette étude peuvent être consulté dans [Grimm et al. \(2018\)](#) et [Turbet et al. \(2018\)](#). Ce chapitre sera consacré à GJ 1214 b en collaboration avec Benjamin Charnay qui a mis à notre disposition une des simulations discutée dans [Charnay et al. \(2015\)](#).

4.1.1 L'exoplanète GJ 1214 b

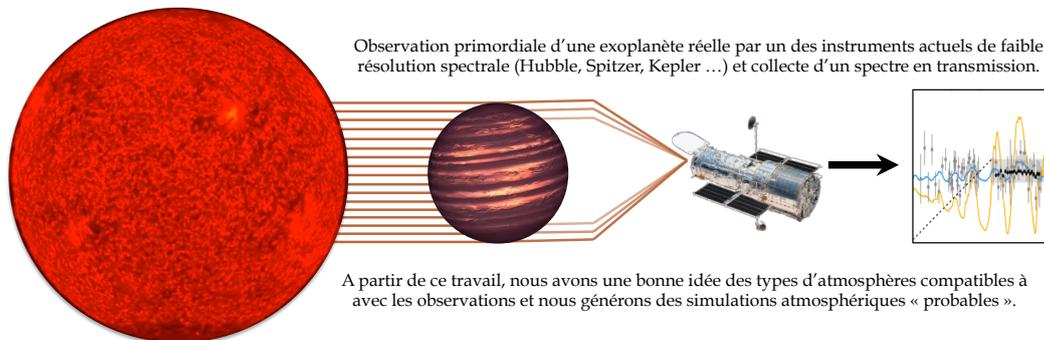
GJ 1214 b est une planète extrasolaire de type super-Terre en orbite autour de l'étoile Gliese 1214 dans la constellation de l'Orphiucus. Elle est située à environ 42,5 années-lumière de notre système et a été découverte en 2009 via le projet MEarth, un observatoire robotique ayant pour objectif de détecter des planètes par la méthode des transits autour de naines rouges. Son diamètre est 2,6 fois supérieur à la Terre et sa masse mesurée par le télescope HARPS serait entre 5,5 et 7,5 fois supérieure. Cet objet à la frontière entre les planètes telluriques et les planètes gazeuses a suscité un vif intérêt de par la dégénérescence structurelle et atmosphérique. En effet, étant donné sa masse et son rayon, il pourrait tout aussi bien

Table 4.1: Caractéristiques de GJ 1214 b et de son étoile.

Paramètres	R_p	M_p	g_0	R_s	M_s	T_s	d_*
Unités	R_J	M_J	m/s^2	R_*	M_*	K	a.l.
	0,2432	0,0206	9,029	0,2065	0,157	3000	42,5

s'agir d'une planète au coeur dense, composé d'un mélange de fer et de nickel, recouvert par une épaisse atmosphère essentiellement dominée par du dihydrogène et de l'hélium, que d'une planète tellurique mais moins dense, constituée de glace par exemple, et recouverte d'eau liquide et gazeuse. GJ 1214 b serait donc, dans le deuxième cas, une planète dite océan, et aurait une atmosphère de vapeur d'eau. Cette dégénérescence devrait pouvoir être levée par la caractérisation de son atmosphère en déterminant la quantité d'eau. Est-ce un constituant majeur ou non ? C'est dans ce but que l'exoplanète a fait l'objet de plusieurs observations au cours des 10 dernières années et d'autant de discussions dans la littérature. (CITATIONS) Dans les études à venir, nous nous sommes focalisés sur les atmosphères dominées par un mélange d'hydrogène et d'hélium et nous avons travaillé avec la simulation GCM de Benjamin Charnay discutée dans [Charnay et al. \(2015\)](#). Les hétérogénéités constatées dans les cartes de température et de composition publiées sont à l'origine de nos questionnements au sujet de leurs influences sur le spectre en transmission et sur la manière dont elles étaient prises en compte par la communauté. La mise au point des algorithmes comme Tau-REx et l'implication de l'équipe dans la mission M4 ARIEL de l'ESA ont par la suite orienté nos interrogations sur la manière dont ces hétérogénéités pouvaient être lisibles dans les résultats qu'ils allaient offrir sur des observations réelles et à quel point ces derniers pouvaient s'en voir biaisés.

GJ 1214 b était le candidat parfait pour débiter les études que nous allons présenter dans les paragraphes à venir. Sa place de choix parmi les objets d'intérêt, ses dimensions et les outils à notre disposition nous permet aussi d'approfondir les nombreuses discussions dont elle a pu faire l'objet.



4.1.2 Les hétérogénéités de températures et de compositions d'une simulation de GJ 1214 b

Nous rappelons que la simulation de [Charnay et al. \(2015\)](#) propose une exoplanète dont l'atmosphère serait dominée par du dihydrogène et de l'hélium. Ci-dessous nous rappelons également les caractéristiques principales utilisées par Pytmosph3R pour en produire les observables :

- Le rayon planétaire fixé par la simulation est de $R_p = 1,7 \cdot 10^7$ m, soit $R_p = 0,243166 R_J$.
- La simulation comprend 8 molécules : H_2 , He, H_2O , CH_4 , NH_3 , N_2 , CO_2 et CO, les abondances sont déterminées en nous plaçant à l'équilibre thermodynamique.

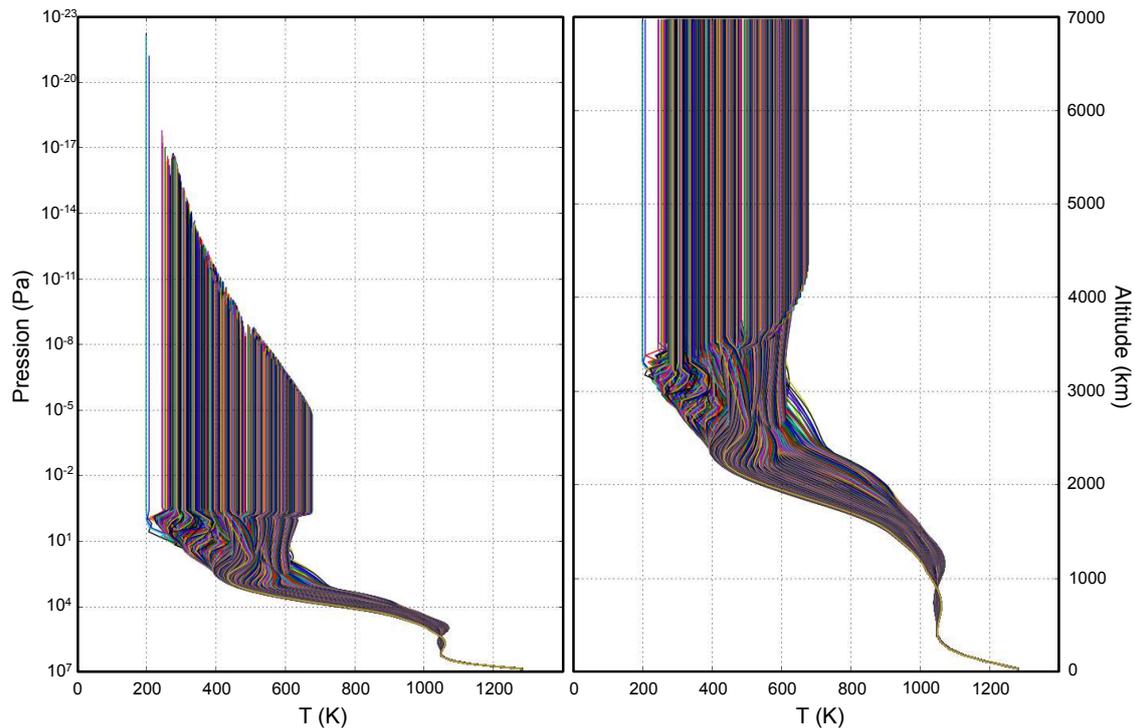


Figure 4.1: Profils en température des colonnes de la simulation atmosphérique de GJ 1214 b. À gauche nous proposons une représentation classique du diagramme $P_c = f(T)$, la pression étant exprimée en Pascal (Pa), et à droite une représentation en altitude $z = f(T)$, l'altitude étant exprimée en kilomètres (km).

- Le ratio He/H_2 est assimilé à celui d'une étoile de type solaire, à savoir 0,17647.
- La gravité de surface à 10 bar est déduite de la masse de GJ 1214 b et de son rayon, soit $g_0 = 8,93 \text{ m/s}^2$.
- La pression du toit atmosphérique est proche de 10^{-1} Pa dans la simulation, et est fixée à 10^{-6} Pa dans le but d'être sûr d'atteindre la convergence des spectres.
- La simulation comporte une cinquantaine de couches, en choisissant un nombre de couches égal à 100, les 60 premières re-découpent les sorties du GCM, bien que cela dépende de la colonne considérée, et les 40 autres sont issues de son extrapolation.
- Elle compte deux espèces d'aérosols, des particules de chlorure de potassium KCl et des particules de sulfure de zinc ZnS.
- Nous utilisons la version discrète du transfert radiatif.
- Nous utilisons le set de section efficace 10_{wno} à résolution variable et de $\Delta\sigma = 10 \text{ cm}^{-1}$ constant.

Outre le fait d'être une atmosphère dominée par du dihydrogène et de l'hélium, les abondances sont, comme précisé, déterminées en supposant l'équilibre thermodynamique. Une hypothèse discutable étant donné les températures mises en jeu, mais dans le cadre de cette étude, nous ne discuterons que brièvement de cet aspect. La composition chimique est donc contrôlée exclusivement par la température et la pression. La conséquence principale de ce choix est que l'ensemble des hétérogénéités qui seront

constatées dans cette atmosphère découlera directement ou indirectement des effets thermiques. La Figure 4.1 est une représentation des profils verticaux superposés de toutes les colonnes atmosphériques de la dite simulation, et comme nous pouvons le constater, elle peut présenter entre deux points de coordonnées (λ, φ) des écarts de quelques centaines de degrés pour un même niveau (en pression ou en altitude). Ces différences de température, naissant tout d'abord de la rotation synchrone de l'exoplanète, et donc du contraste jour/nuit qui en découle, mais aussi des vents et des circulations dans les régions de rencontre des masses d'air, déforment la couche atmosphérique. Dans la Figure 4.2, à gauche est représentée une coupe méridionale au terminateur. Nous pouvons y observer l'évolution de la pression, et nous avons coupé l'atmosphère au niveau du toit de la simulation. La zone blanche centrale correspond donc au cœur supposé solide de l'exoplanète, réduit dans un souci de visibilité à un dixième de ses vraies dimensions, tandis que la zone blanche délimitée par des tirets noirs correspond à la région extrapolée de l'atmosphère par Pytmosph3R. À droite cette fois-ci, la coupe équatoriale qui met encore mieux en évidence cette déformation. Le côté jour y apparaît enflé par les températures plus élevées tandis que le côté nuit est plus contracté. Sur cette même Figure 4.2, nous avons ajouté les coupes en température. Les iso-contours superposés à la coupe méridionale correspondent aux niveaux à partir desquels la transmittance est inférieure à $\exp(-1)$ (ou une profondeur optique totale égale à 1) pour 3 bandes d'absorption : l'une associée au méthane à 1,17 microns qui, on pourra le constater, est la molécule la plus représentée dans le spectre en transmission ; et les deux bandes principales du dioxyde de carbone centrées sur 4,27 et 14,3 microns. Comme nous pouvons le voir, ces trois bandes d'absorption sont très proches ou au-dessus du toit de la simulation, ce qui rejoint les remarques formulées dans le chapitre précédent concernant l'importance de son choix du point de vue du transfert radiatif. *A posteriori*, un toit à 10^{-6} Pa est largement au-delà de la convergence des spectres et, finalement, les 80 premières couches sont tout à fait suffisantes. Avec une épaisseur de couche de 69 615 m, cela veut dire que notre atmosphère a une épaisseur totale de 5 569 km (pour 80 couches) ou 6 961 km (pour 100 couches), soit à peu près le tiers du rayon planétaire.

L'atmosphère présente deux types d'hétérogénéités :

- Celles purement thermiques comme cela peut se voir sur les coupes méridionale et équatoriale en température.
- Celles compositionnelles qui découleraient d'un appauvrissement ou d'une accumulation d'une espèce moléculaire ou d'un aérosol dans une région précise de l'atmosphère.

Les variations de températures comme les variations d'abondances (en fraction molaire ou massique) ont toutes deux un effet évident sur l'extension spatiale locale de l'atmosphère puisque la hauteur d'échelle est une fonction de T et du poids moléculaire moyen μ . Dans ce cas précis, les quantités impliquées, en dehors de H_2 et He , sont finalement toujours faibles et ne représentent au total qu'au maximum un dixième de la quantité de matière totale. Par conséquent, le poids moléculaire moyen varie peu et ne subit entre deux valeurs extrêmes qu'une déviation de 2%. C'est donc bien la température qui est maîtresse de l'évolution de la hauteur d'échelle dans cette atmosphère. Nous nous attendons à un effet sur les spectres lié à ces hétérogénéités que l'on pourrait qualifier de thermo-spatiales. Mais se superposera à lui toutes les étapes faisant intervenir des processus physiques dépendant de la température, et en particulier le transfert radiatif.

Les spectres résultant d'une atmosphère hétérogène vont ainsi être altérés de plusieurs manières :

- Par les effets thermo-spatiaux précités, le rayon effectif calculé diffère pour chaque angle θ et le spectre final est une moyenne de ces angles, on parlera donc d'un effet azimutal. Cette première al-

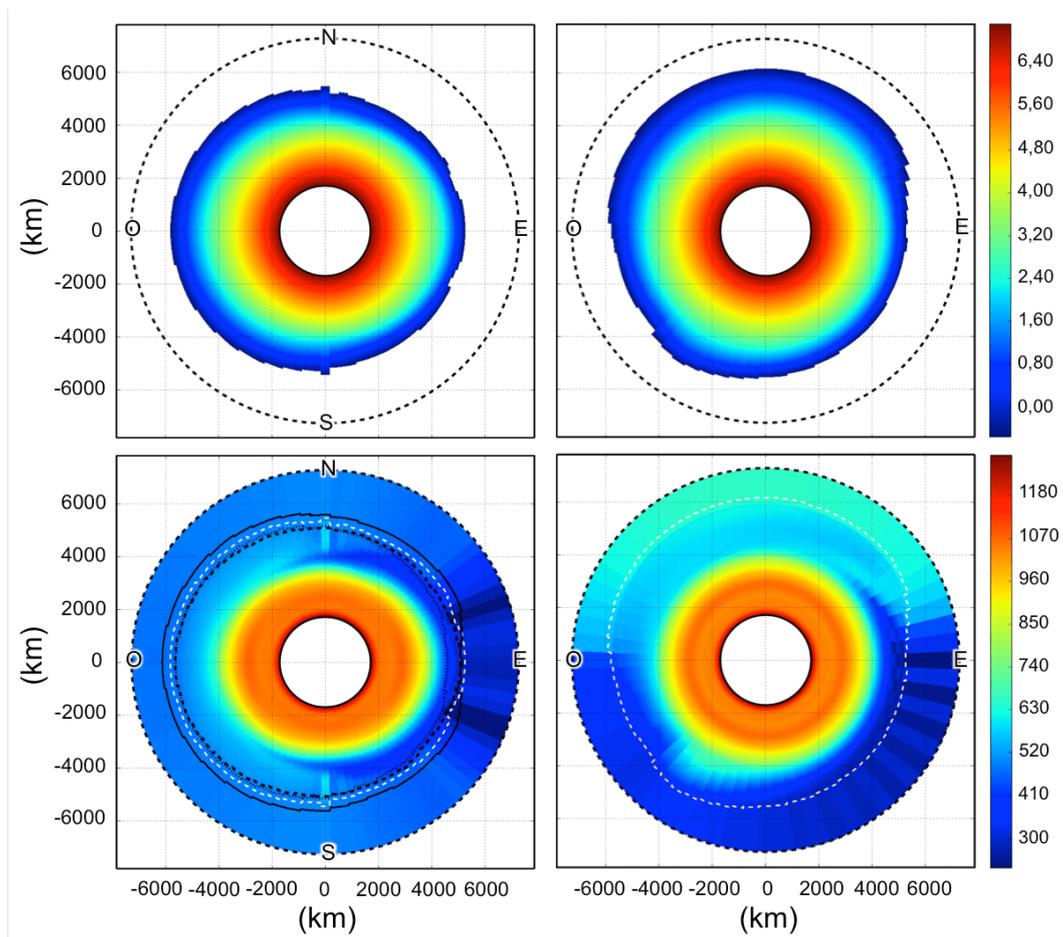


Figure 4.2: Coupe méridionale au terminateur et équatorial de la simulation de GJ1214 b, en haut la pression (puissance de 10 et exprimée en Pa), en bas la température (exprimée en K). Les tirets noirs indiquent le toit du modèle dans la maille de Pytmosph3R et les tirets blanc au toit de la simulation elle-même. Les iso-contours noirs sur la coupe méridionale en température indiquent les niveaux pour lesquels la transmittance de l'atmosphère devient supérieure à e^{-1} aux longueurs d'onde : 1,17 (tirets), 4,27 (trait plein), 14,3 (pointillés) microns. Dans un souci de lecture, le rayon planétaire est réduit sur ces représentations d'un facteur 10 et nous ne représentons que les 80 premières couches.

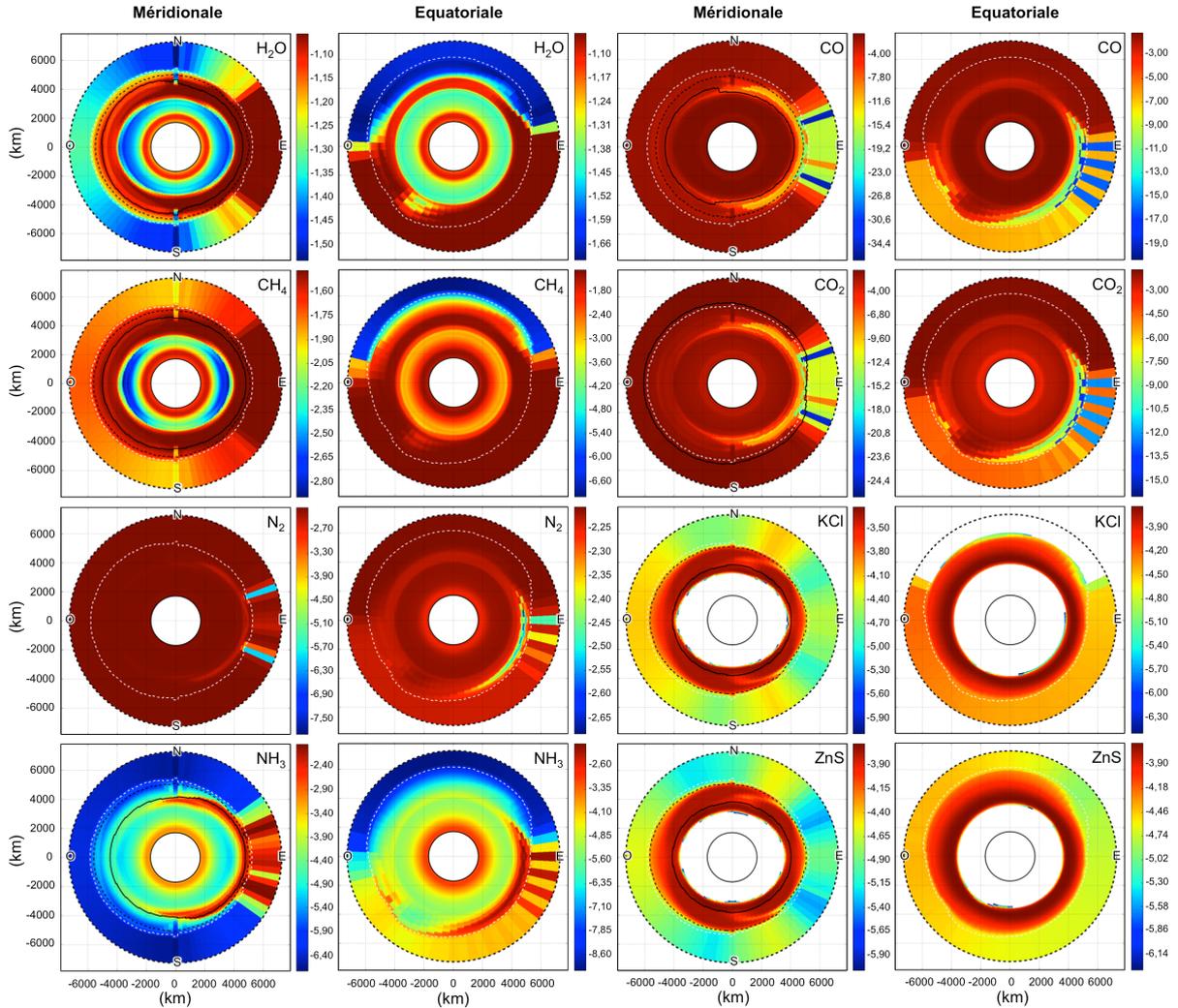


Figure 4.3: Coupe méridionale au terminateur et équatoriale de la simulation de GJ1214 b des abondances en nombre des molécules et des fractions massiques en aerosols (sans H_2 et He). L'échelle de couleur est en puissance de 10. Les tirets noirs indiquent le toit du modèle dans la maille de Pytmosph3R et les tirets blanc au toit de la simulation elle-même. Les iso-contours en traits continus noirs indiquent les niveaux pour lesquels la transmittance de l'atmosphère devient supérieure à e^{-1} pour des longueurs correspondant à des pics d'absorption propres à la molécule concernée et pour lesquelles ils constituent l'unique contribution au spectre total en l'absence de diffusion de Mie : 2,502 (H_2O), 1,171 (CH_4), 1,515 (NH_3), 4,608 (CO, non dominant), 4,273 (CO_2) et 1,082 (ZnS et KCl) microns. Les iso-contours en pointillés noirs correspondent à ces mêmes niveaux mais en tenant compte de la diffusion de Mie. Dans un souci de lecture, le rayon planétaire est réduit sur ces représentations d'un facteur 10 et nous ne représentons que les 80 premières couches. En ce qui concerne les aérosols, les régions blanches dans l'atmosphère correspondent à des fractions massiques négligeables ou nulles que nous avons écartées pour mieux visualiser la répartition dans les zones denses.

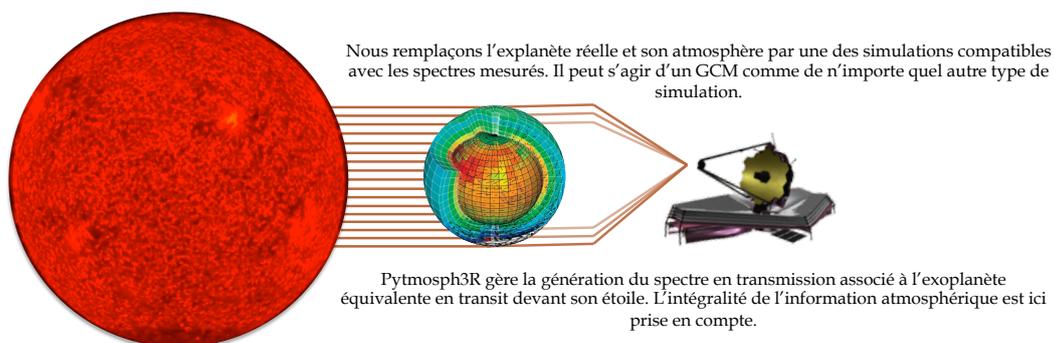
tération est achromatique au premier ordre, puisqu'elle ne repose que sur des aspects géométriques, mais elle est aussi accompagnée de son lot de conséquences.

- Par la dépendance en T de l'absorption moléculaire, de la diffusion Rayleigh et du continuum qui va, dans la plupart des cas, accentuer les effets précédents puisque les opacités ont tendance à croître avec la température. C'est une altération chromatique puisque les différentes sources d'absorption n'évoluent pas de la même manière avec la température.
- Par les répartitions moléculaires, uniquement dépendantes ou non, de la température (équilibre ou non). C'est un effet qui sera donc spécifique aux hétérogénéités propres à chaque molécule et n'affectera les spectres qu'aux gammes correspondant à leurs bandes d'absorption.
- Que ce soit d'un point de vue thermique ou compositionnel, la structure des colonnes atmosphériques ont un effet que l'on qualifiera de vertical, et la variété de ces profils rencontrés par les rayons stellaires le long de la ligne de visée va également en modifier le transfert radiatif, par opposition à une atmosphère homogène, et c'est ce qu'on appellera un effet tangentiel.

Dans notre cas d'étude, les fortes variations de température vont avoir un impact parfois très important sur l'équilibre thermodynamique, et donc sur la composition moléculaire. La Figure 4.3 illustre cela en proposant les mêmes coupes que pour la température et la pression, mais cette fois-ci pour toutes les molécules de l'atmosphère. Si la plupart reste relativement peu sensible à ses variations, comme H_2O , N_2 , NH_3 et bien sûr H_2 et He , les molécules carbonées, elles, le sont davantage (CH_4 , CO et CO_2). On notera tout particulièrement l'appauvrissement sur l'équateur droit du dioxyde de carbone et du monoxyde de carbone. Dans cette région de l'atmosphère, les courants d'air frais s'enfoncent par delà le terminateur avant d'être réchauffés, et à ces couples pression/température, les abondances en CO_2 et en CO s'effondrent sur plusieurs ordres de grandeur, au profit du CH_4 .

4.2 Effets des hétérogénéités sur les spectres en transmission

Maintenant que nous avons une simulation, nous la faisons transiter devant l'étoile du système, à savoir GJ 1214, et nous appliquons Pytmosph3R pour en générer les observables. Nous n'utiliserons que les cartes de transmittance et les spectres en transmission pour étayer notre étude et notre argumentation. Durant cette première étape, nous allons déjà formulé un certain nombre de critiques vis-à-vis des techniques classiques dans la génération des spectres, et ainsi mettre l'accent sur l'apport de Pytmosph3R lorsque nous sommes en présence de certains types d'hétérogénéités. Nous tenterons ensuite de dégager des prédictions sur l'inversion.



4.2.1 Techniques classiques de génération de spectre

Visualisons à présent les effets que l'on s'attend à observer, comme soulignés dans la section précédente sur les spectres de GJ 1214 b (voir § 4.1.2). Nous travaillerons d'abord en l'absence de nuages puis nous montrerons en quoi ces derniers peuvent gommer certains d'entre eux. Nous allons dans un premier temps mettre en évidence l'impact concret du caractère hétérogène de l'atmosphère sur la génération d'un spectre en transmission. Les deux méthodes les plus fréquemment rencontrées pour produire des observables à partir d'une simulation atmosphérique 3D consiste à se focaliser sur le terminateur. L'argument ici consiste à dire que finalement l'essentiel de l'absorption le long d'un rayon échantillon se produit dans la région de l'atmosphère qui est la plus dense et la plus opaque, autrement dit autour du terminateur. À partir de là, seules les colonnes (λ, ϕ) associées sont nécessaires et nous cherchons un spectre moyennant les hétérogénéités de la simulation. Les deux techniques se distinguent par l'étape à laquelle cette moyenne est effectuée :

- La première méthode consiste à simuler un profil moyen à partir de l'ensemble des profils du terminateur. Avec Pytmosph3R, il est très facile de générer une colonne moyenne puisque la maille est spatiale. Tout repose finalement sur la manière d'effectuer cette moyenne, notamment en ce qui concerne la pression et les abondances. Nous ne pouvons pas juste établir un profil thermique moyen puis en déduire les fractions molaires à partir de l'équilibre thermodynamique car alors nous gommons les très fortes hétérogénéités de composition ou nous les surestimons (ou sous-estimons) en fonction des températures moyennes obtenues. Nous avons fait le choix de moyennner brutalement les logarithmes de la pression et des fractions molaires, puis de corriger ces dernières pour qu'elles respectent la conservation de la matière. Nous avons conscience toutefois que ce profil ne respecte plus ni l'équilibre hydrostatique, ni l'équilibre thermodynamique, mais gardons aussi à l'esprit que ce profil moyen n'a pas de valeur physique, seulement une valeur spectroscopique.
- La deuxième méthode, plus fréquente et que l'on peut retrouver dans l'utilisation de SMART dans [Charnay et al. \(2015\)](#), consiste à produire un spectre 1D pour chacune de ces colonnes. Une fois ces spectres générés, nous en moyennons les flux relatifs ou les rayons effectifs (au carré). Un des modules de Pytmosph3R réalise cette opération pour ensuite le comparer à celui qu'il produit de son côté.

Spectre 1D à partir d'un profil moyen du terminateur

La Figure 4.4 illustre les spectres obtenus au moyen de la première méthode, avec ou sans nuages, ainsi que les différences en ppm avec le spectre global généré par Pytmosph3R. Sur ces différences est proposé le bruit de photon approximatif de GJ 1214 avec les instruments du JWST. Nous adoptons la plus petite résolution de ces derniers, à savoir $R = 100$ pour donner une idée du meilleur niveau de bruit attendu. L'intégration est faite pour la durée d'1,5 transit de GJ 1214 b, soit environ 8600 secondes. En somme, tout ce qui sera largement en dessous de cette courbe disparaîtra dans le bruit lors d'une observation, et tout ce qui s'en rapproche ou est au-dessus peut être détectable (en tout cas à moins de $10 \mu\text{m}$, par la suite le bruit instrumental fera exploser ce bruit). Les spectres obtenus par cette approche ont des allures similaires à ceux produits par Pytmosph3R, mais des différences affectent toutes les bandes d'observation, et tout particulièrement celles des molécules les plus hétérogènes : le CO_2 et le CH_4 . Non seulement elles sont presque tout le temps proches ou supérieures au niveau de bruit stellaire, mais elles peuvent excéder des centaines, voire le millier de ppm pour les bandes du CO_2 . Les longueurs d'onde les plus affectées ne correspondent pas aux maximums des bandes mais à leurs ailes. Les longueurs d'onde proches du pic d'absorption sont en effet beaucoup plus sensibles aux températures, mais aussi à

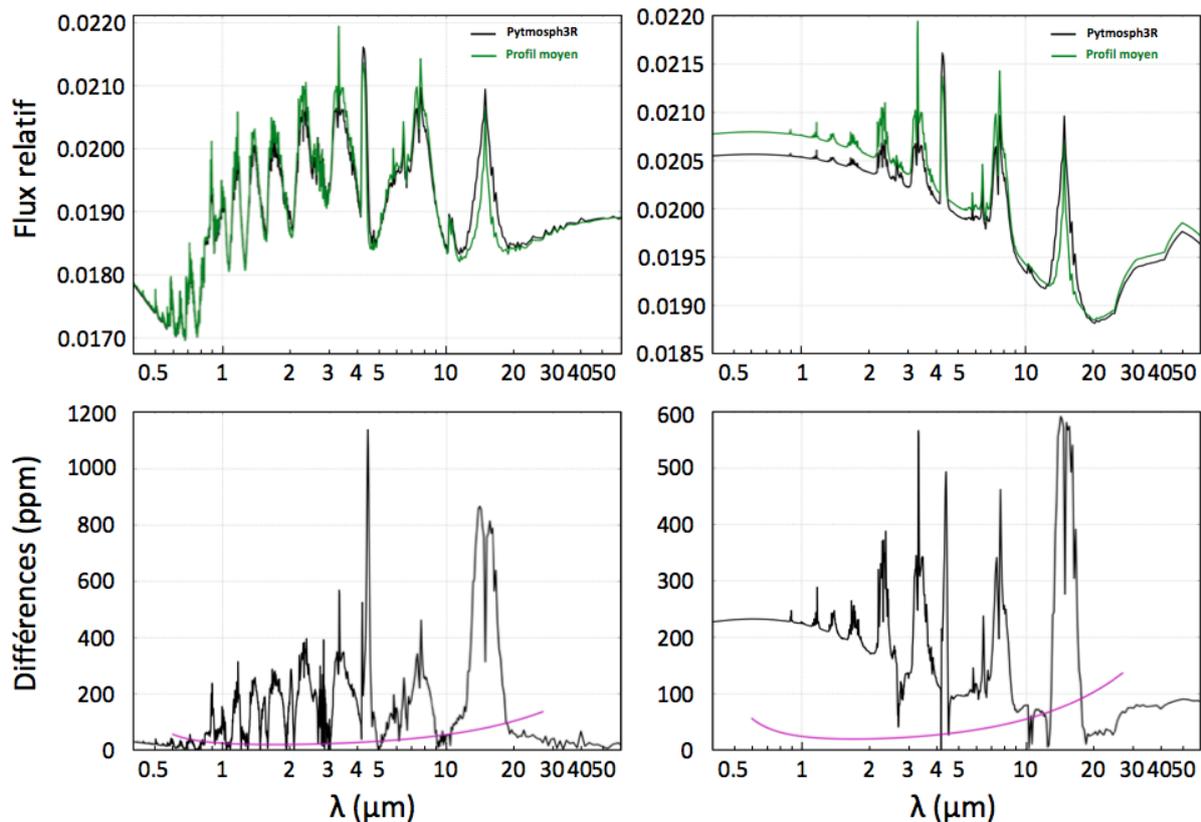


Figure 4.4: Comparaison entre la méthode du profil moyen et les spectres Pytmosph3R. À gauche : en haut : superposition du spectre en transmission obtenu par la méthode (en vert) et du spectre Pytmosph3R (en noir) à partir de la simulation de GJ1214 b en l'absence de diffusion de Mie ; en bas : différences entre les spectres exprimées en ppm. À droite : en haut : superposition du spectre en transmission obtenu par la méthode (en vert) et du spectre Pytmosph3R (en noir) à partir de la simulation de GJ 1214 b en tenant compte de la diffusion de Mie des nuages de KCl et de ZnS ; en bas : différences entre les spectres exprimées en ppm. Les courbes magenta donnent l'ordre de grandeur en fonction de la longueur d'onde du bruit de photon de GJ 1214 pour 1h30 d'intégration, des instruments semblables à ceux du JWST et une résolution $R = 100$.

la pression que le pic lui-même, et leurs déformations sur le spectre trahissent l'absence d'un fort mixage en couples (P, T). Le spectre de Pytmosph3R est le résultat de la contribution de chaque cellule traversée par les rayons stellaires qui ne sont pas totalement absorbés et est issu d'une grande diversité de couples (P, T) aux contributions variables, tandis que le spectre obtenu à partir moyenne des profils souffre d'une variété beaucoup plus faible et ne repose finalement que sur une dizaine d'entre eux, contre au moins autant mais multiplié par le N_{θ} . Cette méthode n'est pas adaptée à la génération d'observables fiables dans le cas d'une atmosphère présentant des hétérogénéités azimutales ou tangentielles non négligeables.

Les mêmes remarques peuvent être formulées en présence de nuages, ces derniers étant eux-aussi très affectés dans le visible, le très proche infra-rouge et les infra-rouges lointains. L'essentiel des différences constatées dans le visible et le proche infra-rouge découlent de la position non représentative des nuages lorsque nous moyennons nos profils. Nous retrouvons dans l'infra-rouge, seule gamme dans laquelle il peut s'exprimer, les différences liées au moléculaire. Toutefois, elles sont amoindries par rapport à la comparaison que nous avons effectuée en l'absence de diffusion de Mie. Pour reprendre notre

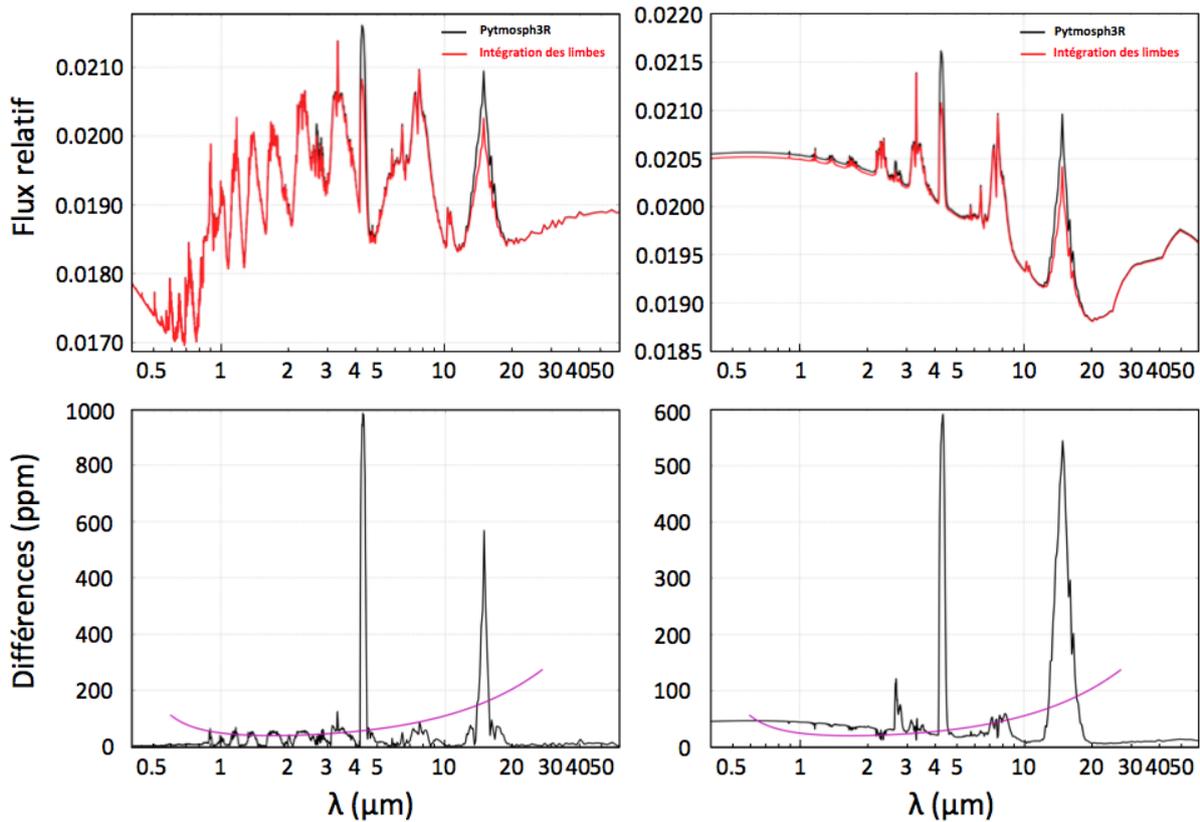


Figure 4.5: Comparaison entre la méthode d'intégration des spectres 1D obtenus à partir des profils aux limbes et les spectres Pytmosph3R. À gauche : en haut : superposition du spectre en transmission obtenu par la méthode (en rouge) et du spectre Pytmosph3R (en noir) à partir de la simulation de GJ 1214 b en l'absence de diffusion de Mie ; en bas : différences entre les spectres exprimées en ppm. À droite : en haut, superposition du spectre en transmission obtenu par la méthode (en rouge) et du spectre Pytmosph3R (en noir) à partir de la simulation de GJ 1214 b en tenant compte de la diffusion de Mie des nuages de KCl et de ZnS, en bas, différences entre les spectres exprimées en ppm. Les courbes magenta donnent l'ordre de grandeur en fonction de la longueur d'onde du bruit de photon de GJ 1214 pour 1h30 d'intégration, des instruments semblables à ceux du JWST et une résolution $R = 100$.

exemple, les ailes des bandes d'absorption, et tout particulièrement celles du CO₂, étant de plus faibles amplitudes, le poids de la contribution de Mie sur leurs intensités s'en voit aussi plus important. Par conséquent, à diffusion de Mie assimilable dans les gammes de ces deux bandes, les ailes sont plus fortement ré-haussées dans le cas moyenné, car plus serrées, que dans le cas Pytmosph3R, et les différences s'en voient plus faibles. Si on regarde les pics eux-mêmes, les nuages n'ont aucune influence sur eux puisque les contributions de Mie y sont négligeables (à quelques ppm près). Quelle que soit la gamme spectrale, les écarts entre les deux spectres sont beaucoup trop importantes pour ne pas être détectables lors de l'inversion.

La qualité médiocre des spectres générés à partir d'un profil moyen résulte de la présence d'hétérogénéités azimutales et/ou tangentielles, et étant donné les objets que nous allons étudier, nous ne pouvons pas nous en satisfaire. Nous déconseillons donc cette méthode de génération des spectres lorsque la simulation GCM est particulièrement hétérogène (de manière azimutale et tangentielle), et notamment pour des simulations d'exoplanètes tempérées ou chaudes et en rotation synchrone.

Moyenne des spectres 1D obtenus pour chaque colonne du terminateur

La Figure 4.7 illustre quant à elle les spectres obtenus au moyen de la deuxième méthode, avec ou sans nuage toujours, ainsi que les différences en ppm avec le spectre généré par Pytmosph3R. Ce qui est frappant ce sont les allures très proches entre les deux courbes. Il ne fait aucun doute que dans ce cas de figure, cette technique est beaucoup plus fidèle et efficace que la précédente. Sur l'ensemble de la gamme spectrale, et au vu du set de sections efficaces utilisé, les deux spectres sont presque assimilables car 97% des points ont une différence inférieure au bruit de photon de GJ 1214 (contre seulement 15% avec la technique précédente). Les 3% restant ne sont pas à négliger pour autant car ils ne sont pas anodins et une fois de plus, concernent essentiellement le dioxyde de carbone. Cette technique est excellente pour tenir compte des hétérogénéités azimutales et rendre compte par exemple de l'appauvrissement en CO₂ du côté Est de la simulation (voir Figure 4.3) ou de l'enrichissement en CH₄ découlant de l'équilibre thermodynamique. Néanmoins, de par son approche, elle ignore complètement les hétérogénéités tangentielles plus évidentes à percevoir sur les coupes équatoriales de Figure 4.3. Ce sont tout de même des différences de plusieurs centaines de ppm, 600 pour la bande à 4,27 μm et presque 1000 ppm pour celle à 14,7 μm . Et même si elles sont légèrement atténuées en tenant compte de la diffusion de Mie, elles restent proches de 500 - 600 ppm. De tels écarts auront très probablement des conséquences sur l'inversion de ces spectres, ce que nous mettrons en évidence dans le prochain paragraphe (§ 4.3).

Outre les écarts les plus spectaculaires, si les spectres en l'absence de diffusion de Mie sont relativement représentatifs, ils le sont beaucoup moins du moment où nous introduisons l'absorption des aérosols. Nous passons de 97 % des points en dessous du bruit de photon à 17 % seulement, même si 91 % d'entre eux restent à moins 2 fois ce bruit. Toute la gamme 0,6 - 3,7 μm , absolument essentielle lors de l'inversion, en particulier avec le set *10wno* pour lequel la résolution est proportionnelle au nombre d'onde, n'est plus identifiable au spectre global de Pytmosph3R. Tau-REx n'est actuellement pas capable de prendre en compte efficacement la diffusion de Mie par les aérosols, nous n'aurons donc pas l'occasion de souligner ce point dans les paragraphes à venir. Il faudra toutefois le garder à l'esprit pour les prochaines mises à jour qui devraient permettre l'implémentation de la physique des nuages.

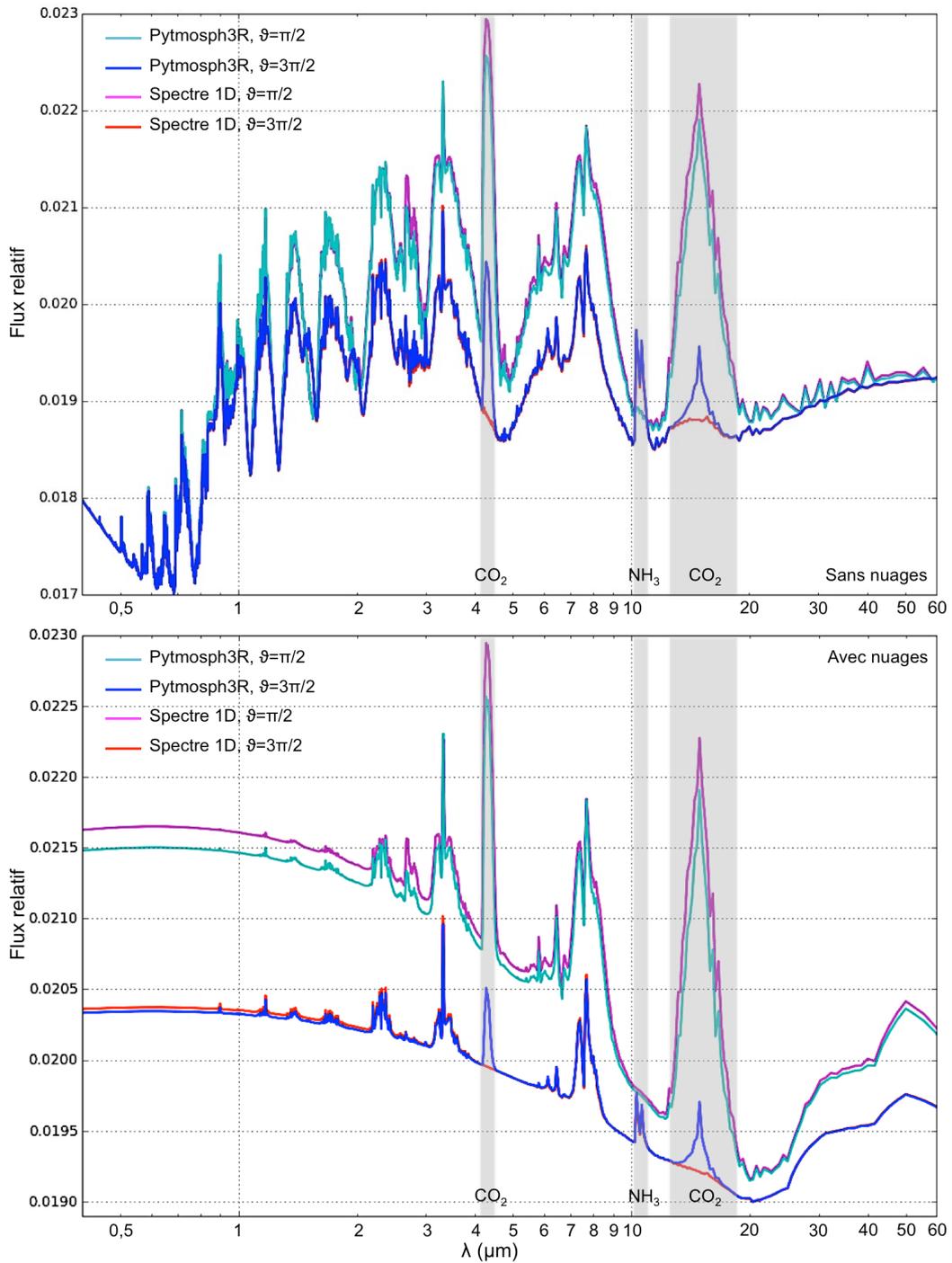


Figure 4.6: Spectres en transmission obtenus à partir de la carte de transmittance en se restreignant uniquement aux angles $\theta = \pi/2$ (courbe cyan) et $\theta = 3\pi/2$ (courbe bleu), et les spectres 1D calculés à partir des colonnes atmosphériques du terminateur aux équateurs Ouest (courbe magenta) et Est (courbe rouge). Sont surlignées les deux bandes majeurs du CO_2 et la bande à $10,4 \mu\text{m}$ du NH_3 . En haut : nous ne tenons pas compte de la diffusion de Mie. En bas : nous en tenons compte.

4.2.2 Effets azimutaux et tangentiels pour le CO₂ et NH₃

Donnons une explication aux différences obtenues avec la méthode d'intégration des spectres aux limbes. Si, au terminateur, 17 colonnes présentent une abondance en dioxyde de carbone plus faible, pesant sur la moyenne des spectres à presque 20% dans l'expression des bandes de la molécule, cet appauvrissement devient rapidement moins marquée lorsqu'on s'en écarte. En s'enfonçant vers le côté jour, les abondances augmentent sur 4 à 12 ordres de grandeur et nous nous retrouvons typiquement dans un cas de figure où l'argumentation, reposant sur un sous-parcours centré sur le terminateur et portant l'essentiel de l'absorption du parcours, est complètement fausse. Toujours au terminateur, dans cette région de latitude, le sous-parcours central représente entre moins de 1% et 65% de la profondeur optique totale associée au dioxyde de carbone. Pire encore, la molécule ne contribue même pas à un 10 000ème de la profondeur optique totale. pour appuyer nos propos, nous avons représenté sur la Figure 4.6 :

- le spectre en transmission obtenu avec la colonne à l'équateur Est de la simulation (rouge)
- le même spectre mais à partir de l'angle $\theta = 3\pi/2$ de la carte de transmittance de Pytmosph3R (bleu), correspondant à la section de cylindre associée à l'équateur Est
- le spectre en transmission obtenu avec la colonne à l'équateur Ouest de la simulation (magenta)
- le même spectre mais à partir de l'angle $\theta = \pi/2$ de la carte de transmittance de Pytmosph3R (cyan), correspondant à la section de cylindre associée à l'équateur Ouest.

Comme nous pouvons le constater, en ne retenant que la colonne du terminateur, tout se passe comme si le dioxyde de carbone était absent du côté Est de l'exoplanète, alors qu'en tenant compte de l'ensemble du parcours au sein de la simulation, le CO₂ s'exprime tout de même par le biais des sous-parcours plus proches ou plus profonds sur la ligne de visée. L'effet est inversé d'ailleurs du côté Ouest puisque la colonne à l'équateur retient une abondance très importante alors que, comme nous pouvons le voir sur la coupe équatoriale de Figure 4.3, le côté nuit de la simulation est largement appauvri. Le spectre 1D correspondant surestime donc la quantité de CO₂ et il en résulte deux bandes, centrées sur 4,27 μm et 14,7 μm , plus intenses. Ces deux effets liés aux hétérogénéités tangentielles et de nature compositionnelle sont spectaculaires pour cette molécule.

Sur cette même figure, nous avons également surligné une bande de l'ammoniac qui a un comportement très différent suivant qu'on se place d'un côté ou de l'autre de l'atmosphère. La bande centrée à 10,92 μm est la seule de la molécule à dominer le spectre en l'absence de nuages. Les coupes méridionale et équatoriale montrent que la molécule subit localement, dans la région Est de l'atmosphère, une augmentation non négligeable de son abondance. Il s'agit d'une région très fine qui enrobe l'isotherme, présente uniquement de ce côté, et qui persiste autour du terminateur. La température y avoisine les 460 K, correspondant à un équilibre thermodynamique décalé vers la dissociation du diazote et la formation de l'ammoniac. C'est pour cette raison que la bande existe sur les spectres du côté Est mais pas sur ceux du côté Ouest, où elle est écartée par l'eau et le méthane. Comme cette zone d'accumulation du NH₃ s'étale sur un tiers du terminateur, elle subsiste dans le spectre d'absorption total mais est moins marquée. Comme nous sommes face à une hétérogénéité de composition inverse à celle du CO₂ avec une région cette fois-ci localement plus abondante autour du terminateur, elle n'a d'effet que d'un point de vue azimutal puisque les sous-parcours dominants dans le transfert radiatif sont bien ceux centrés sur le terminateur. Les hétérogénéités tangentielles que l'on pourrait s'attendre à observer du fait de l'appauvrissement général de l'atmosphère en dehors de la région précitée sont totalement perdues, d'autant plus que la molécule ne domine presque jamais le spectre et sa signature est masquée par celles

des autres molécules. Ces mêmes remarques s'appliquent au-delà de 20 microns, zone spectrale résultant des contributions rotationnelles de H_2O , CH_4 et NH_3 . L'aspect lissé du spectre côté Est résulte de la domination nette de l'ammoniac sur ces deux consoeurs qui ont une signature plus dentelée dans cette gamme que l'on remarque parfaitement sur le spectre côté Ouest.

À noter que ces effets sur les spectres en transmission ne sont visibles dans le cas de cette simulation que parce que les conditions le permettaient. Le CO_2 est la molécule la plus hétérogène de la composition atmosphérique mais uniquement parce que nous nous sommes placés à l'équilibre thermodynamique et que ses abondances s'effondrent à basse température. Effondrement qui ne pourrait probablement pas se concrétiser si nous tenions compte de la cinétique des réactions chimiques et des processus dynamiques de mélange. C'est aussi la molécule qui présente les deux bandes d'absorption les plus fortes et par conséquent, les plus sensibles aux variations de température et de composition. Dans le cas de NH_3 , les conditions nous sont là encore très favorables parce que la région d'enrichissement dont nous avons parlé se localise exactement dans la zone signataire d'un point de vue radiatif et parce que c'est l'unique bande qui s'exprime malgré la présence de l'eau et du méthane. Elle résulte également des cellules anti-Hadley (Charnay et al. 2015) amenant dans cette région de l'air aux températures propices à la génération des molécules à partir du N_2 . La simulation ayant été réalisée en présence des nuages, se focaliser sur le moléculaire n'a de sens que dans le cadre de l'étude que nous sommes en train de réaliser et il convient donc de garder à l'esprit l'ajout ou la disparition des effets lorsque nous tenons compte de la diffusion de Mie. La contribution de l'ammoniac dans le spectre, par exemple, est alors totalement effacée, ainsi que les effets liés à ses hétérogénéités.

4.2.3 Effets tangentiels des aérosols

Comme nous l'avons fait remarquer, lorsque nous prenons en compte la diffusion de Mie, la méthode d'intégration des limbes n'est plus aussi fidèle et induit des biais systématiques plus gênants. Pour comprendre les différences que l'on peut noter ici, nous nous référons de nouveau au coupes méridionales et équatoriales de la Figure 4.3. On y remarque une répartition hétérogène azimutale assez symétrique du terminateur par rapport au plan équatorial, particulièrement marquée à l'Est du fait de l'air froid du côté nuit qui s'enfonce dans le côté jour et ne se réchauffe qu'un peu plus profondément. Ce refroidissement du côté Est, déjà responsable des hétérogénéités précitées, induit une contraction de l'atmosphère, et des conditions paramétriques réduisant la région de condensation. Ceci explique par ailleurs l'énorme différence entre les spectres obtenus à l'Est et à l'Ouest (voir Figure 4.6), mais cet effet, de par sa nature azimutale, n'explique pas les différences entre les deux méthodes de génération de spectre.

Si maintenant nous observons de plus près les courbes de la Figure 4.6 :

- Le côté Est ne semble pas subir d'effets tangentiels, à l'exception de ceux liés à CO_2 et NH_3 dont nous avons déjà discutés (§ 4.2.2). Les gammes spectrales pour lesquelles les nuages dominent l'absorption montrent des flux relatifs presque identiques.
- Ce n'est plus le cas du côté Ouest pour lequel nous notons de gros écarts dans toutes ces gammes, en particulier dans le visible et le proche IR.

En observant de plus près la répartition de ces nuages de ZnS et de KCl sur les coupes équatoriales, mais aussi directement dans la simulation, on se rend compte que les fractions massiques suivent les déformations spatiales induites par la température, ce qui paraît logique étant donné que la condensation dépend de la pression et de la température. Le côté jour étant enflé, les particules peuvent condenser sur une région plus ample, et inversement pour le côté froid. Cette forme en champignon où la tête serait

du côté jour de l'atmosphère altère les profils qui ne peuvent plus s'identifier à celui du terminateur, les nuages subsistent plus haut quand on s'enfonce dans le côté jour et se concentrent à une altitude proche de celle du terminateur du côté nuit. À partir de cette simple remarque, on pourrait s'attendre à ce que le spectre 1D donne des flux relatifs plus faible que celui de Pytmosph3R, mais nous constatons tout l'inverse. La carte est en effet trompeuse car elle donne l'impression que la haute atmosphère présente une très faible quantité d'aérosols. Or elles ne sont que 2 à 10 fois inférieures : cette partie de l'atmosphère n'est donc pas à pas négliger. Nous notons sur les coupes que le KCl présente une très forte hétérogénéité en haute altitude. Les représentations limitent la fraction massique à 10^{-7} kg/kg(air) pour mieux percevoir la répartition globale, raison pour laquelle le côté chaud apparaît blanc pour cet aérosol. Les fractions massiques impliquées dans cette région varient en réalité entre 10^{-8} et 10^{-14} . Donc, si le profil 1D sous-estime l'altitude des nuages lorsqu'on est proche du toit du modèle, elle surestime les derniers couches et toute la partie extrapolée en fixant sa fraction massique sur une valeur à 5 - 9 ordres de grandeur. Dans le cas du ZnS, le constat est le même mais à bien moindre mesure et nous notons une dissymétrie par rapport à l'axe d'observation plutôt que par rapport à l'axe Est-Ouest. Du point de vue du transfert radiatif, les nuages de KCl sont dominants dans le visible et le proche IR avant d'avoir une contribution à peu près semblable à celle de ZnS à partir de $4 \mu\text{m}$. C'est donc la haute atmosphère, ses hétérogénéités tangentiels, et essentiellement celle des particules de KCl, qui sont à l'origine de l'écart constaté du côté Ouest.

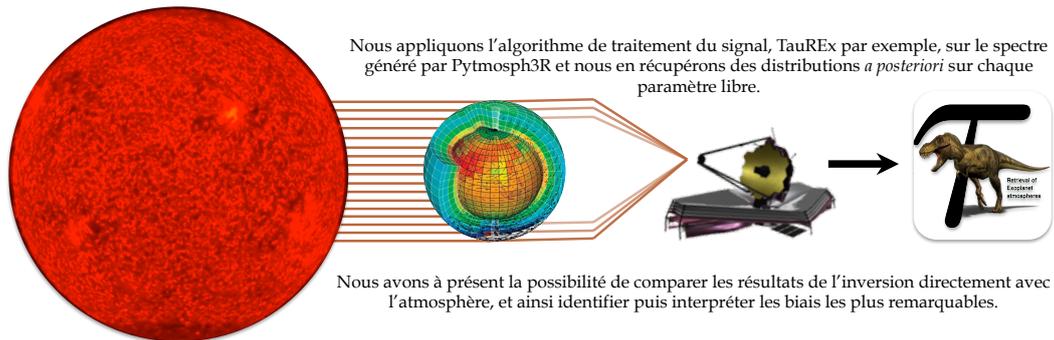
Le côté Est, quant à lui, est beaucoup moins marqué par ces effets tangentiels car elles y sont aussi moins intenses. L'air froid qui pénètre dans le côté jour permet aussi aux nuages d'y subsister plus profondément. La région d'appauvrissement apparaît pour un angle légèrement plus élevé (d'une douzaine de degrés), un angle donc proche de l'angle d'ouverture, et a donc un impact plus faible sur les spectres. L'écart des fractions massiques entre la haute atmosphère et la plus basse est aussi un peu plus net puisqu'il y est 10 fois inférieur alors qu'il ne l'était que d'environ 2 fois du côté Ouest. Le spectre 1D reste donc toujours supérieur au spectre Pytmosph3R mais l'écart est clairement moindre.

Pour conclure, les hétérogénéités atmosphériques ont un impact réel sur les spectres en transmission qu'il ne faut pas négliger. Dans la volonté de confronter des simulations solutions à des observations réelles, en fonction de l'intensité de ces hétérogénéités, on privilégiera l'une de ces trois méthodes de génération de spectre :

- le profil moyen lorsque l'atmosphère est presque homogène ;
- l'intégration des limbes lorsque les hétérogénéités sont essentiellement de natures azimutales ;
- Pytmosph3R lorsqu'elles sont à la fois azimutales et tangentiels, ou seulement tangentiels.

4.3 Résultats de l'inversion de la simulation de GJ 1214 b

En discutant des spectres obtenus à partir de Pytmosph3R nous avons identifié la plupart des types d'hétérogénéités atmosphériques que l'on pouvait rencontrer, ainsi que des effets qui leurs sont associés. Il s'agirait à présent d'être capable de les retrouver dans les résultats de l'inversion par Tau-REx. Nous allons voir que certain d'entre eux ne s'expriment finalement que très peu tandis que d'autres auront une signature nette. Etant donné la complexité de la simulation, nous allons éprouver des difficultés à estimer la contribution isolée de chaque type de biais et à les lier aux écarts constatés, mais nous fournirons toujours une ou plusieurs explications.



4.3.1 Paramétrisation de Tau-REx

Ci-dessous nous rappelons les caractéristiques principales utilisées par Pytmosph3R et leurs correspondances avec Tau-REx :

- Le rayon planétaire fixé par la simulation est de $R_p = 1,7 \cdot 10^7$ m. Le rayon moyen à 10 bar quant à lui est à $1,7225 \cdot 10^7$ m environ. Nous avons donc entré dans Tau-REx ce rayon pour une pression de surface de 10^6 Pa.
- La simulation comprend 8 molécules : H_2 , He, H_2O , CH_4 , NH_3 , N_2 , CO_2 et CO, mais seules H_2O , CH_4 , NH_3 , CO_2 et CO sont des espèces optiquement actives. H_2 , He et N_2 sont inactives, les abondances des deux premières étant déterminées à partir de la conservation de la matière et d'un ratio He/ H_2 , tandis que l'abondance en diazote restera libre.
- Le ratio He/ H_2 est assimilé à celui d'une étoile de type solaire à savoir 0,17647 et est fixé.
- La gravité de surface à 10 bar est déduite de la masse de GJ 1214 b et de son rayon à 10 Barbar, soit $g_0 = 8,93$ m/s².
- La pression du toit atmosphérique est fixée à 10^{-6} Pa.
- Le nombre de couches est identique à celui de la grille sphérique de Pytmosph3R, soit 100 couches.
- Nous ne tiendrons pas compte de la diffusion de Mie lors de la génération du spectre qui sera inversé par Tau-REx.
- Nous utilisons la version *Tau-REx* de la construction du profil vertical pour limiter les biais systématiques, et la version discrète du transfert radiatif, conformément à ce que nous avons préconisé dans la section précédente.
- GJ 1214 a pour caractéristiques $R_s = 0,20647R_\star$ et $T_{\text{eff}} = 3000$ K, nous considérons qu'elle est localisée à 42,5 a.l. de l'observateur.
- Concernant les sources d'opacité, seul le continuum du couple He/ H_2 est pris en compte lors de la génération du spectre qui sera inversé par Tau-REx. Dans le cas de GJ 1214 b, la contribution des autres sources de continuum est négligeable.
- L'inversion a été effectuée avec le set de section efficace 10_{wno} à résolution variable et de $\Delta\sigma = 10$ cm⁻¹.

Table 4.2: Résultats de l'inversion de la simulation de GJ 1214 b (Charnay et al. 2015).

Paramètre libre	R_p	T	$\chi_{\text{H}_2\text{O}}$	χ_{NH_3}	χ_{CO_2}	χ_{CO}	χ_{N_2}	χ_{CH_4}
Unités	R_J	K	-	-	-	-	-	-
Médiane	0,263256	485,42	-1,392	-3,488	-1,948	-8,557	-8,129	-1,557
σ_+	$4,9 \cdot 10^{-5}$	2,37	0,010	0,014	0,011	2,494	2,574	0,010
σ_-	$4,6 \cdot 10^{-5}$	2,27	0,010	0,014	0,011	2,371	2,612	0,010

- Nous optons pour une inversion à 9 paramètres libres : R_p , T, $\chi_{\text{H}_2\text{O}}$, χ_{CO_2} , χ_{CH_4} , χ_{NH_3} , χ_{N_2} , χ_{CO_2} , et χ_{CO} . Les distributions des fractions molaires en H_2 et He seront déduites de celles des autres molécules par conservation de la matière et la connaissance du ratio He/ H_2 et il en va de même pour le poids moléculaire moyen.
- Nous avons utilisé les distributions *a priori* suivantes :
 - le rayon planétaire R_p : fonction porte bornée [0,1 ; 0,4]
 - la température T : fonction porte bornée [200 ; 1000]
 - les fractions molaires χ_i : fonction porte bornée [10^{-12} ; 1]
 - le poids moléculaire moyen μ : fonction porte bornée [0 ; 0,4]
- Nous effectuons l'inversion sur la gamme spectrale 1 - 10 μm préconisée par l'équipe de University College London sur un objet comme GJ 1214 b et avec un instrument tel que le JWST. Nous verrons que la gamme spectrale peut s'avérer importante.

Une fois Pytmosph3R exécuté sur la simulation de (Charnay et al. 2015), nous soumettons le résultat à Tau-REx. Pour bruite le spectre et lui associer des barres d'erreur, nous reprenons l'expression du bruit de photon stellaire introduit dans le chapitre précédent (voir § 3.4) et nous adaptons le calcul au set de section efficace qui est utilisé. Nous utilisons toujours les caractéristiques instrument du JWST mais nous en ignorons la résolution spectrale pour appliquer celle du set 10_{wno} , qui est variable. Nous appliquons alors un bruit gaussien sur le spectre à partir de ce que nous obtenons et que nous avons identifié aux barres d'erreur associées.

4.3.2 Interprétation des spectres et des distributions *a posteriori*

La Figure 4.7 est une représentation en triangles des distributions *a posteriori* des 9 paramètres libres et du poids moléculaire moyen d'une solution proposée par Tau-REx. Le tableau Table 5.1 donne les valeurs médianes ainsi que les écarts-type de ces distributions. Enfin, la Figure 4.9 propose la superposition du spectre solution obtenu par Tau-REx au spectre d'entrée dans la gamme 1-10 microns ainsi que les différences absolues entre eux. Nous commencerons par comparer les deux spectres, et pour cela, nous devons visualiser les courbes de contribution au spectre (Figure 4.8).

Spectre solution et spectre d'entrée, comparaisons et prédictions

Comme nous pouvons le constater sur la Figure 4.8, les molécules les plus représentées sont finalement le méthane et l'eau, majoritairement dans le proche IR, puis l'ammoniac et enfin le dioxyde de carbone. Si nous devons quantifier les contributions signataires de chacune des molécules sur le spectre final, CH_4 contribuerait à plus de 89 % de son identité, H_2O à 5 %, NH_3 à 1 %, CO_2 à 4 % et CO à moins de 1 %. Il n'est donc pas étonnant de constater une bonne correspondance entre les spectres

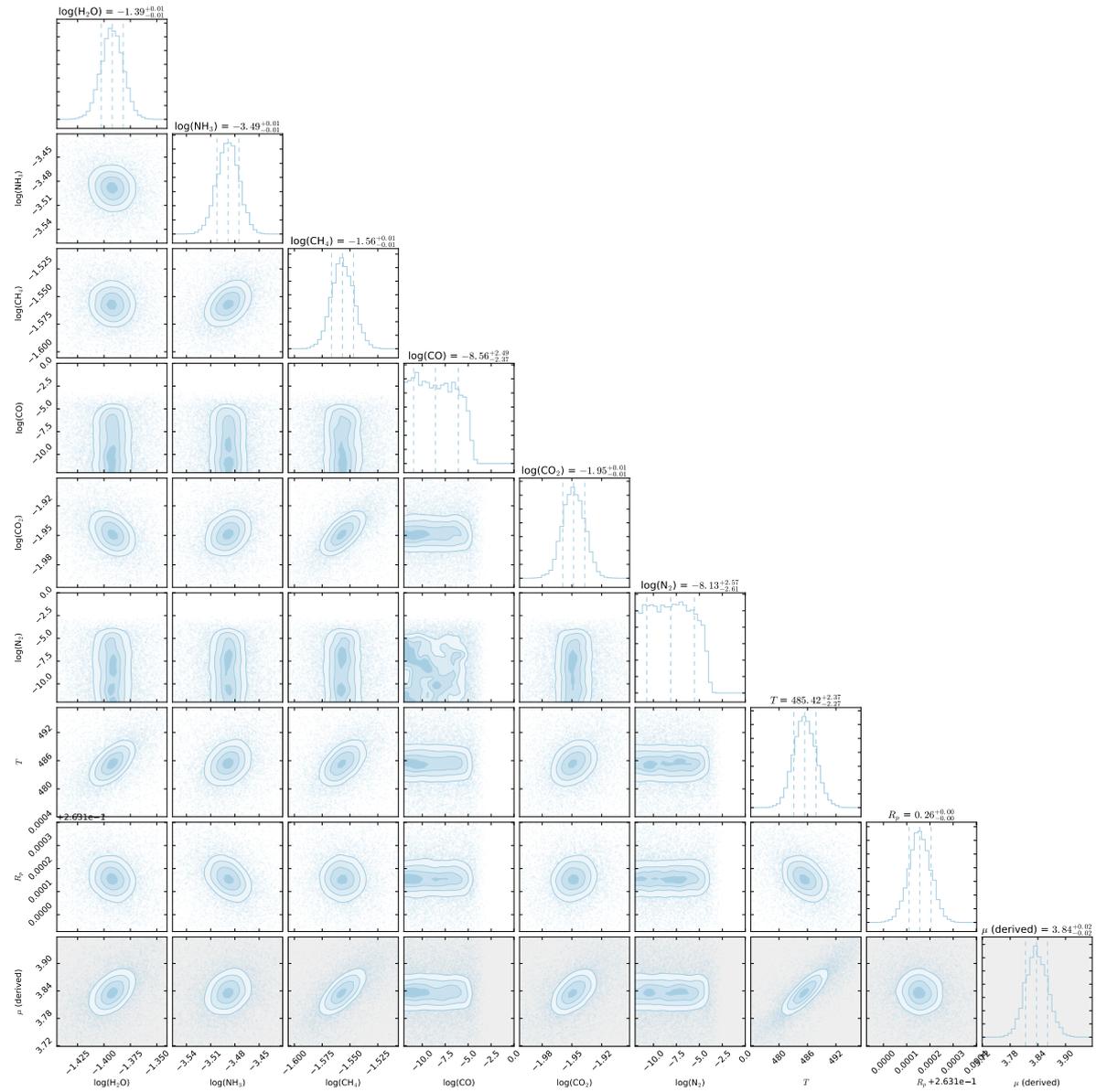


Figure 4.7: Distributions *a posteriori* résultant de l'inversion du spectre de GJ 1214 b par Tau-REx. Les abondances sont exprimées par leurs valeurs logarithmiques, le rayon à 10 bar en rayon jupiterrien et le poids moléculaire moyen en unité atomique.

sur la majorité des gammes dominées par le méthane et l'eau (Figure 4.9). Le χ^2 réduit associé à cette solution est de 1,54, ce qui est plutôt bon étant donné l'ensemble des approximations faites dans le cadre de l'inversion. Si nous excluons la bande du CO_2 , il est même de 1,48. Commentons les spectres pour chaque molécule :

- **CH₄**: Le méthane domine le spectre, et la contrainte du spectre étant globalement de bonne sur l'ensemble des gammes qui la concerne, nous nous attendons à retourner une abondance plus cohérente avec celles de la simulation. Si en effet les bandes les moins intenses sont bien reproduites, les pics sondant plus haut dans l'atmosphère, et notamment à 3,32 microns, sont quant à eux beaucoup moins fidèles au spectre d'origine, c'est d'ailleurs à cette longueur d'onde que la différence est la plus remarquable (plus de 400 ppm).
- **H₂O** : Lorsque le méthane ou le dioxyde de carbone n'imposent pas de manière franche leurs signatures, l'eau s'impose à son tour ou constitue dans la majorité des longueurs d'onde la contribution manquante la plus importante. Sur les deux bandes qui la représentent le mieux, autour de 2,70 μm et 1,94 μm , nous constatons une très bonne correspondance. Nous devrions donc aboutir à une bonne contrainte de son abondance.
- **CO₂**: Bien que le dioxyde de carbone ne présente qu'une raie dans la gamme 1 - 10 microns sur laquelle nous avons effectué l'inversion, il s'agit également de la plus absorbante du spectre, ce qui, *a priori*, devrait en faciliter la contrainte par l'algorithme. Il faut toutefois garder à l'esprit que la résolution du set 10_{wno} décroît inversement proportionnellement avec la longueur d'onde et que cette raie à 4,27 microns est donc peu résolue en comparaison avec toutes les bandes du méthane ou de l'eau dans la gamme 1 - 4 microns. L'algorithme a donc plus de matière à reproduire efficacement les bandes de ces deux molécules et le fait au détriment de celles qui le sont moins, minimisant ainsi au mieux le critère de vraisemblance. En conséquence, presque toutes les longueurs d'onde comprises dans la bande du CO_2 présentent une différence très supérieure à 3σ sans pour autant excéder 400 ppm. Ce n'est pas un écart catastrophique en soi, mais nous retrouvons ici l'ordre de grandeur des biais que l'on aurait pu rencontrer en utilisant les méthodes classiques de génération de spectre et nous ne pouvons pas l'ignorer.
- **CO**: Le monoxyde de carbone, quant à lui, ne présente que quelques bandes dans la gamme choisie, et qui plus est, pas assez fortes pour s'imposer sur le spectre. Tau-REx n'aura donc que très peu, voire pas du tout de matière pour en contraindre l'abondance.
- **NH₃**: En ce qui concerne l'ammoniac, moins contributeur et ne s'imposant jamais en comparaison avec les autres molécules, à l'image du CO, nous ne pouvons pas tirer d'informations concrètes sur la seule base de ces spectres. Néanmoins, les deux molécules ne contribuent pas au spectre de la même manière, si aucune des deux n'est clairement signataire dans la gamme 1 - 10 μm , l'ammoniac a un poids certes faibles mais omniprésent sur le spectre, tandis que le monoxyde de carbone n'a de poids mesurable que pour sa bande à 4,6 μm , bande mixée avec des contributions équivalente de CO_2 , CH_4 et H_2O . Si sa contrainte risque de s'avérer compliquée, elle devrait être plus aisée que pour CO.
- **N₂** : Le diazote n'étant pas une molécule est optiquement inactive, sa présence n'intervient que dans la diffusion Rayleigh, qui ne s'exprime pas dans cette gamme, et sur le poids moléculaire moyen. Nous ne savons donc pas comment Tau-REx va utiliser son abondance.

Si nous devons conclure sur l'interprétation seule des spectres, nous pourrions dire que l'eau, le méthane et à moindre mesure, le dioxyde de carbone semblent être assez bien contraintes par Tau-REx, et nous nous attendons à trouver des abondances proches de celles rencontrées dans la simulation.

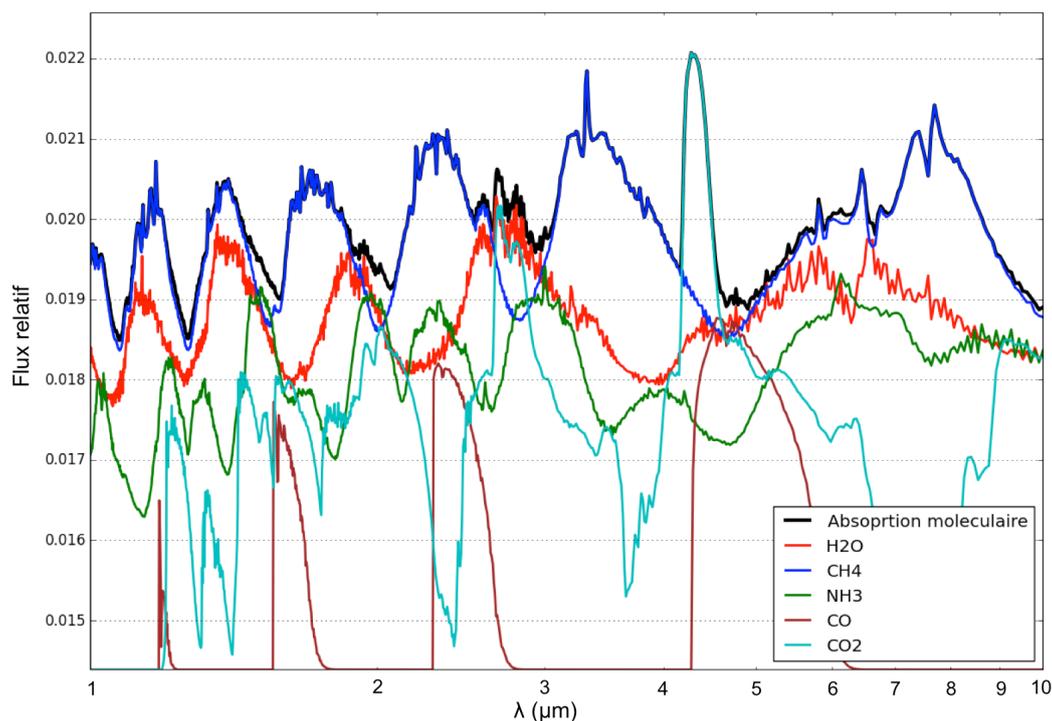


Figure 4.8: Spectre en transmission de la simulation atmosphérique de GJ 1214 b entre 1 et 10 microns et ne tenant pas compte de la diffusion de Mie. Sont superposées les contributions associées à chaque molécule, le Rayleigh et le continuum n'ont aucun effet notable sur cette gamme spectrale.

Les molécules moins représentées ou n'intervenant pas dans l'absorption moléculaire, l'ammoniac, le monoxyde de carbone et le diazote, devraient être plus difficile à contraindre en termes d'abondance. Nous avons constaté deux grandes divergences : une surestimation de la bande à $3,32 \mu\text{m}$ du méthane et une sous-estimation de la bande du dioxyde de carbone. Etant donné la bonne correspondance du reste du spectre solution avec le spectre d'entrée, nous sommes peut-être face à une difficulté rencontrée par Tau-REx à trouver les compromis nécessaires sur les paramètres atmosphériques pour tenir compte de certains types d'hétérogénéités. Dans quel cas, cet exemple d'inversion mettrait en évidence la signature de biais naissant de celles-ci, ce que nous cherchions justement à illustrer. Nous allons tenter d'en donner une explication dans le paragraphe suivant (§ 4.3.3) lorsque nous tenterons de comparer les distributions *a posteriori* des abondances avec des valeurs concrètes.

Commentaires généraux sur les distributions *a posteriori*

Comparons à présent les valeurs médianes des distributions *a posteriori* des molécules avec les abondances rencontrées par les rayons empreintes. Qualitativement toujours, nous trouvons des ordres de grandeur assez similaires, du moins toujours compris entre les valeurs extrêmes de la simulation pour H_2O , CH_4 , NH_3 et CO_2 . Comme nous pouvons le constater, et comme nous l'avions pressenti rien qu'à l'observation des spectres, si la plupart des paramètres sont finalement assez bien contraints par Tau-REx, l'algorithme a éprouvé de fortes difficultés à converger sur les abondances en N_2 et en CO . Les distributions s'étalent sur plusieurs ordres de grandeur dans les deux cas, tout en étant limitées par les bornes inférieures fixées aux fractions molaires à 10^{-12} . Dans le cas du diazote, la molécule étant inactive, l'algorithme n'en use que pour jouer sur le poids moléculaire moyen. En laissant ce paramètre

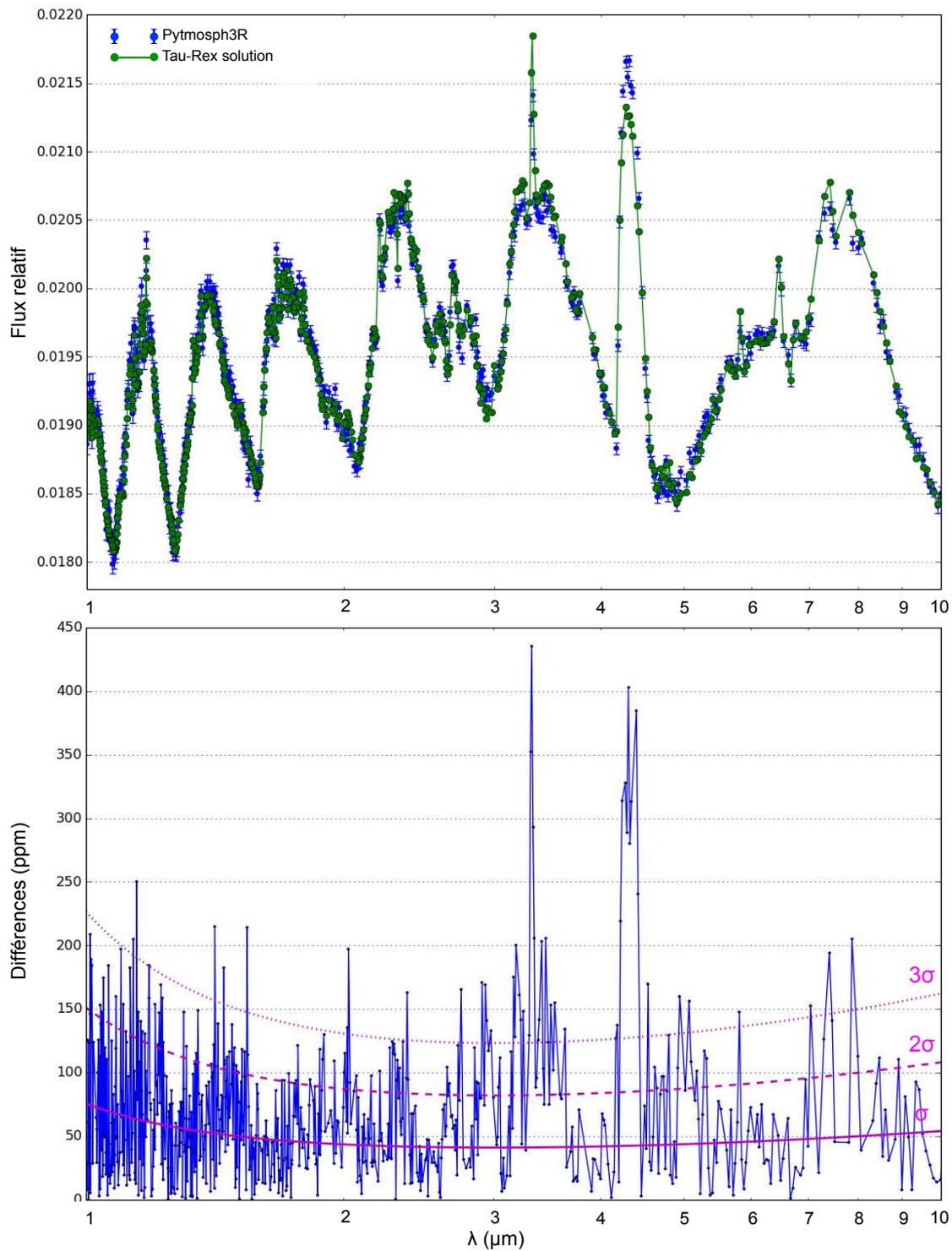


Figure 4.9: En haut : Superposition du spectre en transmission d'entrée obtenu avec Pytmosph3R (points bleus) et du spectre solution obtenu par Tau-REx après inversion dans la gamme 1-10 micron par le set 10_{wno} . En bas : Différence absolue entre les deux spectres exprimée en ppm. À titre indicatif, nous avons représenté les courbes d'erreur à 1, 2 et 3 σ (courbes magenta).

libre, nous avons finalement perdu toute information sur cette quantité qui est de plusieurs ordres de grandeur sous-évaluée par rapport à la simulation de départ. Tau-REx réagit vis-à-vis du monoxyde de carbone qui, rappelons-le, ne s'exprime pas dans le spectre, comme si l'atmosphère n'en présentait pas. Sa distribution laisse à croire que nous sommes face à une non-détection de la molécule. Les distributions *a posteriori* de ces deux molécules, bien que non contraignantes, nous offre tout de même une information forte sur leurs limites supérieures. Ainsi d'après l'algorithme, le CO ne devrait pas pouvoir avoir une abondance supérieure à $10^{-4,3}$, et le N₂ à $10^{-3,7}$, tout en gardant à l'esprit que la contrainte sur cette limite haute n'a de valeur spectroscopique que pour CO.

Outre les abondances, le rayon planétaire est quant à lui surestimé avec une déviation de presque 7% comparée à la valeur d'entrée. En soit, contraindre le rayon planétaire, que l'on doit bien comprendre comme étant le rayon à 10 bar, n'a de sens que du point de vue de la modélisation. Ce paramètre en restant libre permet de compenser des effets atmosphériques impossibles à décrire avec des modélisations aussi simplistes que celles du mode isotherme de Tau-REx. Si nous reprenons les coupes de la simulation Figure 4.2, l'atmosphère comprend une couche à plus haute température, plutôt homogène et opaque à toutes les longueurs d'onde. Seules les parties de l'atmosphère pour lesquelles la transmittance est comprise entre 0 et 1, sans être parfaitement opaques ou transparentes, s'imposent et sont finalement inversées par l'algorithme de traitement du signal, ce qui n'est jamais le cas pour cette région. Elle n'impose donc pas son empreinte sur le spectre en transmission puisqu'elle est totalement opaque, néanmoins elle le décale. Pour en tenir compte, Tau-REx compense en jouant soit sur le poids moléculaire moyen, et donc les abondances, soit sur le rayon à 10 bar. Avec un R_p plus grand mais avec une température atmosphérique plus faible (800 K en moyenne) et en modulant les abondances (notamment celles des molécules inertes) il permet non seulement de feinter la dite couche isotherme, de replacer les parties sondées aux niveaux d'altitude qui conviennent et qui se rapprochent de l'atmosphère d'origine, mais aussi d'y conserver une hauteur d'échelle cohérente avec l'extension spatiale du spectre. Une hauteur d'échelle beaucoup trop faible aura tendance à le compacter, et inversement si elle est trop grande. Avec un poids moléculaire moyen à 0,00381 a.u., une température à 485 K et un rayon à 10 bar de 0,263256 R_J, les niveaux de pression se rejoignent entre le modèle 1D et, en moyenne, la simulation 3D à 2 700 km du rayon planétaire, soit la 40ème couche de la grille Pytmosph3R, à quelques couches de la région la plus contributrice du spectre sur cette gamme.

Ces comparaisons très qualitatives offrent déjà des informations sur la manière de comprendre et de critiquer les résultats retournés par Tau-REx. Il nous faut néanmoins développer une approche plus quantitative pour tenter de dégager indices de la présence d'éventuels biais, et notamment, ceux pouvant résulter des deux divergences spectrales précédemment mentionnées.

4.3.3 Equivalent 1D, isotherme et homogène d'une simulation 3D

Si nous cherchons à interpréter plus quantitativement ces résultats, nous nous heurtons à des complications reposant sur deux points essentiels :

- L'absorption n'étant pas identique pour toutes les longueurs d'onde, la signature n'est pas portée par les mêmes cylindres atmosphériques.
- Ces cylindres sont déformés par les hétérogénéités atmosphériques et ce ne sont finalement pas les mêmes niveaux d'altitude qui sont concernés suivant l'angle θ lorsque nous tentons d'offrir une lecture synthétique des données de la simulation.

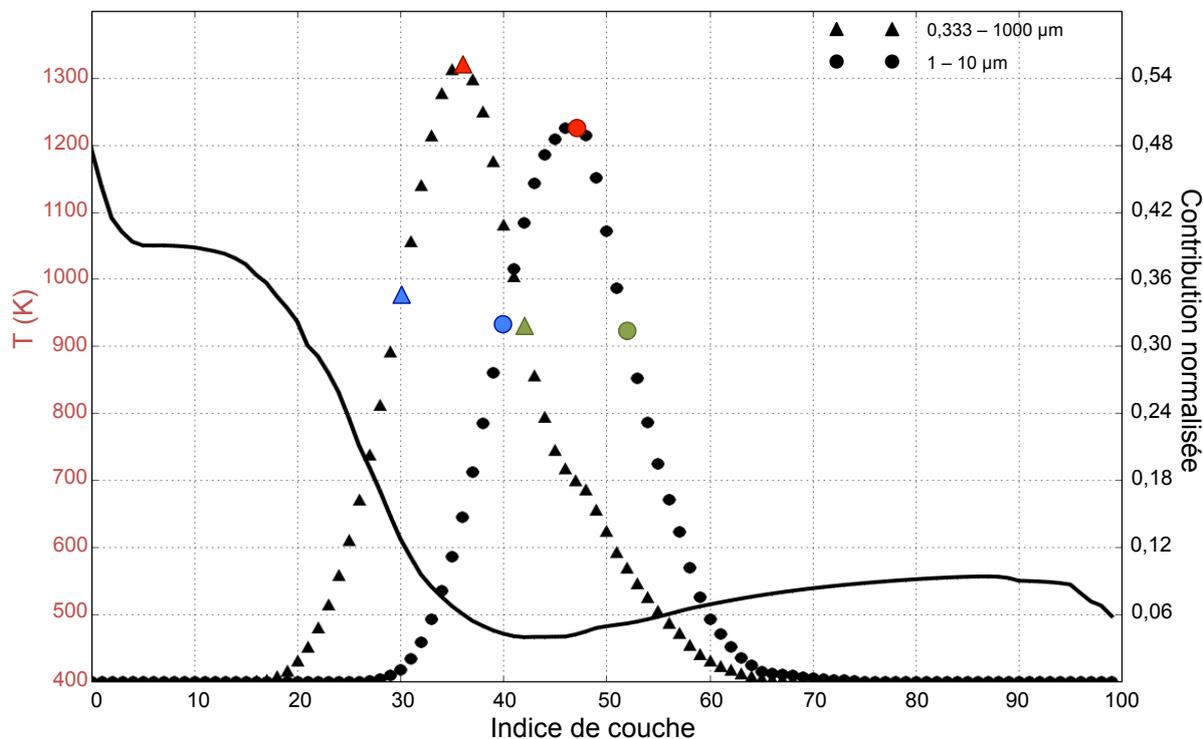


Figure 4.10: Contributions normalisées par couche pour le spectre (sans diffusion de Mie) obtenu à partir de la simulation de GJ 1214 b. Les triangles correspondent aux contributions dans toute la gamme du set 10_{wno} de sections efficaces, tandis que les ronds se cantonnent à la gamme 1 - 10 μm . Les points rouges correspondent aux couches aux médianes des distributions, ceux en verts et bleus aux écarts-types. La courbe noire donne les températures moyennes obtenues lors de la lecture synthétique de la simulation pour chaque couche.

Table 4.3: Résultats de la lecture synthétique de la simulation de GJ 1214 b (Charnay et al. 2015).

Paramètres libre	T	$\chi_{\text{H}_2\text{O}}$	$\chi_{\text{NH}_3}^*$	χ_{CO_2}	χ_{CO}	$\chi_{\text{N}_2}^*$	$\chi_{\text{CH}_4}^*$
Unités	K	-	-	-	-	-	-
Médiane [47]	468,49	-1,186	-2,309	-1,867	-1,949	-2,245	-1,471
A σ_+ [52]	477,83	-1,109	-2,355	-1,666	-1,883	-2,236	-1,559
A σ_- [40]	471,50	-1,138	-2,475	-2,007	-2,173	-2,321	-1,407
Δ (Médianes)	+16,93	-0,206	-1,179	-0,081	-6,608	-5,885	-0,086
Globale [:]	478,47	-1,206	-2,392	-1,853	-1,990	-2,287	-1,486
Δ (M[:])	+6,95	-0,186	-1,096	-0,093	-6,567	-5,842	-0,071

La Figure 4.10 illustre la contribution sur l'ensemble du spectre des cylindres concentriques réguliers formés par la maille de Pytmosph3R. Pour chaque angle θ , nous incrémentons la contribution du cylindre d'indice i_ρ de $1/(N_\theta \cdot N_b)$ chaque fois que la transmittance au point de (i_ρ, i_θ) est comprise entre un minimum (ici de 0,005) et un maximum (ici de 0,995). Nous pondérons cette contribution à la couche i_ρ par la dérivée locale de la fonction de transmittance, autrement dit par $(T_{i_\rho+1} - T_{i_\rho-1})/2$, où T serait la transmittance. En effet, les niveaux pour lesquels les variations de T sont très importantes correspondent aussi à ceux qui vont avoir le plus d'impact sur le spectre final. Nous tenons compte de ce facteur de cette manière. La contribution maximale pour le cylindre d'indice $i_{\rho,max}$ indique donc que ce dernier est le niveau le plus représenté et donc *a priori*, qu'il est celui qui contribue le plus à la signature spectrale. Nous repérons enfin le niveau médian que l'on considérera comme le niveau le plus représentatif. Dans tous les cas, ces distributions soulignent bien à nouveau que nous ne sondons qu'une partie finalement fine de l'atmosphère lorsque nous travaillons à partir de transits. À noter qu'elles sont évidemment dépendantes de la gamme spectrale considérée. Sur la Figure 4.10 nous avons représenté par des triangles la distribution associée à l'ensemble de la gamme spectrale de 10_{wno} (0,333 à 1000 microns) et par des ronds celle associée à la gamme 1 - 10 microns utilisée lors de l'inversion.

Une fois les niveaux correspondant à la valeur médiane et aux deux écarts-types de la distribution identifiés, nous pouvons tenter de comparer les résultats de l'inversion avec la simulation. Pour ce faire, nous avons adopté une méthode de moyenne pondérée sur les quantités, en l'occurrence la température et les abondances. Comme Tau-REx fonctionne en mode isotherme et iso-abondance, nous devons tenter de tirer de la simulation une température moyenne et des abondances moyennes. Si i_m est l'indice du niveau médian, alors nous ne travaillons que sur le cylindre correspondant. Pour chaque angle θ d'indice i_θ , nous récupérons les profondeurs optiques pour chaque sous-parcours $\tau_{i_\rho, i_\theta, i_x}$, et les profondeurs optiques propres à chaque molécule $\tau_{i_\rho, i_\theta, i_x, mol}$. D'un autre côté nous calculons également la profondeur optique totale sur l'ensemble du chemin optique τ_{i_ρ, i_θ} et celles propres à chaque molécules $\tau_{i_\rho, i_\theta, mol}$, ce qui va nous permettre de pondérer les quantités par l'importance des sous-parcours dans notre moyenne. Pour l'eau par exemple, nous déterminons sur ce cylindre l'abondance représentative comme :

$$\chi_m = \sum_{\lambda} \sum_{i_\theta=0}^{N_\theta} \sum_{i_x=0}^{N_x} \left(\frac{\tau_{i_\rho, i_\theta, i_x}}{\tau_{i_\rho, i_\theta}}(\lambda) \frac{\tau_{i_\rho, i_\theta, i_x, H_2O}}{\tau_{i_\rho, i_\theta}}(\lambda) \chi_{i_\rho, i_\theta, i_x, H_2O} \right) \frac{1}{X} \quad (4.1)$$

avec

$$X = \sum_{i_\theta=0}^{N_\theta} \sum_{i_x}^{N_x} \sum_{\lambda}^{N_\lambda} \tau_{i_\rho, i_\theta, i_x, H_2O} \tau_{i_\rho, i_\theta, i_x}(\lambda) \quad (4.2)$$

Multiplier l'abondance associée à un sous-parcours par le rapport des profondeurs optiques totales traduit sa contribution sur l'ensemble du chemin optique. Un sous-parcours ne contribuant que de manière négligeable à la profondeur optique totale ne doit donc pas peser dans notre moyenne, c'est comme si les rayons ne l'avaient qu'à peine traversé et qu'ils n'en avaient pas "retenu" les caractéristiques. D'un autre côté, il faut aussi tenir compte du fait qu'en fonction de la longueur d'onde, les molécules participent plus ou moins à l'absorption, raison pour laquelle nous pondérons également par le rapport des profondeurs optiques mais moléculaires cette fois-ci. Cette manière de faire permet également de mieux tenir compte des hétérogénéités azimutales et tangentielles. Typiquement, les hétérogénéités en abondance mais aussi en température font que pour certains angles, et à certaines longueurs d'ondes, les contributions à la moyenne des sous-parcours vont être très faibles, tandis que pour d'autres, accentuant le pouvoir absorbant de la dite molécule du fait de leurs propriétés, seront essentielles. Le tableau Table 4.3 donne les résultats obtenus par cette méthode. Les valeurs entre crochets indiquent les indices des cylindres correspondant tandis que les astérisques indiquent que les molécules ne sont pas totalement représentées dans la gamme retenue (1 - 10 microns).

Nous proposons également dans ce même tableau une estimation dite "Globale" des paramètres. Ces valeurs sont obtenues après calcul des quantités moyennes pour chaque cylindre de la simulation. Nous les utilisons ensuite pour générer des moyennes sur l'ensemble de l'atmosphère. Nous pondérons en conséquence les cylindres et leurs caractéristiques par la distribution de contribution Figure 4.10, ainsi, seules les couches ayant un impact fort sur les cartes de transmittance et donc, sur les spectres en transmission, s'imposent sur la moyenne. Dans le cas de cette simulation, la distribution ne s'étale que sur une trentaine de cylindres dans la gamme 1 - 10 μm , et à défaut d'utiliser la distribution de contribution comme fonction de pondération pour générer des moyennes sur l'ensemble de la couche atmosphérique sondée, nous raisonnerons dans les paragraphes à venir essentiellement par rapport à la médiane.

Concernant tout d'abord les abondances : nous retrouvons bien une totale incohérence entre les distributions *a posteriori* de Tau-REx et les quantités moyennes pour le monoxyde de carbone et le diazote. Les limites hautes proposées par les distributions *a posteriori* sont également très faibles (aux alentours de $10^{-4,1}$ et $10^{-3,8}$) en comparaison avec les quantités effectivement présentes dans la simulation. Dans le cas de l'eau et du méthane, nous sommes sur des résultats assez proches : $-0,206$ et $-0,071$ respectivement entre nos valeurs médianes et les valeurs médianes de Tau-REx (soit respectivement 38%, et 18% de déviation par rapport à la valeur moyenne). Comme nous l'avions pressenti, l'ammoniac est beaucoup moins bien contraint, il est largement sous-estimé, d'un ordre de grandeur environ $-1,179$. Enfin, le cas du dioxyde de carbone se distingue des autres par une assez bonne correspondance, $-0,081$ soit 16% de déviation, surprenante de surcroît étant donné les écarts constatés sur les spectres.

En somme, les abondances des molécules optiquement actives et les plus représentées dans le spectre sont tout à fait représentatives de celles de la simulation et le sont beaucoup moins du moment où les molécules sont plus discrètes, et ce, alors que nous tentons tout de même de comparer un objet unidimensionnel à un objet tridimensionnel.

Si la sous-estimation isolée des espèces n'a aucun effet notable sur le spectre, et est faible sur le poids moléculaire moyen, le cumul engendre une perte de masse déjà plus remarquable. Sa valeur médiane est effectivement proche de 0,0038 dans le modèle solution contre 0,0043 à 0,0044 dans la simulation. Il peut ici s'agir finalement d'un effet de compensation entre le caractère absorbant des molécules, leurs répartitions spatiales et leurs abondances. Toutes les molécules présentent une abondance plus faible dans la solution que dans la modélisation, ce qui se traduit aussi par un pouvoir absorbant plus faible de l'atmosphère. Dans le même temps, une atmosphère plus légère, à température identique, a également une hauteur d'échelle plus grande. L'atmosphère est donc moins opaque mais la transition s'effectue sur une plus grande épaisseur, ce qui peut tout à fait produire une dégénérescence vraisemblable et simuler d'une certaine manière une atmosphère plus absorbante en dilatant verticalement les bandes d'absorption.

À cette étape de notre raisonnement, il subsiste néanmoins encore quelques dissonances entre la comparaison des spectres et celles des paramètres. Contrairement à ce qu'on aurait pu penser, la bande à 4,27 μm , nettement moins intense dans le modèle solution de Tau-REx que dans le spectre de Pytmosph3R, devrait également impliquer des abondances plus faibles. Inversement, la bande à 3,32 μm du méthane est, quant à elle, plus intense dans le modèle que dans le spectre d'entrée.

- En ce qui concerne le CH_4 , nous pourrions l'expliquer à première vue par son appauvrissement en haute atmosphère (voir Figure 4.3) combiné à une atmosphère plus étalée.
- Pour le CO_2 , ceci pourrait découler à l'inverse de son enrichissement dans cette même région.

En remplaçant les couches extrapolées de la simulation atmosphérique par une composition plus riche en méthane et appauvrie en dioxyde de carbone, en reprenant les abondances retournées par Tau-REx, nous arrivons à ré-hausser d'à peu près 350 ppm la raie à 3,32 μm et à rabaisser de 120 ppm celle à 4,27 μm , sans que cela n'ait d'influence remarquable sur le reste du spectre. Cet effet de la haute atmosphère doit très probablement expliquer en partie ces constats mais nous allons voir qu'un autre effet va les appuyer, et pour mieux le cerner, nous devons discuter du dernier paramètre libre essentiel qu'est la température.

Étant donné que dans la gamme 1 - 10 μm , la distribution de contribution est peu étalée, la basse et la haute atmosphère n'interviennent que très peu et nous trouvons des valeurs très proches entre les valeurs intégrées sur toute l'atmosphère et celles obtenues à la 47ème couche correspondant à sa médiane. Toutes les abondances sont très légèrement plus faibles, à l'exception de celle du CO_2 qui est à peine plus élevée, et la température gagne une dizaine de degrés. L'ensemble des paramètres se rapproche d'ailleurs des solutions retournées par Tau-REx et les commentaires qui ont été formulés ou que nous formulerons seront aussi avec vraie pour les deux jeux de paramètres.

4.3.4 Température globale et température moléculaire

Pour moyenner la température, nous avons supprimé le deuxième terme de pondération dans Eq. (4.1), celui propre aux molécules, et ramené X à $N_b N_\theta$. Le cylindre correspondant à la médiane (voir Figure 4.10), d'indice 47, se trouve dans une zone proche de la tropopause où la température est très hétérogène et affectée d'un fort gradient. Il peut y avoir jusqu'à 200 K de différence entre un côté et l'autre de l'exoplanète, et surtout, se placer à la médiane plutôt que quelques niveaux au dessus pourrait faire une différence significative sur la valeur que nous établissons. À cette dite médiane, nous trouvons une température à moins de 20 K de celle de Tau-REx, et elle ne varie finalement que très peu en nous écartant d'elle (voir Table 4.3) car nous sommes en fait dans un minimum de la température moyenne (voir Figure 4.10). Alors, comment expliquer nos absorptions plus intenses pour le CO_2 et plus faibles pour le CH_4 à partir de ces résultats ? À première vue, nous ne pouvons pas l'expliquer par la contraction d'une haute atmosphère qui serait plus froide puisque la température moyenne se stabilise autour de 500 K : elle n'aurait fourni une explication que pour le méthane et pas pour le dioxyde de carbone.

La valeur moyenne que nous établissons est une température globale qui finalement dilue les petits effets sur le spectre pour favoriser les effets plus généralisés. En tenant compte du poids à chaque longueur d'onde, nous favorisons donc sur les températures des molécules les plus présentes dans le spectre, à savoir le méthane et l'eau, au détriment des moins présentes comme le dioxyde de carbone. Cette valeur moyenne ne correspond donc peut-être pas aux températures qui s'affirment réellement pour chacune des molécules dans le transfert radiatif, qu'on qualifiera de températures moléculaires.

Dans ce sens, modifions légèrement le mode de calcul de la température de manière à se concentrer sur une molécule, le CO_2 par exemple :

$$T_{m,\text{CO}_2} = \sum_{\lambda} \sum_{i_\theta=0}^{N_\theta} \sum_{i_x=0}^{N_x} \left(\frac{\tau_{i_\rho, i_\theta, i_x}}{\tau_{i_\rho, i_\theta}}(\lambda) \frac{\tau_{i_\rho, i_\theta, i_x, \text{CO}_2}}{\tau_{i_\rho, i_\theta, \text{CO}_2}}(\lambda) T_{i_\rho, i_\theta, i_x} \right) \frac{1}{X} \quad (4.3)$$

avec

$$X = \sum_{i_\theta=0}^{N_\theta} \sum_{i_x}^{N_x} \sum_{\lambda}^{N_\lambda} \tau_{i_\rho, i_\theta, i_x, \text{CO}_2} \tau_{i_\rho, i_\theta, i_x}(\lambda) \quad (4.4)$$

En adoptant cette méthode de calcul, nous n'accordons de poids qu'aux sous-parcours significatifs vis-à-vis de la molécule étudiée, et nous en déterminons une température moléculaire. Nous trouvons ainsi à la médiane une température moléculaire moyenne de 539,5 K pour le CO₂, contre 468,5 K pour la température moyenne globale. À σ_+ de la valeur médiane, nous trouvons 544,7 K. Cette bande absorbant à plus haute altitude, la valeur à σ_+ est probablement plus représentative de la modélisation, mais dans les deux cas, l'écart entre ces deux températures suffit à expliquer une bande à 4,27 microns moins intense dans le modèle de Tau-REx pour une abondance très proche. En effet, les sections efficaces du CO₂ sont extrêmement sensibles dans la gamme de température 300 - 600 K, et une différence de 70 K ou plus sur la température les augmente de 1 à 2 ordres de grandeur. *A contrario*, la même opération sur le méthane cette fois-ci aboutie sur une température moléculaire à la médiane de 473,2 K, soit très proche de la température globale, ce qui en soit paraît logique puisque c'est aussi la molécule la plus représentative du spectre.

On ajoute à cela les comportements en abondance des deux molécules que nous avons souligné sur la partie extrapolée de l'atmosphère qui s'opposent du fait de l'équilibre entre molécules carbonées : la haute atmosphère s'appauvrit en CH₄ tandis qu'elle s'enrichit (à l'exception d'une partie du côté Est de l'atmosphère) en CO₂. En plus de cette hétérogénéité verticale, nous constatons également un appauvrissement violent du méthane côté jour (voir Figure 4.3), associé à des fractions molaires entre 4 et 5 ordres de grandeur plus faibles et qui pourraient expliquer et/ou conforter nos remarques. Donc si nous faisons le bilan :

- Dans le cas de **CH₄** : les hétérogénéités verticales de composition très fortes en haute atmosphère, et notamment au terminateur, pour une température globale et moléculaire proche de la température inversée par Tau-REx induit un biais visible sur les spectres. Ce biais n'affecte que les raies les plus intenses et qui sondent la région appauvrie. L'abondance et la température du niveau médian correspond aux valeurs moyennes du terminateur, ce qui n'est plus tout à fait le cas pour les niveaux plus hauts. Les hétérogénéités tangentielles peuvent alors intervenir sur ces mêmes raies, et la légère augmentation de la température globale et moléculaire dans la haute atmosphère pourrait indiquer que la signature spectroscopique n'est plus complètement dominée par celle du terminateur mais légèrement altérée par celle du côté jour. En somme, le spectre du méthane subit de manière claire un biais naissant des hétérogénéités verticales très probablement accentué par ceux naissant des hétérogénéités tangentielles. Il est néanmoins dilué dans les distributions *a posteriori* du fait de la grande représentation spectroscopique de la molécule et de la faible gamme impactée.
- Dans le cas de **CO₂** : les hétérogénéités verticales de composition ne sont pas assez fortes pour expliquer les différences au niveau du spectre. En calculant la température moléculaire pour les différents niveaux à partir du médian on se rend compte qu'elle est systématiquement plus élevée d'au moins 70 K par rapport à la température globale, mais aussi par rapport à la température moyenne au terminateur. Son abondance y est également toujours légèrement plus élevée que la moyenne. Cette double constatation nous mène à penser que les différences observées résultent majoritairement des hétérogénéités tangentielles en abondance de la molécule et en température entre le côté jour et le côté nuit. Il est difficile de séparer la contribution de ces deux biais, ou même de les lier aux distributions *a posteriori*, toutefois, l'algorithme semble avoir compensé la divergence entre la température globale et la température moléculaire de sa bande à 4,27 μm en ré-haussant l'abondance (en comparaison avec le comportement de toutes les autres molécules). Ceci expliquerait qu'elle soit finalement la molécule la mieux contrainte par les distributions et, dans le même temps, la moins bien contrainte par le spectre.

4.3.5 Quelques remarques

Si cette méthode de moyennation donne finalement des résultats très positifs et concluants, elle ne fonctionne que pour des spectres qui ne seraient pas trop étalés en termes de rayons effectifs. La présence d'hétérogénéités induit certes des effets notables entre les résultats de l'inversion et le spectre d'entrée, mais nous en expliquons les causes essentiellement par les hétérogénéités verticales puisque nous comparons un modèle 1D avec un équivalent 1D de la structure 3D. Nous sommes pour l'instant en peine d'avoir les armes nécessaires pour lier efficacement ces effets avec les hétérogénéités azimutales ou tangentielles puisqu'elles sont diluées dans notre recherche de données comparatives et ne s'expriment que dans des cas extrêmes (comme celui du CO₂).

Ces mêmes explications sont finalement la tentative de combinaisons d'une somme d'effets thermiques, compositionnels et géométriques, tous plus ou moins corrélés les uns aux autres. C'est aussi en réalité la faiblesse des hétérogénéités de la simulation atmosphérique qui nous permet de comprendre approximativement le comportement de Tau-REx et la manière dont il a joué sur les paramètres pour trouver une solution qui, soulignons-le encore, reste tout de même remarquable à bien des niveaux. Dans le même temps, c'est la variété de celles-ci qui en rend la caractérisation difficile.

Les critères adoptés pour évaluer les moyennes, et le choix de la gamme spectrale peuvent influencer les résultats de cette étude. La gamme 1 - 10 μm a une distribution de contribution très étroite, ce qui nous a permis de raisonner sur une petite région de l'atmosphère (une trentaine de couches, voire une seule). Sur une gamme plus large, ou avec une composition moléculaire différente induisant de plus grandes amplitudes dans le spectre entre les extrema, nous risquons de mixer encore davantage les différents types de biais, voire de les diluer au point de ne plus pouvoir en tirer d'informations. La lecture synthétique deviendra également beaucoup plus dépendante de la manière dont nous pondérons les niveaux. La distribution de contribution donne une idée plutôt qualitative de leurs représentativités, mais peut-elle vraiment être utilisée comme fonction de pondération ?

L'ensemble de nos propos sont appuyés par une étude utilisant l'angle de pénétration comme base d'argumentation pour expliquer les écarts constatés sur les spectres. Elle est détaillée dans l'Annexe B, et l'un des résultats très fort de cette étude correspond à ce que nous illustrons par la Figure B.3 dans le cas du CO₂. Elle montre bien que lorsque le CO₂ domine le spectre, il sonde très en profondeur dans l'atmosphère, ce qui est même spectaculaire pour la bande à 4,28 μm . Sur cette bande, nous perdons totalement l'information du terminateur.

Nous ne répondons donc pas dans cette approche aux questions que nous nous posons sur des biais propres aux différents types d'hétérogénéités si ce n'est peut-être avec les écarts constatés sur les spectres, mais cela nous conforte tout de même sur le fait que sur des cas plus extrêmes, nous risquons d'être confrontés à des difficultés d'interprétation quant aux résultats de Tau-REx. Il est également certain que nous allons devoir développer de nouvelles méthodes pour les distinguer et les caractériser.

4.4 Influence de la méthode de génération de spectre et de la paramétrisation de Tau-REx sur l'inversion

4.4.1 Impact de la paramétrisation de Tau-REx sur la contrainte des paramètres libres

Dans ce paragraphe nous allons discuter de l'influence de la paramétrisation de l'algorithme de traitement du signal. Nous allons dans un premier temps visualiser l'effet de la gamme spectrale en

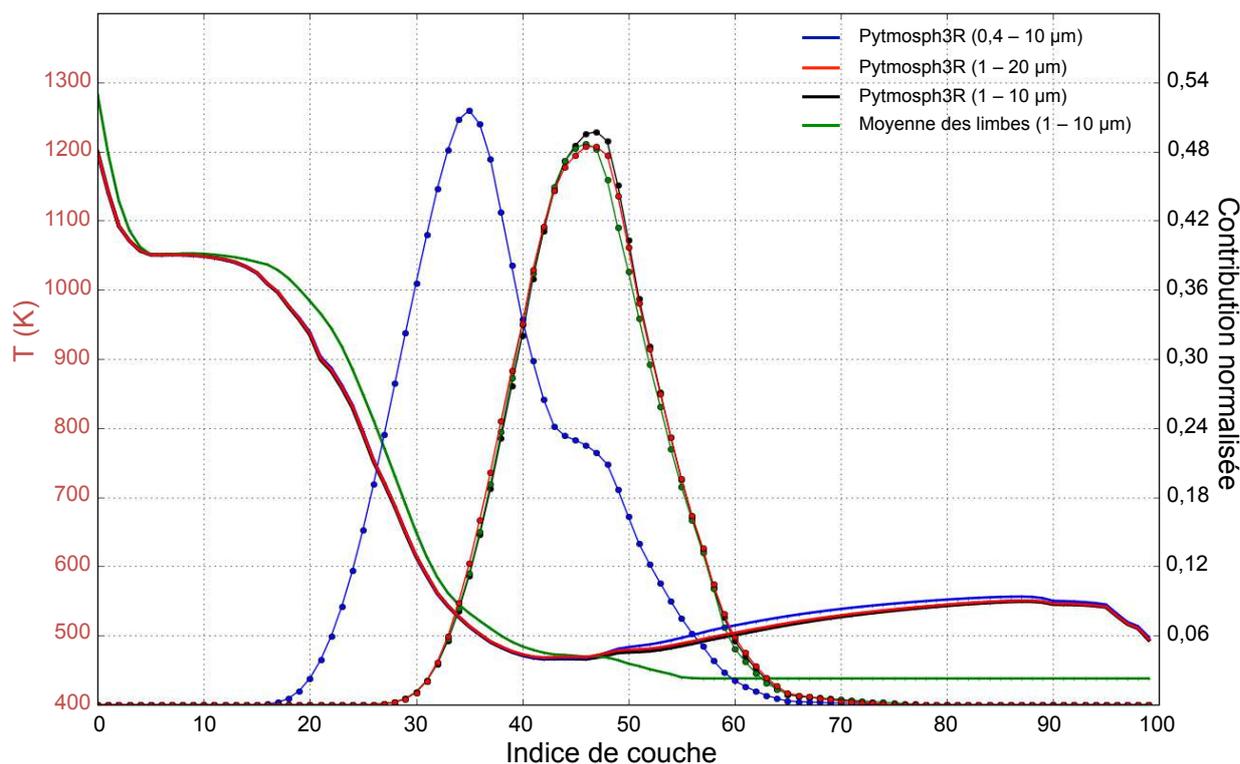


Figure 4.11: Contribution normalisée par couche pour le spectre (sans diffusion de Mie) : ronds noirs : carte de transmittance Pytmosph3R dans la gamme 1 - 10 μm ; ronds bleus : carte de transmittance Pytmosph3R dans la gamme 0,4 - 10 μm ; ronds rouges : carte de transmittance Pytmosph3R dans la gamme 1 - 20 μm ; ronds verts : carte de transmittance des limbes dans la gamme 1 - 10 μm . Sont superposées à ces distributions les courbes de température moyenne obtenues à partir de la lecture synthétique exposée dans § 4.3.3 qui respectent le même code de couleur. Les couches médianes correspondent respectivement aux indices : 47, 37, 47 et 46.

effectuant une inversion pour une gamme plus large : en tenant compte du visible et donc des sources d'absorptions qui ne s'exprimaient pas dans les spectres entre 1 et 10 μm ; en allant vers les plus grandes longueurs d'onde. Nous exposerons ensuite les résultats en fixant la fraction molaire du diazote, jusqu'à considérée comme libre et aboutissant à sa non détection systématique par Tau-REx.

Effets du changement de gamme spectrale

Nous effectuons l'inversion du spectre de GJ 1214 b généré par Pytmosph3R avec la même paramétrisation que celle exposée dans la section § 4.3.1, mais nous élargissons la gamme spectrale à 0,4 - 10 μm contre 1 - 10 μm . De cette manière, nous ajoutons une triple contribution :

- Le set de section efficace du méthane est vide en-dessous de 0,82 μm , laissant ainsi à l'eau et l'ammoniac une plage d'expression plus importante entre à 0,7 et 0,82 μm . Il s'agit donc d'un effet fictif.
- Le continuum du couple H_2/He , qui ne s'exprimait pas dans la gamme 1 - 10 μm , va pouvoir participer à la contrainte du spectre sur une courte gamme de longueur d'onde, notamment entre 0,6 et 0,8 μm et uniquement pour les bandes où les molécules absorbent le moins.

Table 4.4: Résultats de l'inversion de la simulation de GJ 1214 b (Charnay et al. 2015) sur la gamme spectrale 0,4 - 10 μm .

Paramètres	R_p	T	$\chi_{\text{H}_2\text{O}}$	χ_{NH_3}	χ_{CO_2}	χ_{CO}	χ_{N_2}	χ_{CH_4}
Unités	R_J	K	-	-	-	-	-	-
Médiane (M)	0,26291	499,90	-1,369	-3,398	-1,888	-8,463	-8,213	-1,534
σ_+	$4,5 \cdot 10^{-5}$	0,40	0,009	0,013	0,010	2,368	2,633	0,008
σ_-	$4,3 \cdot 10^{-5}$	0,62	0,009	0,012	0,010	2,404	2,543	0,008
$\Delta(\text{Médianes})$	$-3,5 \cdot 10^{-4}$	+14,48	+0,023	+0,090	+0,060	+0,094	-0,428	+0,023
Couche [37]	-	493,96	-1,090	-2,567	-2,155	-2,419	-2,253	-1,394
$\Delta(\text{M}/[37])$	-	+5,94	-0,279	-0,831	+0,267	-6,044	-5,960	-0,150
Globale [:]	-	534,21	-1,252	-2,597	-1,935	-1,989	-2,297	-1,464
$\Delta(\text{M}/[:])$	-	-34,31	-0,117	-0,801	+0,047	-6,474	-5,916	-0,070

- Aux très courtes longueurs d'onde, entre 0,4 et 0,6 μm , la diffusion Rayleigh domine presque toujours sur le moléculaire ou le continuum et ajoute en conséquence un critère dans l'inversion du spectre d'absorption

Nous offrons *a priori* davantage de support de travail à Tau-REx en intégrant le visible. Il doit à la fois contraindre convenablement le moléculaire, le continuum et le Rayleigh, alors que dans la gamme 1 - 10 μm il n'avait que le moléculaire sur lequel se reposer, les autres contributions n'intervenant pas. Les résultats obtenus sont exposés dans la table Table 4.4.

Nous avons également effectué l'inversion sur une gamme élargie, mais cette fois-ci vers les plus grandes longueurs d'onde entre 1 et 20 μm . Cet élargissement présenterait un double avantage :

- Nous pourrions laisser la bande à 10,92 μm de NH_3 s'exprimer et ainsi peut-être en améliorer la contrainte.
- La deuxième bande du CO_2 centrée sur 14,9 μm serait comprise dans la gamme d'inversion et nous devrions avoir une meilleure contrainte de son abondance, mais aussi du mixage en température.

Les résultats obtenus sur cette gamme sont exposés dans la table Table 4.5. Dans les deux cas, nous avons ajouté la différence entre les valeurs médianes retournées dans ces gammes et celles obtenues pour 1 - 10 μm . Pour ces deux études, nous avons représenté sur la Figure ?? les spectres solutions et les spectres d'entrée, ainsi que les différences entre les spectres.

Tout d'abord, pour ce qui est de l'inversion sur la gamme 0,4 - 10 μm . Les résultats de l'inversion diffèrent peu de ceux obtenus sur la gamme 1 - 10 μm , nous pouvons néanmoins formuler un certain nombre de remarques au vue des spectres et des comparaisons avec la lecture synthétique sur la gamme :

- H_2O , CH_4 et CO_2 , qui sont les 3 molécules les plus représentées dans le spectres, ont des abondances solutions quasi-identiques (respectivement 5%, 9% et 15% de déviation) à celles obtenues sur la gamme précédente.
- La distribution est beaucoup plus étalée que dans le cas 1 - 10 μm , qui plus est déformée, et centrée sur une couche de plus faible altitude (37). En effet, comme nous pouvons le constater sur la Figure ??, le spectre entre 0,4 et 1 μm indique que nous sondons en plus basse atmosphère. La très grande résolution du set 10_{wno} dans cette gamme augmente significativement la contribution

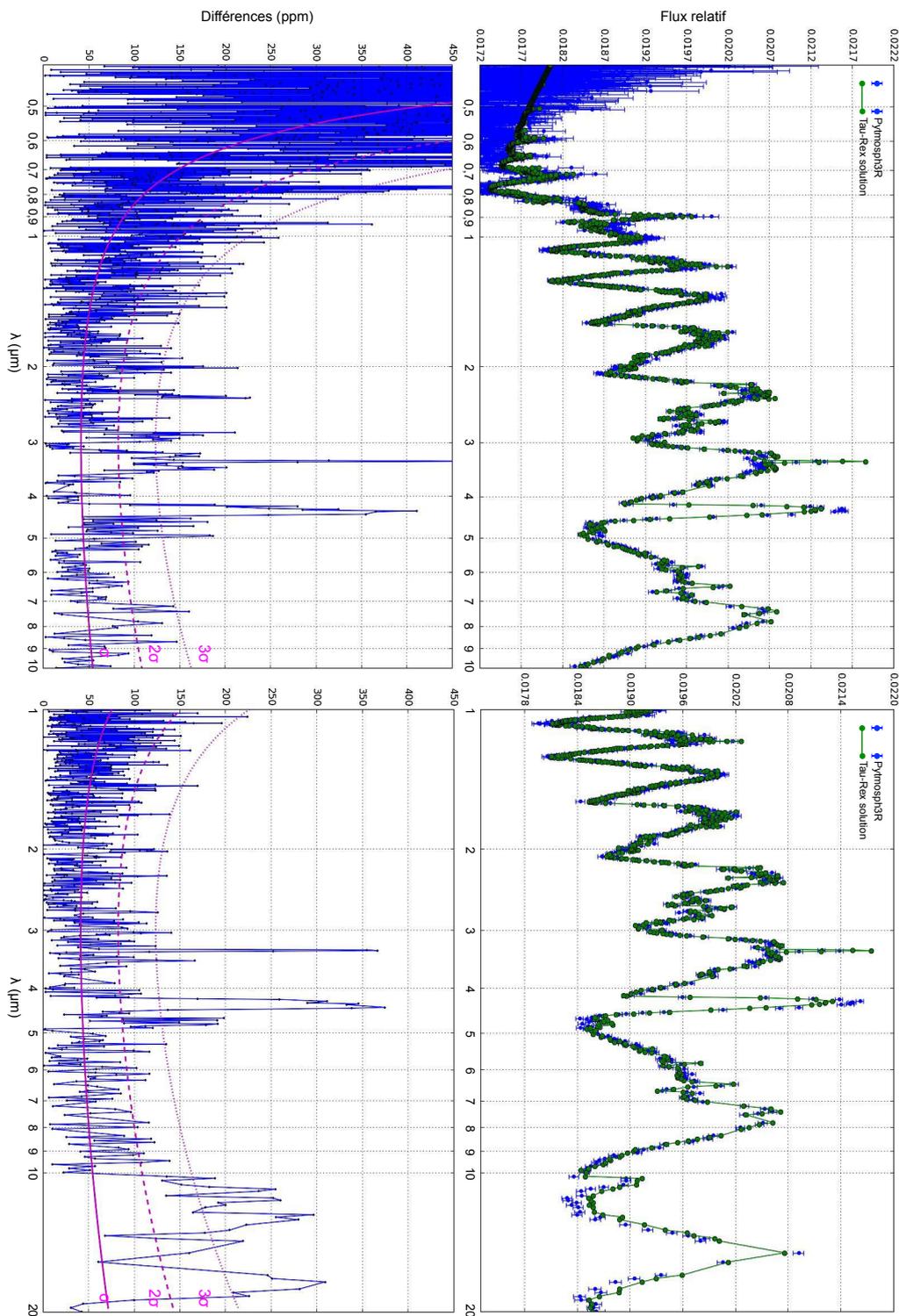


Figure 4.12: En haut : Superposition du spectre d'entrée (en bleu) obtenu par Pytmosph3R et de la solution retournée par Tau-REx (en vert) sur les gammes 0,4 - 10 μm (à gauche) et 1 - 20 μm (à droite). En bas : Différence absolue entre les doublets de spectres exprimée en ppm. À titre indicatif, nous avons représenté les courbes d'erreur à 1, 2 et 3 σ (courbes magenta)

Table 4.5: Résultats de l'inversion de la simulation de GJ 1214 b (Charnay et al. 2015) sur la gamme spectrale 1 - 20 μm .

Paramètres	R_p	T	$\chi_{\text{H}_2\text{O}}$	χ_{NH_3}	χ_{CO_2}	χ_{CO}	χ_{N_2}	χ_{CH_4}
Unités	R_J	K	-	-	-	-	-	-
Médiane (M)	0,26492	491,41	-1,369	-3,055	-1,933	-8,844	-8,224	-1,528
σ_+	$6,4 \cdot 10^{-5}$	1,72	0,008	0,020	0,013	2,127	2,878	0,011
σ_-	$6,7 \cdot 10^{-5}$	1,68	0,008	0,013	0,013	2,143	2,515	0,011
$\Delta(\text{Médianes})$	$+1,7 \cdot 10^{-4}$	+5,99	+0,023	+0,433	+0,015	-0,287	-0,095	-0,029
Couche [47]	-	471,58	-1,187	-2,318	-1,773	-1,949	-2,253	-1,473
$\Delta(\text{M}/[47])$	-	+19,83	-0,182	-0,737	-0,160	-6,895	-5,971	-0,060
Globale [:]	-	481,02	-1,204	-2,402	-1,805	-1,994	-2,284	-1,484
$\Delta(\text{M}/[:])$	-	+10,39	-0,165	-0,653	-0,128	-6,850	-5,940	-0,044

de cette partie de l'atmosphère, réduisant de moitié celle des couches concernées par la gamme 1 - 10 μm .

- Les abondances sont beaucoup plus proches des moyennes globales pondérées par la distribution de contribution que par le niveau médian. La complexité et la largeur de la distribution de contribution rend la recherche d'un cylindre représentatif beaucoup plus hasardeuse, et une approche globale s'en voit plus pertinente.
- Comme nous sondons plus bas, et donc sur des parties plus chaudes de l'atmosphère, il n'est pas étonnant que Tau-REx nous retourne une température plus élevée. Néanmoins, elle ne semble pas être aussi franche qu'attendue puisqu'on est à 34 K de la température globale.
- L'apport de cette partie de spectre reposait sur la contrainte des autres sources d'opacité, mais la résolution y est tellement élevée que les barres d'erreur explosent (voir Figure 4.12). Tout le poids porté par le nombre de point est finalement perdu par la grande souplesse offerte à Tau-REx dans sa contrainte

Pour conclure sur ce cas, nous touchons d'une certaine manière la limite de notre approche consistant à tenir compte des chemins optiques dans la génération des grandeurs moyennes. Nous sommes dans le cas d'un spectre étendu, représenté par une plus large épaisseur atmosphérique et donc difficile à résumer par un cylindre comme ce fut le cas dans la gamme 1 - 10 μm . Qui plus est, nos calculs ne tiennent compte que de l'absorption, de la quantité de raie, et aucunement du bruit qui leur est associé. Ainsi, bien que la contribution des couches inférieures soit nettement supérieure à celle des plus hautes en altitudes, les barres d'erreur associées aux raies contenues dans celles-ci sont tellement grandes qu'elles sont finalement peu contraignantes du point de vue l'inversion. Le fait que tous les paramètres soient plus proches des résultats de l'inversion sur la gamme 1 - 10 μm que de nos lectures synthétiques indique clairement que le poids dans l'inversion par Tau-REx est essentiellement porté par les mêmes couches. Donc, dans ces conditions, étendre la gamme spectrale dans le visible n'a aucun intérêt et, qui plus est, les résultats de l'inversion ne sont représentatifs ni de l'ensemble du spectre, ni de l'ensemble de la couche atmosphérique sondée.

En ce qui concerne l'inversion réalisée sur la gamme 1 - 20 μm , la faible quantité de raies contenue entre 10 et 20 μm pourrait n'apporter finalement que très peu, et quand on compare les résultats obtenus avec ceux de la gamme 1 - 10 μm , là encore les 3 molécules les plus représentées sont sur des valeurs extrêmement proches. C'est sur un autre paramètre, l'abondance en NH_3 , que le changement de gamme

Table 4.6: Résultats de l'inversion de la simulation de GJ 1214 b (Charnay et al. 2015) en fixant la fraction molaire en N_2 .

Paramètres	R_p	T	χ_{H_2O}	χ_{NH_3}	χ_{CO_2}	χ_{CO}	χ_{N_2}	χ_{CH_4}
Unités	R_J	K	-	-	-	-	-	-
Médiane (M)	0,26306	499,76	-1,422	-3,488	-1,969	-8,444	-2,245	-1,560
σ_+	$4,2 \cdot 10^{-5}$	0,66	0,008	0,012	0,010	2,486	-	0,008
σ_-	$4,2 \cdot 10^{-5}$	1,24	0,008	0,013	0,010	2,483	-	0,008
Δ (Médianes)	$-2,0 \cdot 10^{-4}$	+14,34	-0,030	+0,000	-0,021	+0,113	+5,884	-0,003
Couche [47]	-	468,49	-1,186	-2,309	-1,867	-1,949	-2,245	-1,471
Δ (M/[47])	-	+31,27	-0,236	-1,179	-0,102	-6,495	-	-0,089
Globale [:]	-	478,47	-1,206	-2,392	-1,853	-1,990	-2,287	-1,486
Δ (M/[:])	-	+21,29	-0,216	-1,096	-0,116	-6,454	-	-0,074

peut avoir un intérêt. La présence de la bande d'absorption à $10,92 \mu m$ a permis une meilleure estimation de sa quantité et l'écart entre la valeur attendue et celle retournée passe d'un facteur 12,5 à un facteur 4,5. Nous pensions faire de même avec le CO_2 en tenant compte de sa bande centrée à $14,9 \mu m$, néanmoins elle ne suffit apparemment pas à en améliorer la contrainte, et elle est aussi mal reproduite sur le spectre que la bande à $4,27 \mu m$.

Donc la gamme spectrale peut avoir un effet plus au moins fort mais relativement indépendamment du spectre lui-même. Sur des longueurs d'onde plus faibles, avec le set 10_{wno} , le bruit est trop intense pour améliorer la contrainte des paramètres et dilue la signature du Rayleigh et du continuum, de telle sorte que la solution retournée ne correspond plus qu'à une partie du spectre. Sur des longueurs d'onde plus grandes, la présence de bandes pour des espèces peu hétérogènes en facilite la contrainte, comme c'est le cas pour l'ammoniac, tandis que la présence de celles des espèces très hétérogènes confirme un biais sur le spectre qui s'intensifie sur valeurs retournées.

Inversion en fixant l'abondance en espèce inactive, N_2

Tau-REx offre plusieurs possibilités d'inversion, nous pourrions donc parcourir le champ de mode d'inversion :

- Nous pourrions travailler avec un rayon à 10 bar constant, mais l'algorithme n'aurait plus ce paramètre sur lequel jouer pour compenser la basse atmosphère de plus haute température. Nous n'avons pas obtenu de solution acceptable avec ce mode d'inversion.
- Nous pourrions imposer un poids moléculaire moyen constant, dans quel cas les abondances resteraient des paramètres libres mais soumis à une condition très forte. Pour une atmosphère dominée par l'hydrogène et l'hélium, ce poids moléculaire moyen varie en effet peu dans l'atmosphère, et nous pourrions l'exploiter pour libérer ce paramètre et dans le même temps, forcer le rapport en nombre entre (H_2/He) et les autres molécules. Le poids moléculaire retourné dans la gamme 1 - $10 \mu m$ était beaucoup plus faible que celui de la simulation, et en le fixant, nous trouvons une solution associée à un χ^2 supérieur à 20.
- Dans l'atmosphère de cette simulation, nous avons souligné la non détection du CO mais aussi de N_2 . Ces deux molécules ne s'expriment pas dans le spectre, la première parce qu'elle ne domine jamais l'absorption, et la deuxième parce qu'elle ne contribue qu'à la diffusion Rayleigh, nous pourrions forcer leurs abondances moyennes dans Tau-REx. Avec le CO, sa fraction molaire étant

très hétérogène, il était difficile de se résoudre à en fixer la quantité, d'autant plus qu'elle est en moyenne très élevée (voir Table 4.3). Celle de N_2 , plus homogène, était déjà plus simple à estimer et à fixer, et comme elle ne présente pas d'absorption moléculaire, en imposer la quantité n'a d'impact que sur le poids moléculaire moyen.

Nous avons donc fixé la quantité de N_2 dans l'inversion. Nous voulions savoir si l'algorithme avait ignoré la présence de la molécule lors de la première inversion parce que sa quantité n'avait pas un impact significatif sur la vraisemblance des solutions, ou s'il l'excluait systématiquement, dans quel cas il ne trouverait pas de solution acceptable en ajoutant une molécule inactive lourde dans les modèles. Les résultats obtenus sur la gamme spectrale 1 - 10 μm sont exposés dans la table Table 4.6 et les spectres associés exposés dans la Figure 4.13.

Comme nous pouvons le remarquer, fixer la quantité de N_2 n'a aucun impact sur les abondances retournées par Tau-REx (avec des déviations inférieures à 7% pour H_2O , CH_4 et CO_2). Seule la température et le rayon à 10 bar sont affectés, le premier par une augmentation de presque 15 K et le second par une légère diminution. Le χ^2 réduit de la solution est de 2,7 contre 1,54 lors de l'inversion classique, nous avons donc un spectre de moins bonne qualité. Cela se remarque en effet sur la Figure 4.13 si nous la comparons à Figure 4.9, les différences sont globalement un peu plus élevée, notamment pour les bandes du CH_4 et de CO_2 . Cette augmentation de température est donc davantage une rétroaction géométrique, visant à compenser l'augmentation du poids moléculaire moyen, qu'une température représentative d'un point de vue radiatif. μ augmente d'environ 2,3% tandis que la température augmente de 3%. Cette augmentation doit correspondre à un compromis entre les effets sur l'intensité de l'absorption (dépendance des sections efficaces avec T) et l'effet sur la hauteur d'échelle. La hauteur d'échelle étant un petit peu plus élevée, le rayon à 10 bar est à son tour légèrement abaissé pour faire correspondre les niveaux d'altitude.

Nous en concluons donc que Tau-REx a systématiquement exclu le N_2 parce qu'il trouvait des solutions beaucoup plus vraisemblables en son absence. Difficile à ce stade de déterminer s'il s'agit d'un effet des hétérogénéités de composition, et donc de la difficulté éprouvée par l'algorithme à trouver les bons compromis entre les abondances et la température, et/ou un effet plus complexe de compensation entre tous les paramètres pour coller une atmosphère iso-abondance et isotherme sur un spectre dérivé d'une atmosphère qui, elle, est bien tridimensionnelle.

4.4.2 Un effet d'hétérogénéités tangentielle en composition sur l'inversion

Si nous avons clairement montré que la simulation de GJ 1214 b présentait des hétérogénéités suffisamment marquées au moins en composition pour se ressentir sur l'inversion, nous pouvons d'ores-et-déjà apporter un complément d'information, et dans le même temps souligner l'importance de l'utilisation de Pytmosph3R, sur les effets des hétérogénéités tangentielles non négligeables. Nous reprenons pour ce faire le spectre obtenu par la méthode d'intégration des limbes, qui rappelons-le, consiste à produire un spectre 1D pour chaque point en latitude du terminateur, puis de les moyenner. Nous avons montré dans la section § 4.2.1 que nous perdions l'information sur les hétérogénéités de composition du CO_2 (voir Figure 4.7). Nous voulons maintenant montrer de quelle manière cela transparait dans l'inversion et nous appliquons en conséquence Tau-REx sur le spectre ainsi obtenu. Les médianes des distributions *a posteriori* ainsi que les écart-types sont exposés dans la table Table 4.7.

Nous appliquons la même méthode de lecture synthétique de la simulation que précédemment, mais avec cette fois-ci avec autant d'atmosphères 1D que de colonnes utilisées pour produire le spectre moyen. Les valeurs obtenues sont proposées dans la table Table 4.7. Nous allons comparer les résultats de cette

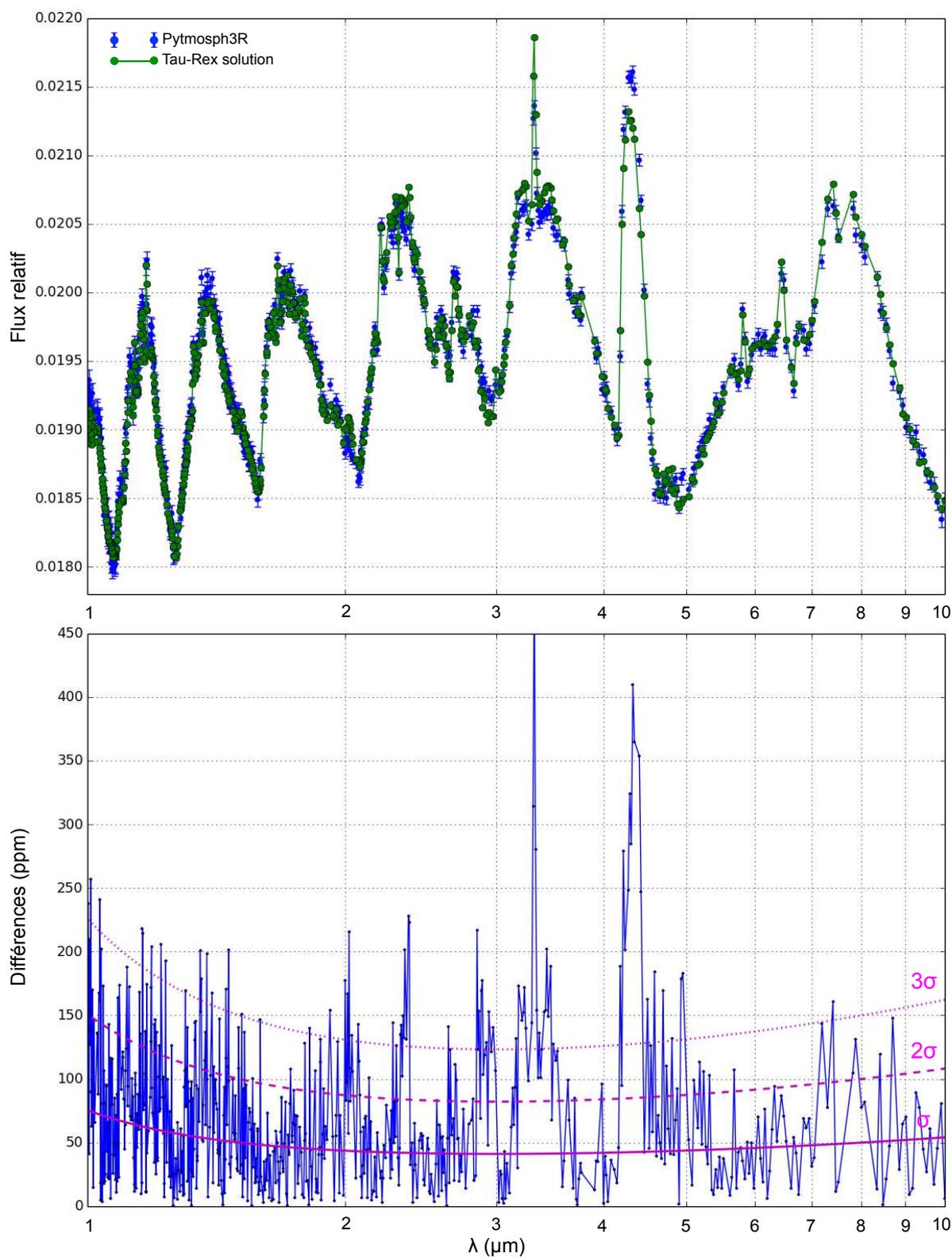


Figure 4.13: En haut : Superposition du spectre d'entrée (en bleu) obtenu par Pytmosph3R et de la solution retournée par Tau-REx (en vert) sur la gamme 1 - 10 μm . En bas : Différence absolue entre les doublets de spectres exprimée en ppm. À titre indicatif, nous avons représenté les courbes d'erreur à 1, 2 et 3 σ (courbes magenta)

Table 4.7: Résultats de l'inversion du spectre obtenu après intégration des limbes.

Paramètres	R_p	T	χ_{H_2O}	χ_{NH_3}	χ_{CO_2}	χ_{CO}	χ_{N_2}	χ_{CH_4}
Unités	R_J	K	-	-	-	-	-	-
Médiane (M)	0,263356	492,76	-1,218	-3,348	-2,162	-3,287	-8,138	-1,451
σ_+	$4,9 \cdot 10^{-5}$	0,71	0,065	0,013	0,015	0,076	2,628	0,010
σ_-	$4,7 \cdot 10^{-5}$	0,74	0,067	0,013	0,015	0,090	2,657	0,010
Δ (Médianes)	$+1,0 \cdot 10^{-4}$	+7,34	+0,174	+0,140	-0,218	+5,270	-0,009	+0,106
Terminateur	-	472,65	-1,142	-2,330	-2,116	-2,541	-2,376	-1,452
Δ (M/T)	-	+20,11	-0,076	-1,018	-0,046	-0,746	-5,762	+0,001
Globale [:]	-	478,47	-1,206	-2,392	-1,853	-1,990	-2,287	-1,486
Δ ([:]/T)	-	+5,82	-0,064	-0,062	+0,263	+0,551	+0,089	-0,034

inversion avec l'inversion effectuée sur le spectre complet (obtenu via Pytmosph3R), et dans le même temps avec les valeurs moyennes attendues.

Les différences avec l'inversion du spectre obtenu par Pytmosph3R sont assez faibles mais vont clairement dans le sens de notre argumentation. La température retournée ici est très proche de celle obtenue à la première inversion (7 K). D'un autre côté, le poids moléculaire moyen est bien mieux contraint du fait de l'augmentation globale des fractions molaires, et surtout, de la détection du CO. Nous sommes d'ailleurs effectivement sur une détection de la molécule puisque sa distribution est clairement piquée et ne propose pas seulement une limite haute. Le poids moléculaire moyen s'en voit augmenté de près de 2%, augmentation correspondant à peu près à celle de la température (1,5%), ce qui conserve localement la hauteur d'échelle bien qu'elle soit légèrement plus faible. Cette diminution est d'ailleurs compensée par un rayon à 10 bar un peu plus grand. Rappelons tout de même qu'entre les deux spectres, seules les bandes du CO₂ sont affectées de manière détectable par les hétérogénéités en composition tangentielle (voir Figure 4.7), et donc que l'ensemble de ces différences sont *a priori* directement liées à elles. En comparant le spectre solution avec le spectre d'entrée (voir Figure 4.14), on remarque immédiatement que la bande du CO₂ est bien mieux contrainte que lors de la première inversion, nous nous attendons donc à ce que ces distributions soient très proches de celles attendues. Le CH₄, quant à lui, présente toujours un problème sur sa bande centrée à 3,32 μ m.

Comparons à présent les valeurs retournées avec les moyennes que nous avons calculées. À l'image de ce que nous avons déjà constaté, les molécules les mieux contraintes sont toujours les plus représentées dans le spectre. Ainsi H₂O, CH₄ et CO₂ sont sur des valeurs semblables (au maximum 10% de déviation). Le NH₃ est toujours largement sous-estimé du fait de son implication faible, et bien que le CO soit cette fois-ci détecté, il est lui aussi sous-estimé. Donc globalement, nous avons un résultat encore plus satisfaisant que ce que nous avons eu jusqu'ici, ce qui se confirme par un χ^2 réduit de la solution à 1,32 (contre 1,54). Subsiste un écart de 20 K pour la température qui peut traduire la difficulté de l'algorithme, pour les deux inversions, à couvrir convenablement toute la gamme verticale de température. Les bandes les moins absorbantes sont à des températures plus élevées, puisqu'elles sondent plus bas en altitude, tandis que les plus hautes sont sur des températures proches de celle du niveau médian.

Ces résultats nous montrent que :

- En se cantonnant au terminateur, et donc en éliminant un type d'hétérogénéité, l'inversion du spectre va présenter des résultats cohérents pour les molécules les plus représentées. Le bilan, que ce soit du point de vue de la détection des molécules actives ou de la proximité des résultats est

meilleur que lorsque nous inversons le spectre complet.

- L'intensité des écarts entre les deux approches est proportionnelle à l'intensité des hétérogénéités des molécules concernées. En comparant les abondances attendues avec toute la simulation et celles avec le terminateur seulement ($\Delta(T/G)$), nous constatons bien que CO₂ et CO sont les molécules les plus hétérogènes tangentielllement, et que ces hétérogénéités biaisent l'inversion en réduisant sa qualité globale.
- La bande à 3,32 μm du méthane ne s'explique pas par des effets tangentiels puisque la bande n'est toujours pas bien contrainte par Tau-REx, il s'agit donc bien d'un effet vertical et/ou azimutal, ce qui vient conforter nos propos sur l'influence de la haute atmosphère appauvrie.
- La mauvaise contrainte de la bande du dioxyde de carbone résultait bien d'un effet des hétérogénéités tangentielles de la molécules puisqu'elle est à présent très bien reproduite.

Pour conclure, la prise en compte des effets tangentiels a pour conséquence d'"inciter" Tau-REx à chercher un compromis entre une meilleure description des paramètres hétérogènes et la conservation des paramètres qui le sont beaucoup moins. Ce compromis impacte nécessairement la qualité de son inversion, et proportionnellement à l'intensité des hétérogénéités. Dans cet exemple, GJ 1214 b ne présente finalement qu'une molécule aux hétérogénéités tangentielles franches, et biaise raisonnablement les résultats de l'inversion du fait de sa faible représentativité spectrale. Si des molécules comme l'eau ou le méthane avaient présenté des variations aussi intenses en abondances sur les lignes de visée, elles auraient alors eu un effet bien plus remarquable.

Notons que la température n'a que très peu évoluée entre les deux inversions. Si nous regardons la Figure 4.11, la courbe verte donne le profil moyen en température, et les points verts la distribution de contribution dans la gamme 1 - 10 μm associée. Cette distribution est très proche de celle de la Figure 4.10 que nous avons ici représenté en noir, et les médianes sont dans une région de l'atmosphère pour laquelle la température du terminateur est représentative. Ce n'est que plus haut dans l'atmosphère que les hétérogénéités thermiques s'exprimeraient de manière nette, mais ses couches sont trop peu représentées pour avoir une influence forte sur les spectres et les résultats de l'inversion. Nous n'avons donc pas mis en évidence de biais thermique avec cette étude, ou nous n'avons pas réussi à les distinguer des autres types de biais.

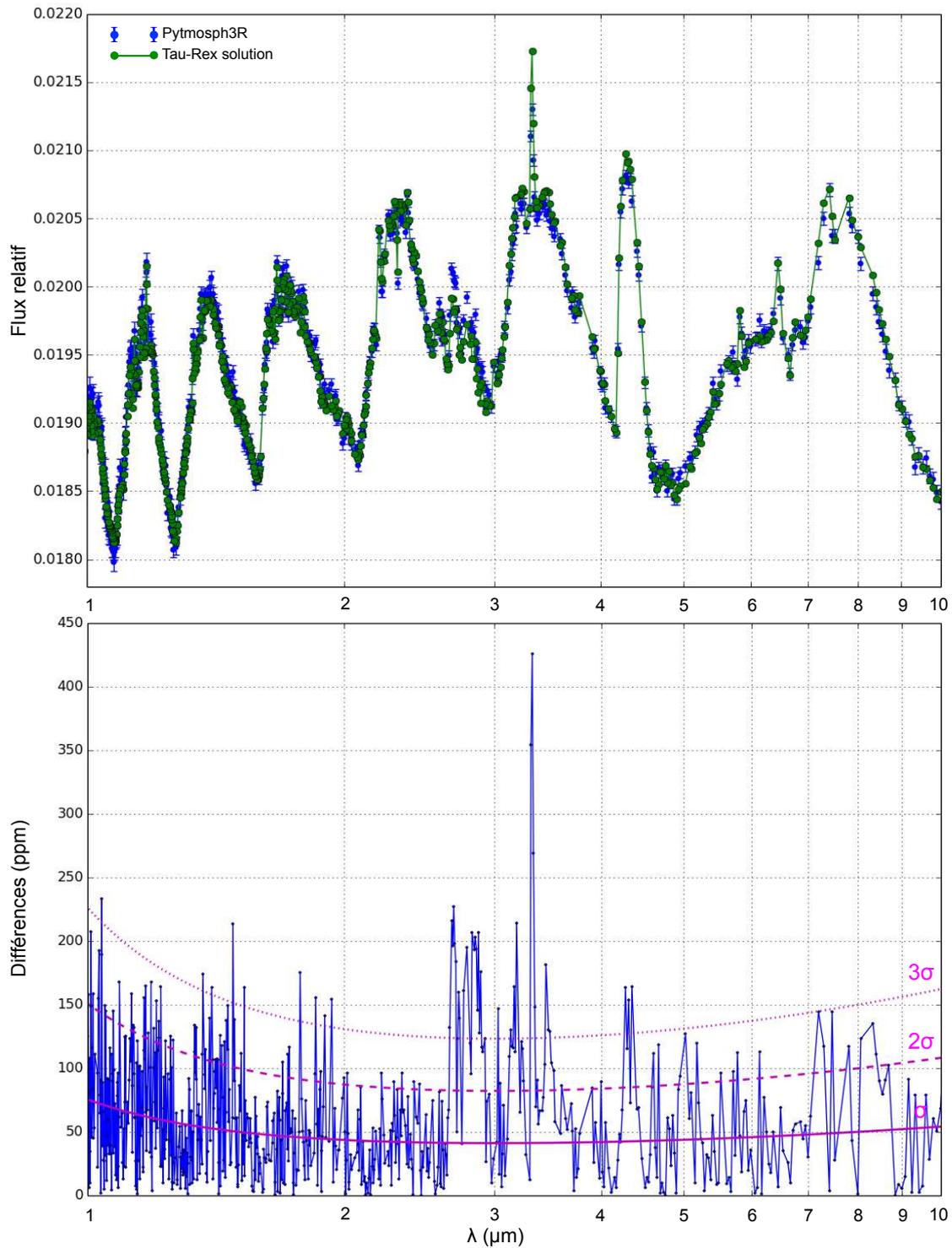


Figure 4.14: En haut : Superposition du spectre d'entrée (en bleu) obtenu à partir des spectres 1D des colonnes du terminateur et de la solution retournée par Tau-REx sur la gamme 1 - 10 μm (en vert). En bas : Différence absolue entre les deux spectres exprimée en ppm. À titre indicatif, nous avons représenté les courbes d'erreur à 1, 2 et 3 σ (courbes magenta)

Pour conclure sur ce chapitre, à partir des spectres obtenus de la simulation atmosphérique 3D de GJ 1214 b, nous avons montré que Tau-REx, même dans son mode le plus simpliste d'inversion (isotherme et iso-abondance) réussissait à retourner des solutions tout à fait satisfaisantes sur la température globale et les abondances des molécules les plus représentées. Nous avons également souligné ses limites pour toutes les autres molécules, les moins représentées comme celles qui n'interviennent pas dans l'absorption moléculaire. Il aboutit ainsi à la non-détection de deux molécules pourtant présentes dans l'atmosphère. Nous avons d'un autre côté défini différents types d'hétérogénéités (verticales, azimutales, ou tangentielles ; thermiques ou de composition) que nous avons clairement identifiées dans la simulation de l'atmosphère de GJ 1214 b. Nous avons montré de quelle manière elles pouvaient s'exprimer sur les spectres en transmission et nous avons tenté d'en isoler les effets.

L'inversion de ces derniers et les différentes tentatives qui ont suivi ont permis de mieux comprendre leurs résultats et d'identifier des biais observationnels prenant naissance dans ces hétérogénéités, qui ici étaient essentiellement de nature compositionnelle. Néanmoins, si la comparaison entre le spectre solution et l'observation pourrait permettre d'identifier l'existence d'hétérogénéités fortes, ces biais ne transparaissent que très peu sur les distributions *a posteriori* elles-mêmes. En effet, dans le cas de la simulation qui nous a intéressé, les dites hétérogénéités mises en cause concernent : soit une molécule peu représentée dans le spectre (CO_2 et *a fortiori* CO), soit une molécule pour laquelle la gamme de leurs expressions est mince et complètement écrasée par toutes les autres où l'algorithme arrive à en reproduire le comportement (CH_4). Nous avons donc été capable d'identifier des biais mais pas de les caractériser, ils n'avaient tout simplement pas suffisamment de poids sur les spectres. Les biais de nature thermique que nous pensions constater intensément à partir de cette simulation n'ont pas pu être mis en évidence, ou nous n'avons pas réussi à les isoler des autres types de biais. Leur existence ne fait cependant aucun doute, ce qui nous amène à penser qu'ils ont été d'une manière ou d'une autre compensés ou atténués par les autres types d'effets.

La complexité de la simulation, la variété des hétérogénéités, de leurs intensités et les corrélations entre les biais qu'elles peuvent générer ne nous ont pas permis de répondre à l'ensemble de nos questions de manière satisfaisante. Nous allons donc changer d'approche en nous concentrant un type d'hétérogénéité, et donc un type de biais avant de revenir sur la simulation, son observation et son inversion pour tenter d'en améliorer la lecture.

Chapter 5

Etude de l'impact des hétérogénéités de nature thermique sur les observations et leurs inversions

Sommaire

5.1	Isolation des effets thermiques tangentiels dans les atmosphères d'exoplanètes . . .	135
5.1.1	Discussions sur les hétérogénéités tangentielles	135
5.1.2	Structure des atmosphères synthétiques	140
5.1.3	Paramétrisation de Tau-REx	145
5.2	Impact sur les spectres en transmission	151
5.2.1	Cas de la mini-Neptune	151
5.2.2	Cas de la géante gazeuse	155
5.3	Impact sur le retrieval	159
5.3.1	Critère de vraisemblance et remarques associées	159
5.3.2	Atmosphères à colonnes isothermes	162
5.3.3	Atmosphères à deux températures	168
5.3.4	Approche analytique en soutien de nos conclusions	173
5.3.5	Impact de la résolution et du mode de fonctionnement de Tau-REx	176
5.4	Retour sur la simulation 3D de GJ 1214 b, des biais thermiques dissimulés	182
5.4.1	Discussion sur les structures atmosphériques les plus représentatives	183
5.4.2	Des biais thermiques amoindris par les hétérogénéités de composition	184
5.4.3	Des biais thermiques qui se compensent par les effets azimutaux	185

Nous avons mis en évidence dans le chapitre précédent les différents types d'hétérogénéités que nous pouvions rencontrer dans une atmosphère et quelques-uns de leurs effets sur l'inversion. Nous n'avons cependant pas été capables de les caractériser clairement puisque nous n'avions qu'un seul cas d'étude et qui plus est, un cas à la composition et à la structure atmosphérique complexes. Nous avons essentiellement mis l'accent sur les biais découlant d'hétérogénéités de nature compositionnelle, s'exprimant de manière singulière dans la simulation de Benjamin Charnay (Charnay et al. 2015), sans pour autant réussir à mettre en exergue des biais purement thermiques que nous nous attendions à remarquer.

Ce chapitre veut se concentrer sur ces biais qui ne prennent naissance que dans une répartition de température hétérogène, et dans ce sens, nous allons travailler à partir d'atmosphères synthétiques simplistes ne résultant ni de modèles 1D, ni de modèles 3D, mais présentant le type d'hétérogénéité qui nous intéresse et sur lequel la littérature ne s'est pour l'instant pas étendue, à savoir, ce que nous avons appelé les hétérogénéités tangentielles. Idéalisées, elles seront représentatives de discontinuités thermiques remarquées dans des simulations atmosphériques 3D et permettront d'en isoler les biais propres lors de leurs inversions. Cette démarche aura également pour but de démontrer que dans le cas de GJ 1214 b, nous aurions dû remarquer un biais purement thermique et horizontal lors de l'inversion, mais qu'il est finalement camouflé par d'autres de natures différentes.

Ce chapitre veut instaurer les prémices d'une plus vaste étude de l'impact des hétérogénéités atmosphériques sur les observations et leurs inversions. L'espace des paramètres à parcourir étant vaste, nous n'avons eu le temps, durant cette thèse, d'aborder que l'un d'entre eux. Le biais qu'il génère risque d'affecter des cibles majeures de la spectroscopie de transit : les atmosphères de planètes très irradiées, à fort contraste jour/nuit et en particulier celles en rotation synchrone. À l'image du chapitre précédent qui se présentait comme un guide faisant le lien entre la modélisation et le traitement du signal, celui-ci propose une méthodologie dans l'étude des biais observationnels. À termes, et à l'issue d'un large balayage de l'espace des paramètres et des types d'hétérogénéités, nous pourrions être capables de détecter des biais et d'en déterminer les natures par l'interprétation des solutions d'une inversion.

Comme nous avons pu le constater, déduire des corrélations claires entre le comportement de l'inversion des spectres des atmosphères tridimensionnelles et les hétérogénéités constatées peut s'avérer délicat si nous travaillons avec des simulations réalistes (on entend par réalistes, des simulations issues de modèles physiques 3D tels qu'un GCM). La simulation de [Charnay et al. \(2015\)](#) comprend 8 molécules et l'inversion compte 9 paramètres libres, tous potentiellement corrélés les uns aux autres, pour trouver la ou les solutions les plus proches du spectre en transmission. Ces dites solutions sont parfois très éloignées des valeurs attendues, et pour certaines longueurs d'onde, les spectres peuvent présenter des différences non négligeables traduisant de la superposition de plusieurs effets de natures variées. Difficile dans ces conditions de dénouer ce jeu de paramètres et de les lier directement à des effets d'hétérogénéités.

Dans les pages à venir, nous nous concentrerons sur les effets thermiques qui jouent directement sur la hauteur d'échelle, l'extension de l'atmosphère, sur la densité locale de l'atmosphère et sur l'absorption moléculaire. Les effets de composition, mis en évidence pour les nuages ou le dioxyde de carbone dans le cas de GJ 1214 b ne seront que superficiellement abordés. Nous nous sommes intéressés, paradoxalement, aux biais qui se détectent le moins dans la simulation de GJ 1214 b (voir le chapitre précédent), alors même qu'ils paraissaient être les plus intuitifs. Nous reviendrons dans les derniers paragraphes sur la dite simulation et sur les raisons pour lesquelles nous n'avons pas réussi à isoler clairement les effets thermiques.

5.1 Isolation des effets thermiques tangentiels dans les atmosphères d'exoplanètes

5.1.1 Discussions sur les hétérogénéités tangentielles

Les biais induits par les différents types d'hétérogénéités

À l'issue de l'étude précédente, nous avons montré que les hétérogénéités impactaient les spectres d'au moins trois manières et pouvaient être associées à des biais plus ou moins remarquables sur les distributions *a posteriori* ou les spectres solutions :

- **Impacts des structures verticales ρ** : Des profils verticaux présentant de forts gradients thermiques ou compositionnels (sur plusieurs ordres de grandeur), induisent une dissonance paramétrique entre les différentes gammes du spectre sondant les différentes régions concernées. Si l'une de ces régions n'est portée que par une petite gamme spectrale, elle s'exprime finalement peu ou pas du tout lors de l'inversion et de la recherche d'un compromis sur les paramètres. Cela se traduit par un spectre solution systématiquement écarté de celui d'entrée dans la dite gamme spectrale. Les biais verticaux vont essentiellement dépendre de l'intensité des hétérogénéités - la

température doit varier assez brutalement et sur des centaines de K ; l'abondance tout aussi brutalement et sur plusieurs ordres de grandeur - pour que le compromis sur les paramètres retournés par l'algorithme soit délicat et non représentatif de l'ensemble de la région atmosphérique sondée mais seulement de sa majorité. Ils seront d'ailleurs plus fréquemment constatés lorsque nous sondons une épaisse couche de l'atmosphère, et donc lorsque le spectre est très étalé en termes de rayon effectif. Ces effets ne nécessitent pas une étude tridimensionnelle et des modèles 1D suffisent à les caractériser. Nous ne chercherons donc pas à les étudier et à les caractériser mais nous verrons comment ils peuvent diluer, influencer, voire dominer les autres types de biais.

- **Impacts des structures azimutales θ** : Les variations de température et/ou de composition aux limbes suivant l'angle θ se moyennent sur le spectre plutôt que sur les variables. L'expression de chacun de ces angles est pondérée par le transfert radiatif et ce sont en sortie ceux qui interviennent le plus dans le spectre total qui verront leurs caractéristiques s'exprimer sur les solutions de Tau-REx. Plus les hétérogénéités sont intenses, et plus ces écarts d'expression s'accroîtront. Elles sont prises en compte lorsque nous appliquons la méthode d'intégration des limbes, et ont probablement déjà fait l'objet de discussions dans la littérature (notamment avec l'utilisation de SMART (Spectral Mapping and Atmospheric Radiative Transfer code, [Meadows and Crisp \(1996\)](#), [Crisp \(1997\)](#), [Misra et al. \(2014\)](#))). Lorsque nous reviendrons sur la simulation de GJ 1214 b, nous mettrons en évidence la manière dont les hétérogénéités azimutales vont masquer celles sur lesquelles nous allons nous focaliser.
- **Impacts des structures tangentielles x** : Jusqu'ici négligées dans la littérature, elles apparaissent lorsque la zone sondée en transmission présente un fort gradient thermique (et/ou compositionnel) jour-nuit. L'hypothèse couramment faite selon laquelle le spectre est généré au niveau d'une zone très mince identifiée au seul terminateur s'avère en effet injustifiée dans de nombreux cas. Dans l'exemple de GJ 1214 b, nous avons ainsi eu l'occasion de montrer que le côté Est, du fait de son appauvrissement spectaculaire en CO_2 au terminateur, induisait un conflit dans la contrainte de la molécule par Tau-REx. L'algorithme n'a finalement pas réussi à trouver le compromis optimal entre la caractérisation cohérente de l'ensemble des autres paramètres, celle de l'abondance en CO_2 , et la génération d'un spectre solution reproduisant convenablement les bandes qui lui sont associées. Si des effets en composition peuvent être détectables au moins sur la comparaison entre le spectre solution et l'observable, l'absence d'effets thermiques a de quoi surprendre.

Ces trois types de biais naissent sur les 3 dimensions de notre maillage cylindrique tout en étant corrélés les uns aux autres. Les hétérogénéités azimutales naissent finalement de la variation des hétérogénéités verticales dans le plan orthogonal à la ligne de visée, tandis que ces mêmes variations dans le plan porté par cet axe induisent les hétérogénéités tangentielles. À titre d'exemples :

- Un appauvrissement du méthane dans la haute atmosphère de GJ 1214 b, quels que soient les latitudes et longitudes considérées ou presque, aura un effet que l'on qualifiera de vertical et non azimutal ou horizontal car il sera généralisé et ne dépendra pas des deux autres degrés de liberté (θ et x).
- *A contrario*, la disparition du dioxyde de carbone, très localisée autour de l'équateur Est, et donc pour un certain intervalle de θ , n'a pas un effet généralisable et aura un effet azimutal.
- Le décalage de la signature spectroscopique induit par un contraste fort en température ou en composition entre le côté jour et le côté nuit est un effet tangentiel. Le même appauvrissement du dioxyde de carbone, s'il est centré sur le terminateur et ponctuel, peut également induire un effet tangentiel si cela se traduit par l'expression d'un côté de l'atmosphère au détriment de l'autre (voir Annexe B, § B.2.1)

En l'état, il est difficile d'estimer et de comparer l'impact sur les inversions de ces 3 effets de manière individuelle. Qui plus est, contrairement aux deux premières, les hétérogénéités tangentielles ne sont pas sondées seulement au niveau du terminateur et ne concernent donc pas uniquement les sous-parcours caractérisés par une densité moléculaire maximale. Nous pourrions donc nous attendre à ce qu'elles aient des effets plus modérés. Cet argument est à la base des méthodes d'inversion actuelles. Mais nous allons voir dans ce chapitre que cette hypothèse d'un spectre dominé par la signature des conditions au terminateur n'est en général pas justifiée.

Les angles d'ouverture et de pénétration comme indicateurs de l'expression des effets tangentiels

Le rapport R_p/H_0 des objets étudiés est souvent très grands (> 1000), même pour des Jupiters chauds (500 - 1000), par conséquent l'angle d'ouverture (Annexe A) correspondant à la région sondée de part et d'autre du terminateur est souvent relativement faible (de l'ordre de 60° dans le meilleur des cas, autour de $30 - 50^\circ$ pour les Jupiter chauds, voir Figure A.2, Annexe C). Cet angle dépend aussi des propriétés optiques de l'atmosphère : si elle présente des absorbants forts et qu'elle est très opaque aux rayonnements, nous sondons les parties les plus hautes de l'atmosphère, et l'angle d'ouverture s'en voit réduit. Dans le cas inverse, nous sondons plus bas et l'angle d'ouverture s'en voit plus important (presque 10° de différence, voir Figure A.2, Annexe C). Si ces angles semblent conduire directement à la conclusion que les conditions au terminateur ne suffisent pas à expliquer les signatures spectrales en transmission, ils ne reposent que sur un argument purement géométrique et non radiatif et dépendent du choix arbitraire de la pression du toit du modèle. Les hétérogénéités tangentielles ont certes besoin d'une atmosphère très ouverte pour s'exprimer, mais elles doivent également être comprises dans la région qui impose significativement sa signature spectroscopique.

Leurs impacts vont donc essentiellement dépendre de ce que nous avons appelé l'angle de pénétration (ψ_* , ψ_+). Nous rappelons qu'il correspond au doublet d'angles par rapport au terminateur, et pour un rayon donné, contenant la région au sein de laquelle nous conservons l'essentiel de l'information du transfert radiatif (étendre cette région n'induirait pas de différences détectables pour un instrument). Cet angle est double puisqu'il peut différer d'un côté ou de l'autre du terminateur (ψ_* pour le côté jour/étoile hôte, et ψ_+ pour le côté nuit/observateur). C'est une grandeur chromatique qui peut être spécifique à une espèce ou globale, elle dépend, tout comme l'angle d'ouverture, du rayon de courbure de l'exoplanète, donc de son rayon planétaire, et du niveau sondé en pression ou en altitude. Pour déterminer ce doublet dans le cadre d'une simulation, une fois le critère de contribution défini, nous devons trouver l'ensemble des sous-parcours pour lesquels la somme de leurs profondeurs optiques répond au dit critère. Il peut s'agir d'une fraction de la profondeur optique totale ou une variation de la transmittance ($T = \exp(-\tau)$) produisant un effet plus important que le bruit. Nous sommes les profondeurs optiques en démarrant du toit atmosphérique côté jour jusqu'à celui, d'indice j , à partir duquel le τ_j ne répondra plus au critère de contribution, et nous faisons de même en partant du toit côté nuit jusqu'à ce que le τ_n ne vérifie plus le critère de contribution, où n serait l'indice du sous-parcours limite. Une fois les sous-parcours j et n déterminés, connaissant leurs positions nous en déduisons les angles formés par rapport au terminateur. Par exemple, avec un critère de $1/100$, la région comprise entre ces deux angles de pénétration, pour une longueur d'onde λ et un rayon échantillon de coordonnées (ρ, θ) donnés, contient 99% de l'absorption atmosphérique.

Nous avons préféré travailler avec un critère reposant sur une variation de la transmittance T . À une longueur d'onde donnée, nous calculons l'ordre de grandeur du bruit attendu lors d'une observation (stellaire et/ou instrumental). Ce bruit se traduit par un écart acceptable sur le flux relatif ou le rayon effectif mesuré de l'exoplanète et de son atmosphère. De par la connaissance de l'évolution de la trans-

mittance avec l'altitude dans la zone de transition (passage d'une atmosphère opaque à une atmosphère transparente), nous en déduisons la variation ΔT nécessaire pour que le spectre soit décalé d'un σ de sa valeur mesurée (voir Annexe B). Sur une atmosphère homogène, la profondeur optique évolue exclusivement avec la densité moléculaire, qui décroît exponentiellement avec la distance au terminateur, et l'angle de pénétration est symétrique par rapport au terminateur. La Figure A.2 représente une estimation de l'angle d'ouverture et de l'angle de pénétration en fonction du niveau en pression sondé, du rayon à 10 bar et de la hauteur d'échelle. Comme nous pouvons le constater, l'angle de pénétration est globalement 3 à 4 fois plus faible que l'angle d'ouverture. Ainsi, dans le cas d'une exoplanète du type GJ 1214 b (Charbonneau et al. 2009), les angles de pénétration devraient avoisiner les 9° de part et d'autre du terminateur (modulés par d'éventuels effets tangentiels) et chuteraient à $5 - 6^\circ$ pour un Jupiter chaud du type HD 209458 b (Richardson et al. 2007).

À ces angles nous associons ce que nous définissons comme le central, soit la position la plus contributrice qui, en l'absence d'hétérogénéités tangentielles, correspondra au terminateur mais qui, le cas échéant, pourra être localisé différemment. Si le central n'est pas localisé au sein de la colonne du terminateur, alors l'argument voulant négliger les autres sous-parcours ne tient plus d'office. Dans le cas contraire, nous nous devons de comparer l'angle de pénétration avec l'ouverture de la colonne au terminateur, et s'il est très supérieur, l'argument ne tient plus non plus. Dans toutes les situations pour lesquelles l'angle de pénétration serait proche ou inférieur à l'ouverture de la colonne, alors le parcours total peut se résumer au sous-parcours centré sur le terminateur et le spectre ne s'imprégnera que de ses propriétés.

Pour conclure l'angle d'ouverture d'une atmosphère discuté dans le Chapitre 2 et présenté de manière plus détaillée en Annexe A n'est pas suffisant dans nos réflexions pour pressentir et estimer l'impact des hétérogénéités tangentielles sur les observables et leurs inversions, il nous faut raisonner aussi en termes d'angle de pénétration. Une exoplanète et son atmosphère de rapport R_p/H_0 petit, comme c'était le cas dans le chapitre précédent, a de fortes chances d'être sensible à ces hétérogénéités puisque les rayons échantillons traversent une plus grande diversité de colonnes atmosphériques. Mais si pour une raison ou une autre les angles de pénétration s'avèrent trop faibles (inférieurs au pas en longitude de la simulation), nous n'observerons pas de biais tangentiels dans la solution Tau-REx. Dans ce cas de figure, le terminateur devient la seule région d'intérêt spectroscopique puisqu'il est seul contributeur à la signature atmosphérique.

Dans la simulation de GJ 1214 b les hétérogénéités tangentielles ne s'expriment pas (ou peu)

Le cas de GJ 1214 b est doublement particulier :

- Il ne présente pas des hétérogénéités très intenses en température comme de celles que l'on pourrait observer sur des simulations de Jupiters chauds en rotation synchrone ou non (Kataria et al. (2015), Moses et al. (2011), Parmentier et al. (2018)).
- L'angle d'ouverture est grand puisque la planète est de petites dimensions pour une hauteur d'échelle élevée du fait des températures qui y règnent et de la composition dominée par H_2 et He, l'angle de pénétration moyen attendu l'est également (de l'ordre de $18 - 20^\circ$ sur l'ouverture totale).

Nous sommes donc à l'interface entre des cas où les effets tangentiels peuvent avoir un réel impact du fait d'un angle de pénétration large et celui où ils ne se ressentent pas ou peu du fait de gradients thermiques ou compositionnels faibles. Les Figures B.1 et B.2 montrent les angles d'ouverture et de

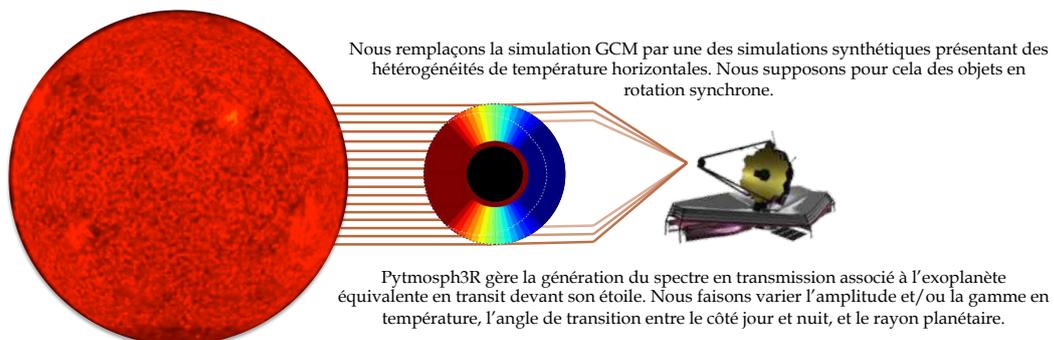
Table 5.1: Caractéristiques des exoplanètes et de leurs étoiles hôtes.

Paramètres	R_p	M_p	g_0	R_s	M_s	T_s	d_*
Unités	R_J	M_J	m/s^2	R_*	M_*	K	a.l.
GJ 1214 b	0,2464	0,0206	8,795	0,2065	0,157	3000	42,5
HD 209458 b	1,367	0,6925	9,605	1,155	0,690	6065	154

pénétration de l'atmosphère de GJ 1214 b pour tous les angles θ et toutes les longueurs d'onde. Une exploitation détaillée des résultats obtenus est proposée en Annexe B et les résultats ont déjà été exploités dans le Chapitre 4 pour soutenir les observations faites sur les spectres et sur les résultats de l'inversion. La conclusion générale que l'on peut tirer de cette étude est que cette simulation fait intervenir une trop grande variété de biais, tous de natures différentes, et que les biais tangentiels détectables semblent naître essentiellement des hétérogénéités en composition. Si cette même étude souligne qu'en l'absence de ces dernières, le décalage vers le côté jour de la région de pénétration devrait induire un biais thermique vers les plus hautes températures, elle montre également qu'ils ne sont finalement pas observables car majoritairement compensés sur presque toute la gamme spectrale (dominée par le méthane). Ils ne s'expriment que par l'intermédiaire du dioxyde de carbone qui est trop peu représenté pour impacter significativement l'inversion sur la température.

Pour simplifier notre investigation nous devons donc limiter les paramètres libres. Dans ce qui suit, nous avons cherché à mettre en évidence les effets strictement liés à la température, que ce soit au travers de la hauteur d'échelle ou au travers des propriétés optiques des molécules. Nous allons par la même occasion explorer l'influence de l'amplitude de ces hétérogénéités et l'influence des dimensions de l'exoplanète sur les biais thermiques. C'est dans cette optique que nous travaillerons sur des atmosphères types, réparties en 3 amplitudes de températures pour 2 dimensions d'exoplanètes :

- Trois aux dimensions de GJ 1214 b, la première évoluant sur une amplitude en température proche de celle constatée dans la simulation de [Charnay et al. \(2015\)](#), et deux autres de plus petits rapports R_p/H_0 , dont un correspondant au cas extrême, voire à la limite de la physique, d'une mini-Neptune ultra-chaude.
- Trois aux dimensions de HD 209458 b, exoplanète beaucoup plus grande que GJ 1214 b (rayon 5,5 fois supérieur, soit 15 fois le rayon terrestre), avec des amplitudes en température qui nous permettront d'explorer le domaine des Jupiters tempérés comme celui des Jupiters chauds, la dernière se rapprochant de la simulation atmosphérique discutées dans [Lines et al. \(2018\)](#).



5.1.2 Structure des atmosphères synthétiques

Nous allons décrire les deux types de structures atmosphériques sur lesquelles nous allons baser toute notre étude dans le but d'isoler les biais liés aux hétérogénéités tangentielles, puis d'observer de quelles manières des hétérogénéités verticales peuvent les influencer.

Les atmosphères aux colonnes isothermes

Pour isoler les effets thermiques, nous avons modélisé des atmosphères en supposant que les exoplanètes étaient en rotation synchrone autour de leurs étoiles hôtes et en simplifiant leurs structures. Nous limitons ainsi le nombre de paramètres à gérer dans la modélisation. Les profils thermiques sont construits de la manière suivante :

- Nous introduisons un contraste en température entre un côté jour chaud (T_j) et un côté nuit froid (T_n) justifié par la rotation synchrone où la proximité à l'étoile hôte.
- La transition entre les deux côtés peut être brutale et se produire au terminateur, l'atmosphère résultant ayant alors une forme de champignon avec pour chapeau le côté jour et pour pied le côté nuit.
- Nous introduisons ce que nous avons appelé l'angle de contraste β comme étant l'étalement angulaire de la transition en température entre le côté chaud et le côté froid (défini par rapport au plan du terminateur). S'il est nul, nous retrouvons le cas du champignon, s'il est égal à 180° , alors la température varie linéairement avec la longitude entre la température élevée du côté jour depuis le point substellaire et la température faible du côté nuit jusqu'au point anti-stellaire, dans quel cas l'atmosphère a plutôt une forme de poire.
- Nous pouvons appliquer tous les β intermédiaires et ainsi nous rapprocher de structures plus proches de la réalité. Comme l'angle de contraste est défini par rapport au plan du terminateur, l'atmosphère est symétrique par rapport à l'axe d'observation.
- À l'exception du cas du champignon, la température au terminateur est toujours égale à la moyenne du doublet de température $T_n - T_j$ que l'on considère.
- Ces atmosphères sont dominées par un mélange H_2/He , avec un ratio constant et une fraction molaire en absorbant constante de $\chi = 0,05$. Nous avons utilisé l'eau plutôt que le méthane comme absorbant pour la grande quantité de bandes d'absorption dans le proche infra-rouge et le visible et pour ne pas être gêné par les trous de données dont souffre le méthane.

Cette paramétrisation simplifie grandement la structure thermique par rapport à celles obtenues par les simulations dynamiques. Elle en capture néanmoins l'une des caractéristiques fondamentales (le gradient jour-nuit) et nous permet d'en étudier les conséquences observationnelles spécifiques en s'affranchissant d'autres hétérogénéités (verticales et azimutales). Nous limitons également le nombre de paramètres libres pour les inversions à 3 : le rayon planétaire (ou à 10 bar) R_p , la température T et l'abondance pour un absorbant unique χ_{mol} . Les doublets de températures ont été choisis en fonction des simulations réalisées sur GJ 1214 b (Charnay et al. 2015) et HD 209458 b (Lines et al. 2018), dans le souci toujours de se rapprocher des cas concrets, puis de manière un peu plus générale pour étendre l'étude. Ainsi :

- le doublet 300 - 650 K est assez représentatif de la simulation de GJ 1214 b

- le doublet 1000 - 1800 K est plus adapté pour HD 209458 b
- les doublets 500 - 1000 K et 1000 - 1500 K, communs aux deux types d'exoplanète, ont été appliqués pour affiner l'étude.

Nous conservons dans tous les cas les paramètres planétaires de ces deux objets et leur associons les atmosphères aux doublets correspondant. Nous couvrons ainsi différents types de corps : les objets tempérées comme les objets chauds, et nous couvrons également différents types de contrastes. Le doublet 300 - 650 K multiplie par 2 la hauteur d'échelle entre les deux hémisphères et la sensibilité des sections efficaces avec la température est maximale (en moyenne 2 - 3 ordres de grandeur). Le doublet 500 - 1000 K a un rapport des hauteurs d'échelle très proche mais les sections efficaces augmentent moins vite avec la température. Le doublet 1000 - 1500 K présente une dissymétrie moins forte de l'extension spatiale de l'atmosphère et les sections efficaces n'évoluent plus que sur un ordre de grandeur entre les températures extrêmes. Enfin le doublet 1000 - 1800 rétablit presque un facteur 2 entre les hauteurs d'échelle tout en reposant sur une faible sensibilité des sections efficaces avec la température. Nous espérons ainsi dégager des comportements plutôt géométriques et d'autres plutôt spectroscopiques.

Les Figures 5.1 et 5.2, illustrent la structure des atmosphères que nous générons de cette manière avec une exoplanète aux dimensions de GJ 1214 b. Le cadre de gauche donne les coupes méridionales (portées par la ligne de visée, soit l'axe étoile hôte/observateur) en pression et celui de droite en température. Au sein de chaque cadre, à gauche, nous avons diminué le rayon planétaire afin de mieux percevoir les hétérogénéités, tandis que nous proposons à droite la représentation à l'échelle afin de visualiser l'importance de l'atmosphère par rapport à l'exoplanète. Cette structure est symétrique par rapport à la ligne de visée donc elle est identique quelle que soit la coupe portée par cet axe. La pression de surface est fixée à $P_s = 10^6$ Pa et la pression de toit à $P_h = 10^{-4}$ Pa. Avec une telle amplitude, nous sommes certain d'atteindre la convergence des spectres discutée dans le chapitre précédent (voir Chapitre 3). L'altitude du toit atmosphérique est déduite de la hauteur d'échelle du côté chaud, la pression de toit est donc également la pression maximale que nous pouvons sonder en haute atmosphère. Nous avons illustré ces structures pour des angles de contraste β de 0° , 45° , 90° , 135° , et 180° .

Les structures atmosphériques étant les mêmes entre les deux types d'astres, nous n'avons représenté que les coupes à l'échelle dans le cas d'une exoplanète aux dimensions de HD 20958 b avec la Figure 5.3. Elle se scinde en deux cadres, celui du haut représente pour chaque doublet de température les structures atmosphériques en pression puis en température pour un angle de contraste β de 30° . Le cadre du dessous expose les mêmes informations mais cette fois-ci pour l'angle de contraste maximal (soit 180°). La pression de surface, la pression de toit, et la manière dont sont construites les atmosphères sont identiques au cas de GJ 1214 b, mais nous voulions mettre en évidence de par cette visualisation deux points :

- L'importance de l'aire atmosphérique en comparaison avec le coeur de l'exoplanète qui est beaucoup plus faible que dans le cas de GJ 1214 b, ce qui aura un effet sur l'importance ou la persistance des biais observationnels.
- Les angles d'ouverture et de pénétration discutés précédemment sont également plus faibles dans le cas de HD 209458 b que dans celui de GJ 1214b, ce qui nous permet d'en étudier l'influence sur les biais.

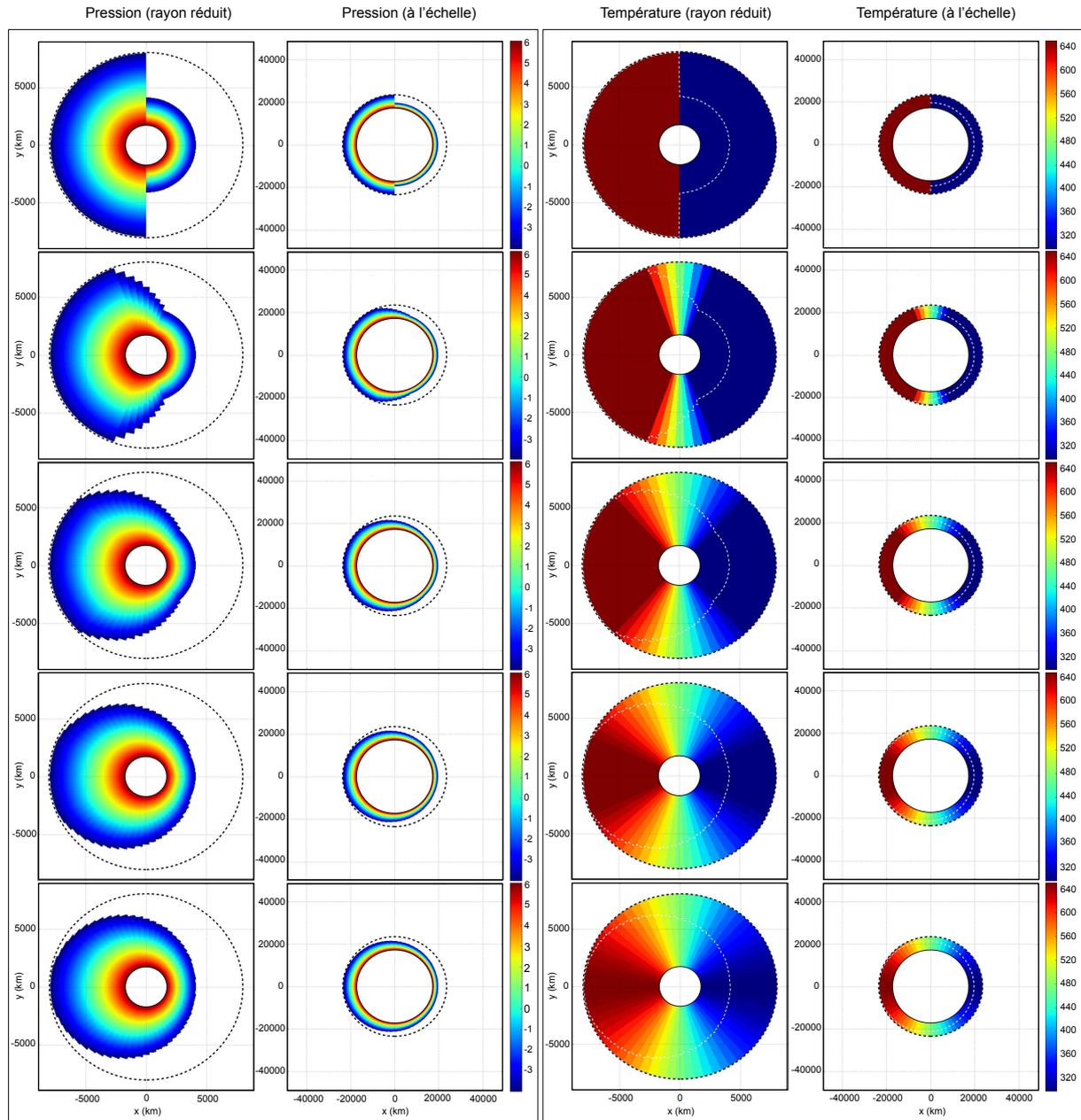


Figure 5.1: Coupes équatoriales de l'atmosphère de GJ 1214 b, le cadre de gauche illustre la structure en pression (à rayon réduit ou à l'échelle) et celui de droite la structure en température (à rayon réduit ou à l'échelle) pour le doublet 300 - 650 K. De haut en bas sont représentés respectivement les cas associés à des angles de contraste valant : 0° , 45° , 90° , 135° et 180° . GJ1214 est à gauche de ces planètes tandis que l'observateur est à droite.

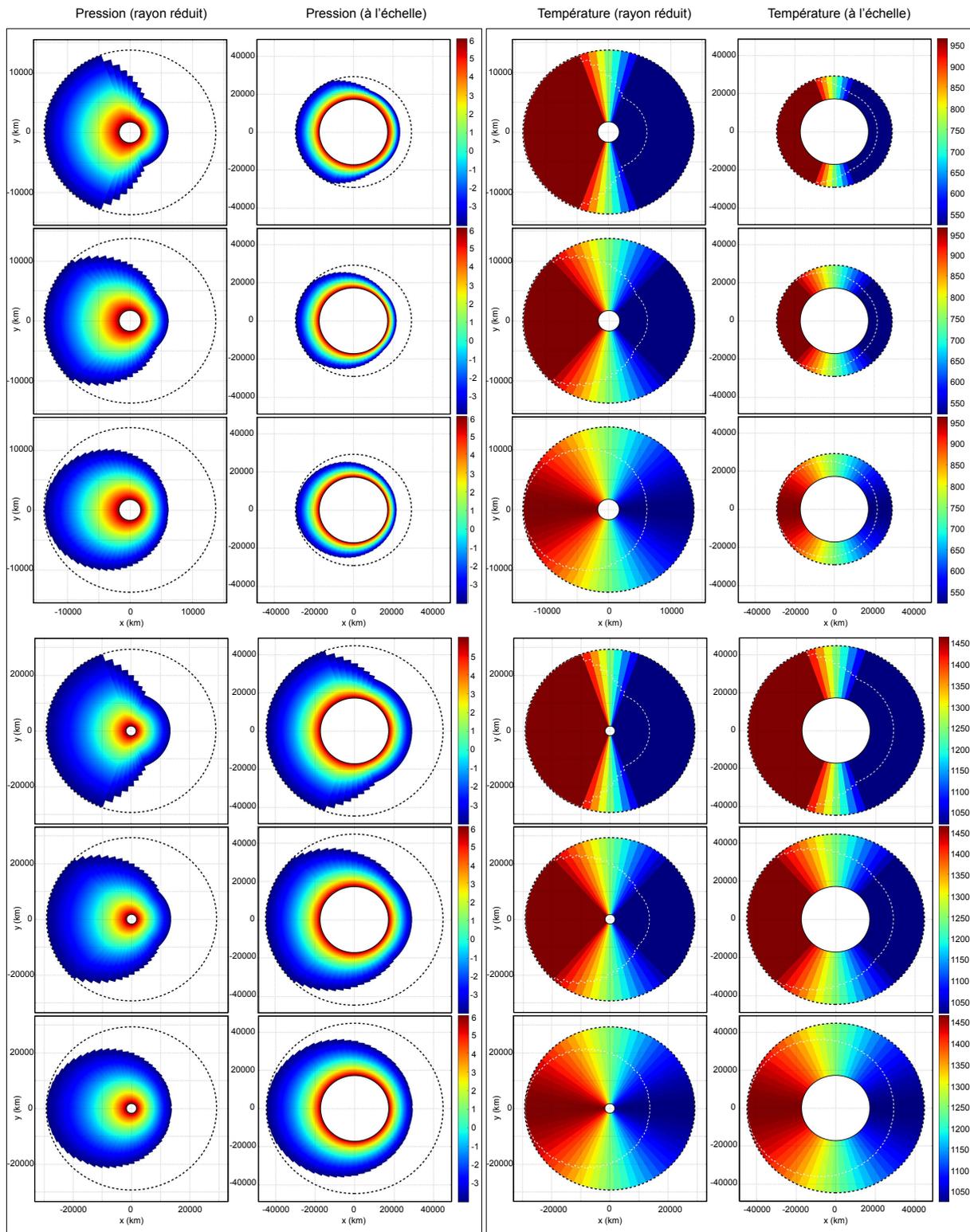


Figure 5.2: Coupes équatoriales de l'atmosphère de GJ 1214 b, le cadre de gauche illustre la structure en pression (à rayon réduit ou à l'échelle) et celui de droite la structure en température (à rayon réduit ou à l'échelle). Les 3 premières figures concernent le doublet 500 - 1000 K, tandis que les 3 derniers concernent le doublet 1000 - 1500 K. Dans chaque cas, sont représentés respectivement les cas associés à des angles de contraste valant : 45° , 90° , et 180° . GJ 1214 est à gauche de ces planètes tandis que l'observateur est à droite.

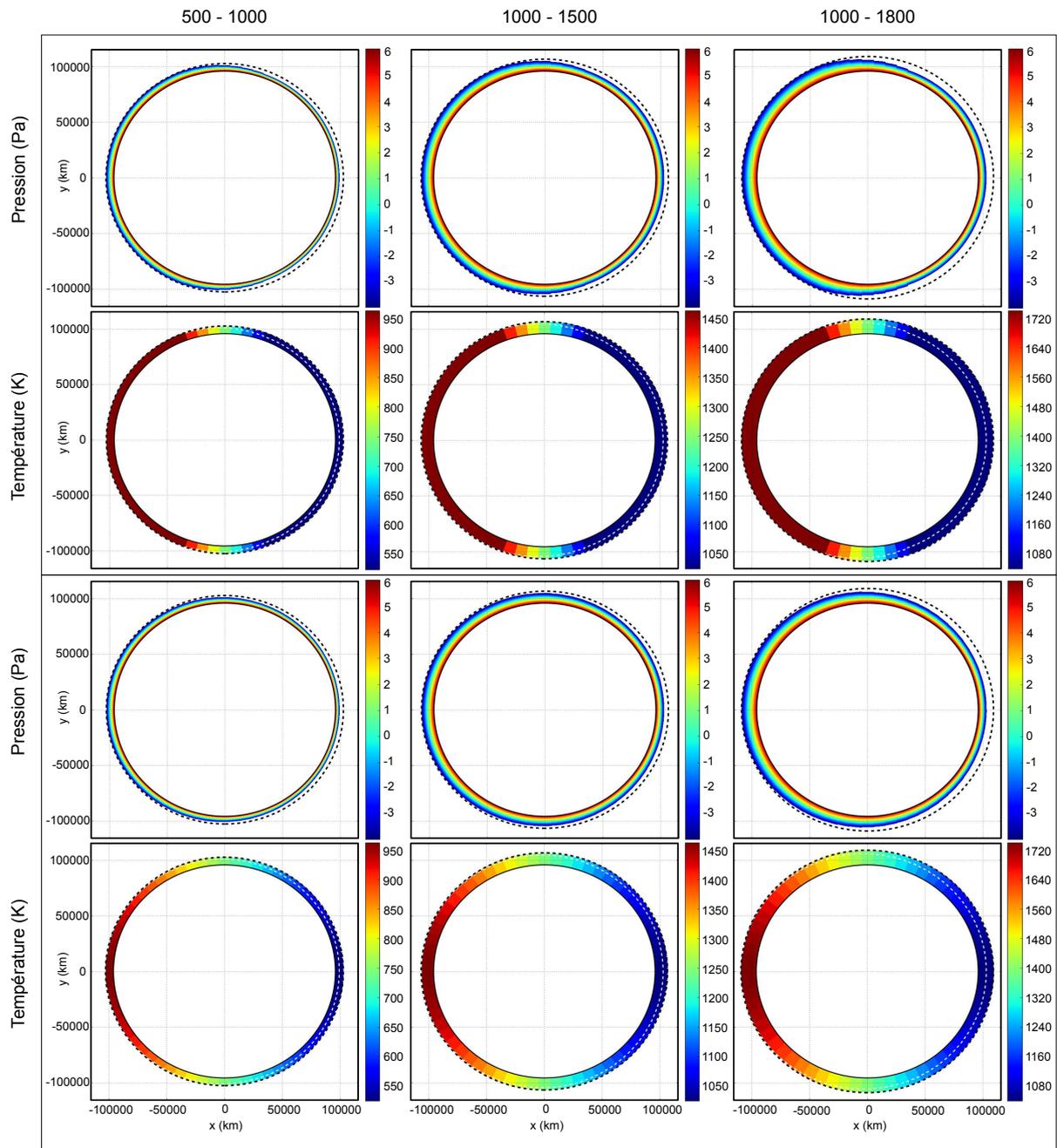


Figure 5.3: Coupes équatoriales à l'échelle de l'atmosphère à colonnes isothermes de HD 209458 b. Cadre du haut : en haut : coupes en pression (exprimée en puissance de 10) pour les 3 doublets 500 - 1000 K, 1000 - 1500 K et 1000 - 1800 K et un angle de contraste $\beta = 30^\circ$; en bas : coupes en température (exprimée en K) correspondantes. Cadre du bas : en haut : coupes en pression (exprimée en puissance de 10) pour les 3 doublets 500 - 1000 K, 1000 - 1500 K et 1000 - 1800 K et un angle de contraste $\beta = 180^\circ$; en bas : coupes en température (exprimée en K) correspondantes. HD 209458 est à gauche de ces planètes tandis que l'observateur est à droite.

Les atmosphères aux colonnes à deux températures

Pour se rapprocher des cas réels ou des simulations complexes, nous ajoutons une hétérogénéité supplémentaire rencontrée dans toutes les atmosphères denses, à savoir une basse atmosphère isotrope et de température élevée. Nous la modélisons par une couche isotherme qui s'étend depuis la surface jusqu'à une pression, et donc une altitude, prédéfinies. À partir de la simulation de GJ 1214 b décrite dans [Charnay et al. \(2015\)](#) mais aussi celle de HD 209458 b décrite dans [Lines et al. \(2018\)](#), nous avons choisi une pression de délimitation de 10^3 Pa. Dans le cas du doublet 300 - 650 K, nous avons appliqué une limite à 10^2 Pa pour illustrer le cas d'une pollution totale par l'isotherme dans les spectres en transmission. La température de cette couche isotherme est fixée à celle du point sub-stellaire même si nous avons conscience qu'elle n'est pas réaliste, la température de surface étant beaucoup plus élevée et décroissant de manière plus ou moins adiabatique jusqu'aux dites pression de transition (voir Figure 4.2).

L'objectif ici est de créer une hétérogénéité verticale aux altitudes qui nous intéressent en introduisant le moins possible de paramètres. La solution d'une couche isotherme était, pour une première approche, la plus simple et la plus pertinente au vu de nos contraintes et des effets que nous souhaitons mettre en évidence. Les colonnes atmosphériques de ces simulations sont donc marquées par une discontinuité de température à 10^3 Pa (ou à 10^2 Pa dans un cas) et nous appellerons ces atmosphères : "colonnes à deux températures".

Les Figures 5.4 et 5.5 illustrent ses structures avec une exoplanète aux dimensions de GJ 1214 b. Le cadre de gauche donne les coupes méridionales, toujours portées par la ligne de visée, en pression et celui de droite en température. Au sein de chaque cadre, à gauche, nous avons diminué le rayon planétaire afin de mieux percevoir les hétérogénéités, et nous proposons à droite une représentation à l'échelle. Nous avons fourni une illustration pour des angles de contraste de 0° , 45° , 90° , 135° , et 180° . La couche isotherme étant à la même température que le côté jour, les atmosphères ne sont dilatées qu'au sein de l'angle de contraste et du côté nuit. Elle représente entre 18 et 24 couches des grilles sphériques, ceci dépendant de la température chaude du doublet.

La Figure 5.6 illustre ces mêmes structures atmosphériques mais dans le cas d'une exoplanète des dimensions de HD 209458 b. Comme pour la Figure 5.3, nous l'avons séparé en deux cadres, celui du haut pour un angle de contraste de 30° et celui du bas à 180° . Dans les deux cas nous proposons les coupes méridionales portées par la ligne de visée en pression, en température, et à l'échelle. La dilatation des parties de l'atmosphère n'étant pas à la température du point sub-stellaire est plus franche pour un objet de ces dimensions car la gravité diminue moins rapidement avec l'altitude. En conséquence, la couche isotherme comprend les 22 à 25 premières couches de la simulation.

Nous appliquons ensuite Pytmosph3R sur ces simulations afin de générer les spectres associés et commencer notre étude. À noter que le code a tourné dans sa version 3D et non dans sa version 1D pour tenir compte des problèmes liés à la résolution de la grille sphérique de base.

5.1.3 Paramétrisation de Tau-REx

Système de paramètres et distributions *a priori*

Par cette démarche, nous limitons le nombre de paramètres libres dans l'inversion à 3 : le rayon planétaire, la température et l'abondance en absorbant. Nous utilisons le mode isotherme et iso-abondance de Tau-REx. Les spectres obtenus grâce à Pytmosph3R appliqué aux atmosphères synthétiques seront donc inversés sur la base de cet espace des paramètres. Pour toutes les simulations ex-

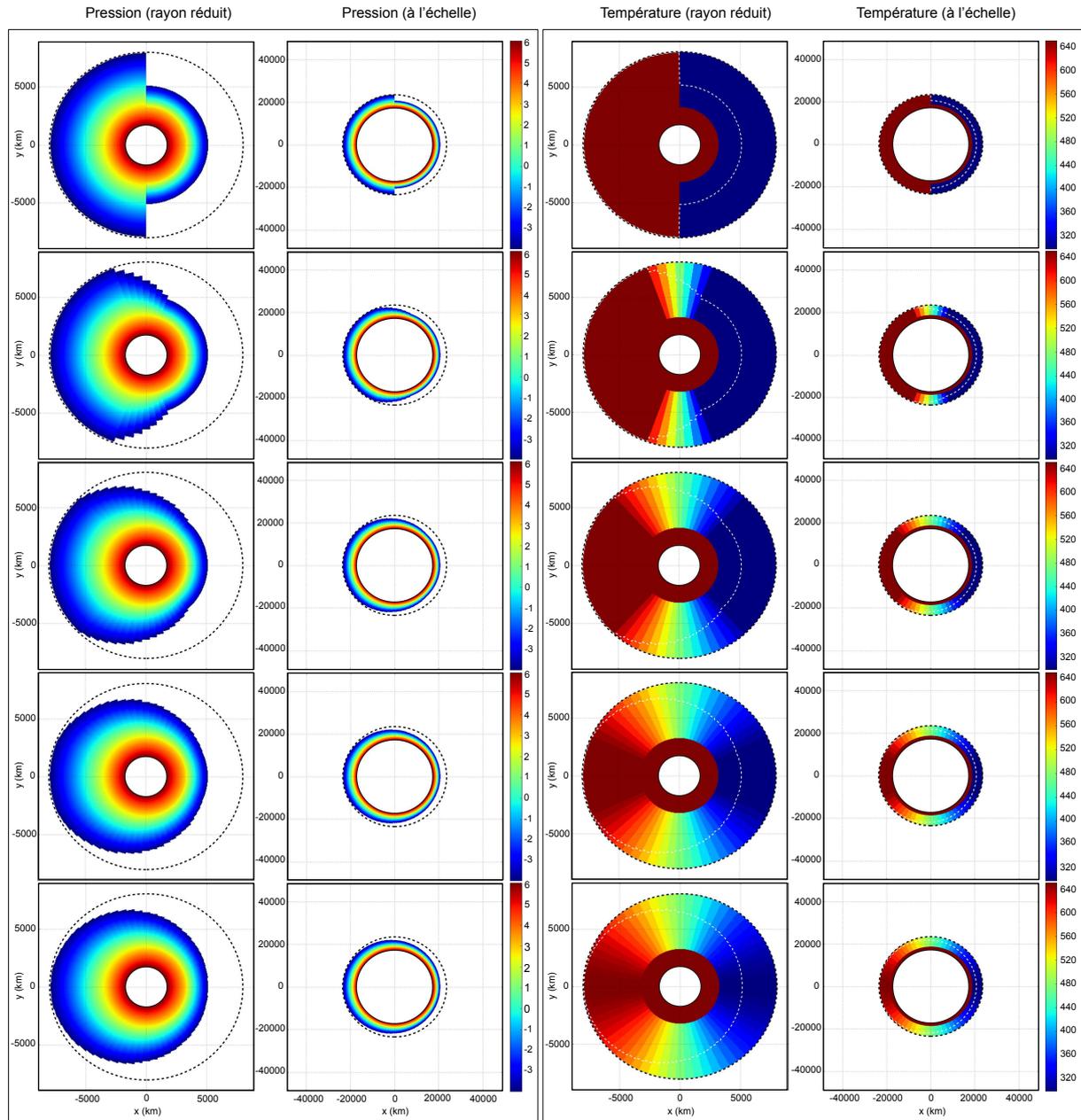


Figure 5.4: Coupes équatoriales de l'atmosphère de GJ 1214 b, le cadre de gauche illustre la structure en pression (à rayon réduit ou à l'échelle) et celui de droite la structure en température (à rayon réduit ou à l'échelle) pour le doublet 300 - 650 K. De haut en bas sont représentés respectivement les cas associés à des angles de contraste valant : 0° , 45° , 90° , 135° et 180° . La couche isotherme en basse atmosphère s'arrête à 10^3 Pa. GJ 1214 est à gauche de ces planètes tandis que l'observateur est à droite.

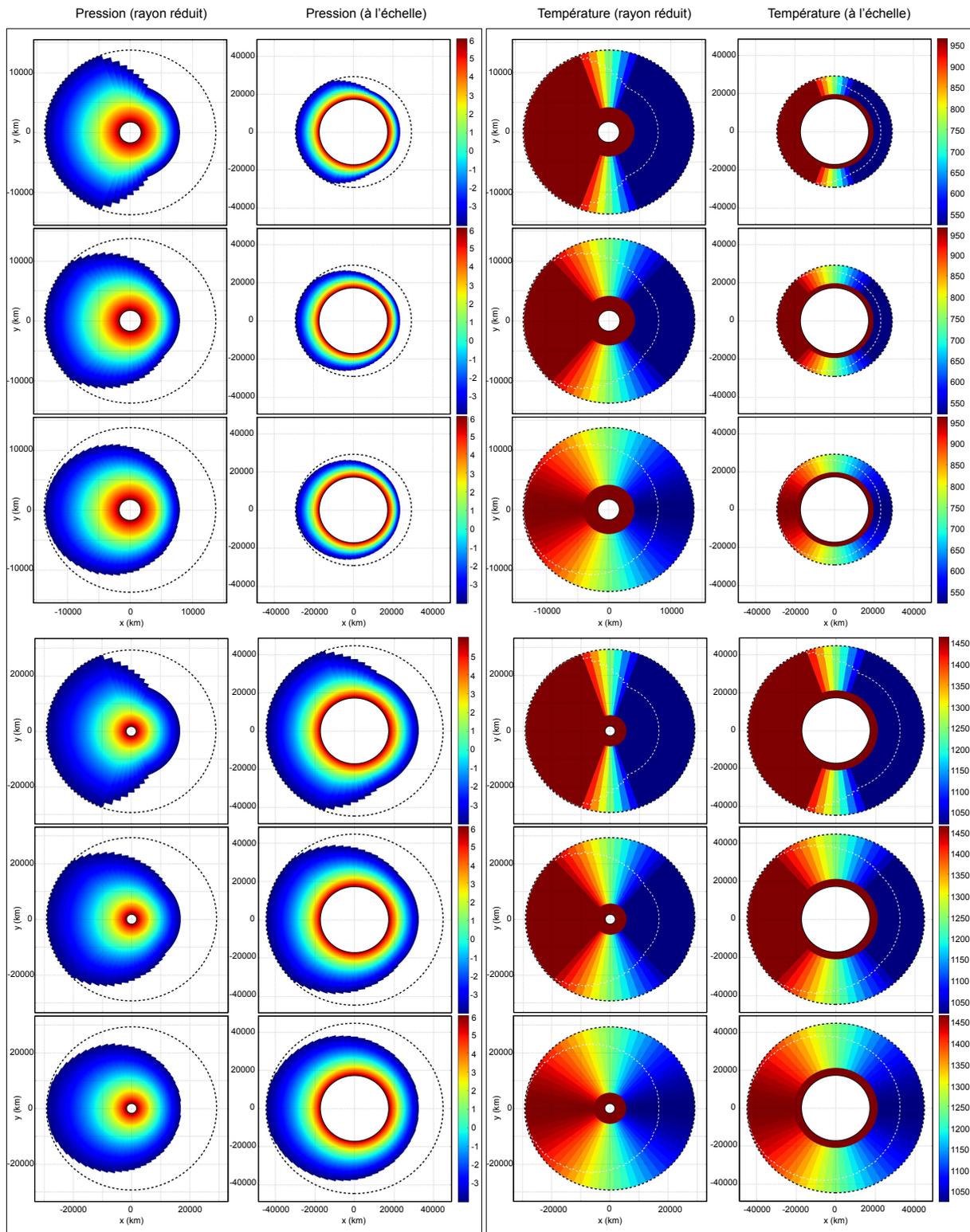


Figure 5.5: Coupes équatoriales de l'atmosphère de GJ 1214 b, le cadre de gauche illustre la structure en pression (à rayon réduit ou à l'échelle) et celui de droite la structure en température (à rayon réduit ou à l'échelle). Les 3 premières figures concernent le doublet 500 - 1000 K, tandis que les 3 derniers concernent le doublet 1000 - 1500 K. Dans chaque cas, sont représentés respectivement les cas associés à des angles de contraste valant : 45° , 90° , et 180° . La couche isotherme en basse atmosphère s'arrête à 10^3 Pa. GJ 1214 est à gauche de ces planètes tandis que l'observateur est à droite.

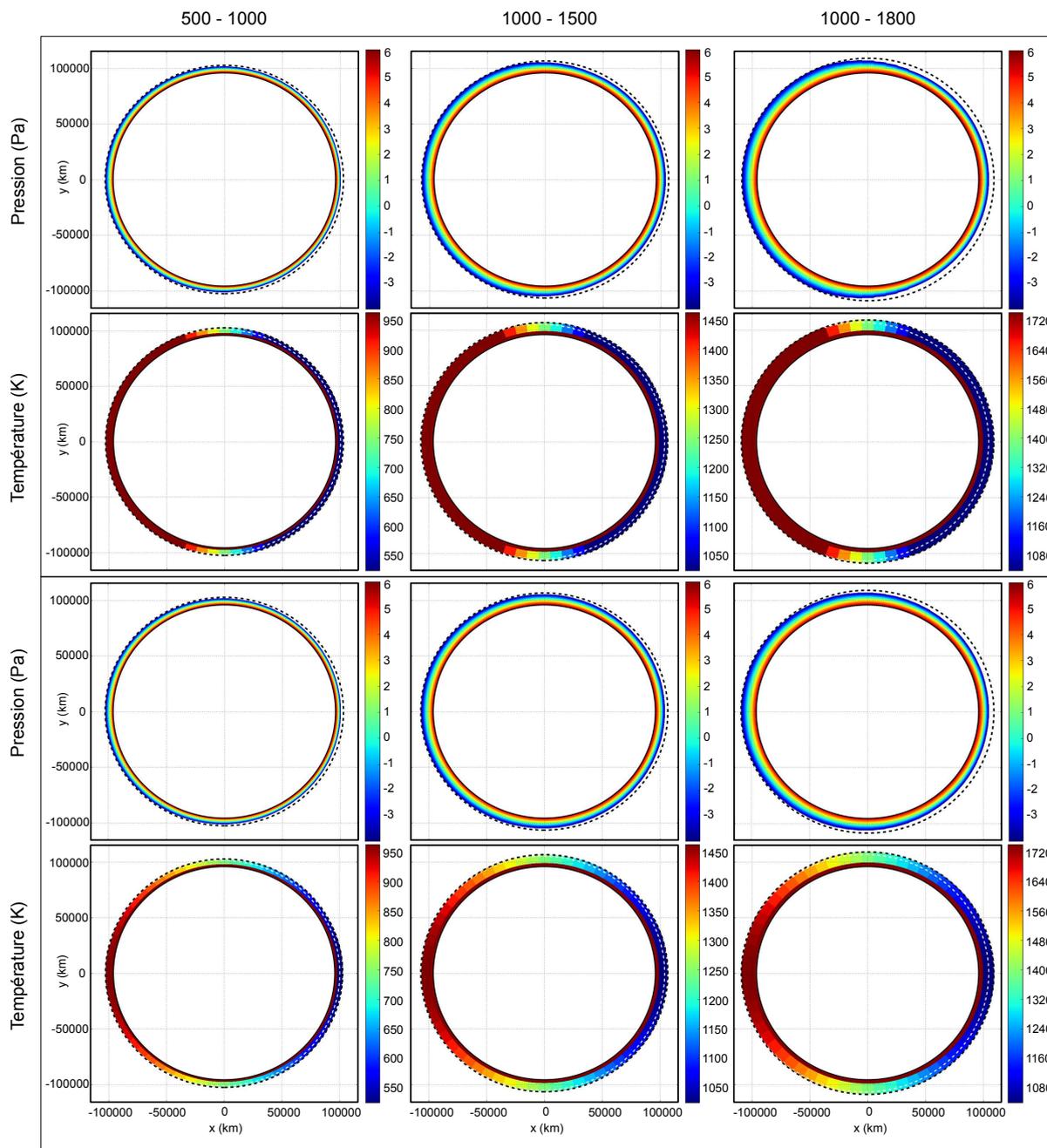


Figure 5.6: Coupes équatoriales à l'échelle des atmosphères aux colonnes à 2 températures de HD 209458 b. Cadre du haut : en haut : coupes en pression (exprimée en puissance de 10) pour les 3 doublets 500 - 1000 K, 1000 - 1500 K et 1000 - 1800 K et un angle de contraste $\beta = 30^\circ$; en bas : coupes en température (exprimée en K) correspondantes. Cadre du bas : en haut : coupes en pression (exprimée en puissance de 10) pour les 3 doublets 500 - 1000 K, 1000 - 1500 K et 1000 - 1800 K et un angle de contraste $\beta = 180^\circ$; en bas : coupes en température (exprimée en K) correspondantes. La couche isotherme en basse atmosphère s'arrête à 10^3 Pa. HD 209458 est à gauche de ces planètes tandis que l'observateur est à droite.

plottées nous avons utilisé les distributions *a priori* suivantes :

- le rayon à 10 bar R_p : fonction porte bornée $[0,1 ; 0,4]$ pour la mini-Neptune et $[0,5 ; 2]$ pour la géante gazeuse,
- la température T : fonction porte bornée $[200 ; 2000]$ K dans les deux cas,
- la fraction molaire en eau $\log_{10}(\chi_{\text{H}_2\text{O}})$: fonction porte bornée $[0 ; 1]$ dans les deux cas,
- le poids moléculaire moyen μ : fonction porte bornée $[0 ; 0,4]$ dans les deux cas.

Le poids moléculaire moyen est corrélé à la fraction molaire en eau, ce qui n'en fait pas un paramètre libre à part entière, néanmoins le fait de l'ouvrir en tant que paramètre d'inversion permet éventuellement d'imposer une contrainte forte sur la composition de l'atmosphère. Les pressions de surface et de toit sont les mêmes que celles utilisées pour la génération des atmosphères, ainsi que le ratio He/H_2 qui a une influence non négligeable sur la hauteur d'échelle.

Discussion sur le choix des données moléculaires

En ce qui concerne les données spectroscopiques, le set de section efficace utilisé dans un premier temps est le set 10_{wno} qui évolue entre 10 et 30000 cm^{-1} , soit entre 0,333 et $1000 \mu\text{m}$. Nous n'utilisons pas l'intégralité de la gamme spectrale lors de la génération des spectres ou lors de l'inversion, nous nous cantonnons aux domaines des instruments à venir, soit essentiellement entre 0,6 et 20, voire entre 1 et $10 \mu\text{m}$. Pytmosph3R étant générique du point de vue de la nature des sources d'opacité, nous pouvons utiliser n'importe quel set, mais nous nous sommes d'abord tournés vers celui-ci car le nombre de bandes était intéressant, ni trop élevé, ni trop faible d'un point de vue strictement technique. Nous n'avons pas eu le temps d'explorer d'autres bases de données lors de cette étude. Nous souhaitions également effectuer ce travail sur la base de k-distributions calquées sur les bandes d'observation des appareils du JWST ou de ceux d'ARIEL, mais à l'issue de ce travail, Tau-REx ne fonctionnait pas encore avec ce mode. D'importantes avancées devraient voir le jour à l'issue de la collaboration étroite entre le Laboratoire d'astrophysique de Bordeaux (LAB) et l'University College London (UCL) sur ce dernier point. L'utilisation de ces k-distributions devrait alors permettre d'explorer plus efficacement et plus rapidement le champ d'étude que nous ouvrons ici. En attendant, nous travaillons en mode "raie par raie".

Les choix de la gamme spectrale et du set de section efficace peuvent s'avérer importants lorsque nous effectuons une inversion. Le set 10_{wno} , qui était pratique pour des raisons techniques, l'est beaucoup moins du fait de sa résolution variable. Elle explose effectivement dans le visible et décroît sur plusieurs ordres de grandeur dans le proche infra-rouge qui est le domaine spectral de prédilection pour la caractérisation atmosphérique. Par conséquent, nous pouvons nous attendre à une pondération importante du rouge et du très proche infra-rouge lors des inversions alors que l'essentiel de l'information moléculaire est contenue à plus grande longueur d'onde, qui est en conséquence beaucoup moins représentée. La bonne manière de réaliser ce travail aurait été de résoudre à très haute résolution le transfert radiatif au moyen de Pytmosph3R, ce qui est réalisable mais pas dans des temps de calcul raisonnables, puis de ré-échantillonner le spectre haute résolution afin qu'il corresponde à la résolution de l'appareil souhaité. Tau-REx serait à son tour sollicité avec le même set de section efficace, ce qui augmente, là-encore, considérablement les temps de calculs et les besoins en mémoire vive. Cette démarche n'était donc pas seulement très coûteuse en temps, mais elle était aussi très exigeante en ressources. Suite à une collaboration avec Ingo Waldmann (UCL), nous l'avons finalement appliqué dans les cas clés et à partir

du set 10_{wno} , tout en gardant à l'esprit que ce dernier est loin d'être un set de données à haute résolution. Il ne permet le ré-échantillonnage de manière convenable qu'entre 0,6 et 10 μm , soit tant que la résolution est supérieure à la résolution minimale de l'instrument (ici $R = 100$). Les résultats de cette approche serviront d'une certaine manière de soutien aux discussions sur les résultats que nous avons obtenus avec le set 10_{wno} . Néanmoins, si 10_{wno} ne repose certes pas sur un échantillonnage optimal au vu de l'instrumentation qui nous intéresse, ils sont suffisants pour illustrer, au moins d'un point de vue qualitatif, les biais thermiques que nous cherchons à caractériser.

Calcul du bruit et des barres d'erreur associés aux spectres d'entrée

Enfin nous devons bruite les spectres et leur associer des barres d'erreur. Dans tout ce qui va suivre, nous nous sommes placés dans le cas d'une observation réalisée par un télescope comme le JWST, mais nous adoptons les résolutions du set de section efficace pour estimer le bruit de photon $\sigma_{\text{obs},\lambda}$. Nous appliquons la formule Eq. (5.1) en effectuant l'intégration point après point pour tenir compte de la résolution variable.

$$\sigma_{\text{obs},\lambda} = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{obs},\lambda}}} \quad (5.1)$$

$$N_{\text{obs},\lambda} = \frac{\pi \tau_{\lambda} c \Delta t R_s^2 A}{2d_{\star}^2} \int_{\lambda_{wl}}^{\lambda_{wl+1}} \frac{d\lambda}{\lambda^4 \left(\exp\left(\frac{hpc}{k_B T_s \lambda}\right) - 1 \right)} \quad (5.2)$$

avec, rappelons-le, $N_{\text{obs},\lambda}$ le nombre de photons collectés à une longueur d'onde donnée, τ_{λ} le rendement de photon de l'instrument (ici identifié à celui des instruments du JWST), A est la surface de captation de ce dernier (également prise à 25 m^2 comme le JWST), Δt le temps d'intégration que nous avons établi à 8400 s, d_{\star} la distance de l'étoile ici correspondant respectivement 42,5 et 154 années lumière et T_s sa température effective. Les bornes d'intégration λ_{wl} et λ_{wl+1} , ne sont plus calculées à partir de la résolution instrument mais déduites de la résolution constante en nombre d'onde du set ($R = 10 \text{ cm}^{-1}$). $\sigma_{\text{obs},\lambda}$ serviront à la fois à bruite le signal (gaussien d'écart-type $\sigma_{\text{obs},\lambda}$) et comme barre d'erreur aux spectres d'entrée inversés par Tau-REx.

L'étude réalisée au laboratoire ne comprend pas les systématiques de l'instrument qui devraient augmenter significativement les barres d'erreur du spectre d'entrée mais aussi celles des distributions *a posteriori*, et en particulier au-delà de 10 μm . Nous avons utilisé la formule ci-dessus pour modéliser le bruit mais nous garderons à l'esprit que les comportements que nous allons mettre en évidence dans les paragraphes à venir peuvent voir leurs impacts s'amoinrir avec des recouvrements plus francs entre les distributions *a posteriori*.

En collaboration avec l'UCL, nous avons effectué une série d'inversion en tenant compte de ces systématiques via le simulateur de bruit PandExo développé par [Batalha et al. \(2017\)](#). Cet algorithme est capable de simuler des observations "réelles" à partir de n'importe quel spectre en transmission et pour tous les modes d'observation du JWST (tant que la résolution d'entrée le permet). Si cet outil a permis l'estimation des barres d'erreur, essentielles lors de l'inversion, les spectres d'entrée n'ont pas été bruités. En effet, les résultats de cette approche ont été utilisés dans le cadre d'une publication dans laquelle nous cherchions à mettre en évidence les effets bruts des hétérogénéités, indépendamment du bruit stellaire ou instrumental. Les barres d'erreur ne servaient donc que la technique et non la simulation à proprement dit des observations.

5.2 Impact sur les spectres en transmission

Nous allons dans un premier temps mettre en évidence l'influence du paramètre β (l'angle de contraste qui définit le gradient thermique jour/nuit) sur les spectres en transmission. Une tendance se profile et laisse entrevoir une dépendance au rayon planétaire, à l'amplitude du doublet de température et à la gamme de températures.

5.2.1 Cas de la mini-Neptune

Les spectres en transmission et leurs différences

Dans la Figure 5.7 Nous avons représenté l'influence de l'écart thermique jour-nuit (doublet $T_n - T_j$) et de l'angle de contraste sur les spectres en transmission. Dans un souci de visibilité, nous n'avons représenté qu'une douzaine d'entre eux si on exclut le cas champignon correspondant à une transition brutale entre le côté jour et le côté nuit ($\beta = 0^\circ$). Le pas est donc de 15° pour balayer tous les cas entre 0° (cas champignon) et 180° d'ouverture (cas poire). Les indices sur les courbes indiquent l'identité de l'angle de contraste comme un multiple de ce pas, ainsi la courbe annotée 1 correspond à $\beta = 7,5^\circ$ et ainsi de suite jusqu'à 12 qui correspond à $\beta = 180^\circ$. Pour chaque série de β , le groupe de courbes compris entre deux spectres extrêmes ($\beta = 0^\circ$ et $\beta = 180^\circ$ en noir) forme ce qu'on appellera un paquet. Le spectre noir de plus grande amplitude est associé au cas champignon et le plus faible à celui de la poire. Notons que ces spectres ne sont pas ceux utilisés comme entrées dans l'algorithme de traitement du signal, ils sont bruités avant l'étape d'inversion comme cela a été présenté dans le paragraphe précédent (voir § 5.1.3). En présence de bruit, si la tendance que nous mettrons en évidence reste évidente pour les premiers angles de contraste, elle s'estompe rapidement, rendant la figure totalement illisible et les différences absolues fondues dans le bruit.

La Figure 5.8, quant à elle, donne les différences entre les spectres au sein de chaque paquet. Dans un souci de lisibilité, nous avons ordonné les figures de manière à pouvoir immédiatement comparer les différences en présence (à droite) ou en l'absence de la couche isotherme (à gauche). On soulignera que les échelles ne sont plus les mêmes entre les deux types d'atmosphère. La courbe noire correspond à la différence enregistrée entre les deux cas extrêmes.

Des spectres qui convergent au-delà d'un angle de convergence

Commentons dans un premier temps la série à colonnes isothermes. Le contraste thermique ayant un effet à la fois sur la hauteur d'échelle et sur le pouvoir absorbant (qui augmente significativement avec la température quand elle est inférieure à 1200 K), plus la gamme de températures est élevée, plus le flux relatif l'est également. À cela s'ajoute l'expansion des paquets (groupe de spectres d'un même écart thermique) lorsque β varie entre 0° et 180° . Les différences entre les spectres au sein d'un doublet augmentent très fortement avec la gamme et l'amplitude en température. De 100 ppm à plus de 1600 ppm pour le cas 300 - 650 K (suivant le domaine de longueur d'onde et l'angle β considéré), nous passons à 200 - 3800 ppm avec le doublet 500 - 1000 K et 300 - 8000 ppm avec le doublet 1000 - 1500 K. On constate que malgré la présence, à l'exception du cas champignon, d'un terminateur commun à la température moyenne, ces atmosphères n'ont pas du tout les mêmes signatures spectroscopiques et que leurs inversions vont nous renvoyer des solutions très différentes. Difficile néanmoins de véritablement raisonner sur cette seule base pour tenter de prédire de quelles manières les biais vont se manifester, sur quels paramètres (température ou abondance) et avec quelles intensités. Cependant, nous pouvons déjà constater une tendance lorsque l'angle de contraste s'ouvre. Dans le cas 300 - 650 K, les spectres

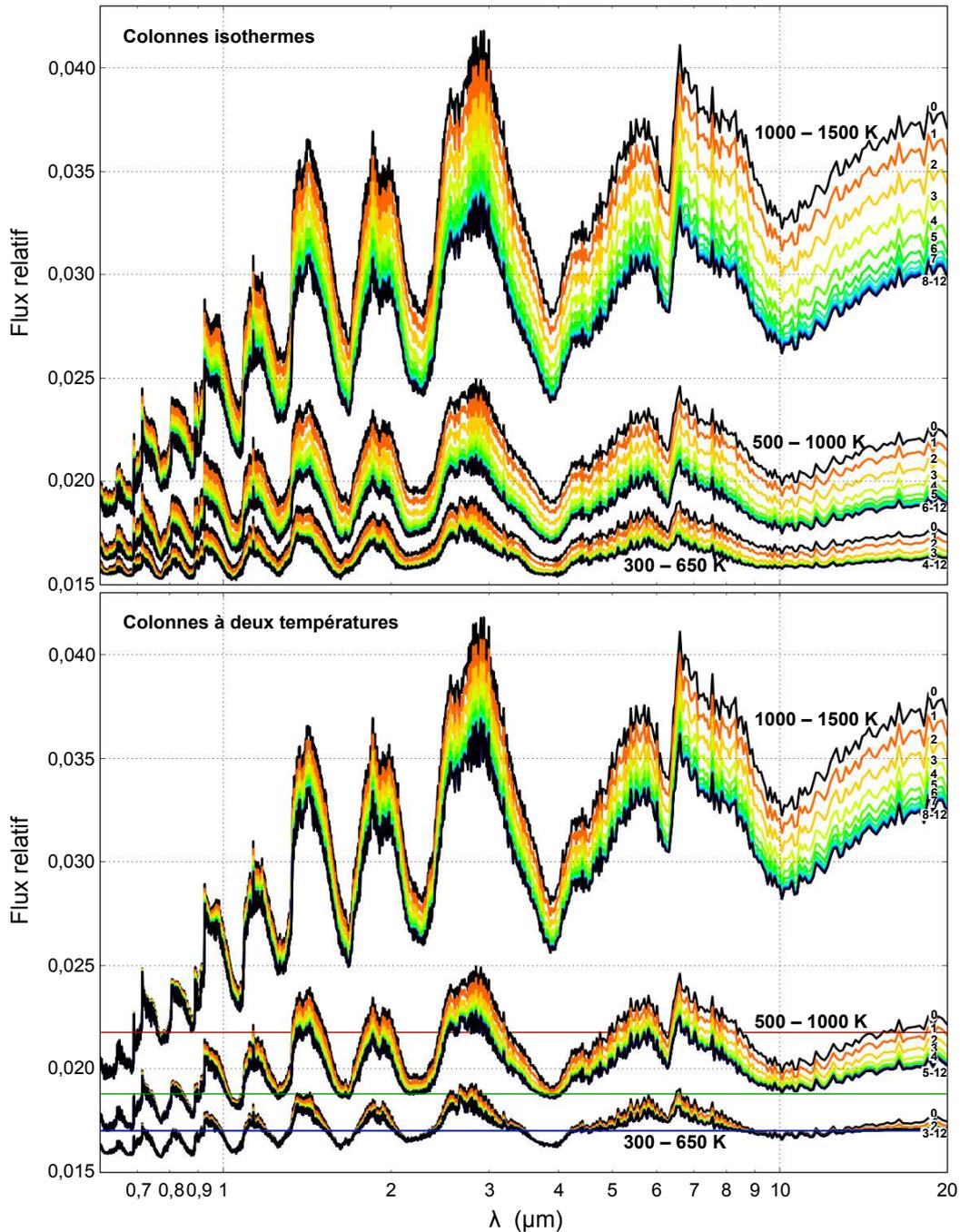


Figure 5.7: Spectres en transmission obtenus au moyen de Pytmosph3R sur les atmosphères à colonnes isothermes (en haut) et celles à deux températures (en bas). Sont superposés les spectres pour les angles β : 0° , 7° , 14° , 22° , 29° , 37° , 45° , 52° , 59° , 67° , 75° , 82° et 90° . Ils sont indiqués dans l'ordre de 0 à 12 sur les figures, et regroupés lorsque les spectres ne sont plus suffisamment discernables. Les spectres en traits pleins noirs correspondent toujours aux angles extrêmes (cas champignons et poires). Les 3 doublets de températures sont proposés sur la même figure et sont indiqués au-dessus des paquets de spectres correspondants. Dans le cas des colonnes à deux températures, l'interface entre la couche isotherme et la plus haute atmosphère est représentée par un trait plein (300 - 650 K, bleu ; 500 - 1000 K, vert ; 1000 - 1500 K, rouge).

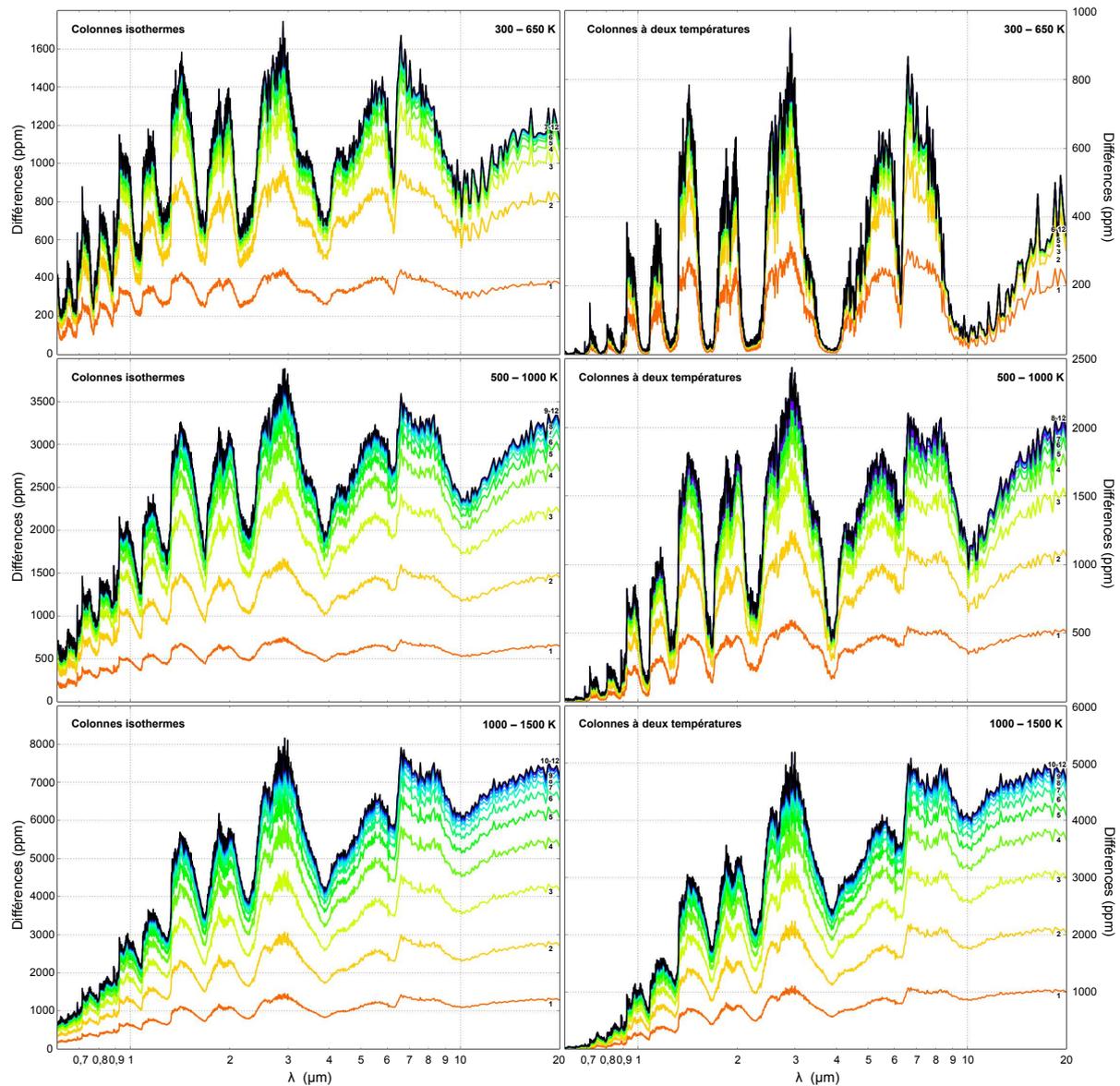


Figure 5.8: Différences entre les spectres de la Figure 5.7 calculées à partir du spectre $\beta = 0^\circ$ et exprimées en ppm. À gauche sont représentées ces différences pour les 3 doublets de températures avec des colonnes isothermes. Ces mêmes figures sont représentées à droite dans le cas des colonnes à deux températures. Les échelles ne sont pas les mêmes pour les deux types d'exoplanètes.

pour $\beta \geq 90^\circ$ ne sont presque plus discernables entre eux et présentent des différences quasi identiques avec le spectre de référence. Ces mêmes différences sont inférieures à un bruit moyen de l'ordre de 50 - 100 ppm dans cette gamme. Nous devrions donc pour $\beta \geq 90^\circ$ aboutir à des solutions Tau-REx identiques, ou tout du moins très proches, et constater un effet de convergence sur les distributions *a posteriori* des paramètres d'inversion. La même remarque peut être formulée avec les autres doublets de températures pour lesquels cette convergence semble survenir respectivement aux alentours de $\beta = 135^\circ$ et $\beta = 165^\circ$, angles à partir desquels les différences entre les spectres sont inférieures à 100 ppm. Nous verrons que cette analyse est confortée par les résultats obtenus lors des inversions de ces spectres par Tau-REx (§ 5.3.2)

Effets directs de la couche isotherme sur les spectres

Ajouter une couche isotherme à la température du côté jour a un effet très remarquable sur les spectres. Les doublets les plus affectés sont 300 - 650 K et 500 - 1000 K, qui sont également les moins opaques, les moins étendus, et ceux qui sondent bas dans l'atmosphère. Nous avons superposé sur la Figure 5.7 la position de l'interface entre la couche isotherme et le reste de la structure atmosphérique régie en température par l'angle de contraste β . La courbe bleue est associée au doublet 300 - 650 K et la verte à 500 - 1000 K. Dans les deux cas, les spectres paraissent beaucoup plus resserrés au sein d'un paquet, voire pour certaines longueurs d'onde, quasi-superposables. Comme nous pouvons le constater, cela survient aux bandes pour lesquelles le rayon effectif correspondant est proche ou inférieur à la position de la dite interface. L'extension spatiale et le pouvoir absorbant plus faibles de 300 - 650 K, et à moindre mesure de 500 - 1000 K, font que la région radiativement significative est aussi plus haute en pression, et qu'une partie du spectre est littéralement dominée par l'isotherme. Cet isotherme étant commun à tous les angles β , les signatures spectrales dans ces bandes sont indiscernables. Nous observons donc :

- une convergence plus rapide que dans le cas des atmosphères sans couche isotherme et donc pour des angles de contraste plus faibles (visiblement autour de $\beta = 45^\circ$ dans le cas 300 - 650 K),
- cette convergence s'effectuera vers des solutions très différentes puisque les spectres n'ont plus les mêmes allures,
- la pollution de la signature spectroscopique par la couche isotherme se traduira par une température inversée intermédiaire entre celle de la dite couche et celle obtenue en son absence,
- tout cela sera mis en évidence lorsque nous interpréterons les résultats d'inversions (§ 5.3.3).

L'ajout d'une couche isotherme dans les cas plus chauds a une influence minimale sur l'angle β critique au-delà duquel les courbes deviennent indiscernables. Cette couche n'est en effet sondée que par une petite fraction du spectre visible. Ainsi, pour le cas 500-1000K, cet angle critique passe de 105° à $75-90^\circ$ et il n'est pas modifié pour le cas 1000 - 1500 K ($\beta = 150^\circ$).

Effets indirects de la couche isotherme sur les spectres

Nous constatons dans tous les cas une compression plus ou moins marquée des paquets dans les bandes qui ne sont pas affectées directement par l'isotherme, et ce même lorsque le niveau sondé est très éloigné de l'interface. Ceci se traduit sur la Figure 5.8 par des différences entre les deux extrêmes, mais aussi entre spectres intermédiaires, plus faibles de quelques centaines de ppm pour le doublet 300 - 650 K à 3000 ppm environ pour le doublet 1000 - 1500 K. Sur la Figure 5.7, en termes de flux relatif, les

spectres des cas champignons sont très proches entre les deux études tandis que ceux des cas poires sont très différents.

Concernant ces atmosphères poires, les amplitudes relativement faibles de l'écart thermique jour/nuit limitent la variété de températures dans les régions proches du terminateur. En conséquence, même si l'angle de pénétration est grand, c'est le terminateur qui domine très largement sur les parcours des rayons échantillons puisqu'il fait office de central. Nous pouvons ainsi considérer que la signature thermique, du point de vue des opacités, correspond à celle du terminateur. La forme du spectre est très proche de celui généré à partir d'une atmosphère isotherme à la température moyenne du doublet. Le flux plus important lorsque nous ajoutons une couche à haute température en basse atmosphère s'explique justement par l'extension plus importante de cette basse atmosphère. Les colonnes à deux températures, du terminateur notamment, ainsi que les régions radiativement significatives sont donc ré-haussées. Le contraste de densité moléculaire entre les colonnes aux températures proches de celle du côté jour et celles de plus faibles températures est beaucoup moins marqué et les contributions plus équilibrées. Les atmosphères à profils dithermes sont donc plus opaques, et portent des signatures spectroscopiques plus équilibrées entre les températures chaudes et les températures froides comprises dans les régions de pénétration. Tous les cas intermédiaires subissent un effet similaire qui s'amointrit très progressivement lorsque β tend vers 0° . En résulte :

- la compression des paquets de spectre
- une convergence plus rapide puisque les écarts entre les spectres sont plus faibles
- des effets géométriques indirects car bien que les spectres poires ne soient pas identiques aux deux types d'atmosphères, leurs allures, et donc leurs signatures thermiques, sont les mêmes. Cela se traduira par une rétro-action de l'algorithme de traitement du signal sur l'abondance et le rayon à 10 bar qui compensera ces effets (voir § 5.3.3).

En conclusion, dans les cas 500 - 1000 K et 300 - 650 K, l'isotherme intervient directement dans la signature spectroscopique de l'atmosphère et risque de polluer très significativement les résultats de l'inversion. L'effet direct est prédominant pour le doublet 300 - 650 K est beaucoup plus modéré pour 500 - 1000 K. Tous les doublets subissent une altération géométrique découlant d'une basse atmosphère plus étendue et donc un effet indirect de l'isotherme. Comme lors de l'analyse de ces spectres, nous constaterons avec ces atmosphères aux colonnes à deux températures deux tendances distinctes lors de leurs inversions que l'on associera à des biais thermiques de deux types tout aussi distincts.

5.2.2 Cas de la géante gazeuse

La Figure 5.9 propose les spectres en transmission obtenus par l'outil Pytmosph3R à partir des structures atmosphériques à colonnes isothermes ou à deux températures avec une exoplanète aux dimensions de HD 209458 b. Nous rappelons que le pas est de 15° de contraste pour balayer tous les cas entre 0° (cas champignon) et 180° d'ouverture (cas poire). Les indices sur les courbes indiquent l'identité de cet angle comme un multiple du pas. Pour chaque série de β , le groupe de courbes est compris entre deux spectres de couleur noire correspondant aux cas extrêmes. Le spectre noir de plus grande amplitude est toujours associé au cas champignon tandis que le plus faible au cas de la poire. Le doublet correspondant au paquet est indiqué à proximité.

La Figure 5.10, quant à elle, donne les différences entre les spectres. Cette différence est exprimée en ppm et est calculée en prenant pour référence les cas extrêmes $\beta = 0^\circ$ pour lesquels l'absorption est

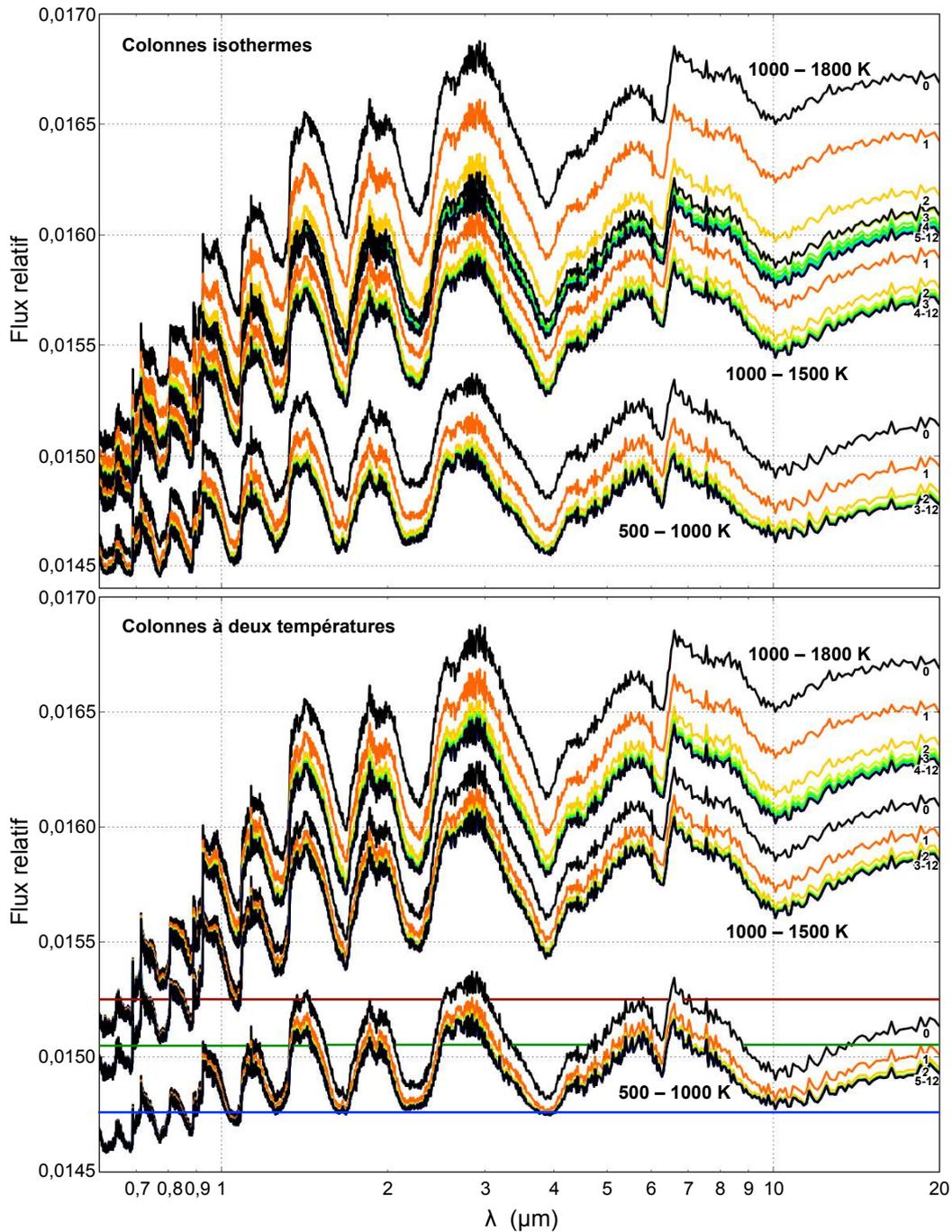


Figure 5.9: Spectres en transmission obtenus au moyen de Pytmosph3R sur les atmosphères à colonnes isothermes (en haut) et celles à deux températures (en bas). Sont superposés les spectres pour les angles β : 0, 7, 14, 22, 29, 37, 45, 52, 59, 67, 75, 82 et 90° . Ils sont indiqués dans l'ordre de 0 à 12 sur les figures, et regroupés lorsque les spectres ne sont plus suffisamment discernables. Les spectres en traits pleins noirs correspondent toujours aux angles extrêmes (cas champignons et poires). Les 3 doublets de températures sont proposés sur la même figure et sont indiqués au dessus des paquets de spectres correspondants. Dans le cas des colonnes à deux températures, l'interface entre la couche isotherme et la plus haute atmosphère est représentée par un trait plein (300 - 650 K, bleu ; 500 - 1000 K, vert ; 1000 - 1500 K, rouge).

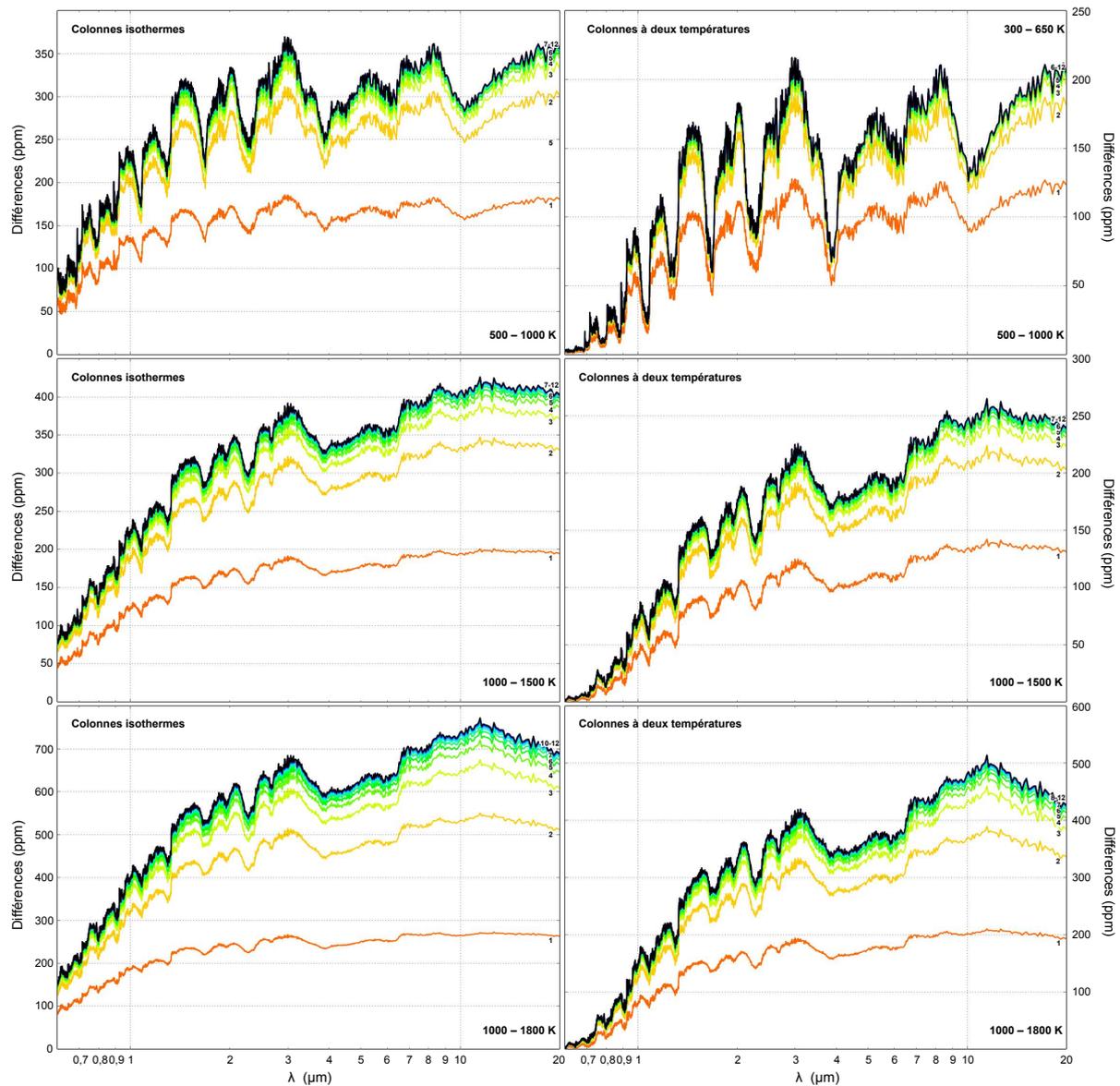


Figure 5.10: Différences entre les spectres de la Figure 5.7 calculées à partir du spectre $\beta = 0^\circ$ et exprimées en ppm. À gauche sont représentées ces différences pour les 3 doublets de températures avec des colonnes isothermes. Ces mêmes figures sont représentées à droite dans le cas des colonnes à deux températures. Les échelles ne sont pas les mêmes entre les deux types d'exoplanète.

la plus intense. À droite, les différences en présence d'une couche isotherme, à gauche en l'absence de cette couche. Nous rappelons que les échelles ne sont pas les mêmes entre les deux approches et que la courbe noire correspond à la différence enregistrée entre les deux cas extrêmes. Les autres courbes sont indiquées de la même manière que dans la figure précédente.

Les commentaires formulés dans le paragraphe précédent au sujet de la Mini-Neptune s'appliquent aussi bien ici. De la même manière, nous observons la convergence des spectres lorsque β augmente et nous constatons les mêmes effets directs ou indirects de la couche isotherme sur les spectres. Notons toutefois que, que ce soit pour les atmosphères à colonnes isothermes ou celles à deux températures, les convergences interviennent beaucoup plus rapidement qu'avec la mini-Neptune. Dans le premier cas, les angles de convergence sont respectivement proches de 45° , 75° et 90° si nous supposons un niveau de bruit acceptable de l'ordre de 50 ppm. Dans le deuxième, elles interviennent pour des angles de $30 - 45^\circ$, $45 - 60^\circ$ et $60 - 75^\circ$. Tout comme il a été souligné dans la partie précédente, la présence de la couche isotherme a pour effet indirect de compacter les spectres et d'accélérer leurs convergences. De même, à l'image des doublets 300 - 650 K et 500 - 1000 K de l'exoplanète précédente, la signature spectroscopique du cas 500 - 1000 K est directement affectée par la présence de la couche isotherme à 1000 K bien que cela soit moins marqué. Le visible et les bandes les moins absorbantes du proche infra-rouge sont concernées et traduisent d'un niveau sondé de plus basse altitude que l'interface. Cet exemple se distinguera des autres de par son comportement vis-à-vis des paramètres d'inversion mais de manière moins spectaculaire qu'avec la Mini-Neptune (voir § 5.3.3).

La convergence des spectres, se produisant pour des angles critiques de contraste plus faible dans ce cas s'explique par la comparaison des rapports R_p/H_0 des deux objets d'étude. Ce rapport est beaucoup plus faible pour la géante gazeuse puisqu'elle est de plus grandes dimensions et cela réduit en conséquence l'angle d'ouverture moyen de la zone radiativement significative ainsi que l'angle de pénétration. L'influence de ce rapport R_p/H_0 sur les angles d'ouverture et de pénétration est d'ailleurs détaillée dans Annexe A et nous avons placé pour les deux exoplanètes les 3 doublets de températures associés sur la Figure A.2 (cercles bleus et rouges). Les ψ des doublets de la mini-Neptune tournent respectivement autour de 20° , 28° et 38° , tandis que ceux de la géante gazeuse autour de 10° , 13° et 15° . En divisant par 2 les angles de pénétration, nous divisons également par 2 la région réellement sondée dans les atmosphères de part et d'autre du terminateur (en n'oubliant pas la dissymétrie plus ou moins intense en fonction du contraste). Les effets de mixage thermique des sections efficaces sont en conséquence amoindris, puisque la diversité de température rencontrée par les rayons échantillons est plus faible, et la signature spectroscopique est moins sensible au contraste de température, ou tout du moins, nécessite qu'il soit beaucoup plus resserré autour du terminateur (faibles β et donc fort gradient $\Delta T/\Delta\beta$) pour réellement impacter le spectre.

Ces commentaires seront confortés par les inversions elles-mêmes comme nous allons le constater. Cette analyse des spectres avait également pour objectif d'insister sur le fait que la caractérisation d'une exoplanète ne repose pas exclusivement sur l'interprétation des distributions *a posteriori*, elle est complétée par l'étude de son spectre et sa comparaison avec celui retourné comme solution. À partir de l'analyse des résultats de l'inversion, nous tenterons de fournir des explications claires et plus quantitatives des effets que nous avons souligné, tout en s'appuyant sur la Figure 5.7, la Figure 5.8, la Figure 5.9, la Figure 5.10 et bien sûr de ce travail préliminaire. Nous tenterons de répondre aux questions que nous nous posons depuis le début de cette étude :

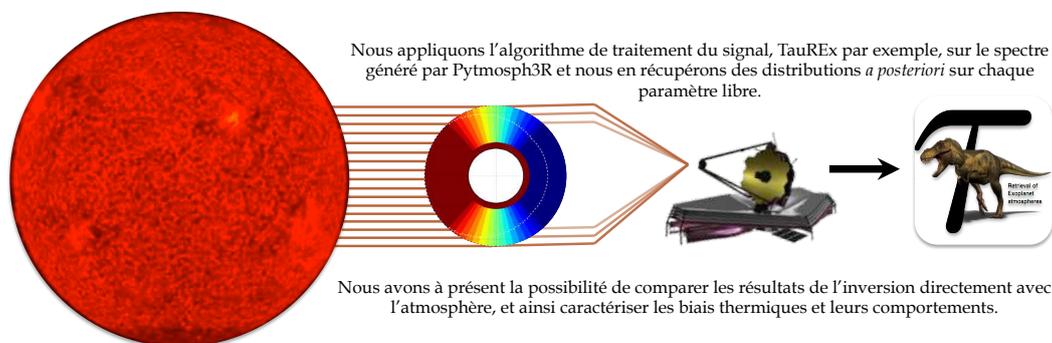
- À quel point le spectre d'une atmosphère uniforme, un isoprofil 1D, peut-il reproduire celui obtenu avec nos structures 3D ? -
- Si l'inversion peut obtenir une solution satisfaisante, les contraintes que l'on obtient sur la tem-

pérature et l'abondance de l'absorbant sont-elles "acceptables" ? Notons que l'objectif annoncé de ce type d'observation est tout de même de contraindre les abondances élémentaires.

- Dans le cas contraire, lorsque l'inversion ne fonctionne apparemment pas, pourquoi et à quel point le résultat obtenu est-il faussé ?

5.3 Impact sur le retrieval

Nous inversons les spectres obtenus au moyen de l'algorithme Tau-REx (Waldmann et al. 2015) avec ou sans la couche isotherme. Nous allons établir une corrélation entre le comportement des distributions *a posteriori* et l'angle de contraste β et ainsi permettre un début de caractérisation des biais associés à des hétérogénéités tangentiels et/ou verticales en température. Nous raisonnerons tout d'abord à partir du critère de vraisemblance, ici le χ^2 réduit, pour ensuite affiner nos conclusions avec les variations des paramètres libres. Nous appuierons notre argumentation au moyen des angles de pénétration ψ_* , ψ_+ et de leurs dissymétries ($\psi_* - \psi_+$) proposés en Annexe C.



5.3.1 Critère de vraisemblance et remarques associées

La Figure 5.11 expose le critère de vraisemblance obtenu lors des différentes inversions. Le critère utilisé est le χ^2 réduit calculé comme suit :

$$\chi^2 = \sum_{\lambda} \frac{N_{\lambda} (\delta_{3D,\lambda} - \delta_{1D,\lambda})^2}{\sigma_{obs,\lambda}^2} \frac{1}{N_{\lambda}} \quad (5.3)$$

où $\delta_{3D,\lambda} - \delta_{1D,\lambda}$ serait la différence entre le spectre d'entrée (3D) et le spectre solution retourné par Tau-REx (1D), $\sigma_{obs,\lambda}$ l'erreur sur le flux d'entrée à la longueur d'onde λ considérée et N_{λ} le nombre de raies dans la gamme utilisé lors de l'inversion. Pour des spectres bruités, lorsque ce coefficient est proche de 1, l'écart avec les spectres solutions est en moyenne inférieur ou égal au bruit, entrée et solution sont considérées comme indiscernables. Plus sa valeur est supérieure à 1 et plus les solutions deviennent de plus mauvaises qualités. Cela indique en outre une plus grande difficulté rencontrée par l'algorithme de traitement du signal à trouver une solution "vraie" pour les spectres d'entrée concernés. Certaines solutions peuvent tout à fait correspondre à un minimum du critère de vraisemblance, lui-même basé sur l'évaluation du χ^2 , et pourtant ne pas correspondre à une solution représentative, c'est-à-dire avec un χ^2 proche de 1. Il se peut aussi que les différents minima soient associés à des coefficients assez proches (1 et 2 par exemple), et que cette dégénérescence ait finalement du sens. Pour l'ensemble des commentaires qui seront formulés dans les paragraphes à venir, en cas de dégénérescences, nous nous appuierons uniquement sur les solutions pour lesquelles ce coefficient sera faible. Nous avons toutefois

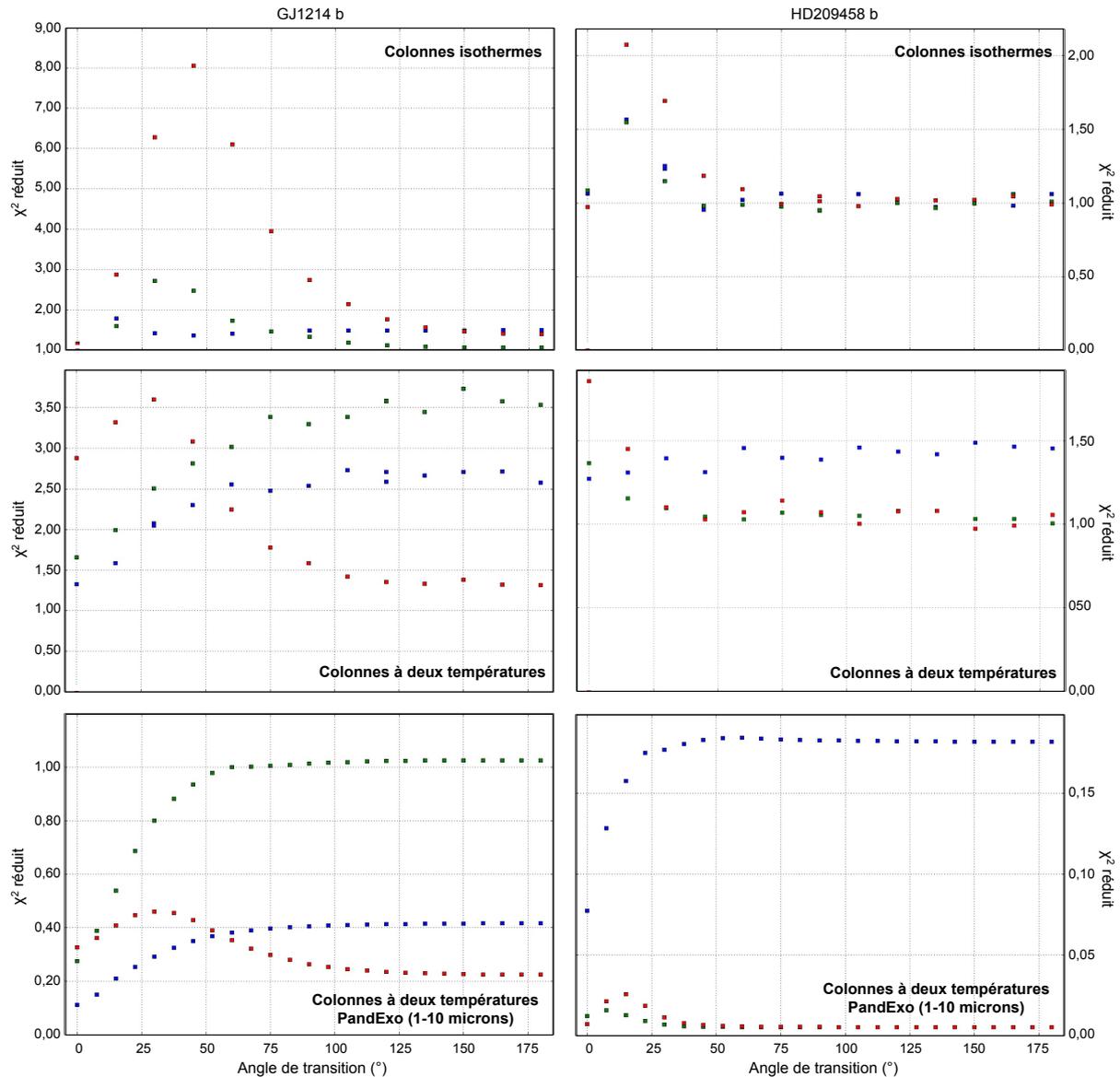


Figure 5.11: χ^2 réduit comme critère de vraisemblance pour les 6 études réalisées. Sont représentés à gauche les résultats dans le cas d'une exoplanète aux dimensions de GJ 1214 b, et à droite dans celui d'une exoplanète aux dimensions de HD 209458 b. Dans chaque graphique les carrés bleus sont associés au doublet de température le plus faible (respectivement 300 - 650 K et 500 - 1000 K), en vert le doublet intermédiaire (respectivement 500 - 1000 K et 1000 - 1500 K) et enfin en rouge le doublet de plus haute température (respectivement 1000 - 1500 K et 1000 - 1800 K). Certaines solutions ne sont pas représentées ici car leurs χ^2 étaient trop élevés.

laissé dans les figures, lorsqu'elles n'altéraient pas la lisibilité des graphiques, les dites dégénérescences obtenues sur les 3 paramètres libres. En conséquence, sur certaines d'entre elles, un paramètre pourra présenter plusieurs valeurs pour un même angle de contraste mais qui ne se retrouvera pas sur un autre paramètre parce que l'écart à la tendance globale aurait desservi la figure (et souvent la solution en question sera associée à un χ^2 très grand).

De manière générale, les χ^2 réduits des atmosphères de GJ 1214 b sont plus élevés que ceux de HD 209458 b, mais cela est en partie lié aux petites dimensions de la planète et de son étoile. Dans l'ensemble, les χ^2 réduits sont soit médiocres (2 - 3), soit bons (< 2) et dans quelques rares cas assez mauvais (> 3).

Concernant les atmosphères aux colonnes isothermes, comme nous pouvons le constater, les cas champignons ($\beta = 0^\circ$) sont bien contraints avec des coefficients proches de 1, et tous ceux se rapprochant de la structure en poire ont également des coefficients proches de 1. Nous retrouvons d'ailleurs l'effet de convergence pressenti dans le paragraphe précédent (voir § 5.2). Les plus grosses difficultés ont été rencontrées pour les atmosphères à colonnes isothermes et en particulier pour les angles de contraste faibles, compris entre 10° et 60° . Tau-REx propose en effet des solutions de moins bonne qualité pour ces angles qui correspondent également à des transitions abruptes entre le côté chaud et le côté froid de l'atmosphère, sans être parfaitement nettes. La diversité de température, certes faible, mais de grande amplitude imprégnant le spectre de sa signature complique clairement l'identification à une atmosphère isotherme. Cet intervalle d'angle de contraste génère donc les biais les plus complexes à compenser par Tau-REx.

Concernant les atmosphères présentant une couche isotherme, les χ^2 réduits sont plutôt satisfaisants mais ils indiquent tout de même une influence non négligeable de cette couche dans la vraisemblance des solutions que Tau-REx veut nous proposer. Les paquets fortement pollués de manière directe par la signature spectroscopique de la basse atmosphère chaude, à savoir les doublets 300 - 650 K et 500 - 1000 K pour GJ 1214 b et le cas 500 - 1000 K pour HD 209458 b, perdent la tendance précédemment soulignée et voit leurs χ^2 réduits augmenter jusqu'à une valeur seuil. Plus les spectres sondent bas dans l'atmosphère, plus la couche isotherme l'imprègne et plus le mixage thermique est compliqué à contraindre. Cela affecte donc les doublets de plus basses températures et l'effet s'accroît avec l'angle de contraste.

En comparaison, ces mêmes coefficients peuvent paraître très faibles pour la dernière série d'études ("PandExo (1-10 microns)"). Nous rappelons que pour cette approche, les spectres n'ont pas été bruités afin d'isoler les effets de contraste jour/nuit indépendamment du bruit. Nous devons donc raisonner différemment : nous considérons que l'inversion est de qualité tant que le χ^2 réduit reste inférieur 1, soit lorsque les différences moyennes deviennent inférieures au bruit moyen. Les solutions sont donc globalement très bonnes dans les deux cas de figure et nous constatons des tendances assez comparables avec les séries réalisées au laboratoire. Dans le cas GJ 1214 b, elles paraissent particulièrement meilleures qu'avec le set 10_{wno} , ce qui peut s'expliquer par le poids très réduit de la gamme proche IR et l'absence du visible dans la couverture spectrale adoptée par l'UCL et que nous avons identifiées comme étant les gammes directement affectées par la couche isotherme.

Enfin, qu'il s'agisse de nos propres résultats ou de ceux obtenus à la résolution du JWST et en utilisant le générateur de bruit PandExo, nous observons des tendances avec lesquelles nous pouvons clairement identifier deux types de convergences :

- **Les convergences piquées** : la qualité décroît jusqu'à passer par un minimum avant de croître et de se stabiliser au-delà d'un angle de contraste (GJ 1214 b : 1000 - 1500 K ; HD 209458 b : 1000

- 1500 K et 1000 - 1800 K).

- **Les convergences à seuil** : la qualité décroît jusqu'à une valeur maximale du χ^2 réduit atteinte à partir d'un angle de contraste qui dépend de l'exoplanète, du doublet, probablement de sa gamme et de son amplitude (GJ 1214 b : 300 - 650 K et 500 - 1000 K ; HD 209458 b : 500 - 1000 K).

Nous serons donc confrontés à deux comportements distincts dans l'évolution des distributions *a posteriori* retournées pour chaque paramètre d'inversion. Dans les paragraphes suivants, nous avons pris le parti de présenter les résultats puis de développer nos interprétations avec le cas le plus simple des atmosphères à colonnes isothermes, puis d'identifier l'origine des différences constatées lorsque nous rajoutons une couche isotherme, et enfin lorsque nous changeons de set de section efficace et de gamme spectrale d'inversion. Nos interprétations et explications seront à la fois supportées par la vraisemblance des solutions et par l'étude des angles de pénétration proposée en Annexe C.

5.3.2 Atmosphères à colonnes isothermes

Intéressons-nous à la première série d'atmosphères correspondant à la Figure 5.1 avec des colonnes isothermes et un gradient de température linéaire sur un angle de contraste β centré sur le terminateur. La Figure 5.12 illustre les résultats obtenus dans le cas de la planète aux dimensions de GJ 1214 b (à gauche) et de celle aux dimensions de HD 209458 b (à droite). Comme nous l'avons fait remarquer, il ne faisait aucun doute que les hétérogénéités de température biaiserait l'inversion de par la simple observation des spectres et de leurs différences, mais nous étions jusqu'alors incapable de préciser dans quels cas de figure et dans quelle mesure ils pouvaient nous duper sur l'identité des atmosphères que nous observions.

Une moitié d'atmosphère et compensations entre paramètres libres

Les tendances sont similaires pour les deux types d'exoplanètes. La température inversée (la médiane de la distribution *a posteriori*) débute avec une valeur proche de celle du côté jour lorsque l'angle de contraste est nul (cas champignon) et tend progressivement vers la température du terminateur qui est la moyenne des températures extrêmes (cas poire). Il est intéressant de constater que dans le cas champignon, non seulement la température correspond à quelques degrés près à celle du côté jour, mais aussi que l'abondance en eau est extrêmement bien contrainte en s'identifiant à la valeur attendue. Rappelons que dans notre cas l'abondance d'eau est uniforme, nous n'avons pas étudié le cas où l'eau (ou un autre absorbant) ne serait pas répartie uniformément entre régions chaudes et froides. Ce résultat montre toutefois que pour ces structures atmosphériques, les effets thermiques ne biaisent pas les abondances. Tout se passe comme si le côté nuit de l'atmosphère était écranté par le côté jour. D'un point de vue spatial, nous pouvions déjà le pressentir dans la Figure 5.1 sans pouvoir exactement estimer la balance des poids portés par chacun des côtés.

Les Figures C.1, C.2 et C.3 donnent les angles ψ_* et ψ_+ pour les 3 doublets de GJ 1214 b et dans les 3 cas, les atmosphères champignons présentent des angles de pénétration nuit proches de 0° (voire négatif). Ainsi, sur l'ensemble du spectre, la région sondée pour ces atmosphères se localise exclusivement dans l'hémisphère jour. D'une certaine manière, nous avons donné à Tau-REx des moitiés d'atmosphères isothermes à la température des côtés jours, et pour compenser l'absence des autres moitiés, il a joué sur les autres paramètres. Nous avons déjà discuté des comportements de R_p et μ pour tenir compte de certains effets atmosphériques, comme la présence d'une couche isotherme, mais nous sommes confrontés à un autre type de compensation.

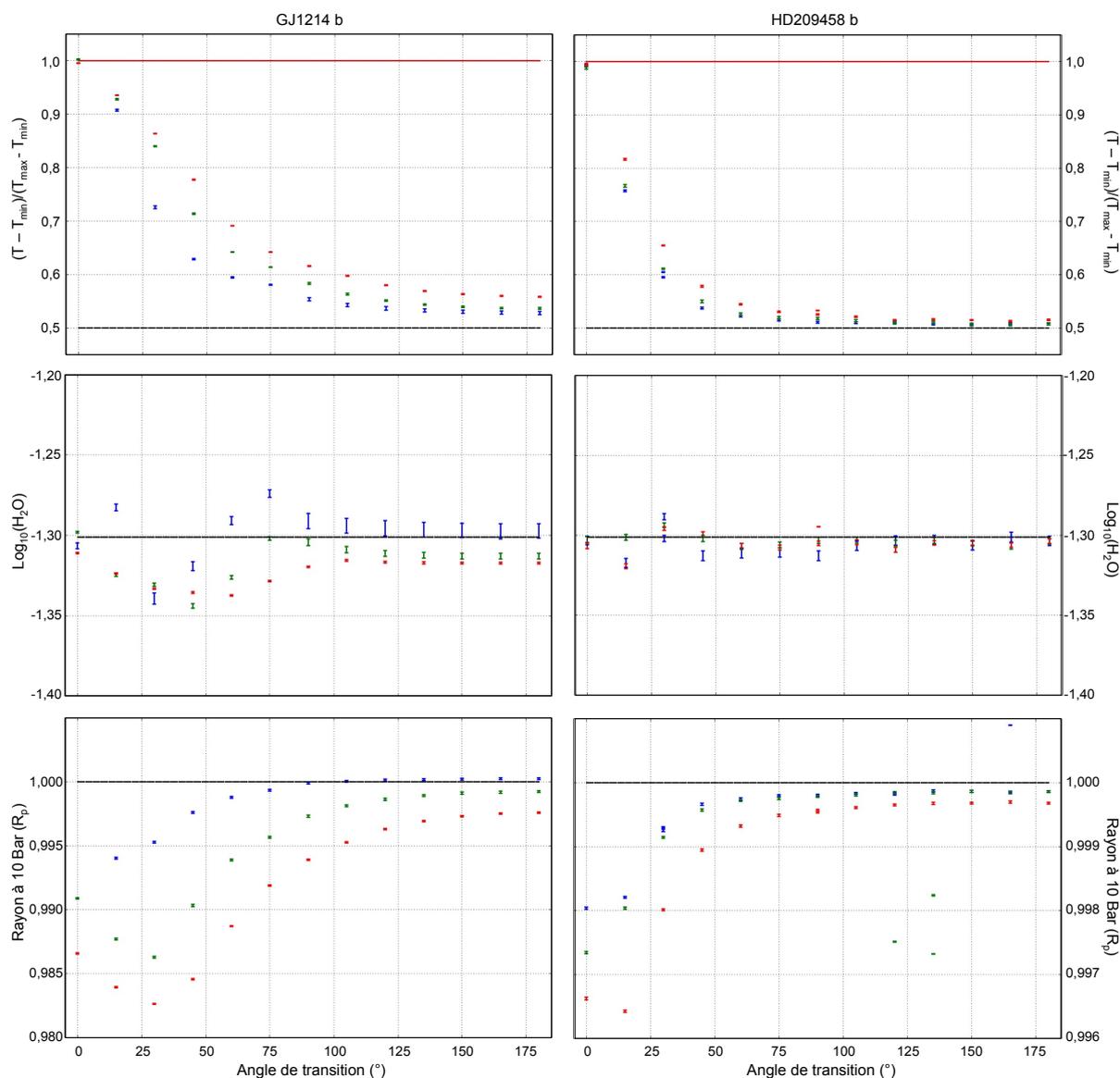


Figure 5.12: Résultats des distributions *a posteriori* obtenues après inversion des atmosphères hétérogènes en température. À gauche : distribution dans le cas d'une exoplanète aux dimensions de GJ 1214 b ; à droite : dans celui d'une exoplanète aux dimensions de HD 209458 b. Dans les deux cas, sont représentés les températures, l'abondance en eau et le rayon à 10 bar et sont superposés les 3 doublets de températures testés, respectivement : 300 - 650 K (bleu), 500 - 1000 K (vert) et 1000 - 1500 K (rouge) ; 500 - 1000 K (bleu), 1000 - 1500 K (vert) et 1000 - 1800 K (rouge). La température est normalisée par rapport au contraste de température ($T_j - T_n$), 1 correspondant à la température du côté jour que nous représentons par un trait rouge, et 0,5 à la température moyenne représentée par un trait discontinu noir. L'abondance en H_2O est exprimée en puissance de 10 et la valeur initialement introduite dans les atmosphères est représentée par un trait discontinu noir. Le rayon à 10 bar est normalisé par rapport à celui utilisé pour les simulations, représenté par un trait discontinu noir.

Ici, la signature spectroscopique est imprégnée par les opacités de la température chaude, et l'algorithme ne peut pas s'en éloigner sans perdre en vraisemblance. Une atmosphère entière avec ces caractéristiques serait trop opaque pour le spectre d'entrée et absorberait plus haut. En conséquence, l'algorithme trouve le meilleur compromis entre : la conservation de la température moléculaire T , celle de l'abondance en eau $\chi_{\text{H}_2\text{O}}$, une solution "vraie" et un rayon à 10 bar compatible avec les rayons effectifs observés. Ceci se traduit par une diminution des dimensions de l'exoplanète. On pourrait également imaginer jouer sur l'abondance en eau pour diminuer la hauteur d'échelle et ainsi contracter l'atmosphère, ce qui aurait un effet similaire à celui de réduire R_p . Toutefois, augmenter l'abondance dans le but d'accroître μ , et donc diminuer la hauteur d'échelle, aurait aussi pour effet de réduire l'intervalle de rayons effectifs sur lequel s'exprime le spectre, et donc de grandement impacter la vraisemblance de la solution. C'est d'ailleurs tout particulièrement le cas avec l'eau comme absorbant car elle présente une grande amplitude spectrale dans la gamme que nous avons retenue et sonde en conséquence une large couche atmosphérique. Après vérification, la différence entre le spectre champignon et un spectre extrême correspondant à une moitié d'atmosphère à la température du côté chaud (sans le côté nuit), est de l'ordre du ppm.

Les résultats obtenus avec HD 209458 b sont semblables et les différences de température à $\beta = 0^\circ$ sont de l'ordre de quelques K. Si nous rentrons dans le détail, les Figures C.7, C.8 et C.9 fournissent toutes les informations sur les angles de pénétration. Pour les 3 doublets de températures, nous constatons que ψ_+ est toujours 3 à 4 fois inférieur à ψ_* sans pour autant s'approcher de 0° (entre 2° et 3°). Cela explique les écarts de températures, même si le côté jour reste largement dominant, et une diminution du rayon à 10 bar qui ne correspond pas tout à fait à la compensation d'une demi-atmosphère chaude. En simulant cette moitié d'atmosphère dénuée de côté nuit et en comparant son spectre à celui du cas champignon nous trouvons un écart légèrement plus élevé, de l'ordre de la dizaine de ppm. Les écarts étant ici très faibles, nous pouvons considérer que le comportement est identique pour les deux types d'exoplanètes.

Evolution des distributions *a posteriori* avec l'angle de contraste et convergence

En ouvrant l'angle de contraste nous augmentons le mixage thermique, l'algorithme éprouve tout d'abord des difficultés à trouver le bon compromis entre les 3 paramètres avant de se stabiliser. En effet, même à petit β , le côté jour prédomine toujours sur le côté nuit car même si la zone *a priori* la plus importante dans la signature spectroscopique reste celle aux alentours du terminateur, nous sondons toujours davantage le côté jour plutôt que le côté nuit. Les figures de l'Annexe C soutiennent nos propos par une dissymétrie toujours positive. Cette dissymétrie augmente brusquement dès que l'angle de contraste n'est plus nul, traduisant d'une information localisée plus profondément dans l'hémisphère jour puisque le terminateur se refroidit. Après cette délocalisation, à mesure que l'angle de contraste augmente :

- La dissymétrie diminue et la zone réellement sondée par les rayons échantillons se resserre autour du terminateur sans pour autant atteindre la symétrie.
- ψ_* diminue, donc nous pénétrons moins profondément dans l'hémisphère jour. Les températures maximales accessibles décroissent par l'augmentation de l'angle de contraste (les températures chaudes sont plus éloignées du terminateur) et la diversité de l'information spectroscopique est de plus en plus faible.
- ψ_+ augmente en parallèle, le côté nuit se réchauffe progressivement, son absorption devient de moins en moins négligeable et sa signature s'impose de plus en plus.

- Sans surprise, l'angle de pénétration suit lui aussi une tendance dictée par le gradient de température. Ses valeurs, comme sa dissymétrie, convergent lorsque β est très grand.

Cela se manifeste sur les distributions *a posteriori* par une diminution de la température qui est toujours plus proche du parcours dominant, et donc des températures du côté jour pour converger vers celle du terminateur. Si nous prenons pour exemple le doublet 500 - 1000 K de GJ 1214 b :

- La Figure C.4 nous indique qu'à $\beta = 30^\circ$, l'angle de pénétration est de l'ordre de $(24^\circ, 3^\circ)$. L'intervalle de température correspondant, et donc réellement ressenti, est compris entre approximativement 700 K et $T_j = 1000$ K puisque $\psi_* > \beta/2$. Tau-REx propose une solution à 865 K, soit pour une colonne représentative qui serait à 8° du plan du terminateur.
- À l'inverse, pour $\beta = 150^\circ$, l'angle de pénétration est plutôt de l'ordre de $(15 - 21^\circ, 8 - 10^\circ)$ et sonde l'intervalle de température $[715 - 720 ; 800 - 820]$ K soit une amplitude d'à peine 100 K. Cette faible gamme rend progressivement au terminateur la domination de ses sous-parcours sur les profondeurs optiques et sur la solution inversée, qui est à 760 K (soit pour un central à 3° seulement), correspond suivant la résolution de la simulation à la colonne du terminateur ou en tout cas, à une colonne très proche.
- Pour les β intermédiaires, les températures perçues par les rayons échantillons lors de leurs traversées évoluent entre une température proche de celle du terminateur, mais qui diminue lentement avec β , et une température proche ou égale à celle du point sub-stellaire, qui diminue plus rapidement avec β . C'est cette large diversité qui en explique la contrainte délicate.
- Notons que notre interprétation s'appuie sur le comportement des χ^2 réduits. Ils explosent justement quand l'amplitude en température est supérieure à $(T_j - T_n)/2$ tandis que si nous reprenons le cas $\beta = 30^\circ$ du doublet 500 - 1000 K, il passe de 1,3 à 3.

Pour conclure, lorsque l'angle de pénétration jour est proche du demi-angle de contraste, l'intervalle de température traversé par les rayons échantillons est maximal et la difficulté éprouvée par Tau-REx à trouver une solution fidèle atteint son paroxysme.

Concernant les deux autres paramètres, le rayon à 10 bar compense toujours le fait qu'une partie de l'atmosphère (pour les angles supérieurs à β) du côté nuit ne s'exprime pas ou très peu, mais la déviation diminue à mesure que nous ouvrons la région de transition et que la région sondée se symétrise par rapport au terminateur. L'abondance en eau permet quant à elle de jouer sur la hauteur d'échelle locale et ainsi de mieux moduler le spectre si la température qui lui est associée n'est pas suffisamment représentative. En conséquence elle ne subit d'écarts que lorsque la solution est de mauvaise qualité et mais reste très bien contrainte dans le pire des cas.

Enfin dès lors que le demi-angle de contraste devient très grand devant l'angle de pénétration, la température converge vers celle du terminateur (ou une valeur s'en approchant), le rayon à 10 bar vers la valeur d'entrée et l'abondance vers celle des simulations. Le cas de la poire et/ou ceux qui s'en rapprochent n'induisent pas d'hétérogénéités en température suffisamment fortes pour provoquer un biais notable sur les spectres, et nous sommes typiquement dans le cadre de l'approximation consistant à ne se focaliser que sur le terminateur (méthode d'intégration des spectres aux limbes, § 4.2.1). Nous perdons alors l'information sur le caractère hétérogène de l'atmosphère.

Ces remarques et explications valent pour les deux types d'exoplanète mais les convergences semblent dépendre de la gamme de température et du rayon planétaire.

Persistence des biais thermiques en fonction des paramètres planétaires et atmosphériques

En ce qui concerne GJ 1214 b, la convergence du paramètre T vers une température moyenne ou intermédiaire intervient pour des angles de contraste plus grands que pour HD 209458 b, et ce avec des caractéristiques atmosphériques similaires (à l'exception de la hauteur d'échelle puisque la gravité de surface des deux objets diffère et varie peu sur l'épaisseur de l'atmosphère pour la géante gazeuse du fait de ses dimensions). Avec le set 10_{wno} utilisé, nous ne l'atteignons même pas tout à fait pour le doublet 1000 - 1500 K de GJ 1214 b quand le contraste est maximal. Nous considérons que la convergence est atteinte lorsque les barres d'erreur commencent à se recouvrir et que les paramètres n'évoluent presque plus. Ainsi, à partir des distributions *a posteriori*, nous la localisons respectivement aux alentours de 90°, 120° et 150° d'angle de contraste pour la mini-Neptune, et pour des angles compris entre 80° et 100° pour la géante.

Premièrement, nous constatons une convergence commune, qui naît des mêmes effets, que ce soit sur les paramètres d'inversion, les allures des spectres d'entrée, les angles de pénétration et les χ^2 réduits, tous ces outils étant évidemment corrélés entre eux. Ils fournissent autant de support à notre analyse. Nous retrouvons ainsi des angles critiques de contraste proches de ceux que nous avons avancés lorsque nous avons commenté les spectres d'entrée (voir § 5.2). Ces valeurs sont également cohérentes avec les variations du χ^2 réduit. La dissymétrie de l'angle de pénétration atteint également sa convergence pour des angles de contraste similaires, bien que ce soit plus délicat de l'estimer sur les figures de l'Annexe C.

Deuxièmement, est soulevé ici un effet des dimensions de l'exoplanète sur le biais thermique qui s'explique par la pénétration de l'atmosphère. Le rapport R_p/H_0 de HD 209458 b est 5,5 fois plus grand, à doublets identiques, que celui de GJ 1214 b, et ce faisant, la zone radiativement significative est comprise au sein d'un angle de pénétration également plus faible. Il passe ainsi de 15 - 27° à 4 - 8° pour le doublet commun 500 - 1000 K et de 20 - 40° à 6 - 10° pour le doublet 1000 - 1500 K (voir Figures C.4 et C.6 ; Figures C.8 et C.10). De plus faibles angles de pénétration impliquent un mixage moins contraignant à inverser par Tau-REx, et dans le même temps nécessitent des angles de contraste plus faibles pour se resserrer autour du terminateur. Dans le cas de HD 209458 b, la température de convergence est d'ailleurs nettement plus proche de celle du terminateur car à β très élevés, l'angle de pénétration et l'intervalle de température sondé deviennent suffisamment faibles pour que celle du terminateur soit la seule à réellement s'imposer. La dissymétrie est d'ailleurs beaucoup plus faible (1 - 2°) qu'avec la mini-Neptune (4 - 9°), ce qui montre bien que l'angle de pénétration est très resserré et presque centré sur le terminateur. Une fois la convergence atteinte, hormis quelques fluctuations, les grandeurs retournées par l'algorithme de traitement du signal restent constantes.

En suivant notre raisonnement, il n'est pas étonnant de constater que quel que soit le cas considéré, l'écart entre les températures extrêmes et leurs rapports sont décisifs dans la vitesse de la convergence précédemment discutée.

- Avec l'exoplanète aux dimensions de GJ 1214 b, le cas 300 - 650 K atteint la convergence seulement quelques degrés avant le cas 500 - 1000 K, tandis que le cas 1000 - 1500 K ne converge que beaucoup plus tardivement, voire pas du tout. À faibles β , la diminution de la température retournée n'est pas aussi franche pour les deux doublets à 500 K d'amplitude, elle est plus "persistante", que pour celui à 350 K.
- Pour les atmosphères de HD 209458 b, toujours à faibles β , les doublets à 500 K d'amplitude présentent une décroissance légèrement plus rapide que pour le cas à 800 K d'amplitude, qui diminue lentement sur les $\beta < 30^\circ$ avant de s'écrouler pour atteindre la convergence en quelques dizaines de degrés. Le constat est donc similaire

La différence entre les températures extrêmes conditionne l'amplitude des températures qui vont être rencontrées au sein de la région de pénétration. Une atmosphère avec un gradient de température fort (grande amplitude) imposera donc également une plus large diversité d'identités spectroscopiques par le biais des sections efficaces. Il est alors plus difficile de trouver un isoprofil 1D qui fera le compromis de par sa température unique sur le mixage thermique réellement rencontré dans l'atmosphère. En conséquence, l'inversion est plus délicate lorsque nos atmosphères sont particulièrement contrastées (ce qui se traduit d'ailleurs par les χ^2 réduits élevés à faibles β), et cela l'est d'autant plus pour des atmosphères ouvertes et présentant des angles de pénétration grands.

Ce constat simple a plusieurs conséquences sur la persistance des biais intenses (qui impliquent des températures beaucoup plus élevées que celle du terminateur) :

- Si l'angle de pénétration est très grand, la température T_j reste représentée dans la région correspondante sur une plus grande plage de β et l'expression des températures intermédiaires, et évidemment celle des températures plus froides en est amoindrie. Tant que la température T_j s'exprime sur un angle non négligeable, la température retournée reste très proche de T_j .
- Notons que cet effet est accentué par la sensibilité des sections efficaces avec la température. Ici, l'absorption de l'eau augmentent très fortement pour des températures inférieures à 1 200 K, et encore plus fortement entre 300 et 750 K. Le doublet 500 - 1000 K est donc celui qui présente à la fois le plus fort gradient de température et le plus fort gradient de section efficace. Donc l'impact de T_j précédemment souligné est d'autant plus fort et persistant si l'écart des sections efficaces de T_j et de celles de T_n est très grand.
- Lorsque l'angle de contraste devient supérieur à l'angle de pénétration, la chute de l'amplitude des températures sondées est d'autant plus rapide avec β que le gradient de température est fort ($T_j - T_n$). Nous le remarquons avec les figures de l'Annexe C pour les plus grandes longueurs d'onde, aux sections efficaces moins sensibles à la température et qui peuvent présenter des comportements exacerbés pour les premiers β avant de suivre la tendance générale.
- Cet effet est également accentué par un gradient fort des sections efficaces. La courbe $T = f(\beta)$ est très déformée aux faibles β , plus que celle du doublet 1000 - 1500 K qui a une décroissance plus progressive reposant sur des variations d'opacités plus faibles.

Pour finir, soulignons le simple effet géométrique qui accentue, par-delà la dépendance avec la température des sections efficaces, la dissymétrie de l'angle de pénétration puisque la hauteur d'échelle est une fonction linéaire de T . Ainsi, le rapport des hauteurs d'échelle conditionne d'un point de vue spatial celui des rapports de contribution des côtés chauds et froids. Un rapport T_j/T_n élevé comme c'est le cas pour les situations 300 - 650 K et 500 - 1000 K induit un côté jour deux fois plus étendu que le côté nuit, et ceci favorise l'expression du côté jour et donc des hautes températures. Si ce rapport décroît, les extensions spatiales se rapprochent pour les deux côtés et ceci favorise, en comparaison avec le cas précédent, l'expression du côté nuit. Le rapport des composantes de l'angle de pénétration ψ_*/ψ_+ passe par exemple d'un facteur 3 pour les doublets 300 - 650 K et 500 - 1000 K à seulement 2 pour le doublet 1000 - 1500 K aux β intermédiaires. Cet effet est d'autant plus marqué que le rapport R_p/H_0 est faible puisqu'il est accentué par la décroissance rapide de la gravité avec l'altitude. Il est plus compliqué de l'établir dans le cas de HD 209458 b, notamment parce que ses angles de pénétration sont déjà faibles et que la résolution des simulations que nous avons utilisée n'est pas bonne. Les pas en longitude sont de $5,625^\circ$, ce qui veut dire qu'à l'équateur, les rayons échantillons ne traversent qu'au maximum 3 colonnes différentes, et donc 3 températures.

Conclusions sur les biais thermiques en l'absence d'hétérogénéités verticales

Pour conclure sur les biais thermiques observés dans le cas des atmosphères à colonnes isothermes :

- Lorsque la transition entre le côté chaud et le côté froid est très brutale, nous ne conservons d'informations que sur le côté chaud.
- Nous perdons l'information sur les deux côtés du moment où cette transition s'effectue sur un angle proche ou supérieur à l'angle de pénétration qui peut s'estimer à partir du rapport R_p/H_0 , seule la signature du terminateur nous est accessible.
- Les biais thermiques dépendant de l'angle de pénétration, ils dépendent également de R_p/H_0 . Plus ce rapport est grand, plus le biais persiste sur des angles de contraste grands, et inversement.
- Plus l'écart de température $T_j - T_n$ est grand, et plus la persistance des biais thermiques intenses (fortes déviations des températures retournées) risque de s'étaler sur de plus grands angles de contraste.
- Lors de cette étude, l'abondance de la molécule est relativement bien contrainte quel que soit l'angle de contraste, mais nous avons considéré une abondance uniforme et un seul absorbant. Par ailleurs, nous avons considéré une molécule, H_2O , qui absorbe sur tout le spectre considéré et qui sonde donc une grande plage de couches dans l'atmosphère. Des biais différents sont attendus pour des molécules dont la signature serait plus localisée dans le spectre.
- Le rayon à 10 bar reste un paramètre de compensation.

Dans le cas de la simulation de GJ 1214 b, l'amplitude de température est plus proche du cas 300 - 650 K avec un angle de contraste entre 30° et 45° , sans être linéaire comme nous l'avons supposé dans cette étude. Sur la Figure 5.12, on remarque que cet angle n'est pas dans la zone de convergence et donc que les biais thermiques tangentiels devraient avoir un effet, mineur mais présent, sur le spectre et l'inversion. À cela s'ajoutaient les effets radiaux, les effets de composition et des effets verticaux. Il y a néanmoins fort à parier que le même objet, mais avec une amplitude et/ou une gamme de températures plus élevées, verrait son inversion fortement biaisée. Ceci se manifesterait par une caractérisation atmosphérique essentiellement portée par le côté jour.

Nous discuterons plus en détails des effets azimutaux dans § 5.4, et notamment des effets de dilution qu'ils peuvent générer. Nous allons à présent mettre en évidence l'influence de la basse atmosphère de plus haute température sur les résultats que nous avons obtenus ainsi que les interactions possibles entre les biais tangentiels et les biais verticaux.

5.3.3 Atmosphères à deux températures

Comme nous le soulignons dans le paragraphe précédent, les atmosphères à colonnes isothermes sont intéressantes en tant que cas d'école, mais sont très loin de la réalité. Pour s'en approcher, nous avons proposé des simulations présentant une couche atmosphérique isotherme délimitée par un niveau de pression obtenu à partir des observations faites sur le panel de simulations publiées dans la littérature. Les résultats de l'inversion de ces atmosphères sont compilés dans la Figure 5.13.

Tout d'abord, la plupart des commentaires formulés lors de l'étude précédente sont aussi valables dans le cadre de celle-ci :

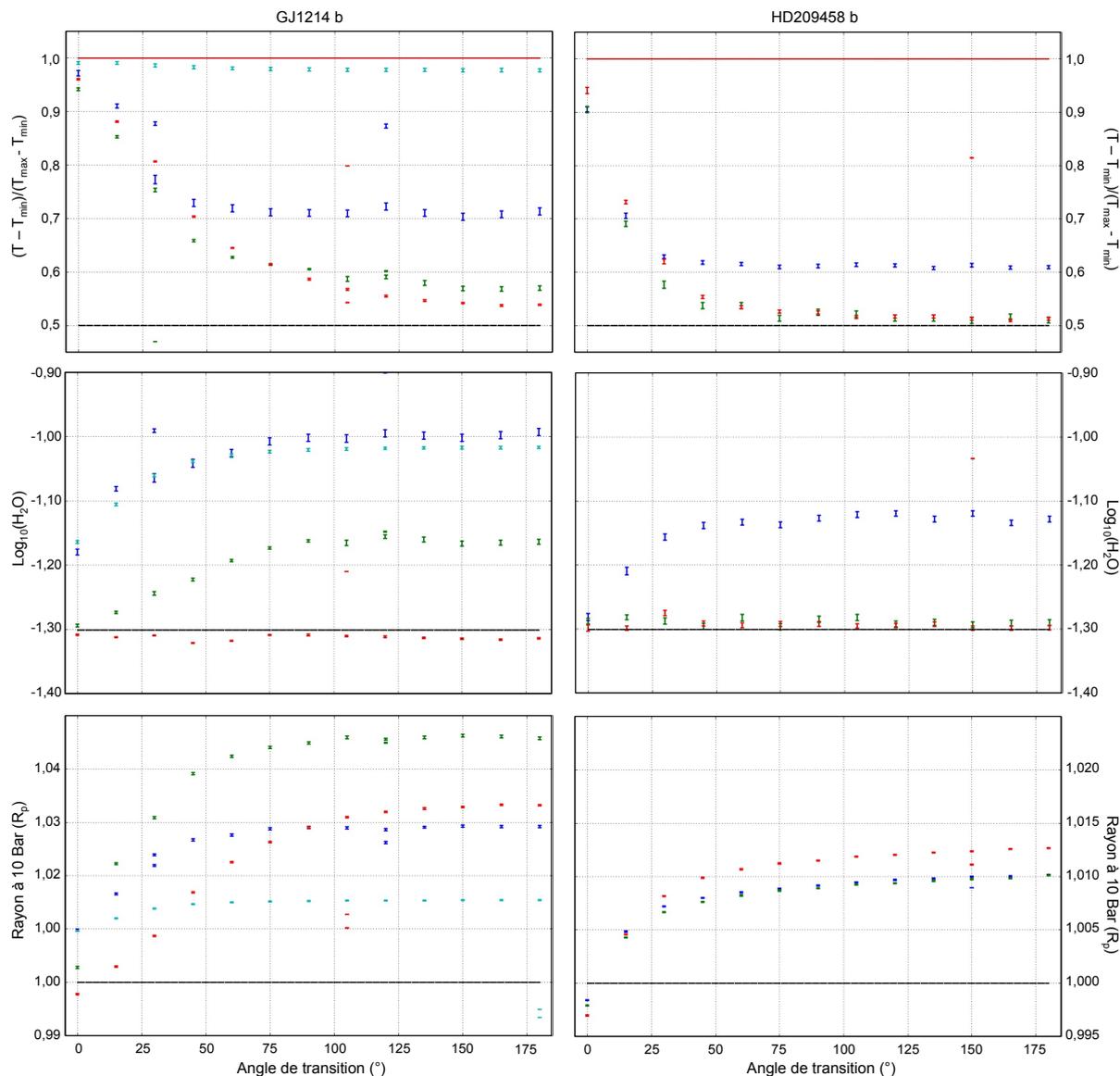


Figure 5.13: Résultats des distributions *a posteriori* obtenus après inversion des atmosphères hétérogènes en température. À gauche : distribution dans le cas d’une exoplanète des dimensions de GJ 1214 b ; à droite : dans celui d’une exoplanète des dimensions de HD 209458 b. Dans les deux cas, sont représentés les températures, l’abondance en eau et le rayon à 10 bar et sont superposés les 3 doublets de températures testés, respectivement : 300 - 650 K (bleu), 500 - 1000 K (vert) et 1000 - 1500 K (rouge) ; 500 - 1000 K (bleu), 1000 - 1500 K (vert) et 1000 - 1800 K (rouge). Nous avons ajouté en cyan les résultats obtenus avec le doublet 300 - 650 K (GJ 1214 b) pour une pression limite de l’isotherme de 0,1 bar au lieu de 0,01 bar. La température est normalisée par rapport au contraste de température $(T_j - T_n)$, 1 correspondant à la température du côté jour que nous représentons par un trait rouge, et 0,5 à la température moyenne représentée par un trait discontinu noir. L’abondance en H_2O est exprimée en puissance de 10 et la valeur initialement introduite dans les atmosphères est représentée par un trait discontinu noir. Le rayon à 10 bar est normalisé par rapport à celui utilisé pour les simulations, représenté par un trait discontinu noir.

- Lorsque la transition entre le côté chaud et le côté froid est très brutale, nous ne conservons essentiellement que l'information sur le côté chaud, bien que nous ne retrouvons pas exactement les caractéristiques d'une demi-atmosphère à la température T_j .
- Lorsque la transition s'effectue sur un angle de contraste proche ou supérieur à l'angle d'ouverture et supérieur à deux fois l'angle de pénétration, seule la signature du terminateur nous est accessible tant que d'autres biais n'interviennent pas dans sa caractérisation (nous précisons ce point dans les paragraphes qui suivent).
- La dépendance avec R_p/H_0 des angles critiques de contraste est toujours observable, et donc, la convergence des paramètres d'inversion reste d'autant plus rapide que ce rapport est faible.
- Nous observons toujours une assez bonne contrainte de l'abondance de la molécule active tant que d'autres biais n'interviennent pas dans sa caractérisation (nous précisons ce point dans les paragraphes qui suivent).
- Le rayon à 10 bar sert toujours de compensateur.

Certains points nécessitent des précisions, notamment en ce qui concerne les doublets de plus basses températures, et ce, pour les deux types d'exoplanète.

Effets indirects de la couche isotherme sur les distributions *a posteriori*

Nous avons déjà discuté des corrélations et compensations qui existent lors de l'inversion d'un profil 1D entre le rayon à 10 bar et les autres paramètres ajustés (la température et l'abondance de l'absorbant). Nous expliquions le rayon sous-estimé dans la partie précédente comme la compensation de la "perte" d'une partie de la moitié froide de l'atmosphère. Dans le cas d'une transition brutale, les cas champignons, le rayon à 10 bar est proche ou légèrement sous-estimé par rapport à celui de la simulation alors que la température retournée est certes proche de celle du côté chaud, mais s'en écarte tout de même de 5 à 10 % suivant le doublet ou le type d'exoplanète. Deux aspects essentiels sont corrélés ici et nous allons voir que nous ne voyons finalement pas la même chose que dans l'étude précédente.

Premièrement, en ajoutant une couche isotherme à la température du côté jour jusqu'à 10 mbar, nous avons rehaussé les colonnes du côté nuit sans toucher à celles du côté jour puisqu'elles sont à la même température. La conséquence est que nous ne pouvons plus affirmer que ce côté est totalement écranté. Il s'exprime très légèrement mais suffisamment pour que le résultat de l'inversion ne contienne plus exclusivement l'information des hautes températures, cela se ressentant sur ce petit écart, mais aussi sur un rayon à 10 bar plus grand.

Deuxièmement, si le côté nuit s'exprime du fait de sa structure et de son expansion, les bandes les moins absorbantes traduiront davantage de ce mixage entre les opacités extrêmes que les bandes les plus intenses, qui elles ne porteront que l'information du côté chaud. Si une température un peu plus faible traduit au mieux de cette variété, il est nécessaire de replacer convenablement la zone radiativement significative, ce qui se répercute sur le rayon à 10 bar par une valeur plus élevée que si la température s'était identifiée à celle du côté jour. Le paramètre compense ainsi à la fois la dissymétrie de l'atmosphère et l'écart en température, ou en extension spatiale, de la couche isotherme et du côté jour.

À l'image de la tendance observée dans le cas des colonnes isothermes, ce rayon augmente jusqu'à atteindre une valeur de convergence. Contrairement au cas précédent, il est surestimé pour presque tous les angles de contraste. La dissymétrie atmosphérique nécessite de moins en moins une compensation lorsque nous ouvrons la région de contraste, mais d'un autre côté, la température du modèle 1D

décroissant, l'algorithme doit augmenter R_p pour traduire de la présence de la couche isotherme qui est beaucoup plus chaude. Par un simple calcul, en remplaçant le rayon à 10 bar et la température par les valeurs retournées, nous retrouvons à quelques dizaines de km près les mêmes niveaux d'altitude à 10 mbar. Notons d'ailleurs que si nous écartons le cas 500 - 1000 K de HD 209458 b, les tendances sont identiques au cas sans isotherme, et les arguments que nous avons avancé sur l'influence de l'amplitude et de la gamme de températures sur la vitesse de convergence à faibles β et à fort β se retrouvent bien. En écartant le cas 300 - 650 K pour GJ 1214 b, nous avons la même conclusion pour les faibles β , mais ils se perdent par la suite par une convergence précoce de la température avec le doublet 500 - 1000 K.

Les effets indirects de la couche isotherme sur le transfert radiatif se retrouvent également sur les courbes de l'angle de pénétration en Annexe C. Pour les doublets cités, à l'exception des plus courtes longueurs d'onde, les angles de pénétration jour sont globalement plus faibles en présence de l'isotherme qu'en son absence, et les angles de pénétration nuit plus élevés. La dissymétrie diminue également, et d'autant plus à mesure que nous augmentons l'angle de contraste. À vrai dire, cette dissymétrie développe une dépendance avec la distance à la couche isotherme car plus le flux est bas, et plus les deux composantes se rapprochent l'une de l'autre, et ce, pour tous les angles de contraste. Les courbes donnent l'impression de se rejoindre jusqu'au moment où l'on sonde l'isotherme, ce que nous n'observons pas pour les atmosphères à colonnes isothermes. Ces comparaisons montrent bien que l'isotherme a permis au côté nuit de s'exprimer davantage rien que de par son existence.

Les doublets écartés ne respectent plus du tout ce que nous avons dit jusqu'ici et subissent l'interaction entre les biais tangentiels et les biais verticaux (ce que nous avons qualifié d'effets directs).

Effets directs de la couche isotherme, interaction avec des biais verticaux

Les cas 300 - 650 K et 500 - 1000 K pour GJ 1214 b, et 500 - 1000 K pour HD 209458 b présentent des tendances tout à fait distinctes de celles que nous avons pu observer jusqu'alors. Il s'agit ici d'une contamination par un autre type de biais. Lorsque nous observons les spectres (voir Figure 5.7 et Figure 5.9) de cette série d'atmosphères, nous ne pouvons pas ignorer le fait que pour la plupart d'entre eux, les niveaux les plus bas en terme d'absorption sont indiscernables. En comparant les rayons effectifs associés à ces niveaux et les structures thermiques des atmosphères, nous nous rendons compte qu'ils sont en fait en dessous de 10 mbar, et donc que les rayons échantillons traversent au terminateur, voire profondément de part et d'autre, la couche isotherme. Et alors que dans l'étude précédente, les χ^2 réduits étaient toujours très bons, passant par un maximum pour les β faibles avant de diminuer jusqu'à une valeur plus qu'acceptable, ce coefficient ne diminue plus dans les 3 cas de figure précités et augmente ou stagne sur une valeur beaucoup moins satisfaisante (de l'ordre de 3 ou 4). Autrement dit, l'algorithme a beaucoup de mal à trouver un compromis entre les aspects géométriques, et donc essentiellement thermiques, de l'atmosphère et ses propriétés optiques. Toute une partie du spectre est marquée par la signature de la température du côté jour par le biais de la couche isotherme, et ce même à très grand β , tandis que l'autre partie s'imprègne des niveaux supérieurs, et à terme, de la température du terminateur. La persistance de l'expression des hautes températures entraîne donc la convergence vers une température plus élevée que celle du terminateur, respectivement de 130 K, 70 K et 100 K pour les 3 cas qui nous intéressent.

S'en suit un effet domino sur les autres paramètres libres et notamment l'abondance en eau qui devient assez largement surestimée. Dans le cas 300 - 650 K de GJ1214 b, elle est doublée, tandis que dans les deux autres cas elle est augmentée respectivement de 40% et 50% à la convergence. Ces valeurs pourraient paraître acceptables, après tout nous étions relativement satisfait des résultats de l'inversion pour la simulation de Charnay et al. (2015) avec pourtant des déviations plus grandes. Toutefois, cet exem-

ple comptait 6 molécules à contraindre tandis que nos atmosphères synthétiques n'en présentent qu'une seule. Qui plus est, au vue de la contrainte excellente obtenue lorsque cet effet vertical n'est pas introduit, nous pouvons parler d'écarts remarquables et gênants pour les observations à venir. La corrélation entre le poids moléculaire moyen, l'abondance et la température joue également sur le comportement du rayon à 10 bar qui réagit en suivant une tendance distincte des autres cas.

Étant donné ces corrélations, elles-mêmes liées au transfert radiatif, il est difficile de trouver une explication claire de ces tendances qui tiendra compte de tous ces aspects. Au premier ordre, si nous séparons les aspects géométriques et les aspects radiatifs, la contrainte de la température est dominée ici par les aspects radiatifs puisque c'est le mixage des opacités qui entraîne sa surestimation. Cette température trop élevée entraîne également une hauteur d'échelle trop élevée pour replacer convenablement la zone radiativement significative ainsi que son extension spatiale. L'algorithme trouve le compromis en jouant sur R_p et μ pour la positionner, tandis qu'il joue sur μ pour maintenir les niveaux extrêmes du spectre (les niveaux bas sont surélevés puisqu'ils sondent dans l'isotherme, les niveaux hauts dépendent de l'intensité du biais thermique horizontal), ce qui se traduit par une augmentation de μ et donc de l'abondance en eau. En effet, dans ces 3 cas, l'écart relatif en température par rapport à la température du terminateur est respectivement d'environ 27%, 10% et 14%. Le poids moléculaire moyen devient respectivement 0,00387, 0,00340 et 0,00348 contre 0,00309 dans les simulations, soit une déviation de 25%, 10% et 13%.

La domination de l'isotherme sur les hémisphères jour et nuit est spectaculaire puisqu'elle survient dans les chemins par le terminateur. Nous pouvons le constater sur les courbes de l'angle de pénétration car du moment où le rayon échantillon sonde dans l'isotherme, la dissymétrie tend à s'annuler. Les angles de pénétration jour et nuit s'identifient, ils subissent une très forte diminution, et ce, pour tous les angles de contraste. Si la dissymétrie est parfaitement nulle, alors seule l'isotherme s'exprime, sinon, une partie de l'hémisphère jour continue de participer à la profondeur optique. Étant donné les ordres de grandeur de ces angles, sonder une à deux couches en dessous de celle de l'interface suffit à assurer la domination totale de l'isotherme sur la gamme. Nous avons ajouté sur les courbes de la Figure 5.13 l'exemple d'une atmosphère totalement écrasée par l'isotherme. Elle est identique à celle du doublet 300 - 650 K mais avec une couche isotherme qui s'arrête à 1 mbar. Plus de la moitié des raies sondent dedans, et les autres sont très fortement affectées de manière indirecte. Comme nous pouvons le constater, la convergence est alors quasi-immédiate et la température de l'atmosphère est presque égale à T_j . La proportion spectrale altérée par la basse atmosphère va donc directement conditionner l'intensité du biais thermique vertical. Contrairement aux biais tangentiels qui naissent sur des contrastes plus profonds de part et d'autre du terminateur, les biais verticaux prennent place au terminateur pour ensuite seulement s'étendre sur les régions limitrophes (là où la densité moléculaire est maximale). En conséquence, les biais verticaux l'emportent rapidement sur les biais tangentiels.

Conclusions sur les biais thermiques en présence d'hétérogénéités verticales

Pour conclure sur les biais thermiques observés dans le cas des atmosphères aux colonnes à deux températures :

- Lorsque la transition entre le côté chaud et le côté froid est très brutale, nous conservons essentiellement l'information du côté chaud à un petit écart de température près qui dépend du contraste T_j/T_n .
- Nous convergions du moment où cette transition s'effectue sur un angle de contraste plus grand que l'ouverture de l'atmosphère et seule la signature du terminateur nous est alors accessible. Cette

convergence s'effectue pour un angle de contraste compris entre l'angle de pénétration et l'angle d'ouverture.

- Les biais thermiques dépendant de l'angle de pénétration, ils dépendent également de R_p/H_0 . Plus ce rapport est grand, plus le biais persiste sur des angles de contraste grands, et inversement.
- Plus l'écart de température $T_j - T_n$ est grand, plus la persistance des biais thermiques intenses (fortes déviations des températures retournées) risque de s'étaler sur de plus grands angles de contraste.
- Si une partie du spectre sonde plus bas que l'interface de la couche isotherme, cette dernière induit un biais thermique vertical qui se traduit par une température de convergence plus élevée que la température moyenne et qui se produit pour des β plus faibles.
- Plus la gamme spectrale affectée par la couche isotherme est importante, plus le biais vertical est intense. Il l'emporte nettement sur les biais tangentiels à partir du moment où la convergence est atteinte.
- Le rayon à 10 bar reste un paramètre de compensation.

5.3.4 Approche analytique en soutien de nos conclusions

Nous allons montrer que nous pouvons conforter l'ensemble des remarques formulées dans les paragraphes précédents avec une approche analytique. Nous allons appliquer pour cela les formules de Guillot (Guillot 2010), mais sur deux demi-atmosphères correspondant au côté froid et au côté chaud dans le but d'en déterminer les rapports de contribution aux profondeurs optiques. Le détail des calculs aboutissant aux expressions qui vont suivre se retrouve dans l'Annexe D.

Cas champignons, en l'absence de pollution directe par la couche isotherme

Nous nous plaçons dans les deux situations où soit les colonnes atmosphériques sont isothermes, soit elles sont à deux températures du fait de l'existence d'une couche isotherme mais le niveau de transition est plus haut en altitude ($z_t > z_{T_i}$). Dans ce deuxième cas, nous avons montré que la profondeur optique pouvait s'exprimer comme :

$$\tau = n_0 \sigma_{mol} \exp\left(-\frac{H_{T_i} z_t - (H_{T_i} - H_j) z_{T_i}}{H_j H_{T_i}}\right) \sqrt{\frac{\pi R_p H_j}{2}} \times \left(1 + \exp\left(-\frac{z_t (H_j - H_n) - z_{T_i} (H_j - H_n)}{H_n H_j}\right)\right) \sqrt{\frac{\pi R_p H_n}{2}} \quad (5.4)$$

avec, rappelons-le, n_0 la densité moléculaire de surface, z_t l'altitude de transition, soit le rayon pour lequel $\tau = 1$, z_t et H_{T_i} respectivement le niveau limite de la couche isotherme et la hauteur d'échelle lui correspondant, H_j et H_n les hauteurs d'échelle du côté jour et du côté nuit, et σ_{mol} la section efficace moyenne de l'ensemble du parcours. Nous avons fixé dans nos atmosphères la température de la couche isotherme à celle du côté jour ($H_{T_i} = H_j$). En conséquence, nous pouvons simplifier l'équation Eq. (5.4)

comme :

$$\tau = n_0 \sigma_{mol} \exp\left(-\frac{z_t}{H_j}\right) \sqrt{\frac{\pi R_p H_j}{2}} \left(1 + \exp\left(-\frac{z_t(H_j - H_n) - z_{T_i}(H_j - H_n)}{H_n H_j}\right)\right) \sqrt{\frac{\pi R_p H_n}{2}} \quad (5.5)$$

$$\tau = \tau_j \left(1 + \exp\left(-\frac{z_t(H_j - H_n) - z_{T_i}(H_j - H_n)}{H_n H_j}\right)\right) \sqrt{\frac{\pi R_p H_n}{2}} \quad (5.6)$$

$$\tau = \tau_j \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{z_t(H_j - H_n) - z_{T_i}(H_j - H_n)}{H_n H_j}\right)\right) \sqrt{\frac{H_n}{H_j}} \quad (5.7)$$

Nous avons noté τ_j la profondeur optique totale d'une atmosphère isotherme à la température du côté jour pour retrouver notamment les résultats obtenus avec les cas champignons ($\beta = 0^\circ$, Eq. (5.7)). En l'absence de la couche isotherme, et donc avec $z_{T_i} = 0$, Eq. (5.7) se simplifie comme :

$$\tau = \tau_j \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{z_t(H_j - H_n)}{H_n H_j}\right)\right) \sqrt{\frac{H_n}{H_j}} \quad (5.8)$$

Si les hauteurs d'échelle des côtés s'identifient, nous retrouvons bien alors la profondeur optique d'une atmosphère isotherme à la température correspondante. Ces équations nous confortent dans la plupart de nos conclusions formulées jusqu'ici :

- Dans le cas limite où $T_n \ll T_j$, soit $H_n \ll H_j$, le deuxième terme des équations Eq. (5.4) et Eq. (5.7) tendent tout deux vers 0, et la profondeur optique vers la moitié de la profondeur optique d'une atmosphère isotherme à la température du côté jour. Ceci explique donc bien le cas champignon pour lequel Tau-REx réagit comme s'il observait une atmosphère chaude entière, dont il compense la moitié de profondeur optique en réduisant le rayon à 10 bar.
- Plus le rapport de température est élevé, et plus cette identification est marquée, ce qui transparait par sa présence dans les équations à la racine carré mais aussi dans l'exponentielle qui fait intervenir un terme en $(H_j + H_n)/(H_n H_j)$. À rapport des hauteurs d'échelle constant ce terme donne le même résultat, la gamme n'a donc pas d'influence dans cette configuration. En revanche, à différence constante, plus la gamme de températures augmente et moins le terme nuit devient négligeable.
- Pour s'en convaincre, nous avons calculé le deuxième terme pour tous les doublets de GJ 1214 b, en l'absence de couche isotherme, en partant du principe que les pressions de transition étaient les mêmes pour les atmosphères et que l'altitude de transition était égale à 1 500 km pour le doublet 300 - 650 K. Ils valent respectivement ($\times 10^{-4}$) : 3,7 ; 12 et 255 à colonne isotherme. Autrement dit, de par cette tendance nous devrions perdre progressivement l'identification à l'isotherme jour lorsque l'on augmente la gamme de température du doublet, et ce même si dans nos exemples d'atmosphères ce deuxième terme reste négligeable.

Difficile dans ces conditions de vraiment comparer ces résultats avec ceux obtenus par l'inversion car nous ne savons pas dans quelle proportion la contribution s'exprime sur la température inversée par Tau-REx. L'écart à la température du côté chaud est de 1 K, 1 K, et 2 K pour les colonnes isothermes, et 10 K, 20 K et 22 K pour les colonnes à deux températures. Pour la géante gazeuse, nous trouvons 4 K, 6 K, et 5 K, puis 45 K, 52 K et 48 K. Il semble donc que nous retrouvons des tendances similaires pour nos atmosphères champignons. Concernant HD 209458 b, le doublet 1000 - 1500 K est le moins proche de sa température chaude car il a aussi le plus mauvais rapport H_j/H_n .

Nous proposons en Annexe D une application de cette approche sur une exoplanète aux dimensions de GJ 1214 b. L'étude et la méthode sont décrites dans § D.1.3. Les Figures D.1 et D.2 correspondent aux résultats analytiques obtenus à partir des équations Eq. (5.4), Eq. (5.7). Nous avons considéré 6 niveaux compatibles avec les spectres que nous avons obtenus et dans chaque cas, nous proposons le rapport entre la contribution nuit et la contribution jour à la profondeur optique totale. À gauche sont traitées les atmosphères à colonnes isothermes et à droite celle à deux températures (seuls les niveaux tels que $P_t \leq P_{T_i}$ correspondent aux équations obtenues jusqu'ici). Nous avons fait varier la hauteur d'échelle entre 70 km et 570 km et les 3 sphères représentent les 3 doublets 300 - 650 K, 500 - 1000 K et 1000 - 1500 K.

Ces résultats doivent néanmoins être nuancés par un certain nombre de remarques :

- **La gravité n'est pas constante** : La gravité décroît avec l'altitude, et en conséquence, le côté chaud est encore plus enflé (en pression comme en densité) par rapport au côté froid qu'à gravité constante, ce qui est accentué par le rapport des températures. Il devrait alors en découler une atténuation de la tendance précédente.
- **Le niveau de transition dépend de la hauteur d'échelle** : Nous avons considéré $z_{T_i} = 1500$ km pour le doublet 300 - 650 K. En tenant compte des rapports de hauteur d'échelle, nous avons placé ce niveau à $z_{T_i} = 2325$ km et $z_{T_i} = 3945$ km. Or en augmentant les dimensions de l'atmosphère, nous abaissons par la même occasion la pression de transition puisque l'angle d'ouverture s'en voit renforcé. En conséquence, les niveaux de transition sont également plus élevés pour les doublets 500 - 1000 K et 1000 - 1500 K. À une couche au-dessus de ce niveau, nous divisons par 2 les termes, à 2 couches, par 4 et nous trouvons des valeurs similaires pour les trois doublets avec 3 couches de décalage.
- **La section efficace dépend de la température** : Outre les deux effets précédents, l'effet de la température sur les sections efficaces est clairement le plus important. Leurs comportements dépendent de la longueur d'onde considérée. Entre 300 et 1500 K, elles évoluent sur 8 ordres de grandeur et augmentent presque toujours avec la température dans l'infra-rouge. Les bandes les moins absorbantes sont associées à des sections efficaces 100 fois plus élevées entre 300 - 650 K avant de ne gagner plus qu'un ordre de grandeur entre 500 et 1000 K ou 1000 et 1500 K. Les bandes les plus intenses quant à elles ont une évolution de section efficace plus linéaire, et donc à peu près équivalente pour les 3 doublets. L'absorption étant plus forte du côté jour que du côté nuit, le deuxième terme des équations Eq. (5.8) et Eq. (5.7) s'en voit diminué du rapport des sections efficaces (voir Eq. (5.9)). Qui plus est, le niveau de transition s'en trouve réévalué en altitude puisque nous avons considéré une section efficace moyenne sur l'ensemble du parcours puis déterminé z_t à partir de cette valeur. Si nous redonnons au côté jour son réel niveau d'absorption, étant le seul à s'exprimer, la transition intervient en plus haute altitude.

$$\tau = \tau_{T_j} \left(\frac{1}{2} + \frac{\sigma_{mol,n}}{2\sigma_{mol,j}} \exp \left(-\frac{z_t(H_j + H_n)}{H_n H_j} \right) \sqrt{\frac{H_n}{H_j}} \right) \quad (5.9)$$

Cas champignons, en présence de pollution directe par la couche isotherme

En présence d'un isotherme en basse atmosphère, si le niveau de transition est plus bas que l'interface ($z_t > z_{T_i}$), alors l'expression de la profondeur devient, en supposant $T_i = T_j$:

$$\begin{aligned} \tau = \tau_{z_t > z_{T_i}} - n_0 \sigma_{mol} & \left[\exp\left(-\frac{z_t H_{T_i} - z_{T_i}(H_{T_i} - H_n)}{H_{T_i} H_n}\right) \int_0^{\sqrt{2(z_{T_i} - z_t)R_p}} \exp\left(-\frac{x^2}{2R_p H_n}\right) dx \right] \\ & + n_0 \sigma_{mol} \left[\exp\left(-\frac{z_t}{H_{T_i}}\right) \int_0^{\sqrt{2(z_{T_i} - z_t)R_p}} \exp\left(-\frac{x^2}{2R_p H_{T_i}}\right) dx \right] \end{aligned} \quad (5.10)$$

$$\begin{aligned} \tau = \tau_{z_t > z_{T_i}} - n_0 \sigma_{mol} & \left[\exp\left(-\frac{z_t H_j - z_{T_i}(H_j - H_n)}{H_{T_i} H_n}\right) \int_0^{\sqrt{2(z_{T_i} - z_t)R_p}} \exp\left(-\frac{x^2}{2R_p H_n}\right) dx \right] \\ & + n_0 \sigma_{mol} \left[\exp\left(-\frac{z_t}{H_j}\right) \int_0^{\sqrt{2(z_{T_i} - z_t)R_p}} \exp\left(-\frac{x^2}{2R_p H_j}\right) dx \right] \end{aligned} \quad (5.11)$$

$$(5.12)$$

Notons I_n la première intégrale de cette expression et I_j la deuxième, respectivement la partie de la profondeur optique nuit à retirer du fait de la présence de l'isotherme, et la partie qui la remplace à la température de celle-ci égale à T_j . Lorsque z_t décroît, ces deux termes augmentent, mais I_j croît beaucoup plus rapidement que I_n , ce qui assoit une domination très nette sur une pénétration très faible de l'isotherme du côté jour. La contribution du côté nuit est très vite écrasée et rapidement, nous n'observons plus qu'une atmosphère dont l'air chaud du côté jour aurait envahi une partie du côté nuit, ne laissant plus que T_j comme signature thermique.

Sur les Figures D.1 et D.2 à droite sont traitées les atmosphères à deux températures, avec une couche isotherme à la même température que le côté jour. Nous avons fait varier la hauteur d'échelle entre 70 km et 570 km et les 3 sphères représentent les 3 doublets 300 - 650 K, 500 - 1000 K et 1000 - 1500 K. Lorsque le niveau sondé est compris dans la couche isotherme, nous avons représenté le rapport entre la contribution du côté nuit et la somme de la contribution du côté jour et de l'isotherme puisqu'ils ont la même signature thermique. Une valeur très faible de ce rapport, et ce, quelle que soit la hauteur d'échelle du côté nuit, indique un écrantage total du côté nuit. Contrairement au cas d'une profondeur optique plus grande que la moitié jour grâce à une contribution nuit non négligeable qui altère la signature spectroscopique (en ajoutant une dépendance en T et en λ de la section efficace), son augmentation *via* la contribution isotherme renforce la signature du côté jour, et les algorithmes de traitement du signal l'interprète comme s'il ne subsistait que T_j . L'algorithme réagit en réévaluant sa compensation par le rayon planétaire. À terme, il retrouve une atmosphère isotherme, à la température du côté jour et aux bonnes dimensions.

5.3.5 Impact de la résolution et du mode de fonctionnement de Tau-REx

Nous reprenons l'étude effectuée sur des atmosphères à deux points de température, mais sur une gamme spectrale plus faibles (1 - 10 μm), cette fois-ci en utilisant des spectres ré-échantillonnés de manière à s'adapter à la résolution instrumentale, à savoir celle du JWST. Cette opération a été permise grâce à la participation d'Ingo Walldmann de l'UCL (Walldmann et al. (2015), Batalha et al. (2017)). Nous avons ensuite effectué l'inversion de quelques exemples de nos atmosphères synthétiques par le mode de fonctionnement 'Guillot' de Tau-REx.

Inversion à la résolution et dans la gamme spectrale du JWST

Comparons les résultats obtenus par l'équipe de l'UCL à ceux que nous avons exposés. En ce qui concerne les évidentes similitudes :

- Les tendances des trois paramètres libres sont identiques pour les doublets de GJ 1214 b ainsi que pour les doublets 1000 - 1500 K et 1000 - 1800 K de HD 209458 b.
- Ainsi, les convergences interviennent pour des angles similaires ou tout du moins très proches. L'étude étant effectuée sur un plus grand nombre de β , la détermination des angles de convergence est facilitée.
- L'influence de l'amplitude et de la gamme de température sur les courbes de tendance sont également les mêmes.

En majorité, les choix de la résolution ou de la gamme spectrale n'ont pas eu d'influence sur l'ensemble des comportements exposés jusqu'ici. Nous notons néanmoins un certain nombre de différences dont nous allons discuter.

Tout d'abord concernant les barres d'erreur, elles sont nettement plus importantes sur cette deuxième série d'inversion que dans la première. En cause, la résolution fixée à 100 ainsi que la gamme spectrale plus restreinte qui impliquent un nombre de points plus faible dans les spectres. L'échantillonnage étant réduit, les distributions *a posteriori* sont plus étalées. Qui plus est, PandExo propose une estimation plus réaliste du bruit en tenant compte à la fois du bruit de photon stellaire et du bruit instrumental (ici du JWST). Avec des barres d'erreur plus importantes, l'algorithme a plus de souplesse dans son exploration de l'espace des paramètres puisque les exigences sur la contrainte des spectres sont amoindries et les distributions paramétriques s'en voient élargies.

Il est intéressant de remarquer que les distributions ne se recouvrent pas toujours entre les deux approches. Cela pourrait paraître inquiétant au premier abord, mais nous allons voir que nous pouvons fournir des éléments d'explication. Comme nous pouvons le constater sur les spectres (Figure 5.7 et Figure 5.9), ils évoluent sur un large intervalle de rayons effectifs puisque l'eau présente une forte amplitude de section efficace entre le visible et l'infra-rouge (environ 10 ordres de grandeur). La distribution de contribution est en conséquence très étalée, et la diversité en angles de pénétration plus importante. Sur la gamme 0,6 - 20 microns, la résolution beaucoup plus grande dans le visible que dans l'infra-rouge exacerbe la contribution des niveaux les plus bas, région presque toujours dominée par l'isotherme. En conséquence, c'est un mélange sur une large épaisseur atmosphérique et c'est une large diversité de signatures qui s'expriment dans les spectres, puis lors des inversions. En réduisant la gamme spectrale à 1 - 10 microns, la dite couche s'amincit par la perte du visible et c'est une partie globalement plus haute de l'atmosphère que nous sondons. En l'absence d'hétérogénéités verticales, cette mixture n'a que peu d'effets sur les inversions, mais dans le cas des colonnes à deux températures, la perte de la basse atmosphère implique par la même occasion celle de la signature de l'isotherme (à la température du côté jour). Il n'est donc pas étonnant que les températures solutions obtenues dans la gamme 1 - 10 μm soient plus faibles que celles obtenues dans la gamme 0,6 - 20 μm .

Ce ne sont pas des différences très fortes et à la convergence, elles sont comprises entre 15 et 30 K dans le cas GJ 1214 b et entre 10 et 20 K pour HD 209458 b (nous mettons de côté le doublet 500 - 1000 K pour l'instant), mais elles sont souvent suffisantes pour que les barres d'erreur ne se recouvrent pas et pour affecter les deux autres paramètres. Si les tendances sont toujours respectées que ce soit pour l'abondance en eau ou le rayon à 10 bar, les valeurs de convergences sont différentes, en particulier pour

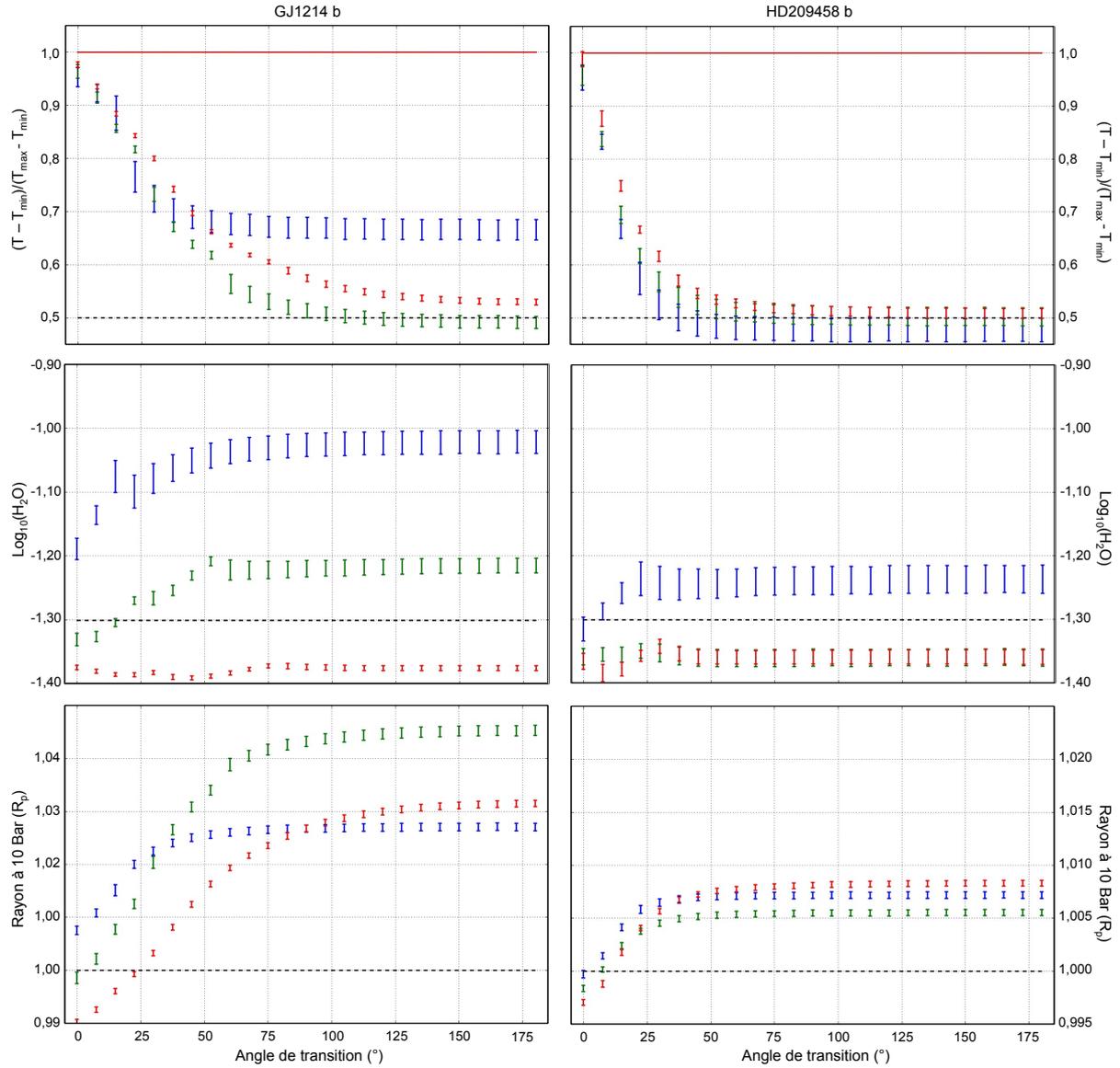


Figure 5.14: Résultats des distributions *a posteriori* obtenues lors de l'inversion des atmosphères hétérogènes en température après ré-échantillonnage des spectres dans le but de coller à la résolution du JWST, avec une estimation beaucoup plus réaliste du bruit et donc en simulant une observation réelle par l'instrument. À gauche : distribution dans le cas d'une exoplanète des dimensions de GJ 1214 b ; à droite : dans celui d'une exoplanète des dimensions de HD 209458 b. Dans les deux cas, sont représentés les températures, l'abondance en eau et le rayon à 10 bar et sont superposés les 3 doublets de températures testés, respectivement : 300 - 650 K (bleu), 500 - 1000 K (vert) et 1000 - 1500 K (rouge) ; 500 - 1000 K (bleu), 1000 - 1500 K (vert) et 1000 - 1800 K (rouge). La température est normalisée par rapport au contraste de température ($T_j - T_n$), 1 correspondant à la température du côté jour que nous représentons par un trait rouge, et 0,5 à la température moyenne représentée par un trait discontinu noir. L'abondance en H_2O est exprimée en puissance de 10 et la valeur initialement introduite dans les atmosphères est représentée par un trait discontinu noir. Le rayon à 10 bar est normalisé par rapport à celui utilisé pour les simulations, représenté par un trait discontinu noir.

le doublet 1000 - 1500 K (GJ 1214 b) ou les doublets 1000 - 1500 K et 1000 - 1800 K (HD 209458 b). Restreindre l'épaisseur de la couche sondée, comme augmenter le bruit sur le spectre, libère une partie de la contrainte sur la hauteur d'échelle et l'abondance en eau. L'algorithme se permet plus d'écarts lors de la compensation des effets de température sur la position de la couche sondée et sur la hauteur d'échelle locale. À des températures de convergences plus faibles, nous constatons aussi des abondances de convergence plus faibles, mais pas seulement. Les écarts semblent plus imposants dans le cas de la mini-Neptune que dans le cas de la géante gazeuse. Un autre effet se superpose au précédent, à savoir la valeur même de la hauteur d'échelle locale à contraindre.

La Table 5.2 expose les valeurs de ce paramètre atmosphérique aux niveaux sondés les plus bas et aux niveaux les plus élevés pour tous les doublets. Ils sont proposés sur la gamme 0,6 - 20 μm et dans la gamme 1 - 10 μm . Celles des niveaux bas de GJ 1214 b sont plus sensibles à la gamme spectrale que celles de HD 209458 b, et à cela s'ajoute une amplitude plus importante du fait des dimensions des exoplanètes (la gravité diminue plus vite avec l'altitude sur GJ 1214 b que sur HD 209458 b). Donc, pour une température de convergence légèrement plus faible, l'algorithme n'a d'autre choix que de compenser en sous-estimant l'abondance en eau et donc en réduisant le poids moléculaire moyen de l'atmosphère pour restaurer une hauteur d'échelle vraisemblable au sein de la couche sondée. Au cas par cas, pour les 3 doublets de GJ 1214 b, les écarts sur $\chi_{\text{H}_2\text{O}}$ engendrent une déviation sur le poids moléculaire moyen de 17,6%, 4,1% et 3,5% respectivement, en comparaison avec les valeurs que nous avons obtenues. Dans le même temps, celles sur la température sont de 2,9%, 2,7% et 1,6%, donc la hauteur d'échelle locale est toujours plus grande dans les modèles solutions obtenus par l'équipe de l'UCL que pour les nôtres. Nous nous attendons donc à constater une rétroaction du rayon à 10 bar se traduisant par des valeurs plus faibles que celles obtenues lors de la première étude. En effet, si le rapport T/μ est plus élevé pour les 3 doublets nous n'avons pas autant besoin de compenser la basse atmosphère en augmentant R_p . C'est effectivement ce que l'on peut constater entre les Figures 5.13 et 5.14.

Nous noterons toutefois que la version de Tau-REx utilisée par nos collaborateurs converge systématiquement vers une fraction molaire en eau entre 0,042 et 0,044 au lieu de 0,05 en l'absence de biais verticaux. Il pourrait donc également s'agir d'un écart de compatibilité entre la version de l'algorithme actuellement utilisée par l'UCL et celle que nous avons en local. Ce travail de compatibilité entre Pytmosph3R et Tau-REx n'est pas figé dans le temps et doit être constamment mis à jour.

Subsiste enfin le cas 500 - 1000 K. Inversé sur le set, il est clairement pollué par la couche isotherme et converge vers une température très éloignée de celle du terminateur. Inversé après ré-échantillonnage, la présence de l'isotherme est totalement perdue et sa tendance s'identifie à celles des autres doublets. Si nous reprenons la Figure ??, il est clair que sur la gamme 0,6 - 20 μm , le visible et le très proche infra-rouge sont marqués par l'isotherme, le niveau de transition de la transmittance étant dans cette gamme majoritairement en dessous du niveau délimitant l'isotherme. Sur la gamme 1 - 10 μm , ces niveaux sont très majoritairement au-dessus, et le poids accordé au proche infra-rouge est aussi nettement inférieur lors du ré-échantillonnage. En découle une représentation beaucoup moins marquée, voire inexistante de la couche isotherme dans les spectres et dans leurs inversions. Le comportement des paramètres libres est néanmoins plus délicat à comprendre, la température de convergence est inférieure à celle du terminateur, et ce même en tenant compte des barres d'erreur. Une température plus faible que la moyenne des deux hémisphères impliquerait une dissymétrie négative des angles de pénétration et un poids du côté nuit prédominant sur celui du côté jour dans la signature spectroscopique. Si les fractions molaires présentent des tendances proches, elles ne correspondent pas non plus aux rétro-action constatées jusque-là. À température plus faible, nous devrions constater une fraction molaire également plus faible pour rééquilibrer la hauteur d'échelle locale, ce qui n'est pas le cas. Au vue des courbes de température, nous nous attendions à ce que la fraction molaire converge de la même manière que les

Table 5.2: Hauteurs d'échelle (en kilomètres) rencontrées par les rayons échantillons.

Doublet (K)	300-650	500-1000	1000-1500	500-1000	1000-1500	1000-1800
0,6 - 20 μm	GJ	GJ	GJ	HD	HD	HD
$\beta = 0^\circ$						
Niveau bas (T_j)	217	361	622	289	440	534
Niveau haut (T_j)	266	530	1332	304	483	601
$\beta = 180^\circ$						
Niveau bas (T)	159	271	518	217	367	415
Niveau bas (T_j)	217	361	622	289	440	534
Niveau haut (T)	187	363	979	225	398	456
1 - 10 μm	GJ	GJ	GJ	HD	HD	HD
$\beta = 0^\circ$						
Niveau bas (T_j)	220	387	749	291	453	557
Niveau haut (T_j)	266	530	1332	304	483	601
$\beta = 180^\circ$						
Niveau bas (T)	161	288	605	218	376	429
Niveau bas (T_j)	220	384	726	291	451	551
Niveau haut (T)	188	363	979	225	398	456

autres doublets aux alentours de 0,044. Sur ce cas de figure, nous expliquons les différences comme les conséquences d'un changement de résolution instrumentale ou d'un changement de gamme spectral, et peut-être l'exemple intermédiaire d'une atmosphère faiblement biaisée verticalement, mais subissant quand même un fort effet indirect des hétérogénéités verticales. Même si les valeurs de convergences ne suivent pas forcément la logique que nous avons construit à partir de tous les autres cas, nous gardons à l'esprit que les ordres de grandeur sont tout de même assez satisfaisant.

Pour conclure, le changement de la gamme spectrale peut diluer les biais verticaux voire les faire disparaître si nous ne sondons pas les mêmes niveaux entre les deux gammes. Ces mêmes biais sont également atténués par le poids que la résolution spectrale utilisée accorde aux niveaux pollués. Typiquement, dans le cas de l'eau et pour les structures atmosphériques que nous avons adoptées, l'isotherme s'exprime moins lors des inversions : parce que les courtes longueurs d'onde sont moins représentées et parce que nous écartons la gamme la plus affectée par celle-ci, à savoir le visible. D'un autre côté, les tendances, remarques et explications fournies avec le set 10_{vno} se retrouvant globalement avec le set ré-échantillonné, cette étude complémentaire nous conforte sur les conclusions formulées dans les sections précédentes (§ 5.3).

Inversion par un autre mode de fonctionnement

Toujours en collaboration avec l'UCL, nous avons tenté des inversions en utilisant les autres modes de fonctionnement de Tau-REx sur les atmosphères synthétiques. Les Figures 5.15 et 5.16 donne les profils thermiques solutions obtenus pour le doublet 300 - 650 K, l'évolution du χ^2 avec l'angle de contraste, et l'évolution du rayon à 10 bar, l'abondance en eau, et la température de la haute atmosphère en fonction de l'angle de contraste.

Ce mode de fonctionnement est actuellement le plus efficace de Tau-REx d'après le laboratoire. La vraisemblance des solutions est effectivement très bonne, la compensation du rayon à 10 bar très

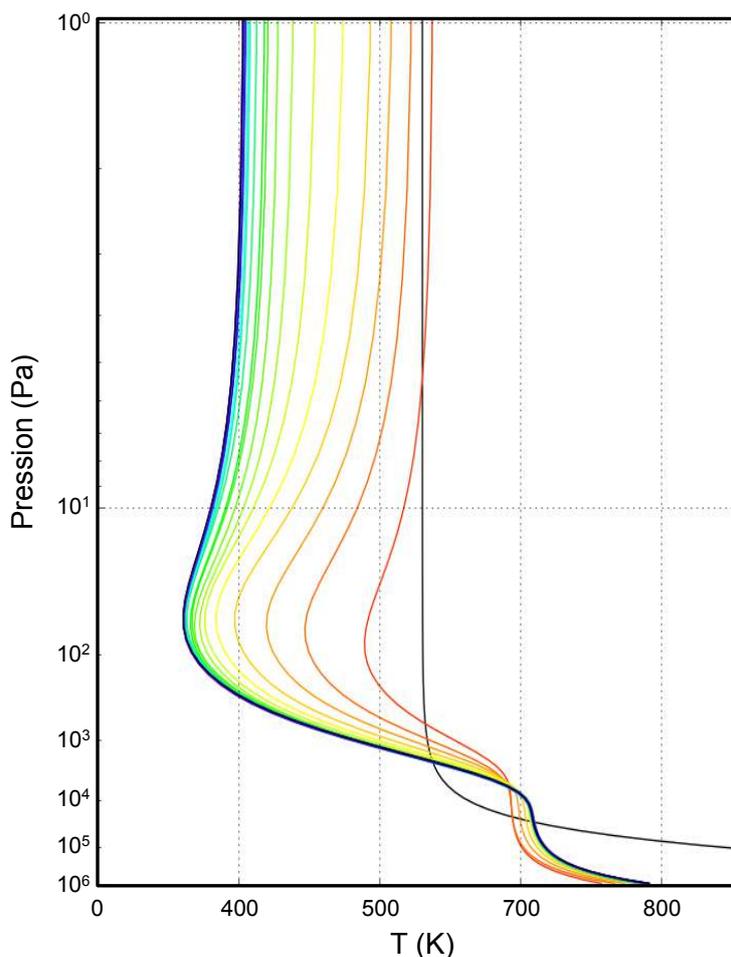


Figure 5.15: Profils thermiques solutions obtenu par inversion des atmosphères du doublet 300 - 650 K (colonnes à deux températures). Ces profils sont obtenus avec le mode "Guillot" de Tau-REx (Waldmann et al. 2015). Les profils sont arrêtés à 10^{-1} Pa car ils sont isothermes à plus basse pression. Le profil noir correspond au cas $\beta = 0^\circ$ et la température de surface monte à 1350 K. Du rouge au bleu, les angles de contraste varient entre 15° et 180° .

faible puisque c'est le profil thermique de la basse altitude qui gère cette fois-ci la compensation des hétérogénéités verticales, et l'abondance est extrêmement bien contrainte, nous trouvons, quel que soit l'angle de contraste, la fraction molaire en eau des atmosphères (alors même que dans le mode de fonctionnement précédent, l'isotherme induisait un biais très fort aux faibles β). Enfin, la température de la haute atmosphère évolue de la même manière qu'en fonctionnement "isotherme". Les biais verticaux affectent cette partie de l'atmosphère avec la même intensité pour les deux approches.

La contre-partie est une multiplication du nombre de paramètres libres à contraindre puisque nous passons d'1 seul à 5 paramètres pour contraindre la température de l'atmosphère. Nous augmentons significativement les temps de calcul et à ce stade de l'utilisation de Tau-REx, nous n'avons pas encore les armes pour interpréter convenablement les distributions *a posteriori* des paramètres décrits dans Waldmann et al. (2015) et Guillot (2010). Ce chapitre cherchant à mettre en évidence des biais de nature exclusivement thermiques, et les deux modes de fonctionnement aboutissant à des conclusions similaires sur les biais en température, nous n'avons pas réalisé l'inversion des autres atmosphères.

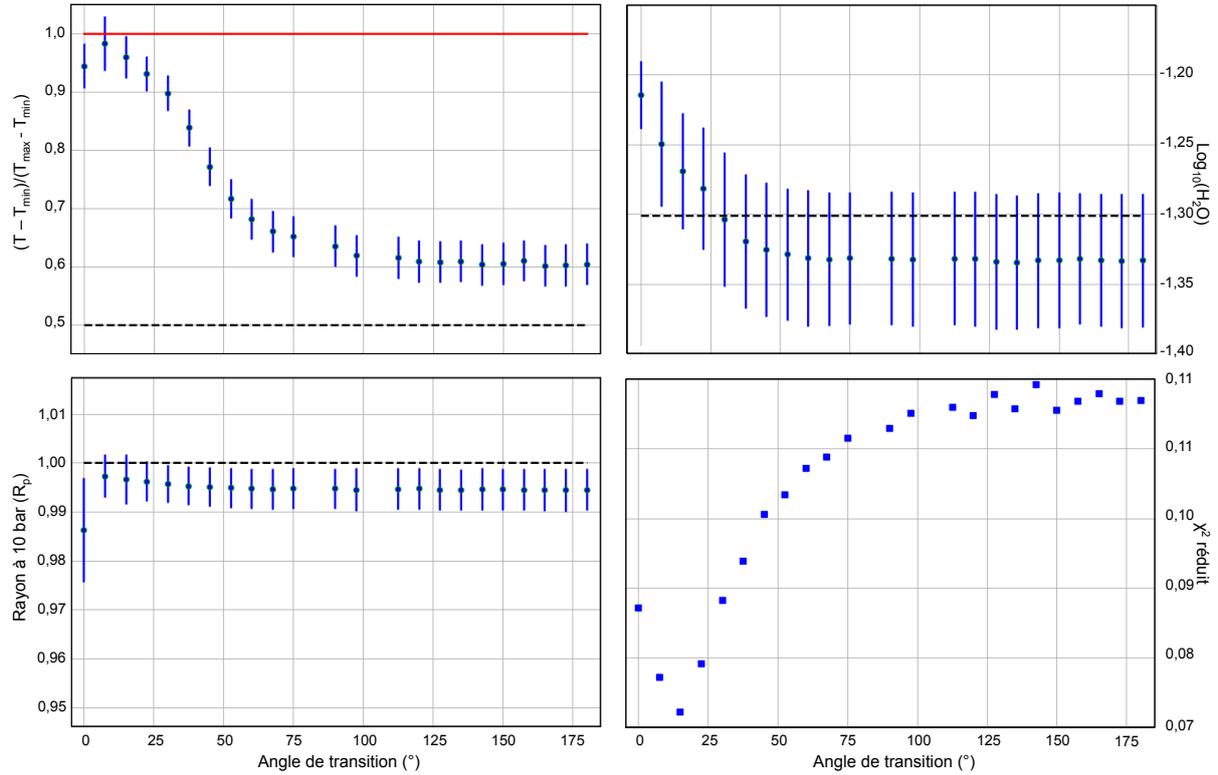


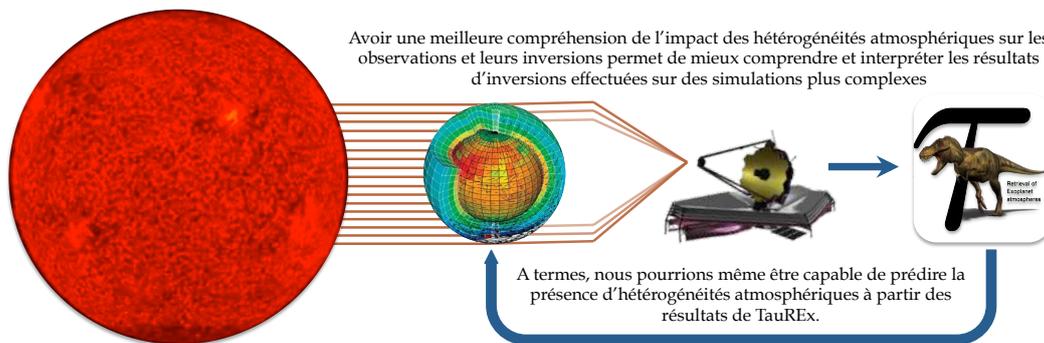
Figure 5.16: Résultats des distributions *a posteriori* obtenues lors de l'inversion en mode "Guillot" des atmosphères hétérogènes en température après ré-échantillonnage des spectres dans le but de coller à la résolution du JWST, avec une estimation beaucoup plus réaliste du bruit et donc en simulant une observation réelle par l'instrument. Le cas étudié est celui d'une exoplanète des dimensions de GJ 1214 b avec le doublet 300 - 650 K (atmosphères aux colonnes à deux températures). La température est normalisée par rapport au contraste de température ($T_j - T_n$), 1 correspondant à la température du côté jour que nous représentons par un trait rouge, et 0,5 à la température moyenne représentée par un trait discontinu noir. L'abondance en H_2O est exprimée en puissance de 10 et la valeur initialement introduite dans les atmosphères est représentée par un trait discontinu noir. Le rayon à 10 bar est normalisé par rapport à celui utilisé pour les simulations, représenté par un trait discontinu noir.

Ce mode de fonctionnement sera très probablement beaucoup plus efficace pour inverser des atmosphères présentant des hétérogénéités de composition ou des atmosphères présentant à la fois des hétérogénéités en températures et en abondances.

5.4 Retour sur la simulation 3D de GJ 1214 b, des biais thermiques dissimulés

Nous savons à présent que les atmosphères des exoplanètes présentant un fort contraste de température entre côté jour et le côté subissent un biais thermique tangentiel (selon la ligne de visée). Il se traduit par l'obtention d'une température intermédiaire entre celle du terminateur et celle du point sub-stellaire lors de l'inversion de son spectre associé. L'intensité de ces biais, s'évaluant à partir de la déviation constatée par rapport au terminateur sur les paramètres atmosphériques (température, abondances, poids moléculaire moyen), et notamment la température, dépend à la fois des propriétés de l'atmosphère et de

celle de l'exoplanète qui la supporte (R_p/H_0). Dans les paragraphes qui suivent, nous allons exploiter l'ensemble des résultats obtenus jusqu'ici pour répondre définitivement à nos interrogations quant à l'absence de biais thermiques tangentiels clairs lors de l'inversion de la simulation 3D de GJ 1214 b (Charnay et al. 2015). Nous allons voir que ces biais sont bien présents, qu'ils étaient déjà de faible intensité et qu'ils sont en réalité compensés par les hétérogénéités azimutales en température, mais aussi par des hétérogénéités tangentielles en composition.



5.4.1 Discussion sur les structures atmosphériques les plus représentatives

Le doublet 300 - 650 K est le plus proche de la dite simulation de par son contraste jour/nuit. Nous pouvons voir sur la Figure 4.2 que la transition de température entre l'hémisphère chaud et l'hémisphère froid s'effectue sur un angle relativement faible, aux alentours de $\beta = 75 - 85^\circ$, au moins pour le côté Ouest. Les températures extrêmes sur ces mêmes angles avoisinent respectivement 300 K du côté nuit et environ 650 K du côté jour. La couche isotherme est quant à elle beaucoup plus chaude, mais nous considérerons que ses effets seront compensés par le rayon à 10 bar, au moins du point de vue géométrique. La Figure 4.10 (Chapitre 4) montre que, dans la gamme 1 - 10 μm , aucune des couches de la région radiativement significative n'est comprise dans la basse atmosphère à très haute température. Les couches d'indice 28 - 34 sont certes plus chaudes que la région globalement sondée (34 - 72), mais elles sont aussi faiblement contributrices et la température des niveaux sondés n'excède jamais 650 K. Nous pouvons considérer que nous n'avons pas d'effet direct de la basse atmosphère sur le spectre d'absorption mais seulement les effets indirects. Étant donné la gamme utilisée dans l'inversion, le type de structure atmosphérique, et la très faible influence de l'isotherme, nous pouvons donc nous référer au doublet 300 - 650 K à deux températures.

Si nous nous focalisons pour l'instant sur le côté Ouest, qui est représentatif des 5/6 de l'atmosphère, le doublet 300 - 650 K serait effectivement parfait comme base de raisonnement, mais il nous a fallu réitérer l'expérience avec une couche isotherme moins épaisse. En effet, cet exemple présentait en l'état une très forte pollution par l'isotherme, qui n'est pas constatée ici, et qui s'est traduite par une convergence rapide vers une température beaucoup plus élevée que celle du terminateur. Elle intervenait qui plus est pour un angle de contraste plus faible que celui observé dans la simulation, soit juste avant que les effets verticaux ne dominent ceux purement tangentiels. Avec une couche isotherme plus profonde, nous obtenons une température comprise entre 0,55 et 0,60 (suivant l'inversion) sur l'échelle relative, ce qui correspondrait à une température comprise entre 495 et 510 K. Autrement dit, à ce stade de notre réflexion, nous aurions pu nous attendre à ce que Tau-REx retourne une température aux alentours de 500 K. C'est en soit une déviation assez faible, et la complexité de l'atmosphère aurait très bien pu expliquer un éloignement à la valeur attendue, mais en réalité, nous nous attendions finalement à un biais beaucoup plus intense encore. En effet, si la zone de contraste est comprise dans un angle β , elle peut également

être très abrupte autour du terminateur, la température ne suivant plus une évolution angulaire linéaire. Suivant le niveau considéré :

- Si nous sondons en haute atmosphère [60] : la température du terminateur est de 470 K tandis que celles des colonnes adjacentes sont de 560 K pour celles du côté jour et de 415 K pour celles du côté nuit. Avec un angle de contraste de 70° comme initialement suggéré, elles auraient été de 503 K et 447 K.
- Si nous sondons aux niveaux les plus représentatifs [47] : le terminateur est plus chaud, 475 K et les colonnes adjacentes à 540 K et 460 K, ce qui reste une transition très brutale
- Si nous sondons plus bas dans l'atmosphère [40] : le terminateur est encore plus chaud, à 505 K, et la région de contraste est plus progressive tout en étant comprise dans un angle plus faible (45°)

Dans tous les cas de figure, nous nous attendions donc à des températures plus élevées. Au vue des angles de pénétration de la simulation (compris entre 0 et 10° , voir Annexe B) et du gradient de température proche du terminateur, nous pouvons ré-estimer l'angle de contraste. À $5,625^\circ$ (pas en longitude), l'augmentation brutale de T côté jour induirait un angle de contraste plutôt de 38° , la chute côté nuit un angle de 48° et à $11,25^\circ$ nous serions davantage sur un contraste de 54° . Ces résultats peuvent fluctuer en fonction de l'azimut considéré mais, à l'exception des pôles, restent globalement représentatifs. En s'arrêtant sur un angle de contraste de l'ordre de 40 - 45° , le biais devrait engendrer une température de 540 K. Avec 485 K, nous sommes plutôt sur celle du terminateur que sur une valeur affectée par des biais tangentiels. D'une manière ou d'une autre, les biais thermiques ont été dilués et nous allons expliquer de quelles manières.

Suite à cette discordance entre les deux études, nous avons cherché à comprendre quels phénomènes dans la simulation pouvaient expliquer l'absence constatée de biais thermiques, en dehors du simple constat d'hétérogénéités en températures relativement faibles. Des arguments nous confortent dans le fait qu'ils se manifestent tout de même, à des amplitudes proches de celles attendues tout en étant soit compensés par des effets liés aux hétérogénéités de composition, soit dilués par les hétérogénéités azimutales en température.

5.4.2 Des biais thermiques amoindris par les hétérogénéités de composition

Le premier argument repose sur la diversité moléculaire beaucoup plus complexe de la simulation 3D que dans nos atmosphères synthétiques, et présentant des hétérogénéités en abondance variées. En multipliant les signatures spectroscopiques et thermiques, nous multiplions par la même occasion les critères de correspondance et la contrainte de la température devrait s'en trouver facilitée, puisque le compromis sur la diversité de température est dilué par celui de la diversité moléculaire. Les deux molécules les plus représentatives du spectre en transmission, que sont l'eau et le méthane, présentent toutes deux un appauvrissement du côté jour (voir Figure 4.3), qui est d'ailleurs beaucoup plus marqué pour le méthane. L'angle de contraste est le même que pour les températures, puisque nous sommes à l'équilibre thermodynamique, et cette chute de l'abondance pourrait amoindrir les effets thermiques en accordant un pouvoir absorbant plus important aux sous-parcours des colonnes du côté nuit, au détriment de celles du côté jour. Les atmosphères synthétiques ne présentaient pas d'hétérogénéités en composition, et par conséquent nous ne savons pas à quel point ces dernières peuvent effacer les biais thermiques.

En Annexe B nous proposons une étude détaillée des angles de pénétration à toutes les longueurs d'onde et à tous les azimuts. Il ressort de cette étude que contrairement aux cas des atmosphères synthétiques, la dissymétrie peut être négative (jusqu'à -5°), et l'angle de pénétration nuit se retrouve sur

de larges gammes spectrales supérieures à l'angle de pénétration jour. Ces mêmes variations suivent parfaitement celles des abondances des molécules ou des compétitions de molécules concernées, ce qui montre bien que dans cette simulation, nous avons une forte compensation des effets thermiques par les aspects compositionnels (voir § B.3, Annexe C). Nous rééquilibrions d'une certaine manière nos hémisphères en termes de contribution dans la profondeur optique et de leurs expressions dans les spectres. La seule molécule pouvant renforcer les biais thermiques de par ses hétérogénéités tangentielles est le CO₂ (voir § B.2.1), mais comme elle est peu dominante dans le spectre, sa signature discordante n'est pas contrainte et elle n'a pas d'influence sur la température globale retournée.

Si notre argumentation semble se tenir en ce qui concerne les effets de composition, nous n'avons pas eu le temps de mettre en place une étude dans laquelle nous ajouterions des hétérogénéités en abondance dans nos atmosphères synthétiques et ainsi proposer un travail de caractérisation des biais qui leur sont associés. Et bien qu'ils entraînent incontestablement une compensation des effets thermiques, ils ne sont pas assez généralisés. Nous avons donc poussé notre investigation sur la voie de notre deuxième argument, ce qui a inspiré les résultats ci-dessous.

5.4.3 Des biais thermiques qui se compensent par les effets azimutaux

Indépendamment de l'argumentation précédente, qui reste à démontrer et à quantifier par une étude plus approfondie, notre deuxième point repose sur les hétérogénéités azimutales qui n'ont pas été modélisée lors de notre tentative d'isolation des biais thermiques. Comme nous pouvons le constater sur la Figure 4.2, la simulation présente une forte dissymétrie des deux côtés Est/Ouest qui se remarque tout particulièrement sur la coupe équatoriale. Comme nous l'avons fait remarquer, la transition du côté Ouest est progressive côté jour et abrupte lorsque l'on se rapproche du terminateur. La température ne descend d'ailleurs pas en dessous des 350 K et n'est atteinte que pour quelques cellules de la simulation. De l'autre côté, l'air froid s'enfonce dans la masse d'air chaud, et la transition n'est plus centrée sur le terminateur mais à une douzaine de degrés en longitude. Ce phénomène se reproduit sur une soixantaine de degrés en latitude autour de l'équateur Est, soit un sixième de l'atmosphère. Si nous nous référons à la Figure A.2, 12° c'est l'ordre de grandeur de l'angle de pénétration de la simulation GJ 1214 b. La dissymétrie dans cette région est en moyenne plus élevée que dans l'autre hémisphère du fait du réchauffement de l'air une dizaine de degrés après le terminateur de l'air et donc un pouvoir absorbant qui augmente tardivement. ψ_* évolue entre 7° et 12° en dehors des gammes présentant des anomalies, contre un ψ_+ compris entre 2° et 5°. Ainsi, la région imposant sa signature est comprise dans un angle de 17° dans le meilleur des cas, soit 3 pas en longitude. À l'équateur par exemple, cela contient un terminateur à 310 K, la moitié de la colonne adjacente nuit (360 K), celle jour (370 K) et la moitié de la suivante à 450 K. Cette partie de l'atmosphère devrait donc être essentiellement imprégnée de la signature thermique du côté nuit (entre 300 et 400 K). Les hétérogénéités azimutales, en dehors de celle précitées, sont très faibles, et nous pouvons considérer que le reste de l'atmosphère est plutôt bien représentée par la structure de la transition Ouest.

Séparons en conséquence la simulation en deux atmosphères distinctes. Nous considérons que tout l'hémisphère Ouest de l'atmosphère et 60° en latitude depuis les pôles un angle de contraste de l'ordre de $\beta = 45^\circ$, qui correspondrait à une température autour de 540 K. Ceci constitue ce qu'on appellera à présent l'Ouest, car sa structure moyenne est relativement identique à celle de la colonne équatoriale Ouest. Le sixième d'atmosphère restant, plutôt représentatif du côté froid avec une température moyenne autour du terminateur de l'ordre de 370 K (310 K sur la colonne Est), sera l'Est. Cette partie n'a pas de contraste, nous nous attendons donc à ce que Tau-REx nous retourne une température sensiblement proche de cette valeur moyenne. Si nous faisons une moyenne en pondérant l'Ouest de 5/6 et l'Est

Table 5.3: Résultats de l'inversion de l'hémisphère Ouest de la simulation de GJ1214 b.

Paramètres	R_p	T	$\chi_{\text{H}_2\text{O}}$	χ_{NH_3}	χ_{CO_2}	χ_{CO}	χ_{N_2}	χ_{CH_4}
Unités	R_J	K	-	-	-	-	-	-
Médiane (MO)	0,262731	507,63	-1,370	-3,702	-1,902	-8,721	-8,224	-1,585
σ_+	$4,1 \cdot 10^{-5}$	0,48	0,008	0,014	0,009	2,343	2,610	0,008
σ_-	$4,3 \cdot 10^{-5}$	0,89	0,008	0,014	0,009	2,274	2,588	0,008
$\Delta(\text{Médianes})$	$-5,3 \cdot 10^{-4}$	+22,21	+0,022	-0,214	+0,046	-0,164	-0,095	-0,028

d'1/6, nous aurions alors une température globale de l'ordre de 510 K. Nous ne pouvons pas réellement raisonner de cette manière, la température influence à la fois la géométrie de l'atmosphère et sa signature spectroscopique, qui plus est, pas de la même manière en fonction des molécules et des longueurs d'onde. Absolument rien ne garantit que le poids de chaque partie dans le spectre et son inversion est équivalent au découpage atmosphérique, et encore moins que nous pouvons moyenner des distributions *a posteriori*. Toutefois, si les hétérogénéités de composition étaient assez spectaculaires pour être observables et remarquées lors de l'inversion, il n'est pas impensable que les hétérogénéités thermiques tangentiels soient diluées par celles azimutales, et d'une certaine manière, leurs propres dissymétries par rapport au terminateur.

Pour s'en assurer, nous avons produit les spectres associés à l'Est et à l'Ouest, et nous avons appliqué Tau-REx dans les mêmes conditions que pour la simulation complète (voir § 4.3.1). Ces spectres sont présentés dans la Figure 5.17.

Un hémisphère Ouest beaucoup plus chaud

La Figure 5.18 permet la comparaison entre la solution Tau-REx et le spectre d'entrée de cette partie de la simulation. Le χ^2 réduit est de 1,43 soit presque la même valeur que lors de la première inversion. Le spectre est effectivement globalement aussi bien contraint même s'il présente toujours les mêmes discordances pour la bande à $3,32 \mu\text{m}$ du méthane et la bande à $4,27 \mu\text{m}$ du dioxyde de carbone. Nous retrouvons ici les hétérogénéités verticales du méthane et les hétérogénéités tangentiels du dioxyde de carbone.

Les résultats de l'inversion de l'Ouest sont exposés dans la Table 5.3. Comme nous pouvons le constater, la distribution *a posteriori* de la température est centrée sur des valeurs nettement plus importantes que celles que nous avons obtenues pour l'ensemble de la simulation. Ceci se remarque également sur les spectres puisque l'amplitude de flux entre les maxima et les minima a augmenté d'un spectre à l'autre. Nous noterons d'ailleurs que les allures globales sont assez similaires, et que les différences ressemblent réellement à une dilatation de la région sondée plutôt qu'à une réévaluation de la composition chimique. Nous nous attendons donc à obtenir des abondances du même ordre de grandeur. À l'exception de l'ammoniac, toutes les autres molécules sont retournées à des abondances très proches de celles initialement obtenues. Remarquons cela dit que toutes les tendances tangentiels en composition sont respectées (l'eau et le méthane sont légèrement moins abondant, et le dioxyde de carbone légèrement plus). La légère chute de la fraction molaire en NH_3 n'a aucun impact sur le poids moléculaire, ni même sur l'interprétation des spectres, puisque la molécule n'est pas contraignante. Le poids moléculaire moyen de l'hémisphère est quasi-identique à celui de l'atmosphère complète. Il ne s'agit donc clairement pas d'un simple effet de compensation mais bel et bien d'une atmosphère plus chaude qui est observée.

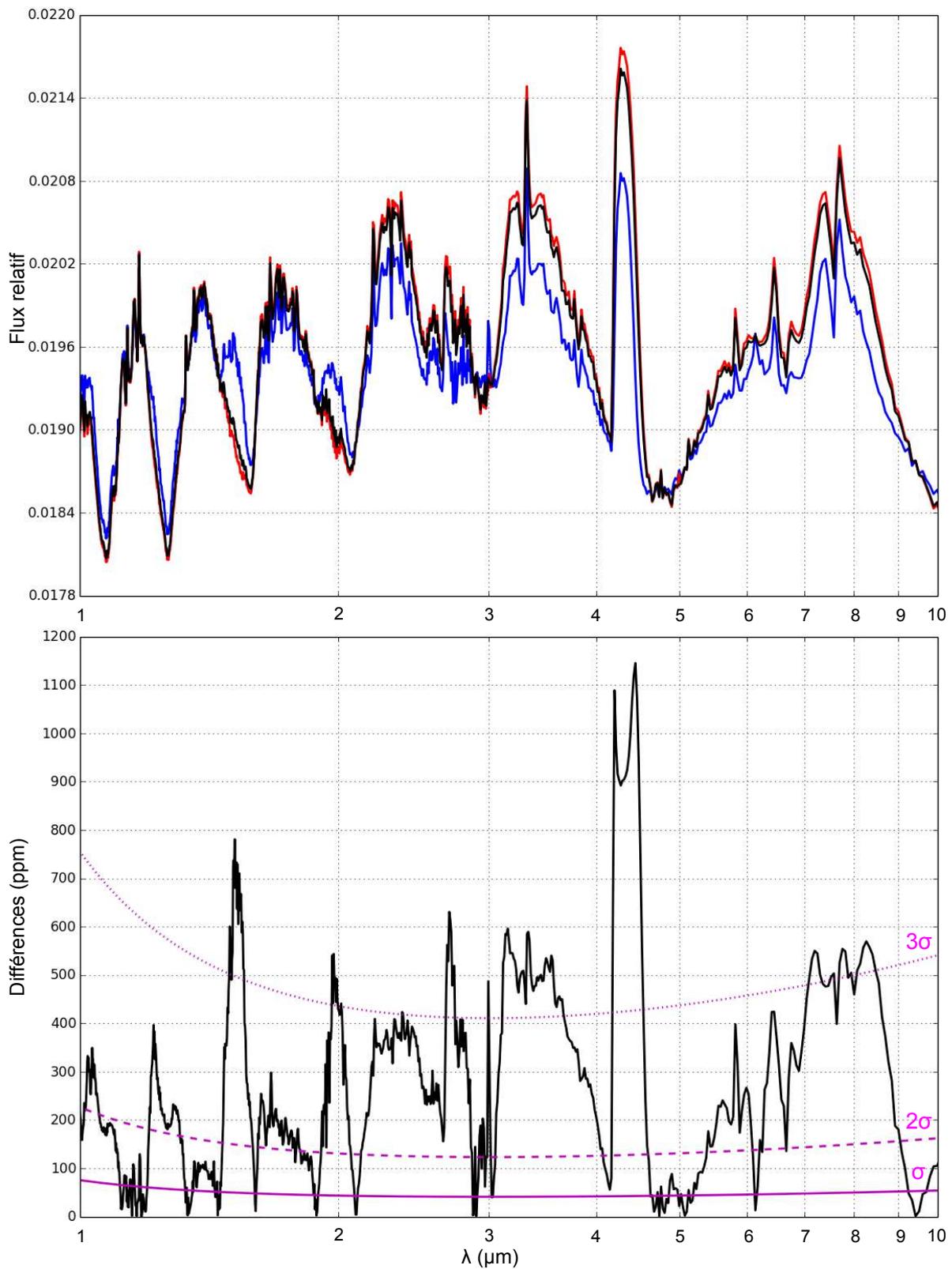


Figure 5.17: En haut : Spectres en transmission des hémisphères Ouest (en rouge) et Est (en bleu) superposés à celui de la simulation complète (en noir). En bas : Différences entre le spectre Ouest et le spectre Est en valeur absolue et exprimée en ppm. À titre indicatif, nous avons représenté les courbes d'erreur à 1, 3 et 10 σ (courbes magenta)

Table 5.4: Résultats de l'inversion de l'hémisphère Est de la simulation de GJ1214 b.

Paramètres	R_p	T	χ_{H_2O}	χ_{NH_3}	χ_{CO_2}	χ_{CO}	χ_{N_2}	χ_{CH_4}
Unités	R_J	K	-	-	-	-	-	-
Médiane (ME)	0,265760	398,51	-1,388	-2,634	-2,335	-3,640	-8,183	-1,485
σ_+	$4,7 \cdot 10^{-5}$	0,62	0,008	0,011	0,017	0,056	2,630	0,008
σ_-	$4,7 \cdot 10^{-5}$	0,60	0,008	0,011	0,017	0,056	2,635	0,008
$\Delta(\text{Médianes})$	$+2,5 \cdot 10^{-3}$	-86,91	+0,004	+0,854	-0,387	+4,917	-0,054	+0,072
$\Delta(\text{ME/MO})$	$+3,0 \cdot 10^{-3}$	-109,12	+0,018	+1,068	-0,433	+5,081	+0,041	+0,100

Nous ne sommes néanmoins pas encore sur la température que nous pensions trouver, elle est en effet encore une trentaine de degrés plus faible. Nous l'expliquons par les hétérogénéités de composition et essentiellement celles du CH_4 . Le contraste jour/nuit de la molécule est progressif, et dans la zone de contraste comprise par l'angle de pénétration jour, il perd qu'1 à 2 ordres de grandeur en fonction du rayon considéré. *A contrario*, le dioxyde de carbone qui s'enrichit du côté jour, et devrait accentuer le biais thermique, ne participe toujours pas à l'accentuation du biais thermique puisque sa bande principale n'est toujours pas contrainte. Donc, si nous faisons le bilan de cette inversion :

- L'hémisphère Ouest est effectivement plus chaud que l'atmosphère complète et son inversion subit le biais thermique découlant des hétérogénéités de température.
- Ce biais est amorti par les hétérogénéités en composition des molécules les plus représentatives et ne s'exprime donc pas de toute son intensité.
- Nous avons toujours une signature forte de la présence d'hétérogénéités verticales par le biais de la bande à $3,32 \mu m$.
- La signature de l'hétérogénéité tangentielle du dioxyde de carbone n'est pas aussi affectée par la perte du sixième Est que nous le pensions et domine celle des hétérogénéités azimutales. Elle naît donc principalement de l'inversion de tendance en composition par rapport aux autres molécules. Son amplitude est toujours mal contrainte puisqu'il s'exprime dans le transfert radiatif sur des températures et des fractions molaires plus élevées du côté jour (570 - 600 K, voir Figure B.3, Annexe B).

Un hémisphère Est beaucoup plus froid

La Figure 5.19 permet la comparaison entre la solution Tau-REx et le spectre d'entrée de cette partie Est de la simulation. Le χ^2 réduit est de 1,98 ce qui est moins bon que les inversions précédentes. L'algorithme semble avoir éprouvé plus de difficultés à contraindre l'ensemble du spectre. Le gradient thermique vertical est effectivement plus brutal dans cette partie de l'atmosphère. La température décroît moins rapidement en basse atmosphère que dans le reste de la simulation, elle évolue sur des températures comprises entre 500 et 600 K avant de chuter brutalement à 300 - 400 K. Contrairement au cas de l'atmosphère complète et à celui de l'hémisphère Ouest, cette hétérogénéité verticale en température intervient autour de la quarantième couche. La moitié basse du spectre sonde à des températures plutôt de l'ordre de 500 K, tandis que la partie haute à des températures de l'ordre de 400 K, voire 300 K pour les raies les plus intenses. La délimitation correspond à un flux relatif de l'ordre de 0,0193. Or, ce sont les longueurs d'onde dont les flux sont inférieurs à cette limite qui sont également celles qui présentent les différences les plus remarquables en comparaison avec les deux inversions précédentes. Les bandes

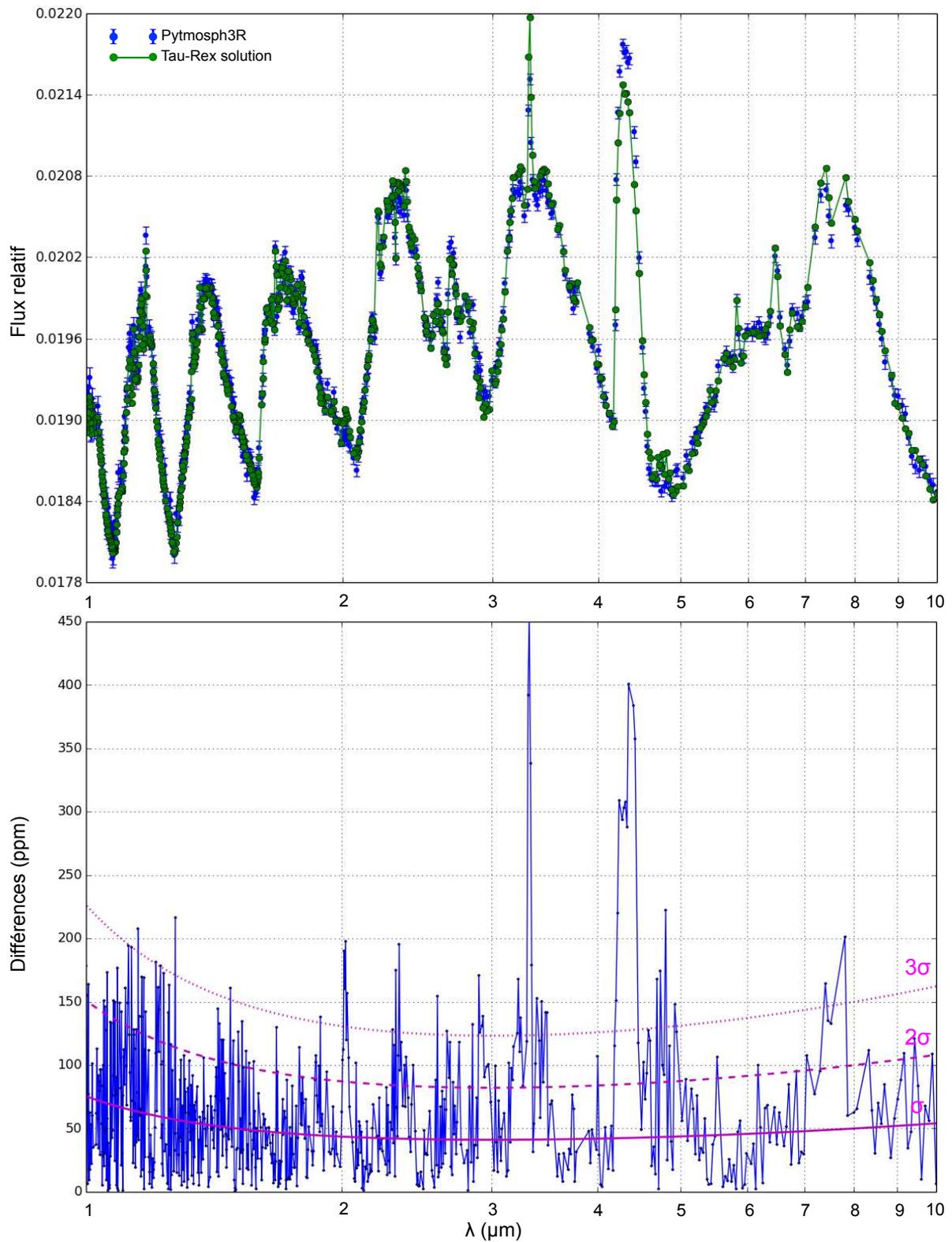


Figure 5.18: En haut : Spectres en transmission de l'hémisphères Ouest (en bleu) et la solution de Tau-REx (vert). En bas : Différences entre les deux spectres en valeur absolue et exprimée en ppm. À titre indicatif, nous avons représenté les courbes d'erreur à 1, 2 et 3 σ (courbes magenta)

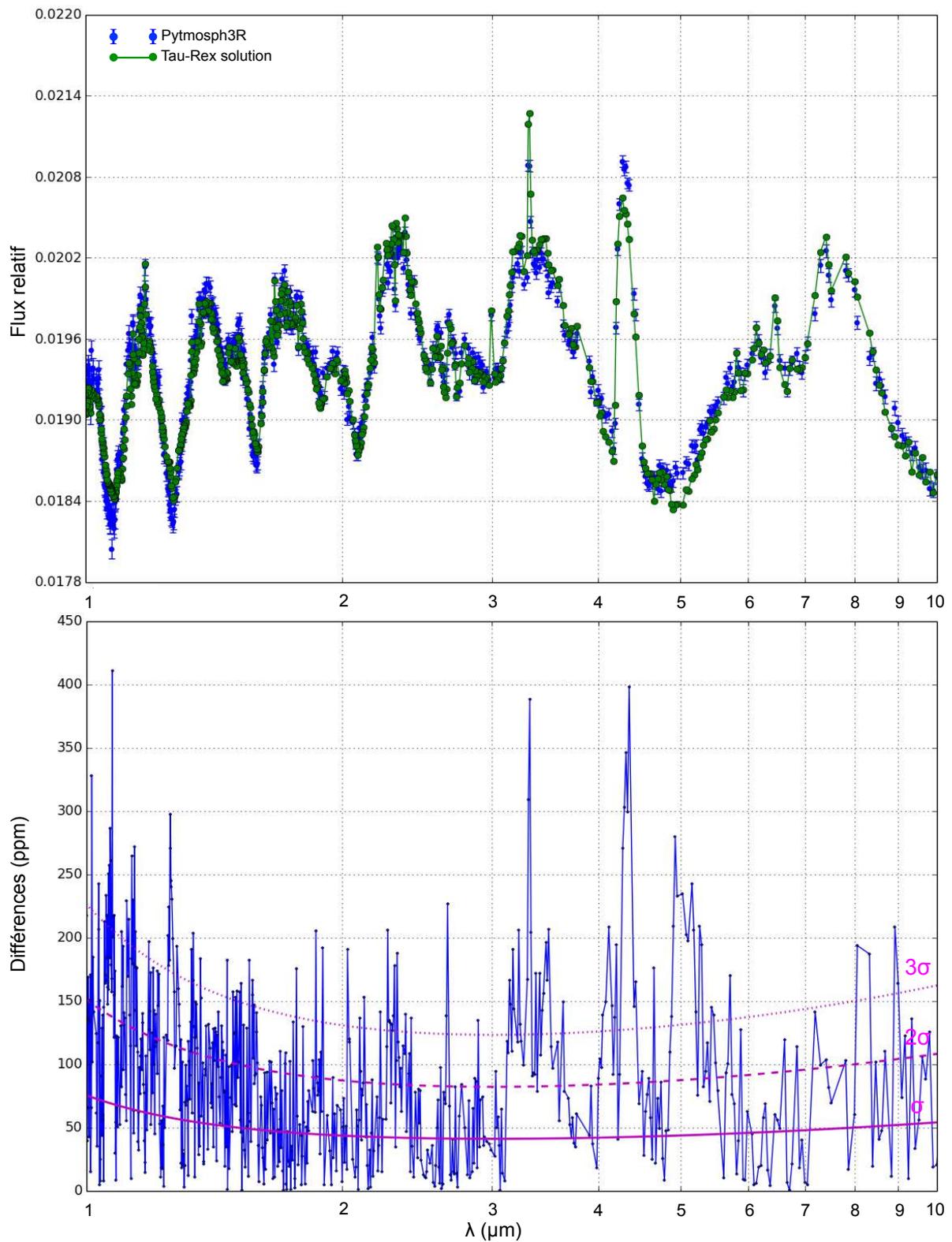


Figure 5.19: En haut : Spectres en transmission de l'hémisphères Est (en bleu) et la solution de Tau-REx (vert). En bas : Différences entre les deux spectres en valeur absolue et exprimée en ppm. À titre indicatif, nous avons représenté les courbes d'erreur à 1, 2 et 3 σ (courbes magenta)

Table 5.5: Résultats moyens après inversion de l'hémisphère Est et de l'hémisphère Ouest de la simulation de GJ1214 b.

Paramètres	T	$\chi_{\text{H}_2\text{O}}$	χ_{NH_3}	χ_{CO_2}	χ_{CO}	χ_{N_2}	χ_{CH_4}
Unités	K	-	-	-	-	-	-
Médiane	485,42	-1,392	-3,488	-1,948	-8,557	-8,129	-1,557
Moyenne	389,44	-1,373	-3,258	-1,950	-4,418	-8,224	-1,566
Δ	+4,02	+0,019	+0,230	-0,002	+4,139	-0,095	+0,009

les plus absorbantes du méthane entre 2 et 3,1 μm sont elles aussi mal contraintes car elles sondent sur des températures plus basses.

On remarquera également la présence des deux bandes de l'ammoniac à 1,47 - 1,55 μm et 1,93 - 2,03 μm qui ne s'exprimaient pas jusque-là. La molécule présente en effet une forte accumulation dans cette région puisque sa fraction molaire gagne 3 à 4 ordres de grandeur.

Les résultats de l'inversion de l'hémisphère Est sont exposés dans la Table 5.4. Concernant les abondances, toutes les molécules présentant une accumulation dans la région, à savoir CH_4 , NH_3 et H_2O sont également retournées à la hausse par Tau-REx. L'ammoniac tout particulièrement qui, cette fois-ci, est trouvé à une valeur très proche de la moyenne (-2,634 contre -2,432). On notera également la détection du CO et la plus faible abondance en CO_2 . Pour ces deux molécules, les parties sondées dans l'atmosphère sont plus profondes et entièrement localisées dans l'hémisphère jour (voir § B.2.1). En ce qui concerne le monoxyde de carbone, la faible température du terminateur et celle des régions sondées plus élevée de 200 K permet à la molécule de s'exprimer dans le spectre malgré une accumulation en eau et en méthane. À l'Ouest, le terminateur était beaucoup plus chaud et induisait une absorption plus intense de la part des molécules compétitrices, ce qui en masquait la présence.

Enfin, la température retournée est nettement plus froide que celle de l'Ouest ou de la simulation complète. Elle reste néanmoins plus importante que ce que nous attendions. Elle s'identifie à celles comprises entre la haute atmosphère très froide (300 - 350 K) et les couches plus chaudes qui relèvent les raies les moins intenses. Quant au rayon à 10 bar, il subit une très forte augmentation (1%) afin de compenser la basse atmosphère.

Avec un Ouest à 507 K et un Est à 398 K, si nous effectuons la moyenne pour tenter de retrouver une température pour l'ensemble de la simulation nous trouvons 489 K, soit quasiment la température retournée par Tau-REx pour l'atmosphère entière. La même opération réalisée sur les abondances donne des valeurs assez cohérentes avec celles obtenues dans le chapitre précédent. Le CO posera toujours des problèmes du fait de sa non-détection dans l'Ouest, et NH_3 est un peu plus éloigné également puisque l'expression de la molécule s'estompe avec la simulation totale. La Table 5.5 permet la comparaison entre les paramètres et les dites moyennes.

Pour conclure, les biais thermiques ne se manifestent pas pour la simulation de GJ 1214 b car ils sont, d'un, amoindris par les hétérogénéités de composition du méthane, et de deux, parce qu'ils sont dilués par la présence de l'Est froid. Les hétérogénéités azimutales peuvent donc camoufler des biais thermiques tangentiels. En somme, en effectuant l'inversion du spectre de l'atmosphère complète nous collections des informations différentes suivant les espèces et les paramètres :

- **T** : La température est une moyenne découlant des hétérogénéités azimutales, et qui ici, pourrait laisser croire qu'elle correspond à celle du terminateur.

- **CH₄** : L'abondance du méthane correspond à une région proche du terminateur mais tout de même localisée dans l'hémisphère jour. C'est la molécule la plus contributrice du spectre et celle qui compense le plus les biais thermiques par ses hétérogénéités tangentielles, mais elle ne le fait que localement (en fonction du niveau sondé). Il s'agit donc d'une valeur intermédiaire entre les fractions molaires du côté jour et celle du terminateur. Les raies les plus intenses, qui sondent la région où les biais thermiques sont surpassés (Ouest), portent en conséquence l'information du côté nuit et sont donc associées à des températures plus froides (voir Figure B.2.2).
- **H₂O** : L'eau est à une abondance à peu près équivalente dans toute l'atmosphère, donc sa valeur ne permet pas d'identifier une région en particulier, par contre sa température moléculaire devrait être plus élevée que celle du méthane (pas de compensation par des hétérogénéités tangentielles).
- **NH₃** : L'ammoniac ne s'exprimant et n'étant bien contraint que dans un sixième de l'atmosphère, sa valeur n'apporte qu'une information diluée.
- **CO₂** : Le dioxyde de carbone sonde clairement plus profondément dans le côté jour et porte une signature thermique chaude. Il évolue donc sur des températures trop différentes de celles du reste du spectre pour pouvoir être convenablement contraint. (voir Figure B.3)
- **CO et N₂** : Le monoxyde de carbone et le diazote ne portent pas d'information.

Pour conclure sur ce chapitre, nous avons remplacé nos simulations dynamiques 3D par des atmosphères synthétiques beaucoup plus simples, ce qui nous a permis d'isoler l'impact des hétérogénéités de température sur les observations et leurs inversions. Nous avons ainsi débuté la caractérisation des biais tangentiels qui étaient au cœur de notre recherche. Ce type de biais dépend essentiellement de l'ouverture des atmosphères que nous considérons et tout particulièrement de la pénétration qu'elles permettent de par leurs caractéristiques et de par celles des exoplanètes. Le rapport R_p/H_0 conditionne cette pénétration et influe sur l'intensité comme la persistance des biais thermique en fonction du caractère abrupte du contraste en température jour/nuit.

Ainsi, les atmosphères d'exoplanète à faibles rapports R_p/H_0 subissent des biais thermiques tangentiels intenses qui persistent sur des angles de contraste grands ($> 60^\circ$) et se traduisent par une température solution après inversion nettement supérieure à celle du terminator. Nous avons montré que, le cas échéant, ce terminator n'était plus représentatif de l'atmosphère et que la signature spectroscopique était imposée par une région plus profonde du côté jour. Pour compléter l'étude, nous avons montré que les hétérogénéités verticales, que nous avons modélisées par une couche isotherme entourant la surface, réduisent la persistance des biais tangentiels. Tant que l'atmosphère est suffisamment opaque pour que la région dominée par l'isotherme ne soit pas sondée, les écarts en température naissent uniquement des hétérogénéités tangentielles. Quand cela n'est plus le cas, les biais verticaux l'emportent sur les biais tangentiels à mesure que la contribution de l'isotherme sur le spectre grandit.

En explorant l'espace de paramètre : le rayon planétaire (à 10 bar), le contraste et la gamme de température et l'angle au sein duquel la transition entre les deux températures extrêmes, nous développons des outils en vue de mieux détecter leurs présences dans les simulations atmosphériques ou des observations réelles et d'en quantifier l'impact. Ce premier pas vers la caractérisation des biais induits par les hétérogénéités atmosphériques a permis par exemple de mieux comprendre les difficultés à contraindre certaines gammes spectrales lors d'une inversion par Tau-REx et de fournir une meilleure interprétation des résultats obtenus. Nous avons ainsi expliqué pourquoi dans le chapitre précédent nous n'avions pas réussi à mettre en évidence un biais thermique détectable.

Ce travail n'est que le début d'une large étude qui dépassera très certainement le cadre de cette expertise. Il montre néanmoins de manière claire que les hétérogénéités atmosphériques, et notamment celles portées par la ligne de visée et très souvent sous-estimées, ont un impact fort sur les observations et les résultats de leurs inversions, impact que nous ne pouvons plus négliger.

Chapter 6

Conclusions et Perspectives

An'en pas douter, si à la lumière de leurs performances inédites les instruments à venir vont très certainement éclairer le domaine de l'exoplanétologie, il n'en serait rien sans le génie de la communauté scientifique qui oeuvre dans leurs ombres avec passion et détermination pour en permettre la réalisation et préparer l'exploitation de leurs observations.

Nous avons axé ce travail autour de plusieurs questions qui pointaient vers la complexité de la caractérisation atmosphérique des exoplanètes, et sur la remise en question de plusieurs hypothèses fortes couramment faites dans la littérature. La question principale que nous avons abordé portait sur la possibilité de contraindre des objets physico-chimiques complexes et tridimensionnels avec des simulations isotropes et unidimensionnelles. Mon étude montre qu'un algorithme d'inversion 1D (ici Tau-REx) fournit effectivement les bons ordres de grandeur pour les abondances chimiques et la température de l'atmosphère observée, et ce alors même qu'il est confronté à une atmosphère complexe, présentant de multiples hétérogénéités de tous types et une nature tridimensionnelle. Cependant dans certaines circonstances, les valeurs retournées pour ces paramètres peuvent dévier significativement de celles attendues. En d'autres termes, nous avons certes réussi à tirer des informations pertinentes du spectre en entrée, mais ces résultats ont quantitativement soufferts des effets liés aux hétérogénéités négligées lors de l'inversion. Les biais qui en résultent et que nous avons mis en évidence se cumulent les uns aux autres, s'exacerbant dans certains cas, et s'annihilant dans d'autres. Certains exemples sont détaillés plus bas.

Si Tau-REx est un formidable outil pour interpréter les observations à venir, que ce soit celles du JWST ou celles d'ARIEL, nous avons montré qu'il pouvait être très sensible à tous les types d'hétérogénéités, verticales, azimutales, tangentielles, qu'elles fussent de natures thermiques ou compositionnelles. Nous avons mis en évidence qu'il sera nécessaire de porter un regard plus critique sur les conclusions des inversions futures et de par cette étude, nous ouvrons la porte vers un nouveau champ d'investigation en vue d'améliorer notre compréhension de ses biais et d'essayer d'en établir les signatures.

6.1 Que retenir de l'étude des biais observationnels induits par le caractère tridimensionnel des atmosphères d'exoplanètes

6.1.1 Mise en évidence de la signature de biais verticaux et tangentiels lors d'une observation

En travaillant sur la simulation dynamique 3D de GJ 1214 b issue de [Charnay et al. \(2015\)](#), nous avons montré que Tau-REx, même dans son mode le plus extrême (atmosphères isothermes et iso-abondances), réussissait à retourner une solution s'ajustant très bien au spectre d'entrée (χ^2 proche de 1), malgré les hétérogénéités du modèle d'entrée. Ceci est principalement dû au fait que 90% du domaine spectral est dominé par une molécule répartie de manière assez homogène dans les régions sondées (ici le CH₄). L'algorithme fournit donc une estimation de l'abondance de méthane très proche de ce que nous observons dans la simulation puisque son abondance ne subit qu'une déviation de 18% (0,028 au lieu de 0,034).

Cela pourrait laisser penser que les hétérogénéités de l'atmosphère ne laissent aucune signature dans le spectre. Cependant, il reste un désaccord significatif dans certaines régions du spectre qui sont dominées par d'autres espèces plus hétérogènes (en particulier CO₂). Ce genre d'indices se révélera crucial dans l'avenir pour détecter ce type de biais dans des données réelles. De plus, nous avons mis en évidence l'existence de différents biais sur l'estimation des abondances de certaines espèces minoritaires (en particulier, dans notre cas, NH₃).

Notre approche a permis de mieux comprendre les résultats de cette inversion et d'identifier les biais compositionnels et thermiques à l'origine de nos constatations. La comparaison entre le spectre solution et l'observation permet de pressentir la présence de ces biais, et nous avons ainsi mis en évidence que dans la simulation qui nous a intéressé, les dites hétérogénéités mises en cause concernaient : soit des molécules peu représentées dans le spectre (moins de 5% des raies) et dont le comportement potentiellement singulier ne s'exprimait pas dans les distributions *a posteriori* (CO₂ et *a fortiori* CO) ; soit des molécules pour lesquelles la gamme d'expression de leurs hétérogénéités était très mince, gamme qui se dénote du reste du spectre, dominée par les comportements plus homogènes et qui en conséquence n'impactait pas non plus les distributions *a posteriori* (CH₄, < 1% des raies traduisaient de ses hétérogénéités). Ainsi, nous avons montré que la surestimation de la bande centrée à 3,32 μm de CH₄ était la signature d'une hétérogénéité verticale brutale en composition (la molécule étant deux fois moins abondante dans la haute atmosphère), tandis que la sous-estimation de la bande à 4,28 μm du CO₂ était la signature de ses hétérogénéités de composition, amplifiées par les hétérogénéités thermiques, dans l'atmosphère (le côté jour étant plus chaud et l'abondance y augmentant brutalement d'un facteur 1000 sur l'espace de 20° en longitude).

Être capable de repérer ces signatures dans les spectres solutions, et de les lier à des biais sur les distributions *a posteriori* – parce que ce sont elles qui donnent une information quantitative sur les paramètres atmosphériques – c'est ce que j'ai commencé à réaliser pendant cette thèse.

6.1.2 Caractérisation des biais thermiques d'origines tangentielles

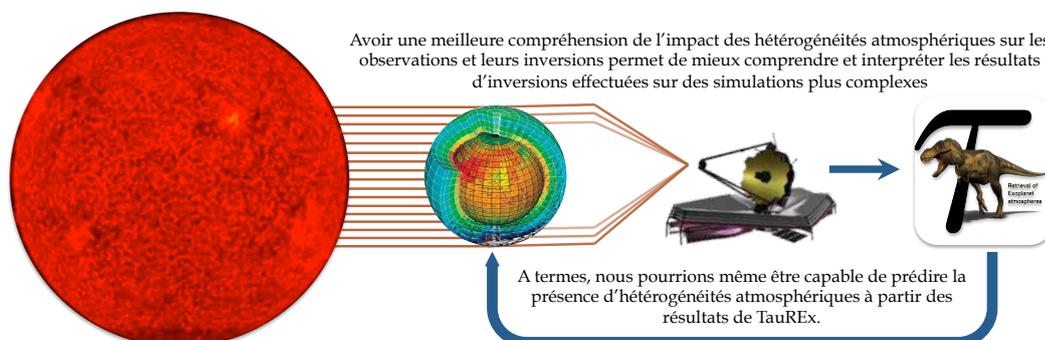
Dans le Chapitre 5, nous nous sommes focalisés sur les hétérogénéités thermiques pour plusieurs raisons. La première étant que cette étude permettait de répondre à la plupart des questions que nous avons formulé dans l'introduction de ce document et à plusieurs reprises dans le texte. **Réussir à isoler l'impact des hétérogénéités tangentielles en température sur les observations et leurs inversions**

c'était confirmer qu'il existait des cas pour lesquels, l'hypothèse consistant à négliger ces hétérogénéités lors de la génération des spectres en transmission n'était pas justifiée. **Et nous avons montré que ces cas n'étaient pas forcément rares.** Les objets que nous avons modélisés couvrent une assez large gamme d'atmosphères d'exoplanètes se rapprochant des observations faites sur des simulations 3D plus abouties. En effet, les exoplanètes en rotation synchrone, et donc présentant un fort contraste en température jour/nuit, ne sont pas des cas exotiques. Cela est d'autant plus vrai si la dite planète est très proche de son étoile, justifiant les fortes températures et les contrastes importants que nous avons souhaité modéliser.

Ces biais se manifestent par une température issue de l'inversion plus élevée que celle du terminateur. Nous avons montré que l'intensité de ses biais (l'écart à la température du terminateur) dépendait du rapport R_p/H_0 de l'ensemble exoplanète/atmosphère et de l'importance du contraste autour du terminateur. Plus la transition entre les températures chaudes du côté jour et les températures froides du côté nuit s'effectue sur une petite zone (c'est-à-dire si l'*angle de contraste* défini au Chapitre 5 est faible), plus le biais est prononcé. **Nous l'avons expliqué par une délocalisation des régions présentant une contribution à l'opacité atmosphérique vers le côté jour.** Pour certains contrastes s'étalant sur une région plus petite que celle sondée en transit – et en particulier s'ils sont renforcés par d'autres effets comme c'est le cas dans la simulation de GJ 1214 b où les hétérogénéités du CO_2 ont accentué les effets thermiques sur sa gamme spectrale – le terminateur n'a même plus une contribution détectable sur les profondeurs optiques et la région réellement sondée est totalement localisée dans l'hémisphère jour. **Ceci remet profondément en question le paradigme selon lequel la spectroscopie en transmission sonde uniquement le terminateur.**

Insistons tout de même sur le fait qu'à première vue, l'intensité du contraste thermique jour/nuit ainsi que l'extension de la région de transition observée dans les simulations de GJ 1214 b, HD 209458 b, HD 189733 b et WASP-43 b sont compatibles avec les valeurs nécessaires à ce que ce contraste soit observable dans les données présentes et à venir. Le cas de WASP-121 b (Parmentier et al. 2018) est un cas extrême d'une exoplanète présentant une atmosphère très contrastée puisqu'elle passe de 1500 à 2600 K sur un angle de 20° autour du terminateur, inférieur à l'ordre de grandeur de l'angle sondé en transit pour un astre avec ses caractéristiques (R_p/H_0 de l'ordre de 130, ce qui devrait impliquer environ 30°). Son cas est tellement impressionnant que nous pourrions nous rapprocher des atmosphères champignons pour lesquelles seul le côté jour (de par l'ensemble de ses caractéristiques) s'exprime dans le spectre en transmission et lors de l'inversion. **De cette manière, nous montrons que les biais thermiques, en l'absence d'effets liés à d'autres types d'hétérogénéités, s'expriment sans doute dans tous ces objets, et probablement dans beaucoup d'autres.**

Quantifier les biais que ces effets induisent dans les analyses publiées des données existantes reste à faire.



6.1.3 Un schéma scientifique complet et un guide pour la suite des événements

L'ensemble de ce travail n'aurait pas été possible sans le développement de Pytmosph3R et les collaborations qui ont permis de compléter le schéma scientifique (GCM/Pytmosph3R/Tau-REx) que notre équipe souhaitait mettre en place. Il est donc le fruit d'une réflexion commune ayant pour vocation d'ouvrir la voie vers un plus vaste champ d'étude. En nous plaçant à l'interface entre la modélisation et les outils de l'observation, nous offrons une expertise moins spécifique et plus souple en vue de rapprocher ces deux aspects de la recherche pouvant parfois manquer de liaisons solides.

Nous avons fourni dans cette dynamique un effort tout particulier à rendre **Pytmosph3R le plus générique possible**, que ce soit vis-à-vis des simulations GCM dont nous souhaiterions obtenir un spectre en transmission, ou vis-à-vis de Tau-REx. De par son écriture, nous avons travaillé son contenu et ses méthodes de calcul de manière à s'adapter au mieux aux deux maillons dont il fait le lien, permettant ainsi à l'ensemble d'être cohérent et compatible. Nous avons également laissé l'opportunité à ses utilisateurs de l'adapter assez rapidement à d'autres modèles dynamiques, 3D ou 1D d'ailleurs, comme à d'autres algorithmes de traitement du signal. Si son contenu n'est pas exhaustif, il tient compte des principales sources d'absorption (moléculaire, continuum, diffusion Rayleigh et diffusion de Mie) et plusieurs de ses options ont été pensées en prévisions d'études que nous n'aurons pas eu l'occasion d'aborder pendant le temps de la thèse. Il a fait l'objet d'une optimisation et d'une parallélisation dans **une version actuellement stable, validée et prête à l'emploi**. L'algorithme est accompagné d'une bibliothèque graphique très riche permettant d'exploiter les intermédiaires de calculs, les simulations elles-mêmes, les résultats de l'inversion, et de générer l'ensemble des grandeurs introduites dans les chapitres précédents.

Enfin, ce document a été écrit de manière à pouvoir servir de guide, à la fois quant à l'utilisation de Pytmosph3R, et à la fois quant à l'exploitation de l'énorme potentiel offert par le trio GCM/Pytmosph3R/Tau-REx.

6.2 Perspectives

Comme nous le disions, la mise en place de la chaîne observationnelle permettra d'intégrer n'importe quelle démarche scientifique faisant appel à un, plusieurs ou l'ensemble des algorithmes qui la constituent. Dans l'immédiat, nous avons à peine commencé à explorer l'espace des paramètres et nous n'avons pas eu l'occasion d'illustrer un certain nombre de nos remarques par des études plus quantitatives. Comme la température, **nous devons quantifier les biais liés aux hétérogénéités de composition**, largement mis en évidence lorsque nous avons étudié la simulation de GJ 1214 b. Une étude préliminaire réalisée dans le temps de la thèse a montré que ce type de biais n'avait d'impact remarquable que si les hétérogénéités en abondance évoluaient sur des contrastes très marqués (d'au moins 3 ordres de grandeur). Il serait alors judicieux de reprendre les atmosphères synthétiques du Chapitre 5 et d'y ajouter des hétérogénéités semblables à celles observées dans la simulation GCM, et ainsi soutenir de manière plus pertinente les effets de compensation que nous n'avons expliqués qu'à partir des angles de pénétration et de leurs interprétations.

Cette étude se focalise sur les hétérogénéités tangentielles car elles étaient au centre de nos questionnements et figuraient comme les moins abordées dans la littérature. N'importe quel type ou superposition de types d'hétérogénéités est envisageable pour continuer ce travail et se diriger petit à petit vers une connaissance plus claire des biais qu'elles peuvent générer, de la manière dont ils s'expriment que ce soit sur les spectres ou sur les distributions *a posteriori* et de leurs interactions. **Être capable, lors de l'inversion d'un spectre généré à partir d'une simulation, de détecter rapidement les indices, les**

signatures propres à ses biais et de prévenir de la présence d'hétérogénéités par cette seule lecture, ce serait là un véritable atout pour les observations à venir.

Indépendamment de l'étude des biais observationnels induits par le caractère tridimensionnel des atmosphères d'exoplanètes, Pytmosph3R nous permet aussi de contribuer à l'étude de l'influence des variabilités stellaires sur les spectres en transmission. En effet, les cartes de transmission spectrale modélisées peuvent être superposées à de vraies cartes de brillance de la surface de l'étoile à plusieurs moments du transit, permettant ainsi la génération de courbes de lumière multi longueur d'onde (incluant l'*ingress* et l'*egress*) prenant en compte aussi bien la variabilité de la planète que celle de l'étoile.

Appendix A

Angles d'ouverture et angles de pénétration

A.1 Angle d'ouverture ψ_o

Considérons une planète de rayon à 10 bar R_p , de masse M_p , de gravité à 10 bar g_0 et son atmosphère caractérisée par sa pression de surface P_s , égale à 10 bar par défaut, sa pression de toit P_t , et sa hauteur d'échelle à 10 bar H_0 . Notons z_t et z_h respectivement le niveau de transition et l'épaisseur totale de l'atmosphère. Nous admettons que l'atmosphère est homogène, isotherme et de composition quelconque, seule la hauteur d'échelle nous intéresse.

L'angle d'ouverture ψ_o est est la grandeur géométrique définissant la région de l'atmosphère (définie comme un milieu de pression supérieure à une pression du toit P_h) traversée par un rayon étoile-observateur à un niveau de pression donné. Ce niveau est dit de transition si la profondeur optique y est égale à 1 le long du rayon concerné. Cet angle dépend donc du niveau de transition, du rayon planétaire (ou à 10 bar) et de l'extension spatiale de l'atmosphère, et donc sa hauteur d'échelle. Le jeu d'équation nécessaire, pour l'ensemble des calculs à venir, est fourni par la loi hydrostatique qui donne la dépendance en z de la pression (Eq. (A.1)), la loi des gaz parfait qui lie la pression à la densité moléculaire (Eq. (A.2)) et de l'expression de x , la position sur le chemin optique du rayon, et z l'altitude par les relations géométriques (Eq. (A.3)) :

$$P(z) = P_s \exp\left(-\frac{z}{H_0} \frac{1}{1 + \frac{z}{R_p}}\right) \quad (\text{A.1})$$

$$n(z) = \frac{P(z)}{k_B T} = \frac{P(z)}{H_0 \mu g_0} \quad (\text{A.2})$$

$$x^2 = (R_p + z)^2 - (R_p + z_t)^2 \quad (\text{A.3})$$

$$dx = \frac{z dz}{\sqrt{(R_p + z)^2 - (R_p + z_t)^2}} \quad (\text{A.4})$$

A partir de l'équation Eq. (A.1), nous pouvons retrouver l'altitude de transition z_t en remplaçant

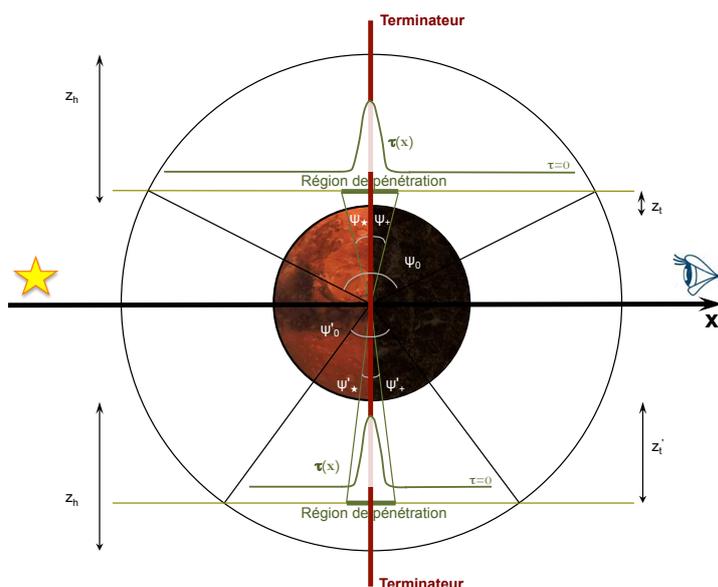


Figure A.1: Schéma explicatif illustrant la géométrie du problème, les angles d'ouverture et de pénétration. Les courbes vertes représentent la variation de la profondeur optique avec la position x . Les traits oranges correspondent à des rayons lumineux pour lesquels, à la longueur d'onde considérée pour chacun d'entre eux (elle n'est pas la même), la profondeur optique totale est égale à $\exp(-1)$

dans l'expression $P(z)$ par la pression de transition P_t et z par z_t :

$$P_t = P_s \exp\left(-\frac{z_t}{H_0} \left(\frac{1}{1 + \frac{z_t}{R_p}}\right)\right) \quad (\text{A.5})$$

$$\frac{z_t}{H_0} \left(\frac{1}{1 + \frac{z_t}{R_p}}\right) = \ln\left(\frac{P_s}{P_t}\right) \quad (\text{A.6})$$

$$z_t = \frac{\alpha}{1 + \frac{\alpha}{R_p}} \quad \text{avec} \quad \alpha = H_0 \ln\left(\frac{P_s}{P_t}\right) \quad (\text{A.7})$$

De la même manière, nous calculons l'altitude du toit de l'atmosphère z_h :

$$z_h = \frac{\alpha}{1 + \frac{\alpha}{R_p}} \quad \text{avec} \quad \alpha = H_0 \ln\left(\frac{P_s}{P_h}\right) \quad (\text{A.8})$$

Pour finir, l'angle d'ouverture ψ s'obtient par :

$$\psi(R_p, H_0, P_t) = \arccos\left(\frac{R_p + z_t}{R_p + z_h}\right) \quad (\text{A.9})$$

ψ_0 est une également une fonction de la pression de toit puisque l'altitude associée intervient directement dans son calcul. La diminuer, et donc augmenter l'épaisseur de l'atmosphère a évidemment pour conséquence d'augmenter l'angle d'ouverture. En fixant P_h à 10^{-4} Pa, nous nous assurons du compromis entre ne pas descendre excessivement bas et atteindre la convergence du transfert radiatif quelles que soient la composition chimique et les propriétés optiques de la dite atmosphère. La figure Figure A.2 donne cet angle d'ouverture pour :

- 4 niveaux de transition aux pressions : 10^1 , 10^2 , 10^3 , et 10^4 Pa. Le premier correspondant aux atmosphères les plus opaques (ou longueur d'onde pour une même atmosphère), et le dernier aux plus transparentes.
- Pour une pression de transition donnée, la hauteur d'échelle varie entre 3 000 et 800 000 m.
- Pour une pression de transition et une hauteur d'échelle donnée, le rayon à 10 bar entre 0,1 et $2 R_J$.

Nous avons superposé aux figures quelques exemples de planètes à partir de la seule connaissance du rayon planétaire et de la hauteur d'échelle. Nous n'affirmons pas que les angles en questions correspondent exactement puisque pour certaines, la pression de surface par exemple n'est pas toujours de 10 bar et le rayon planétaire n'est pas non plus le rayon à 10 bar, mais ils donnent un ordre de grandeur. Dans le cas de GJ 1214 b, nous avons indiqué, aux pressions de transition pour lesquelles cela était possible, les molécules ainsi que les longueurs d'onde s'effectuant à ces niveaux dans la simulation de [Charnay et al. \(2015\)](#).

En connaissant le pas en longitude de la dite simulation, nous déduisons de ces figures le nombre de colonnes traversées à l'équateur par les rayons échantillons (voir Chapitre ??).

A.2 Angles de pénétration ψ_p

L'angle de pénétration, ψ_p - auquel on attribue une valeur unique dans le cas d'une atmosphère homogène et un doublet de valeurs, de part et d'autre du terminateur, dans le cas d'une atmosphère hétérogène - correspond à l'angle délimitant le parcours du rayon échantillon contenant l'essentiel de l'absorption atmosphérique, et donc, l'essentiel de son information. Il dépend également du rayon planétaire (ou à 10 bar), de la hauteur d'échelle, et du niveau de transition considéré. Il dépend de la longueur d'onde mais est quasiment indépendant de la pression de toit (si celle-ci est suffisamment faible).

Reprenons nos exemples d'atmosphères. Pour déterminer cet angle, il nous faut tout d'abord estimer la profondeur optique totale du rayon échantillon passant par le niveau de transition. Par définition, à ce niveau est défini comme étant le point de pression et d'altitude pour lesquels $\tau = 1$, mais notre approche est indépendante de la composition chimique et du choix de section efficace. Nous réalisons cela de la manière suivante. Par définition, la profondeur optique le long d'un rayon échantillon est définie comme :

$$\tau = \int_0^{\infty} n(x) \sigma_{mol} dx \quad (\text{A.10})$$

Nous pouvons réexprimer Eq. (A.10) comme une intégrale sur l'altitude à partir des équations Eq. (A.1), Eq. (A.2) et Eq. (A.4).

$$\tau = 2 \frac{P_s \sigma_{mol} N_A}{H_0 \mu g_0} \int_{z_t}^{z_h} \exp\left(-\frac{z}{H_0} \left(\frac{1}{1 + \frac{z}{R_p}}\right)\right) \frac{z dz}{\sqrt{(R_p + z)^2 - (R_p + z_t)^2}} \quad (\text{A.11})$$

En supposant la section efficace constante, le facteur $P_s \sigma_{mol} N_A / H_0 \mu g_0$ l'est également. Nous nous désintéressons des propriétés optiques de l'atmosphère, nous cherchons juste à montrer comment varie l'angle de pénétration avec le rapport R_p / H_0 . Pour un niveau de transition, une hauteur d'échelle et un rayon à 10 bar considéré, nous intégrons l'exponentielle de l'expression Eq. (A.11) entre z_t et z_h , et nous écartons le facteur d'intégration. Le résultat sur l'ensemble du chemin optique nous permet d'en déduire

$P_s \sigma_{mol} N_A / H_0 \mu g_0$ comme $1/\tau$. Nous intégrons ensuite sur z jusqu'à répondre au critère que nous nous sommes fixé.

L'essentiel de l'absorption est comprise dans la région délimitée par l'angle de pénétration si la profondeur optique du parcours qu'il contient τ_p engendre un décalage dans le spectre inférieur ou égal au niveau de bruit. Ce même bruit va dépendre de l'étoile hôte et des dimensions de l'exoplanète. Un bruit de 50 ppm dans une atmosphère comme celle de la simulation GJ 1214 b correspond à un décalage d'un peu moins d'une demi-couche des transmittances. Comme la transition de cette transmittance s'effectue sur une dizaine de couches, cela représente donc un décalage de l'ordre de $1/15$. Nous intégrons donc l'équation Eq. (A.11) jusqu'à une altitude z_p à partir de laquelle $\exp \tau < \exp(-1) + 1/15$. Intégrer plus loin n'engendrerait pas d'écart significatif sur les spectres. Nous avons appliqué ce critère pour toutes les combinaisons (R_p, H_0) . La figure Figure A.2 donne une estimation de cet angle de pénétration pour les 4 niveaux de transition considérés.

A.3 Description de la figure Figure A.2

La figure Figure A.2 est une application directe des équations Eq. (A.9) et Eq. (A.11). Elle donne l'angle d'ouverture (les cartes de gauche) et l'angle de pénétration (les cartes de droite) pour :

- 4 niveaux de transition aux pressions : 10^1 , 10^2 , 10^3 , et 10^4 Pa. Le premier correspondant aux atmosphères les plus opaques (ou longueur d'onde pour une même atmosphère), et le dernier aux plus transparentes. Nous calculons le toit du modèle est l'altitude des transitions à partir de Eq. (A.7) qui dépendent de la hauteur d'échelle et du rayon planétaire.
- Pour une pression de transition donnée, la hauteur d'échelle varie entre 3 000 et 800 000 m.
- Pour une pression de transition et une hauteur d'échelle donnée, le rayon à 10 bar entre 0,1 et $2 R_J$.

Les échelles évoluent entre 0 et 180° d'ouverture et entre 0 et 60° de pénétration. Les isocontours indiquent le nombre de colonnes en longitude traversée par les rayons au sein de ces angles centrés sur le terminateur. Donc dans toutes la région comprise entre les isocontours 1 et 3, l'angle d'ouverture ou de pénétration y évolue entre 1 et 3 fois le pas en longitude pour une simulation à 64 points de longitude (soit un pas de $5,625^\circ$). Les régions blanches sur les cartes correspondent à des atmosphères qui divergent, pour lesquelles nous ne pouvons pas calculer les altitudes z_t et z_h avec la loi hydrostatique (Eq. (A.7) et Eq. (A.8)).

Nous avons superposé aux figures quelques exemples de planètes à partir de la seule connaissance du rayon planétaire et de la hauteur d'échelle. Nous n'affirmons pas que les angles en questions correspondent exactement puisque pour certaines, la pression de surface par exemple n'est pas toujours de 10 bar et le rayon planétaire n'est pas non plus le rayon à 10 bar, mais ils donnent un ordre de grandeur. Dans le cas de GJ 1214 b, nous avons placé la simulation (hauteur d'échelle à 10 bar) ainsi que ses 3 atmosphères synthétiques. Le doublet 300 - 650 K correspond au cas de plus faible hauteur d'échelle, et le doublet 1000 - 1500 K à celui de plus grande hauteur d'échelle. Les pourcentages indiquent la proportion de raies dans le spectre dont les rayons effectifs sont compris autour du niveau de pression P_t , et donc z_t . Ceci nous permet de mettre en évidence le poids de ces niveaux sur le spectre en transmission. Nous avons utilisé les données pour un angle de transition $\beta = 45^\circ$. Lorsque la somme des 4 pourcentages ne contient pas 100%, cela veut dire que les raies manquantes sondes des niveaux de pression encore plus bas (ou plus haut en altitude). La même opération a été exécutée pour HD 209459 b. En l'absence de simulation, nous avons utilisé les valeurs de la littérature. De la même, le cercle de plus faible hauteur d'échelle correspond au cas 500 - 1000 K et le plus important à 1000 - 1800 K (voir Chapitre 5).

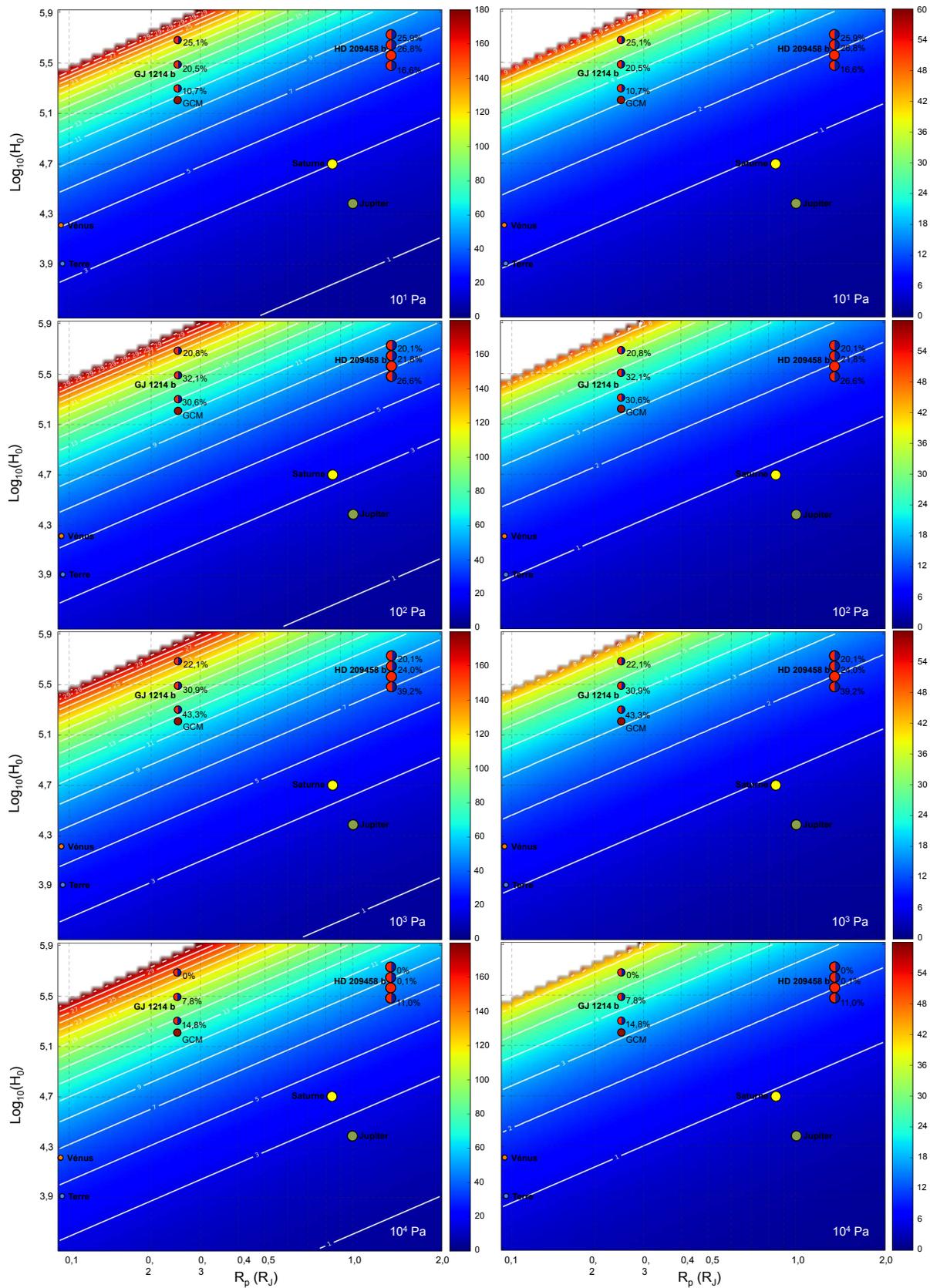


Figure A.2: À gauche : angles d'ouverture en fonction du rayon à 10 bar et de la hauteur d'échelle de surface. À droite : angles de pénétration en fonction du rayon à 10 bar et de la hauteur d'échelle de surface.

Notons que les variations les plus notables concernent essentiellement les objets aux plus forts rapport R_p/H_0 .

A.4 Application à une simulation atmosphérique 3D hétérogène

Nous pouvons utiliser le même principe que dans les paragraphes précédents dans le cas d'une simulation atmosphérique. Les atmosphères précédentes étaient homogènes tandis que les simulations atmosphériques ne le sont plus. La conservation des différents résultats intermédiaires lors de la génération d'un spectre en transmission va nous permettre d'évaluer les angles de pénétration ψ_* et ψ_+ , respectivement l'angle de pénétration jour (l'étoile indiquant le côté étoile), et nuit (le + indiquant le côté observateur sur Terre).

Pour évaluer ces angles, pour chaque angle θ de la maille cylindrique et pour chaque longueur d'onde :

- Nous déterminons la couche, caractérisée par l'indice i_p , pour laquelle la transmittance est la plus proche de $\exp(-1)$. La valeur exacte est conservée (T_i). Nous considérerons qu'il s'agira du niveau sondé.
- Nous repérons de la même manière les couches pour lesquelles la transmittance est très proche respectivement de 0,95 et 0,05. Les valeurs exactes sont conservées ($T_{0,95}$ et $T_{0,05}$). Ceci nous permettra d'évaluer le critère de contribution.
- Pour tous les rayons échantillons correspondant, nous calculons les deux angles de pénétration ré-intégrant la profondeur optique au sein des parcours mais en soustrayant à la profondeur optique totale un morceau du début du parcours pour ψ_* ou de la fin du parcours pour ψ_+ .

Cette soustraction s'effectue jusqu'à ce que la profondeur optique réponde au critère de contribution. Il s'agit en somme d'un ΔT évalué à partir de la pente, à la longueur d'onde et à l'angle θ donnés, de la courbe de transmittance calculée à partir de $T_{0,95}$ et $T_{0,05}$, et du bruit de photon de l'étoile simulé. Si nous notons ce bruit Δf , R_{eff,i_p} le rayon effectif associé à la couche sondée, R_* le rayon de l'étoile hôte, alors :

$$\Delta R_{\text{eff}} = \frac{R_*^2 \Delta f}{2R_{\text{eff},i_p}} \quad (\text{A.12})$$

où ΔR_{eff} est donc l'écart en rayon effectif correspondant à un écart de Δf du flux relatif. En première approximation, nous considérons que la pente de transition de la transmittance est assimilable à une droite, et nous en calculons la pente a comme :

$$a = \frac{T_{0,95} - T_{0,05}}{R_{\text{eff}}(T_{0,95}) - R_{\text{eff}}(T_{0,05})} \quad (\text{A.13})$$

où $R_{\text{eff}}(T_{0,95})$ et $R_{\text{eff}}(T_{0,05})$ correspondent aux rayons effectifs des couches sélectionnées pour T proche de 0,95 et de 0,05. Le décalage autorisé en flux se traduit donc par une tolérance en transmittance ΔT telle que :

$$\Delta T = a \Delta R_{\text{eff}} \quad (\text{A.14})$$

Donc du côté jour, nous retirons progressivement à la profondeur optique la contribution du début de parcours et ce jusqu'à une distance au terminateur d_* à partir de laquelle $\exp(-\tau) > T_i + \Delta T/2$. Du

côté nuit, ne faisons de même mais avec la fin de parcours, sur une distance d_+ . Nous en déduisons dans les deux cas l'angle de pénétration correspondant :

$$\psi_{\star|+} = \arctan \left(\frac{\sqrt{(R_p + h)^2 - R_{\text{eff},i_p}^2} - d_{\star|+}}{R_{\text{eff},i_p}} \right) \quad (\text{A.15})$$

Le couple (ψ_{\star}, ψ_+) dépend de la longueur d'onde par deux aspects : premièrement par le niveau de transition, et deuxièmement par la pente a . Si la transition de transmittance entre 0 et 1 est brusque (suivant la dépendance en T et P des sections efficaces correspondantes, mais aussi de la molécule dominante et des hétérogénéités atmosphériques), le critère ΔT sera plus grand et l'angle de pénétration plus faible puisque nous devons nous soustraire d'une plus grande partie du parcours et l'essentiel de l'absorption est plus concentrée vers le terminateur. Il en va de même si le bruit, et donc plus les variations acceptables en flux, est important. Et inversement si la transition est plus étalée dans l'espace ou si le bruit est faible.

Lorsque nous travaillons avec une carte de transmittance obtenue en mode semi-intégré, la détermination des positions d_{\star} et d_+ est simple puisque nous pouvons rapidement repérer le sous-parcours au sein duquel se produit la vérification du critère de contribution pour ensuite le réintégrer par pas jusqu'à déterminer très précisément ces distances (voir § 2.3.1). En mode discret, la densité est considérée constante au sein des cellules de la grille sphérique et s'identifie à celle de son centre. Donc nous déterminons de la même manière que précédemment le sous-parcours vérifiant le critère de contribution, mais cette fois nous n'avons plus qu'à estimer la fraction de ce sous-parcours nécessaire pour que $\exp(-\tau) = T_t + \Delta T/2$.

Dans le cas d'exoplanètes en rotation synchrone, la dissymétrie de température engendre le plus clair du temps une dissymétrie systématique de l'angle de pénétration. Et en l'absence d'hétérogénéités de composition très fortes, ψ_{\star} est presque toujours supérieur à ψ_+ . Cet angle est un outil assez fabuleux permettant de comprendre l'origine des biais observés sur les spectres, mais aussi celles des difficultés que peut rencontrer un algorithme de traitement du signal à trouver une solution satisfaisante pour l'ensemble des paramètres d'inversion.

Appendix B

Interprétation des angles de pénétration dans la simulation de GJ 1214 b

Dans cette partie, nous détaillons les différents points qui sont utilisés dans les chapitres Chapitre 5 et Chapitre 4. Nous effectuons cette étude à part afin de rendre plus fluide la lecture des chapitres précédemment cités. Nous appliquons ce que nous avons décrit dans § A.4 à la simulation de GJ 1214 b (Charnay et al. 2015) sur une intégration discrète des chemins optiques. La Figure B.1 donne les résultats obtenus pour chaque angle θ et chaque longueur d'onde dans la gamme 1 - 10 μm .

B.1 Des valeurs cohérentes avec l'étude homogène

Les angles de pénétration (ψ_* , ψ_+) ont des valeurs essentiellement comprises entre 3° et 10° . Ils peuvent dans certains cas exceptionnels, sur lesquels nous reviendrons, présenter des valeurs beaucoup plus importantes (jusqu'à 25°) ou même négative (jusqu'à -14°). Mais en moyenne, nous trouvons des angles inférieurs à 10° , soit un angle total du même ordre de grandeur que celui que nous avons prédit, étant donné la hauteur d'échelle et le rayon planétaire de l'exoplanète, de l'ordre de 17° (voir Figure A.2). Nous pouvons donc raisonner sur la base d'un angle d'environ 20° lorsqu'il s'agit de fournir une explication quant aux observations faites sur les spectres en transmission de cette simulation. La Figure B.2 correspond à la différence entre $\psi_* - \psi_+$, l'échelle de couleur est choisie de manière à ce que tout ce qui est négatif ($\psi_* < \psi_+$) apparaisse en une nuance de magenta/violet, tandis que tout le reste est positif ($\psi_* > \psi_+$). Notons que dans la gamme 1 - 2 μm , cette différence est la moitié du temps positive, l'autre moitié négative, et presque essentiellement comprise entre -5° et 5° . Dans la gamme 2 - 10 μm , à quelques gammes et régions de l'atmosphère près, elle est majoritairement positive et présente les écarts les plus conséquents. Les effets de température sur l'angle de pénétration ne dominent pas sur l'ensemble du spectre et dans toutes les régions de l'atmosphère. Nous devons, pour chaque anomalie clairement identifiée comme étant la signature d'une hétérogénéité de nature différente, étudier la simulation, repérer les régions de l'atmosphère véritablement traversées par les rayons échantillons et trouver des effets systématiques.

Outre les remarques précédentes, si nous revenons sur la Figure B.1, et que nous nous concentrons sur la partie la moins hétérogène de l'atmosphère, à savoir son hémisphère Ouest, on constate une oscillation de l'angle de pénétration en phase avec le spectre d'absorption. Les bandes les moins absorbantes ont des angles de pénétration plus grands de quelques $^\circ$ et inversement. Ceci rejoint les remarques formulées lors de l'étude précédente, pour un même rayon planétaire et une hauteur d'échelle identique, sonder plus bas augmente la région imposant sa signature sur le spectre de part et d'autre du terminateur, sonder

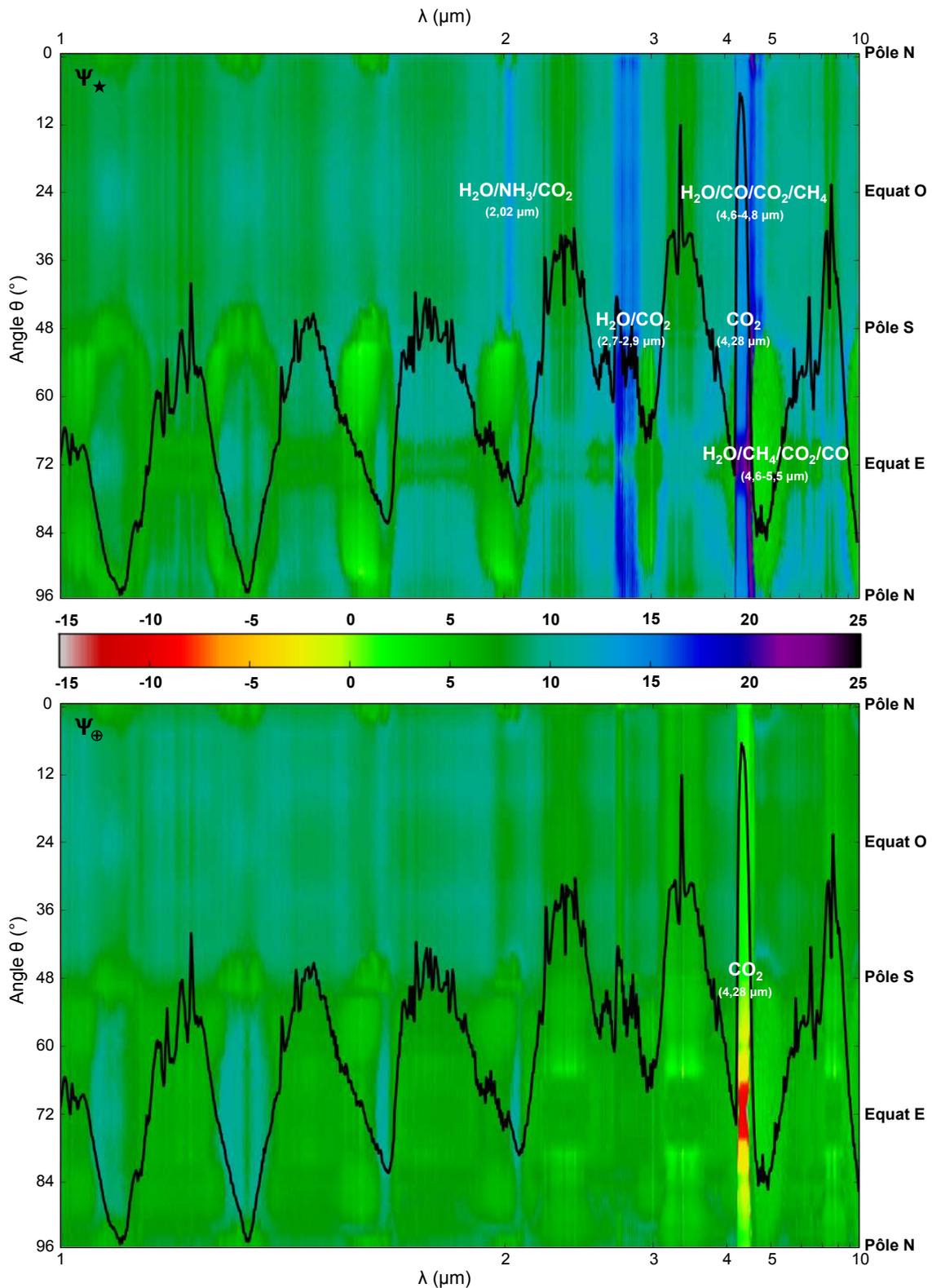


Figure B.1: Angles de pénétration (en $^{\circ}$) obtenus à partir de la simulation GJ 1214b d'après [Charnay et al. \(2015\)](#) dans la gamme 1 - 10 μm . En haut : Angle de pénétration jour (ψ_{\star}) pour chaque angle azimutal θ (exprimé en indice) et chaque longueur d'onde (exprimée en μm). En bas : Angle de pénétration nuit (ψ_{\oplus}) pour chaque angle azimutale θ (exprimé en indice) et chaque longueur d'onde (exprimée en μm). Sur les deux cartes nous avons superposé le spectre en transmission (courbe noire).

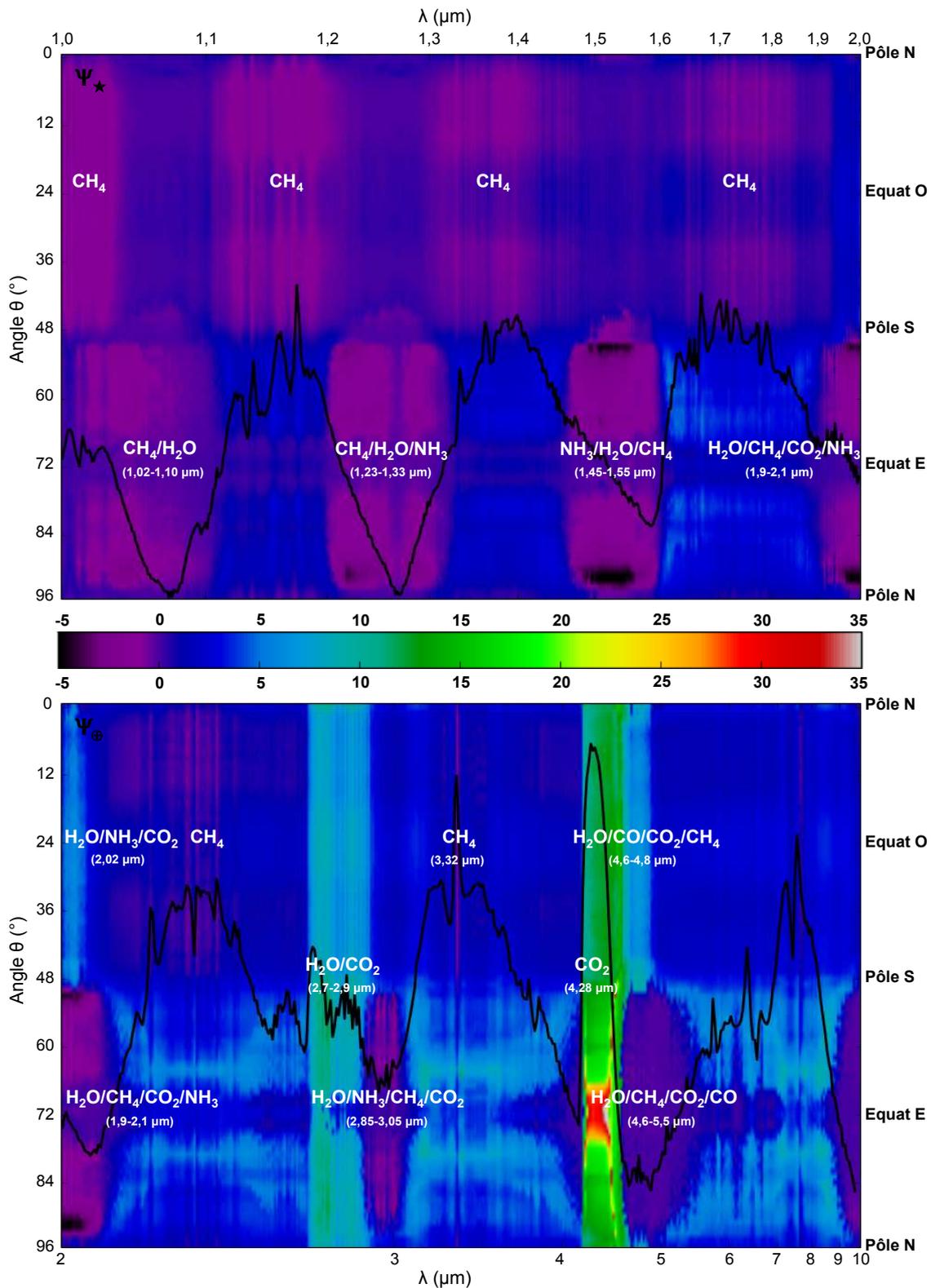


Figure B.2: Dissymétrie des angles de pénétration (en $^\circ$) obtenus à partir de la simulation GJ 1214b d'après Charnay et al. (2015) dans la gamme 1 - 10 μm ($\psi_\star - \psi_+$). Nous avons superposé à la carte le spectre en transmission (courbe noire). Sont indiquées également les anomalies discutées dans les sections § B.2.1 et § B.3.

plus haut la réduit. Si nous nous référons à la Figure A.2, nous ne devrions remarquer qu'à peine 1° de différence entre les niveaux extrêmes, or nous avons des écarts plus importants de 1 à 2° , et ce seulement sur la moitié de l'angle de pénétration. Nous l'expliquons pas la chute de température entre les niveaux les plus bas (environ 600 K) et les niveaux les plus représentés (environ 480 K), induisant par la même occasion, une baisse importante et rapide de la hauteur d'échelle, que la dépendance avec l'altitude de la gravité ne compense pas totalement. Baisser le rapport (R_p, H_0) a également pour conséquence de diminuer l'angle de pénétration, et la somme d'au moins ces deux effets explique les variations spectrales et/ou locales aussi importantes alors même que le spectre y est dominé essentiellement par la même molécule.

Enfin, toutes les régions et gammes spectrales pour lesquelles l'angle de pénétration est inférieur à 5° et positif (en vert clair) et ne présente pas de dissymétrie jour/nuit ne portent pour information que celle du terminateur. C'est la majorité le cas et les inversions réalisées sur la simulation complète et sur un spectre obtenu à partir du terminateur devrait le mettre en évidence.

B.2 Des hétérogénéités en composition qui renforcent les effets de la dissymétrie thermique

Nous allons nous intéresser dans ce paragraphe aux anomalies dans les angles de pénétration soulignant un effet renforcé des hétérogénéités de température et donc aux cas pour lesquels ψ_* est très grand devant ψ_+ .

B.2.1 CO_2 à $4,28 \mu\text{m}$

Dans l'hémisphère Ouest comme dans l'hémisphère Est, la bande à $4,28 \mu\text{m}$ est associée aux ψ_* les plus importants, évoluant entre 15° et 25° environ suivant l'hémisphère. A l'Ouest, l'angle de pénétration est extrême et atteint 25° , ce qui est 2,5 fois plus grand que la moyenne. *A contrario*, ψ_+ atteint ses valeurs minimales, se rapprochant de 0° dans l'hémisphère Ouest, et étant majoritairement négatif dans la région Est. Nous sommes clairement dans un cas où l'information spectroscopique et atmosphérique est peu voire plus du tout portée par le terminateur. Ici, les hétérogénéités en abondance de la molécule, très intenses entre le côté jour et le côté nuit et particulièrement du côté Est, dominent très fortement les effets de températures plus qu'elles ne les accentuent car nous sondons vraiment très profondément dans l'hémisphère jour.

Dans cette région qui entoure l'équateur Est, l'appauvrissement drastique en CO_2 perdure sur une douzaine de $^\circ$ en longitude à l'équateur (voir Figure B.3), ce qui est très proche de ψ_+ . L'information sur le CO_2 est donc contenue dans la région entre $-(4-15)^\circ$ et $-(15-20)^\circ$ par rapport au terminateur et est donc uniquement portée par le côté jour. Ceci n'est possible que parce que la molécule est clairement dominante sur cette longueur d'onde, qu'elle est en abondance suffisante, et parce que le contraste entre la fraction molaire au terminateur et celle plus profonde du côté jour est gigantesque (7 - 8 ordres de grandeur). Du point de vue thermique, la région sondée dans cette bande est associée à des températures également plus élevée, et sa signature spectroscopique est en conséquence plus chaude que pour toutes les autres gammes et régions resserrées autour du terminateur.

Du côté Ouest, ψ_+ n'est jamais négatif, mais proche de $1-3^\circ$. Donc le central est clairement décalé par rapport au terminateur mais de manière moins brutale que pour le côté Est. En cause encore, les hétérogénéités tangentielles en composition de la molécule qui est plus abondante du côté jour. Le gradient en fraction molaire ne varie plus que sur 4 ordres de grandeur, mais la zone de transition entre les deux abondances est dans le même temps très brutale, ne s'étalant que sur une dizaine de $^\circ$. Donc,

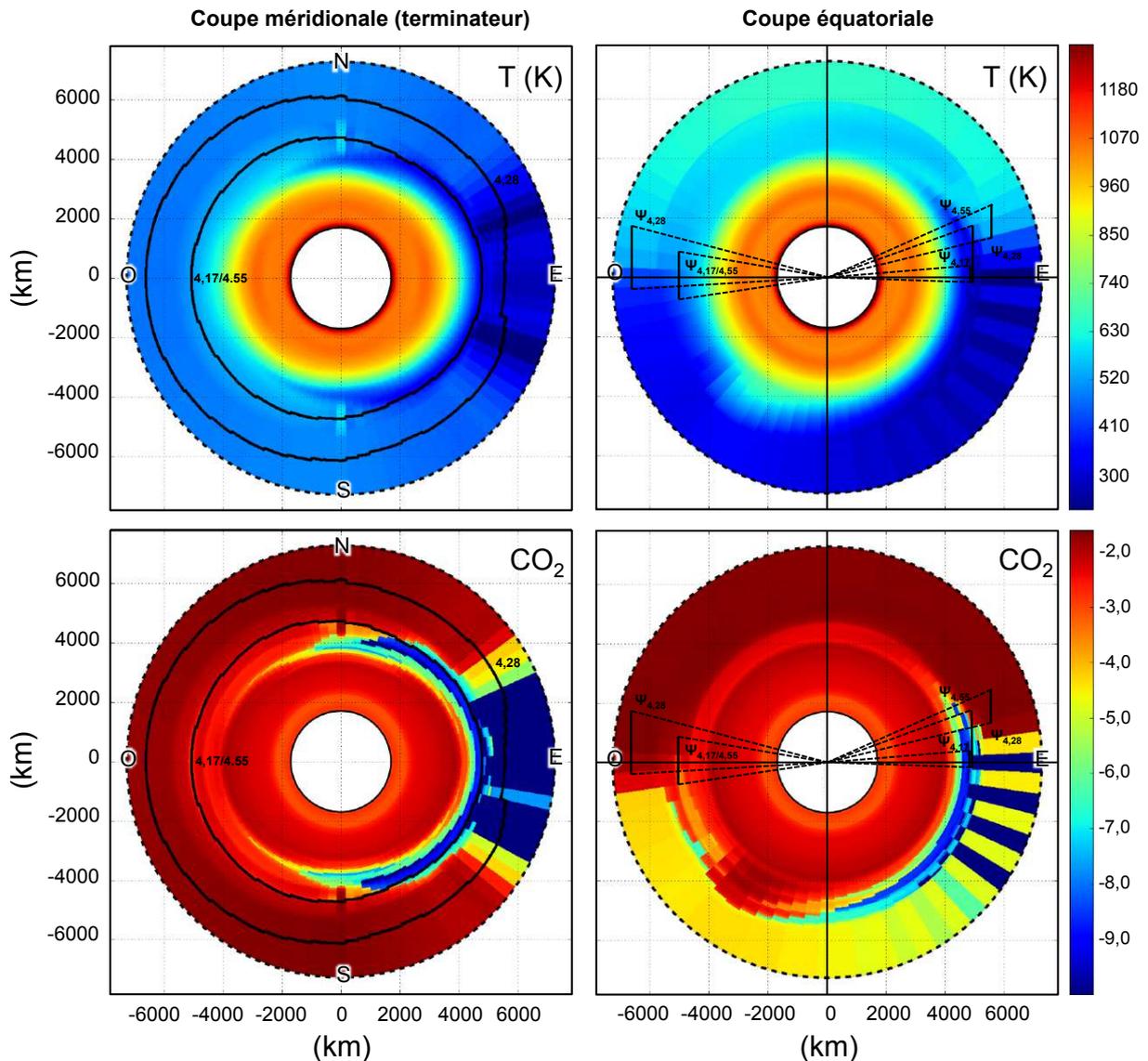


Figure B.3: En haut : Coupes en température, méridionales (terminateur) à droite et équatoriales à gauche, de la simulation GJ 1214 b. En bas : Coupes en abondance du CO₂, méridionale (terminateur) à droite et équatoriale à gauche, de la simulation GJ 1214 b. Les iso-contours noirs sur les coupes méridionales indiquent les niveaux pour lesquels la transmittance est égale à $\exp(-1)$ aux longueurs d'onde 4,17 ; 4,28 et 4,55 μm . Les portions de rayons échantillons associées à une transmittance proche de $\exp(-1)$ pour les 3 longueurs d'onde précitées et comprises dans les angles de pénétration sont représentées par des traits noirs sur les coupes équatoriales. Les points cardinaux sont définis par rapport à l'observateur.

à un niveau sondé donné, la moitié jour est plus absorbante du fait des plus hautes températures qui y règnent et des fortes fractions molaires et ψ_+ s'amointrit fortement au profit de ψ_* . Le fait que la fraction molaire au terminateur se rapproche de celles du côté jour permet de conserver la signature de sa colonne, qui s'étale de part et d'autre justement sur 2-3°. Donc dans cette partie de l'atmosphère, le CO₂ ne porte l'information que du terminateur lui-même et du côté jour. En moyenne sur l'ensemble des θ , la molécule devrait donc reposer sur une signature spectroscopique discordante par rapport aux autres molécules et être à l'origine de biais lors de l'inversion des spectres.

Sur la Figure B.3, nous proposons également une visualisation des angles de pénétration sur les coupes atmosphériques pour le pieds de la bande du CO₂. Nous les avons placé respectivement à 4,17 et 4,55 μm car les cartes de transmittance associées sont très proches et le flux relatif identique mais ne traduisent cependant pas de la même information spectroscopique. En effet, si les deux raies sondent exactement la même région du côté Ouest, celle à 4,17 μm est très serrée autour du terminateur tandis que celle à 4,55 μm sonde plus profondément. Dans le premier cas, la molécule entre en compétition avec le méthane qui, on en parle dans les paragraphes à venir, a un effet inverse à CO₂ et ramène la zone sondée au terminateur. Dans le deuxième cas, la compétition fait intervenir le CO, H₂O, et CH₄ à moindre mesure. Les effets cumulés du dioxyde de carbone et du monoxyde de carbone l'emporte clairement du côté jour, tout en étant partiellement amoindris par ceux du méthane. La partie nuit sondée est la même pour les deux molécules.

B.2.2 CO₂ mixé à d'autres molécules, 2,7 - 2,9 μm et 2,02 μm

Les deux autres bandes manifestant une situation semblable font toute deux intervenir le CO₂. D'abord dans la gamme 2,7 - 2,9 μm pour laquelle la molécule est en compétition avec H₂O. Cette dernière est plutôt homogène dans cette simulation avec au maximum un facteur 5 entre les régions les plus riches et les plus pauvres. Qui plus est, ses variations suivent une tendance inverse à celle du CO₂ puisqu'elle est légèrement plus abondante du côté nuit. De par sa répartition en abondance, elle tend plutôt à décaler la région de pénétration vers le côté nuit (indépendamment de l'effet thermique sur les sections efficaces). L'Ouest est une fois de plus impacté par une contribution très profonde de CO₂ qui domine sur celle de H₂O. L'Est propose des angles de pénétration plus faibles pour les mêmes raisons soulignées avec la bande à 4,28 μm mais les bandes d'absorption du dioxyde de carbone étant moins intenses, elles ne dominent pas complètement la gamme, ce qui explique une dissymétrie beaucoup moins impressionnante.

Viens enfin la gamme autour de 2,02 μm dans laquelle 3 molécules sont en compétition : CO₂, H₂O et NH₃. ψ_* a une valeur de nouveau très élevée du côté Ouest pour les mêmes raisons que pour les gammes précédentes, à moindre mesure car CO₂ y possède une bande de faible intensité, contrastée par deux autres molécules dont la distribution tangentielle en abondance est inversée. Cet effet se perd complètement du côté Est par la domination nette de NH₃ qui gagne 4 ordres de grandeur en fraction molaire, réduisant ψ_* à seulement quelques °, tout comme ψ_+ , et ne laissant plus que le terminateur s'exprimer dans cette région. En moyenne, sur les deux gammes précitées, la signature spectroscopique devrait être légèrement altérée par rapport au reste du spectre, mais à bien moindre mesure par rapport à la bande à 4,28 μm .

B.3 Les hétérogénéités compositionnelles dominant les effets thermiques

Nous allons nous intéresser dans ce paragraphe aux anomalies dans les angles de pénétration soulignant un effet compensé ou inversé par les hétérogénéités en composition et donc aux cas pour lesquels

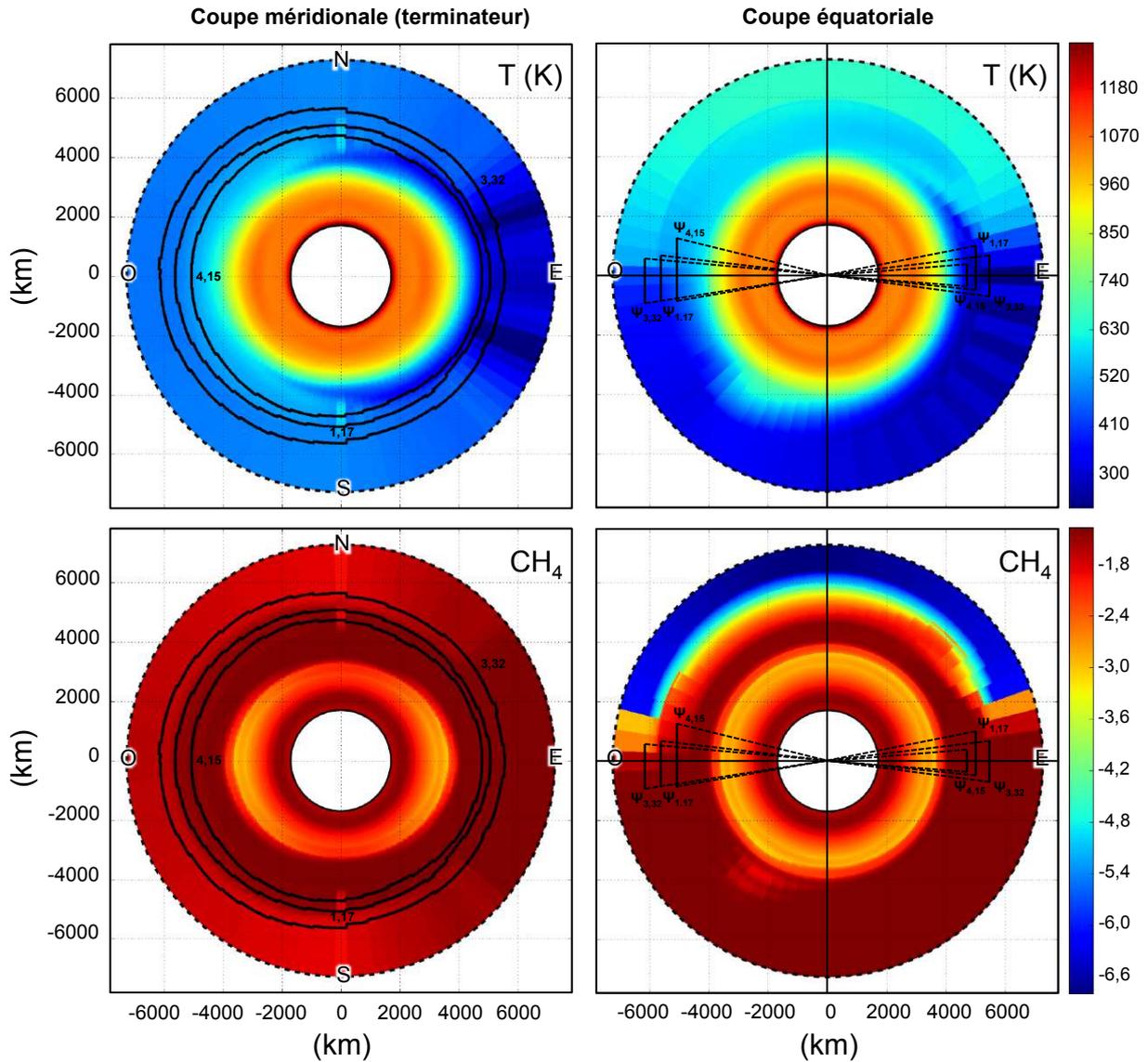


Figure B.4: En haut : Coupes en température, méridionales (terminateur) à droite et équatoriales à gauche, de la simulation GJ 1214 b. En bas : Coupes en abondance du CH₄, méridionale (terminateur) à droite et équatoriale à gauche, de la simulation GJ 1214 b. Les iso-contours noirs sur les coupes méridionales indiquent les niveaux pour lesquels la transmittance est égale à $\exp(-1)$ aux longueurs d'onde 1,17 ; 3,32 et 4,15 μm . Les portions de rayons échantillons associées à une transmittance proche de $\exp(-1)$ pour les 3 longueurs d'onde précitées et comprises dans les angles de pénétration sont représentées par des traits noirs sur les coupes équatoriales. Les points cardinaux sont définis par rapport à l'observateur.

ψ_* est très proche ou inférieur à ψ_+ .

B.3.1 CH₄ aux multiples hétérogénéités

Le méthane est la molécule dominante du spectre de GJ 1214 b et présente des hétérogénéités très marquées évoluant sur 5 ordres de grandeur. Elles sont de natures verticales, tangentielles et azimutales et globalement plus intenses que celles du CO₂, exception faite de la région Est autour du terminateur. Toutefois, elles ne sont pas ou très peu détectées lors de l'inversion par l'algorithme de traitement du signal contrairement au dioxyde de carbone. La molécule est en fait un compensateur global des effets thermiques à en juger par les angles de pénétration dans les gammes qu'il domine.

Du côté Ouest, la molécule souffre d'un appauvrissement du côté jour sur un angle de transition très dissymétrique. Sa fraction molaire passe ainsi de $10^{-1,8}$ à $10^{-5,5}$ sur 15° en longitude côté jour et à $10^{-1,3}$ sur 5° côté nuit en haute atmosphère. En plus basse atmosphère, la fraction molaire diminue légèrement du côté jour (10^{-2}) et sur un angle de transition plus important. Ainsi, les bandes les plus absorbantes sondent dans la haute atmosphère et, comme nous pouvons le constater sur la Figure B.2.2, voient le fort gradient de composition. En conséquence, le plus gros de l'absorption est porté par le côté nuit, plus riche, et les effets thermiques sont surpassés. Les bandes qui absorbent plus bas dans l'atmosphère voient des hétérogénéités beaucoup plus faibles, en plus d'être en compétition avec les autres molécules de l'atmosphère, et donc, d'autres types d'effet sur l'angle de pénétration. La variation jour/nuit en abondance de la molécule n'est pas assez intense pour contrebalancer les effets thermiques et $\psi_* > \psi_+$. La dissymétrie $\psi_* - \psi_+$ reste néanmoins faible, $0 - 3^\circ$ suivant l'angle θ et ψ_* évolue entre 7 et 10° .

Du côté Est, l'air froid qui s'enfonce dans le côté jour et les basses températures qui persistent entraînent une accumulation du méthane et une hétérogénéité tangentielle plus tardive sur la ligne de visée. Si elle est de même intensité que celle du côté Ouest, elle est aussi décalée de 6° en longitude, ce qui est proche des angles de pénétration moyens. par conséquent, cet hémisphère ne souffre pas des effets de composition, que ce soit en basse ou en haute atmosphère. Les bandes d'absorption les plus intenses, ne voyant qu'une composition homogène de la molécule, ne subissent que les effets thermiques et $\psi_* > \psi_+$. Les bandes les moins intenses ne sont toujours pas affectées par les effets de composition du méthane, mais la compétition avec les autres molécules, et essentiellement NH₃ et CO₂ vont sceller la tendance de l'angle de pénétration.

B.3.2 Les compétitions moléculaires du méthane avec ...

... le dioxyde de carbone

Comme nous l'avons souligné précédemment, le CO₂ s'exprime sur 3 gammes de longueur d'onde : entre $1,9$ et $2,1 \mu\text{m}$, entre $2,7$ et $3,05 \mu\text{m}$ et entre $4,17$ et $5,5 \mu\text{m}$. Nous avons déjà discuté des 3 gammes pour le côté Ouest qui voit le CO₂ l'emporter sur les autres molécules, très nettement sur les deux dernières gammes et de manière plus modérée pour la première, imposant de par ses hétérogénéités une pénétration profonde dans l'hémisphère jour et une signature à plus haute température sur le spectre en transmission. La gamme $1,9 - 2,1 \mu\text{m}$ est plus resserrée autour du terminateur par l'effet du méthane, principal compétiteur. Du côté Est, l'appauvrissement en CO₂ est tel qu'en dehors de sa bande principale centrée sur $4,28 \mu\text{m}$ et toute la gamme $2,7$ et $3,05 \mu\text{m}$, la molécule ne domine plus le transfert radiatif et la contribution majoritaire n'est plus portée par le côté jour mais reste cantonnée autour du terminateur. Les hétérogénéités de l'eau, du méthane et de l'ammoniac sont trop faibles aux niveaux de transitions

concernés (faible absorption) pour avoir un effet, et de même pour les hétérogénéités de température. En conséquence, l'angle de pénétration est symétrique (ce qui transparait par une différence nulle).

... l'ammoniac

Sur les gammes 1,23 - 1,33 μm , 1,45 - 1,55 μm et 1,9 - 2,1 μm , du côté Est, l'enrichissement en NH_3 induit également sa domination sur les autres molécules dans cette région. Suivant l'angle θ , l'enrichissement est plus ou moins marqué le long du chemin optique. L'accumulation est plus marquée autour des pôles et correspond également à des niveaux sondés plus élevés, là où les hétérogénéités tangentielles sont nettes. A ces angles, et pour ces gammes, la fraction molaire du côté nuit est de 4 ordres de grandeur plus grande que celle du côté jour, ce qui est suffisant pour effacer les effets thermiques et même les surpasser. En conséquence, l'information spectroscopique est contenue en partie par le terminateur et majoritairement par le côté nuit (ce qui transparait par les régions noires sur la Figure B.1).

Pour conclure, l'angle de pénétration permet de mieux comprendre les spectres en transmission de par les régions qui sont réellement sondées à chaque gamme spectrale, mais il ne permet pas quantifier les biais qui en résulteront. Dans le chapitre Chapitre 4, nous faisons référence à ces résultats pour expliquer les deux indices de la présence de fortes hétérogénéités lorsque le spectre inversé n'arrive pas à contraindre le méthane sur la bande à 3,32 μm et la bande principale du dioxyde de carbone. Nous expliquons par ailleurs que les biais thermiques ne sont pas détectés lors de l'inversion, et que nous retrouvons finalement des résultats proches, notamment en température, du terminateur. Dans notre exemple, les effets thermiques sont effectivement globalement, et plus ou moins fortement, compensés par les hétérogénéités tangentielles du méthane sur les gammes où la molécule est dominante. Les gammes pour lesquelles les effets thermiques ne sont pas compensés ou sont exacerbées souffrent d'une faible représentation dans les spectres, insuffisantes pour s'exprimer mais assez marquées pour être détectées comme des anomalies dans le processus d'inversion (CO_2 , voir Chapitre 4).

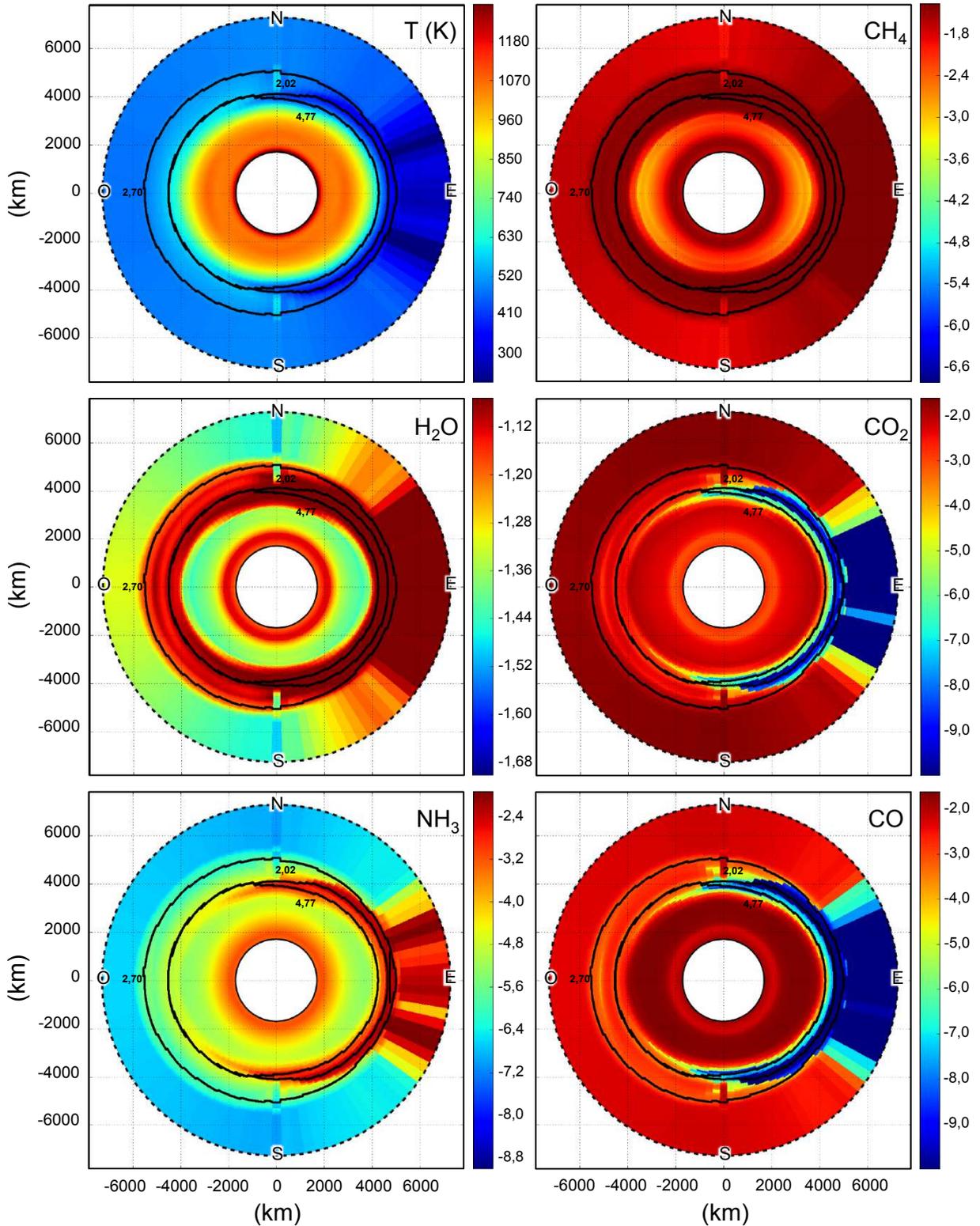


Figure B.5: Coupes méridionales (terminateur) de la simulation GJ 1214 b : en température (K), en abondance pour CH_4 , H_2O , CO_2 , NH_3 et CO (puissance de 10). Les portions de rayons échantillons associées à une transmittance proche de $\exp(-1)$ et comprises dans les angles de pénétration sont représentées par des traits noirs pour les longueurs d'onde 2,02 ; 2,70 et 4,77 μm . Les points cardinaux sont définis par rapport à l'observateur.

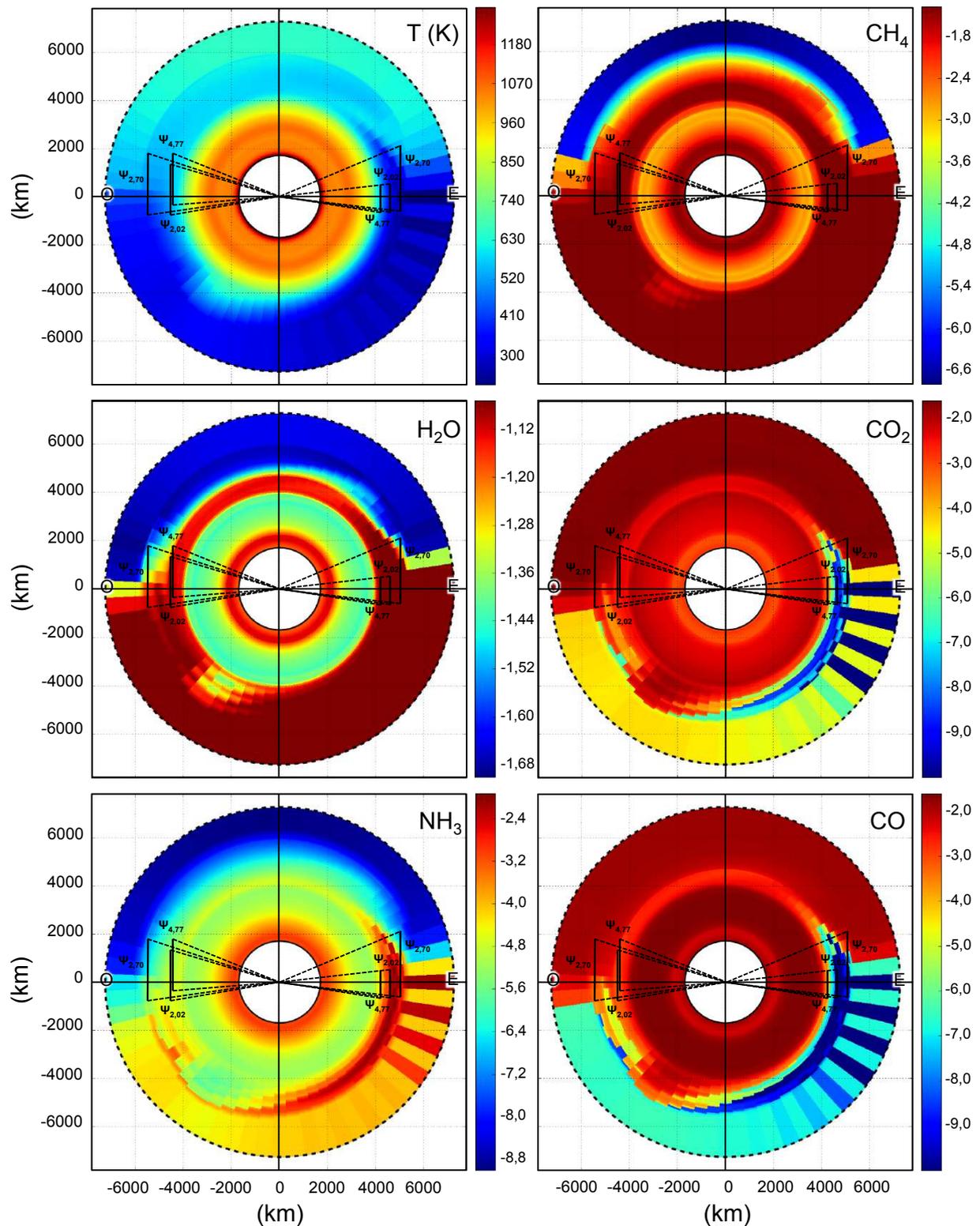


Figure B.6: Coupes équatoriales de la simulation GJ 1214 b : en température (K), en abondance pour CH_4 , H_2O , CO_2 , NH_3 et CO (puissance de 10). Les iso-contours noirs indiquent les niveaux pour lesquels la transmittance est égale à $\exp(-1)$ aux longueurs d'onde 2,02 ; 2,70 et 4,77 μm . Les points cardinaux sont définis par rapport à l'observateur.

Appendix C

Angles de pénétration des atmosphères synthétiques

Sont représentées ci-après les angles de pénétration jour ψ_* , nuit ψ_+ et la dissymétrie $\psi_* - \psi_+$ pour les atmosphères synthétiques présentées dans le Chapitre 5 à toutes les longueurs d'onde du set 10_{wno} .

Pour chaque figure, nous avons indiqué le type d'exoplanète, le doublet de température $T_n - T_j$ et la structure verticale.

Pour les atmosphères présentant une couche isotherme en basse atmosphère, nous avons accentué en gris les gammes dans lesquelles les rayons stellaires traversent la dite couche.

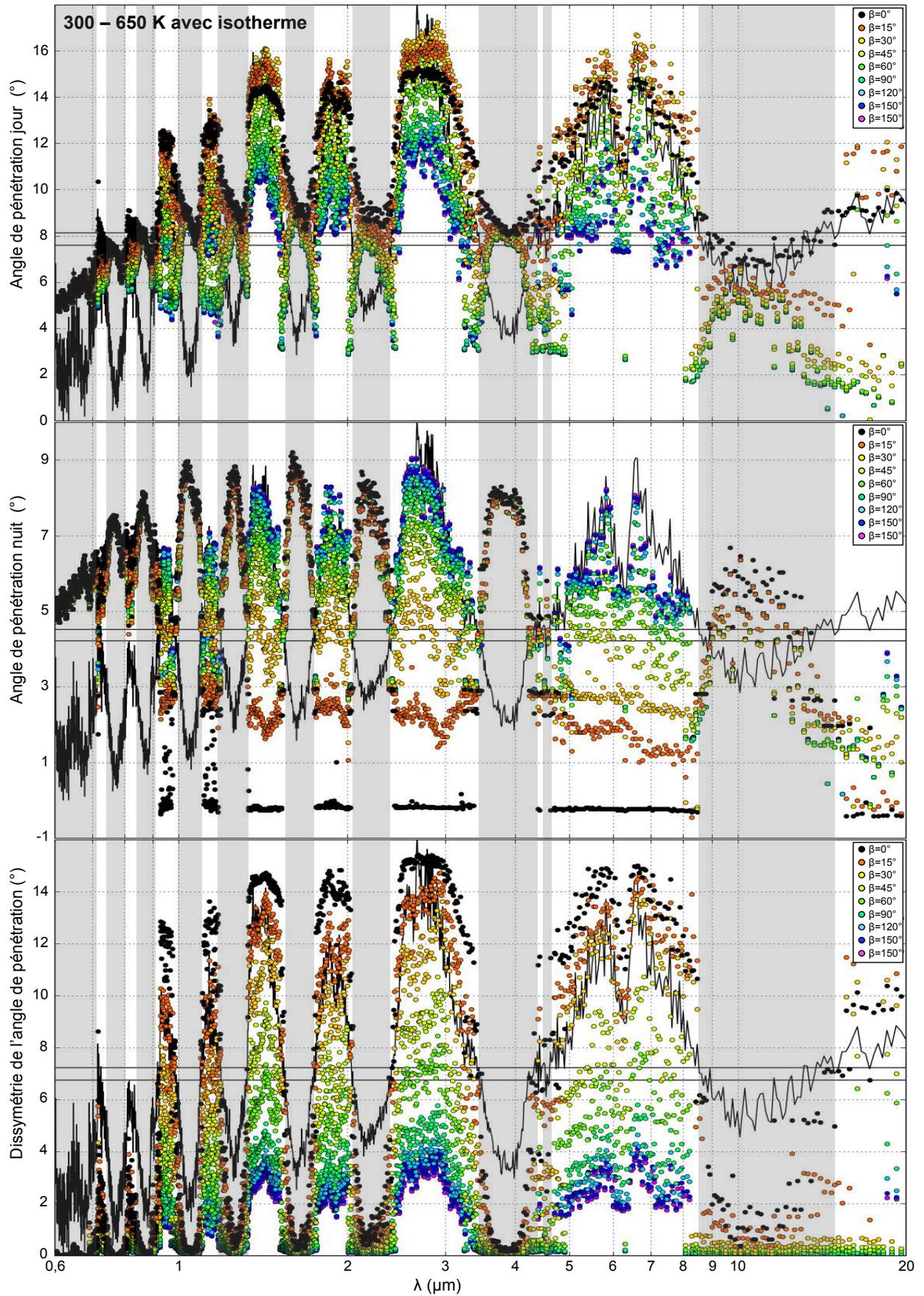


Figure C.1: GJ 1214 b ; doublet 300 - 650 K ; colonnes à deux températures

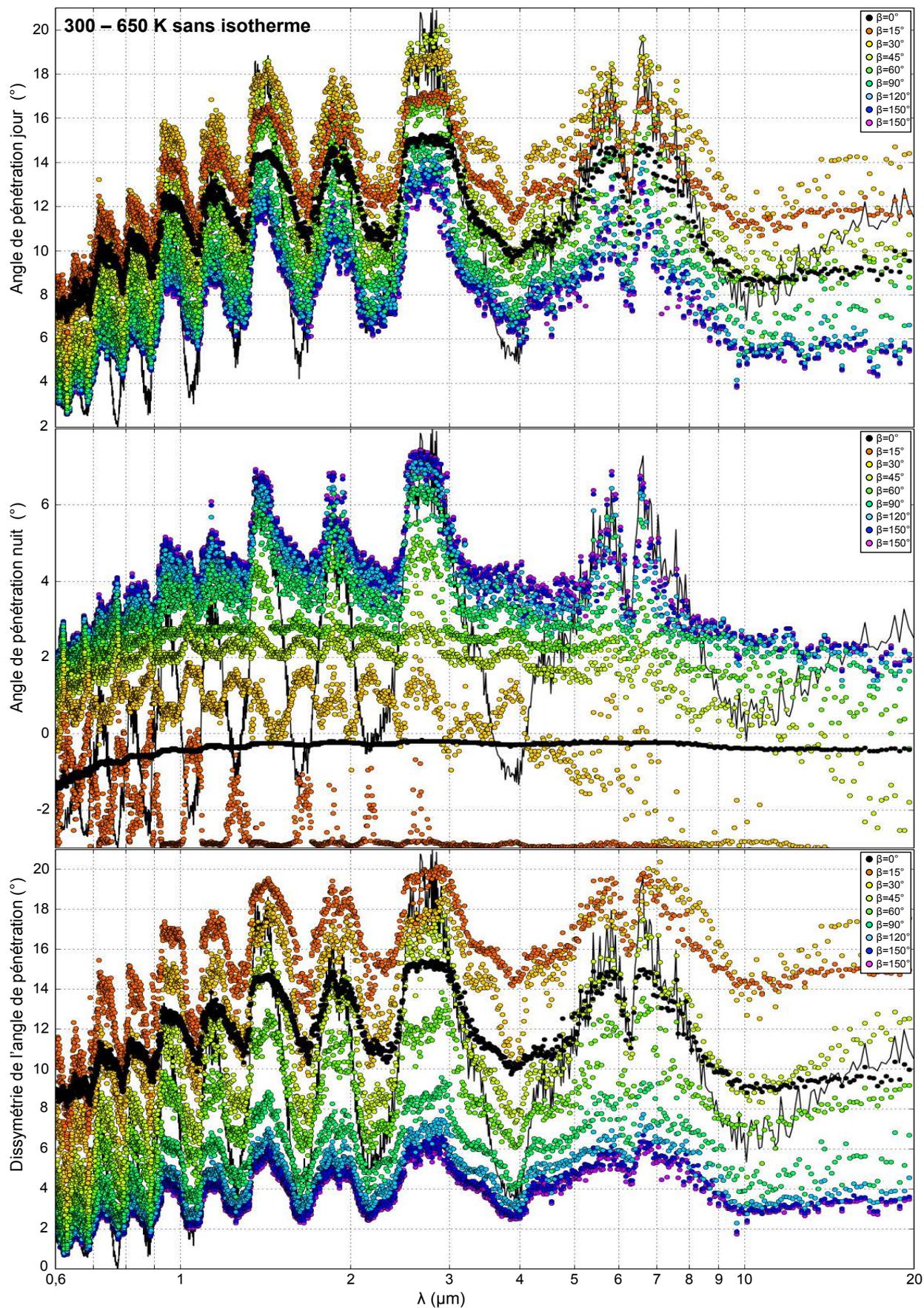


Figure C.2: GJ 1214 b ; doublet 300 - 650 K ; colonnes isothermes

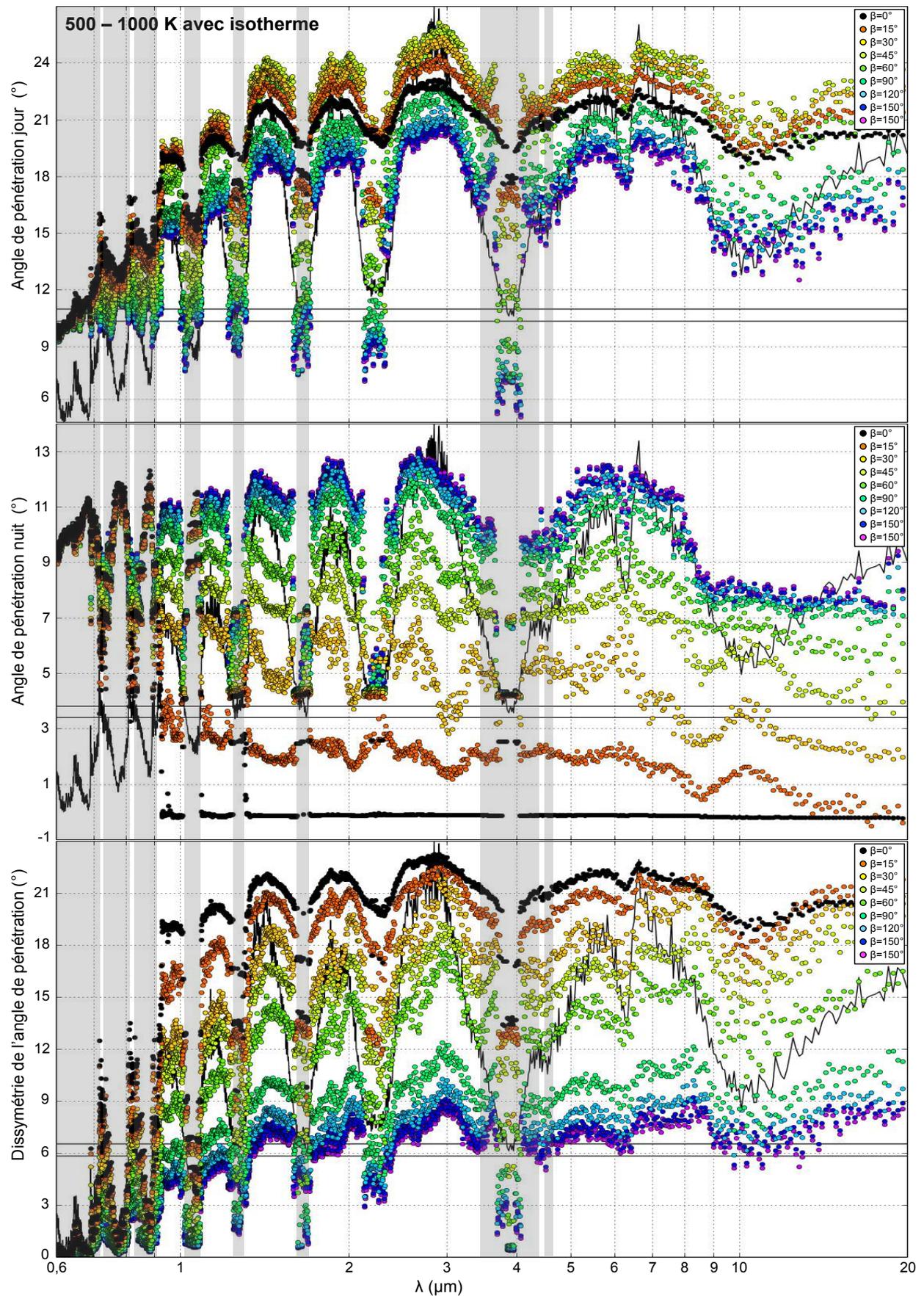


Figure C.3: GJ 1214 b ; doublet 500 - 1000 K ; colonnes à deux températures

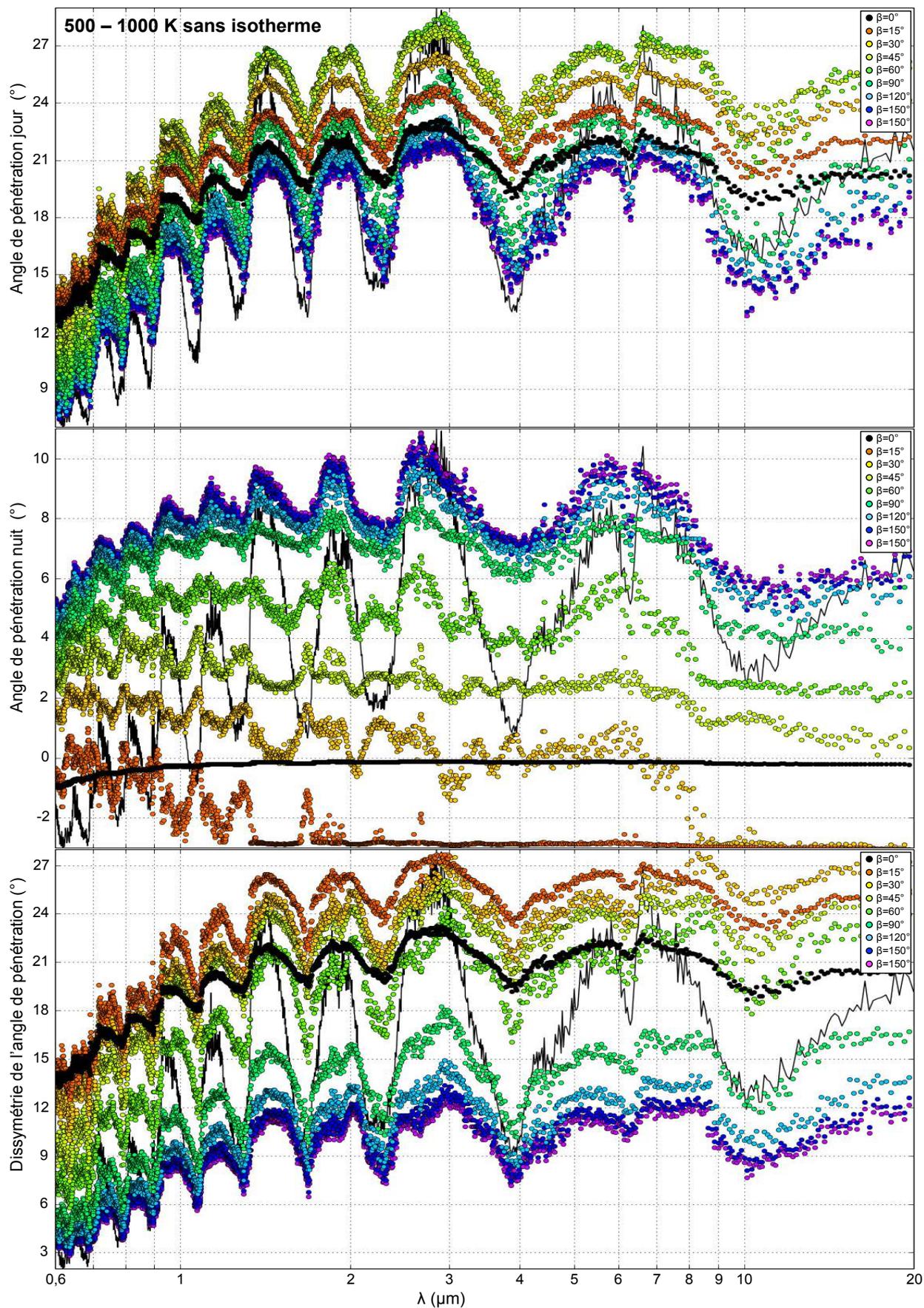


Figure C.4: GJ 1214 b ; doublet 500 - 1000 K ; colonnes isothermes

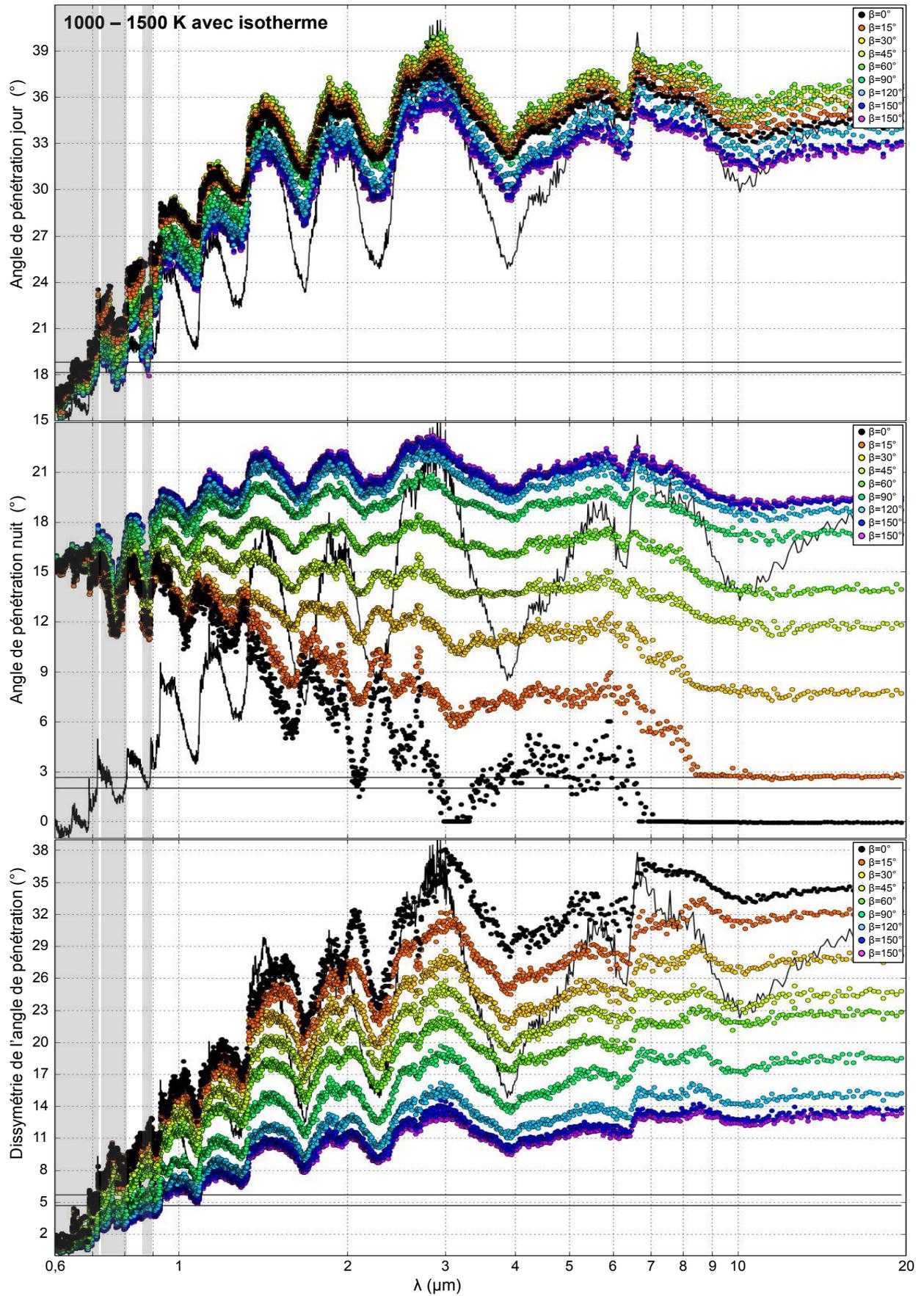


Figure C.5: GJ 1214 b ; doublet 1000 - 1500 K ; colonnes à deux températures

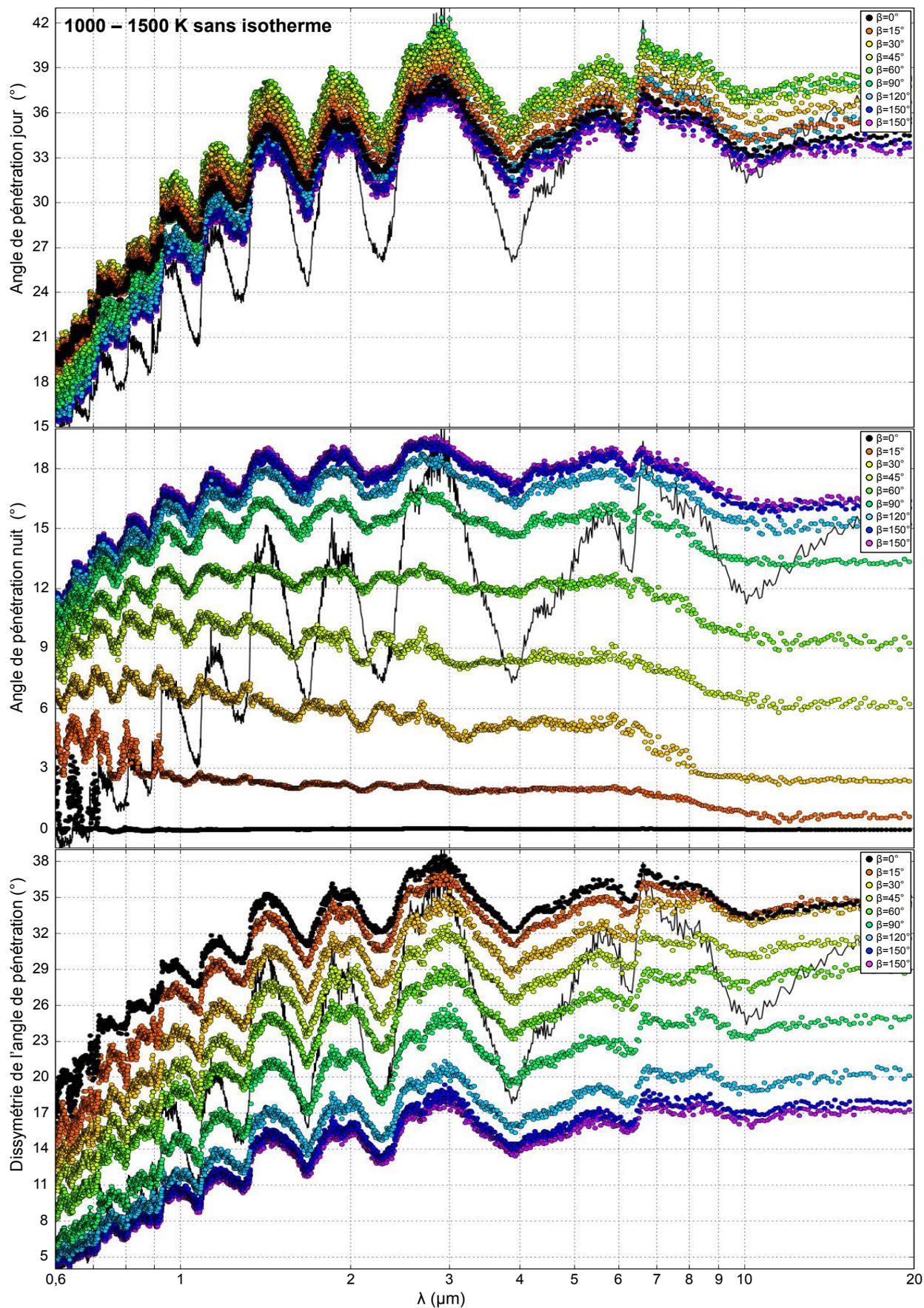


Figure C.6: GJ 1214 b ; doublet 1000 - 1500 K ; colonnes isothermes

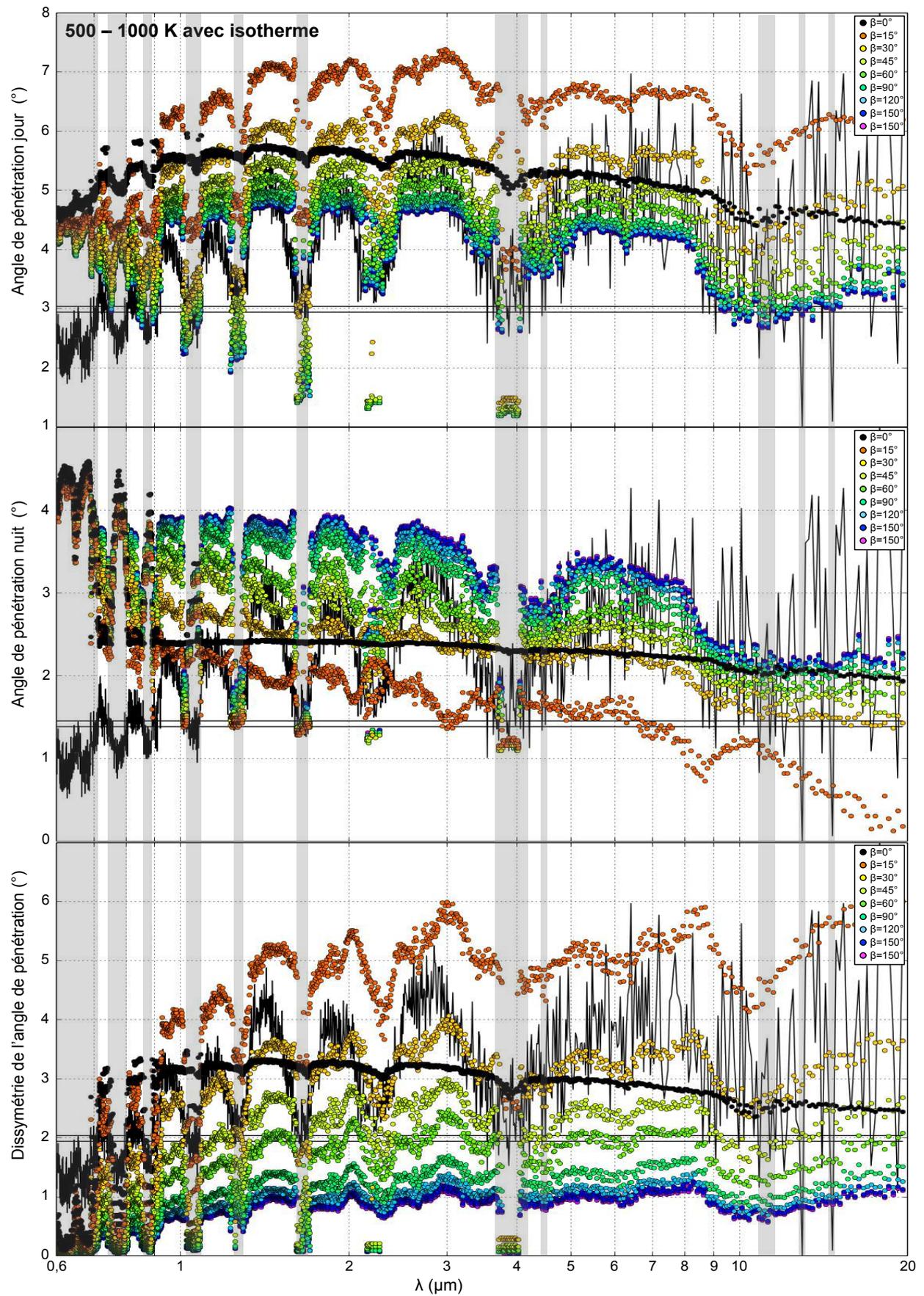


Figure C.7: HD 209458 b ; doublet 500 - 1000 K ; colonnes à deux températures

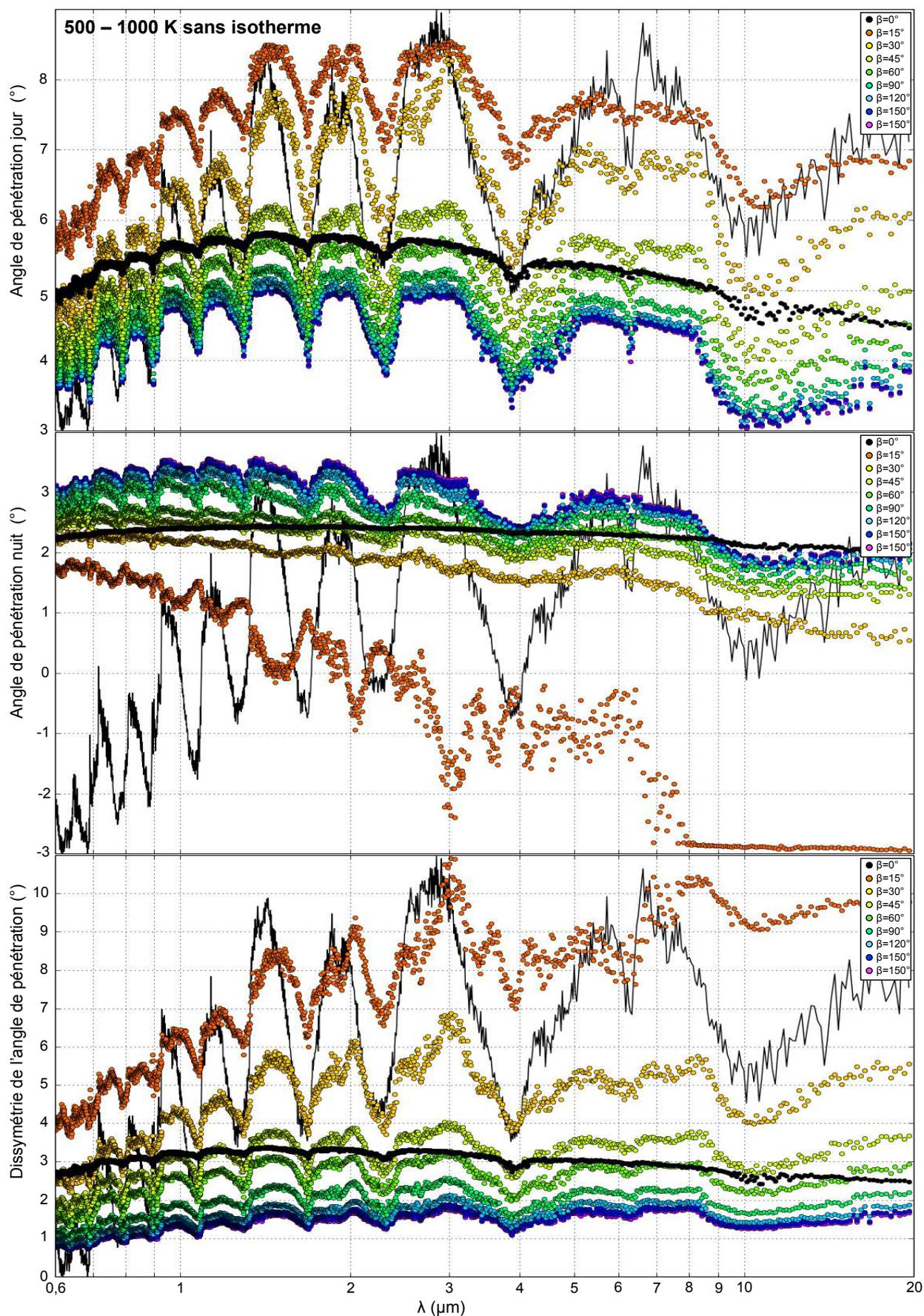


Figure C.8: HD 209458 b ; doublet 500 - 1000 K ; colonnes isothermes

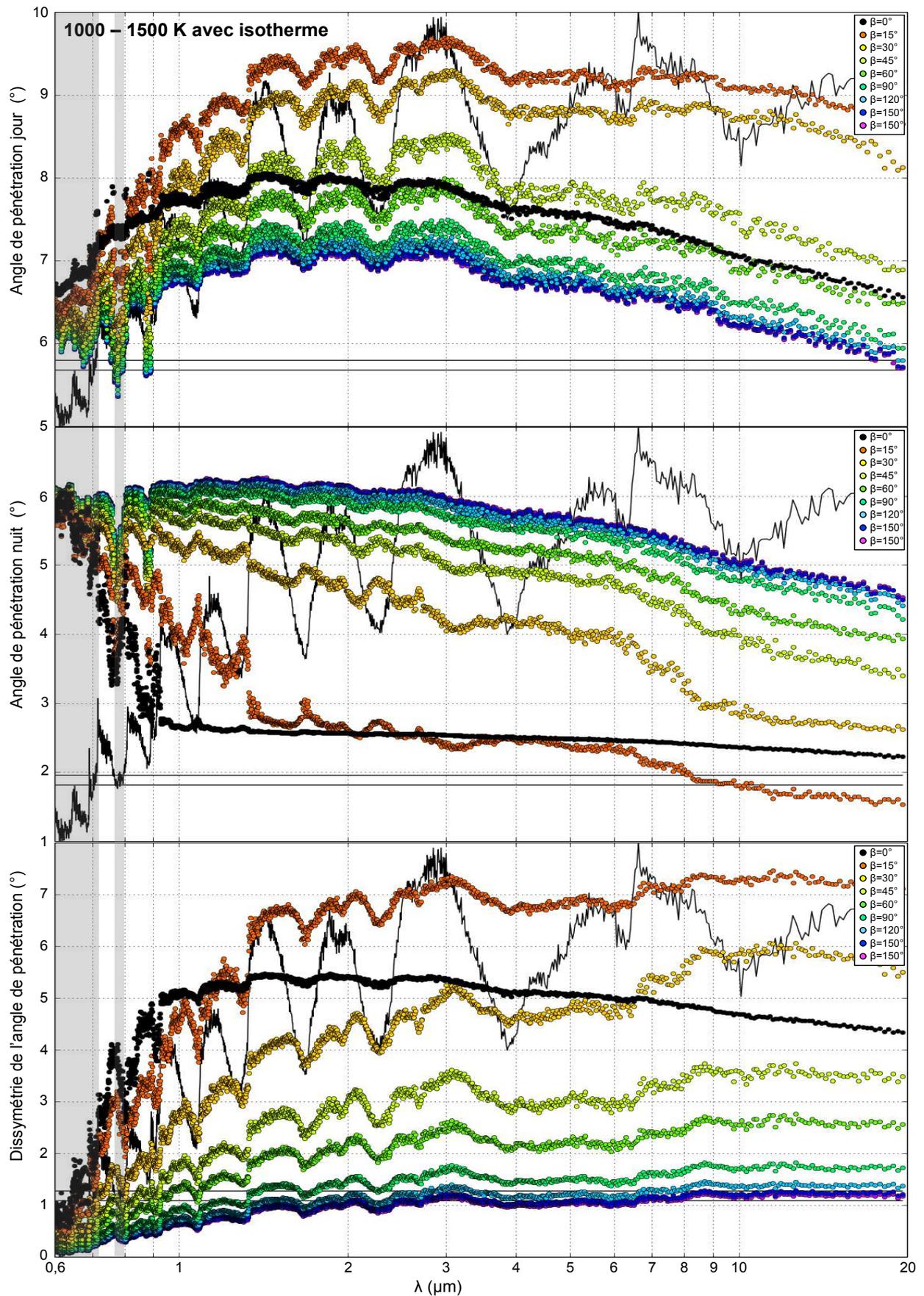


Figure C.9: HD 209458 b ; doublet 1000 - 1500 K ; colonnes à deux températures

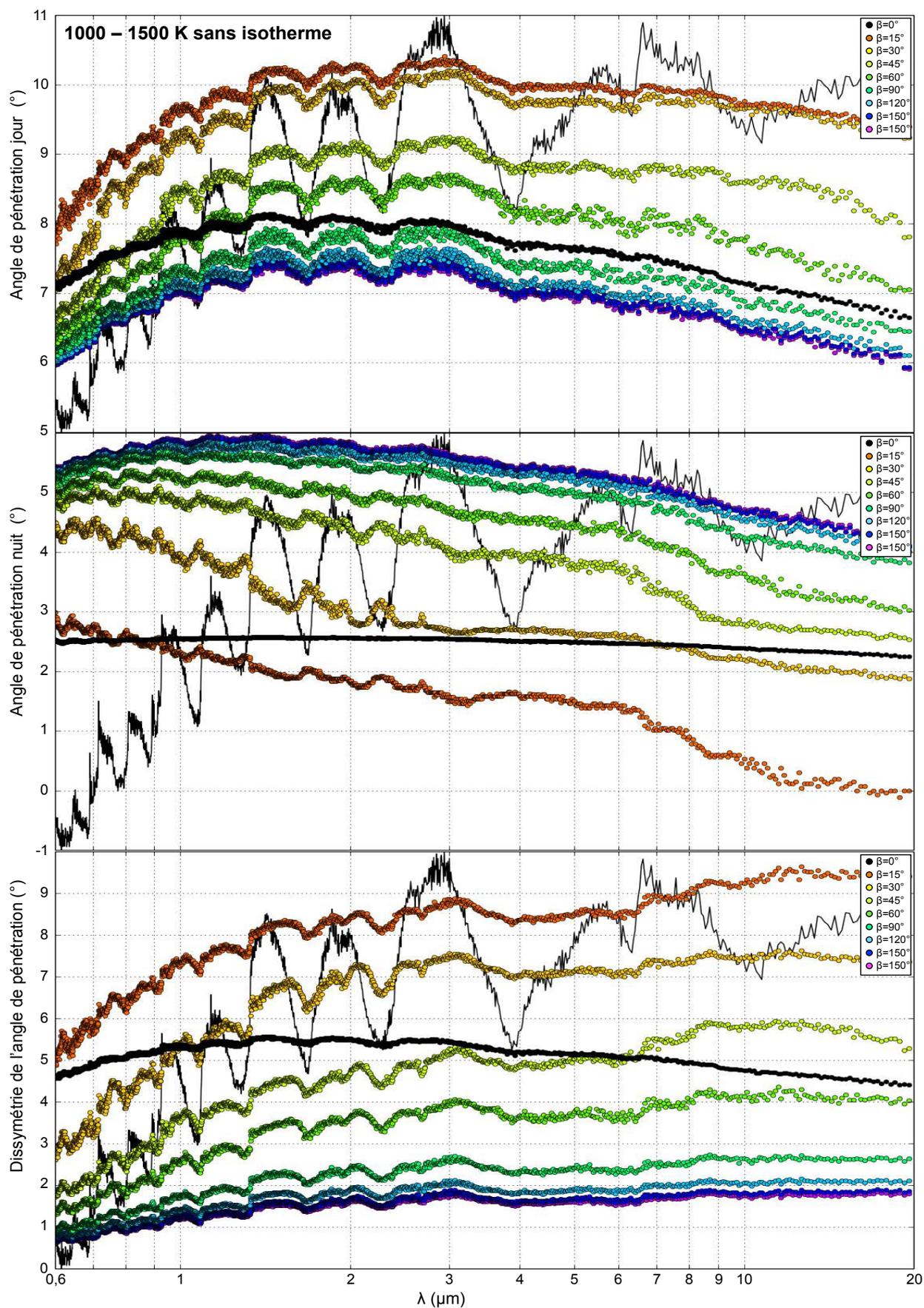


Figure C.10: HD 209458 b ; doublet 1000 - 1500 K ; colonnes isothermes

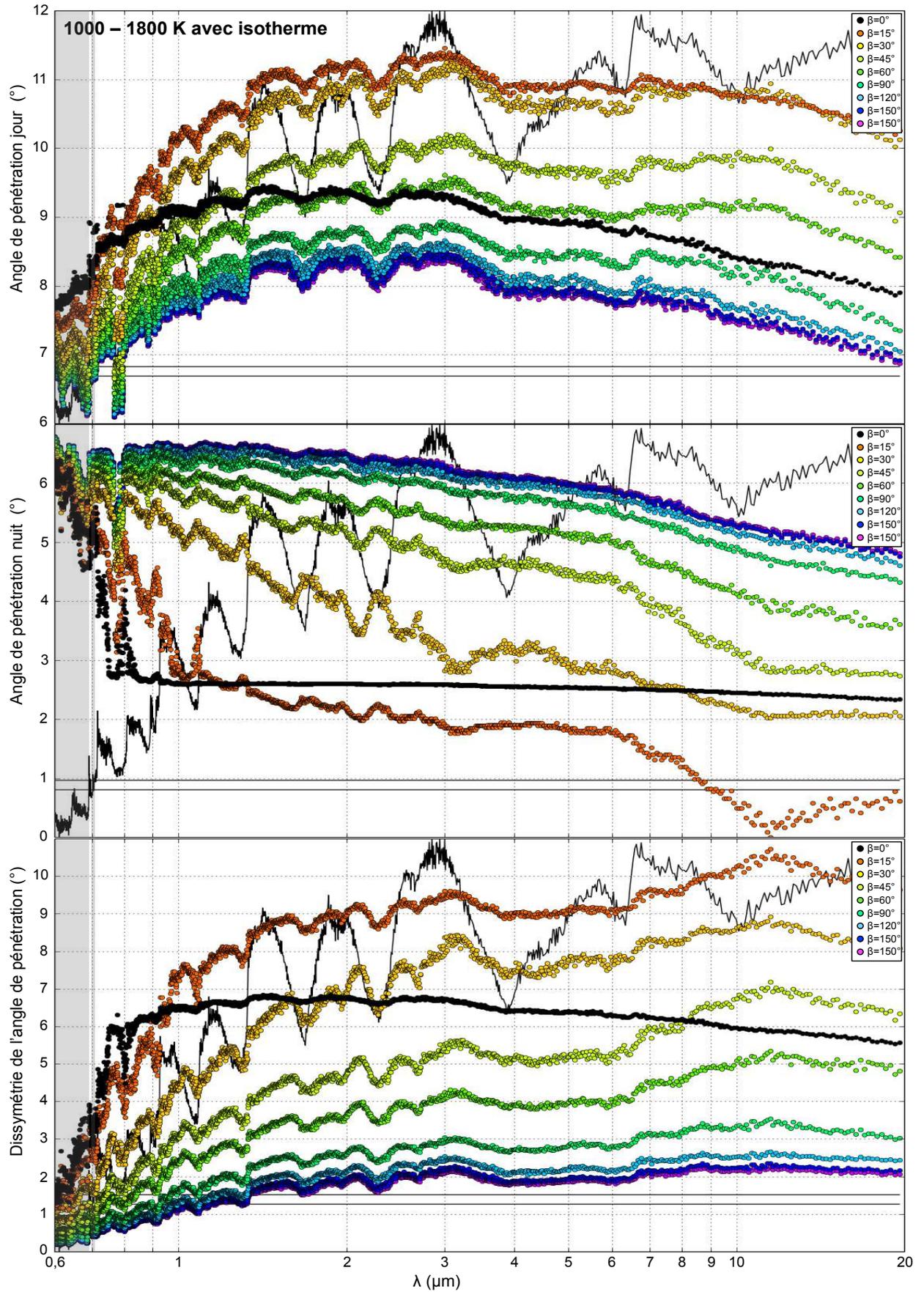


Figure C.11: HD 209458 b ; doublet 1000 - 1800 K ; colonnes à deux températures

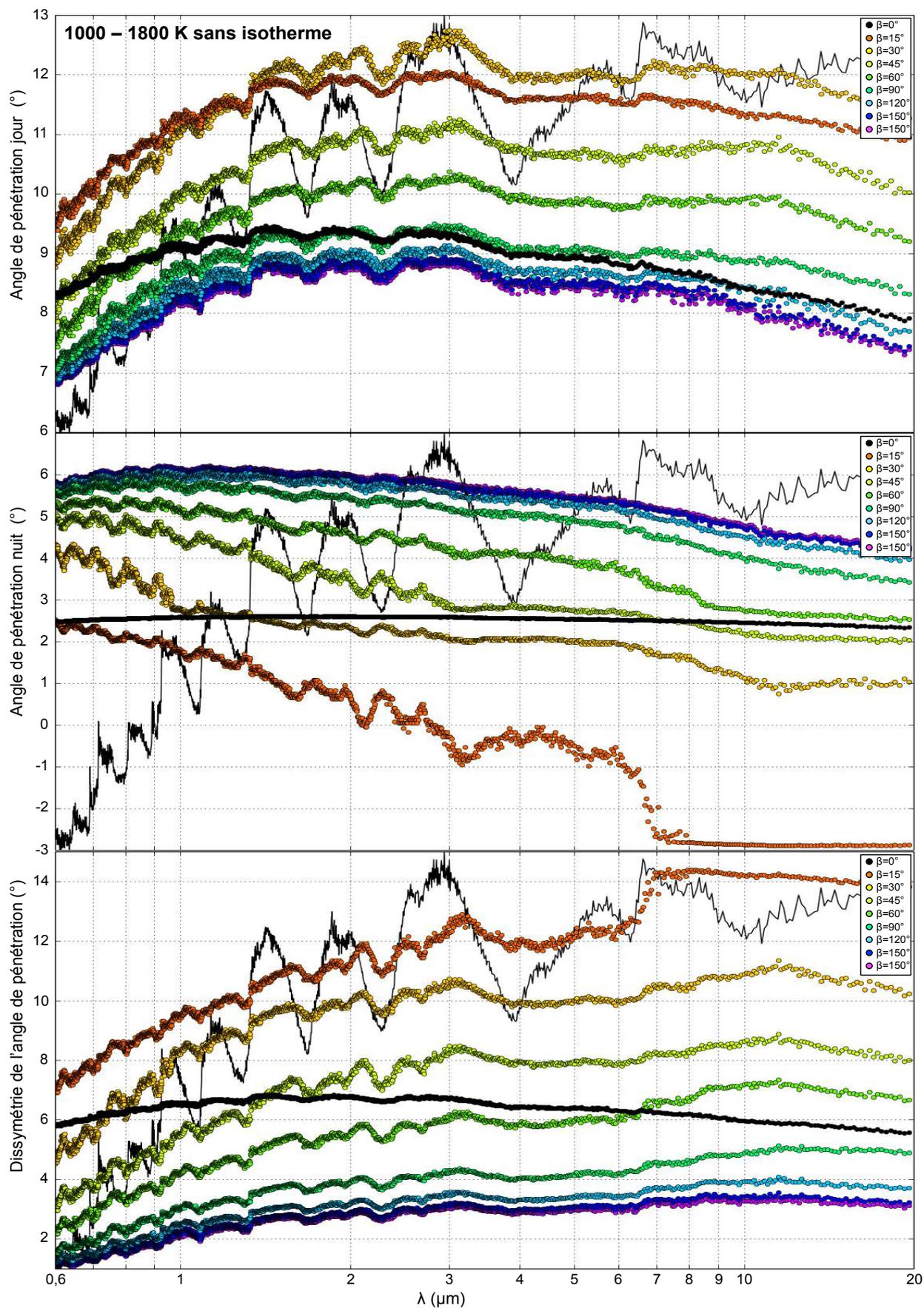


Figure C.12: HD 209458 b ; doublet 1000 - 1800 K ; colonnes isothermes

Appendix D

Calcul analytique des profondeurs optiques pour des exoplanètes à gradient de température Jour/Nuit

D.1 Atmosphère à deux températures, cas champignon

Nous allons montrer que nous pouvons conforter l'ensemble des remarques formulées dans les paragraphes précédents avec une approche analytique. Nous allons appliquer pour cela les formules de Guillot (Guillot 2010), mais sur deux demi-atmosphères correspondant au côté froid et au côté chaud dans le but d'en déterminer les rapports de contribution aux profondeurs optiques.

Nous raisonnerons à gravité constante pour faciliter les expressions et leurs interprétations. Si nous notons H_n et H_j les hauteurs d'échelle du côté nuit et du côté jour respectivement, z_T l'altitude où la couche isotherme s'arrête, R_p le rayon à 10 bar, n_0 la densité moléculaire de surface (donc à 10 bar), σ_{mol} la section efficace de la molécule optiquement active à la longueur d'onde considérée, moyennée sur l'ensemble du rayon échantillon et χ_{mol} la fraction molaire de la dite molécule, la profondeur optique τ se calcule comme :

$$\tau_j = \int_{-\infty}^0 n_j(x) \sigma_{mol} dx \quad (D.1)$$

$$\tau_n = \int_0^{\infty} n_n(x) \sigma_{mol} dx \quad (D.2)$$

où $n(x)$ est la densité moléculaire à la distance x du terminateur. Cette même densité s'exprime aisément à partir de l'équilibre hydrostatique comme :

$$\log \left(\frac{n_{j,n}(z)}{n_{j,n}(z_t)} \right) = \exp \left(-\frac{z - z_t}{H_{j,n}} \right) \quad (D.3)$$

L'altitude z dépend évidemment de x et dans nos atmosphères, la hauteur d'échelle également. Nous allons établir les formules en présence de la couche isotherme, puis en déduire celles sans cette couche qui correspond au cas où $z_{T_1} = 0$. Nous distinguons deux cas de figure : lorsque la transition ($\tau = \exp(-1)$) s'effectue sur une altitude z_t plus basse que la couche isotherme, et celui où elle se produit plus haut.

D.1.1 $z_t > z_{T_i}$

Dans le cas le plus simple $z_t > z_{T_i}$:

$$\begin{aligned} n_{j,n}(z) &= n(z_t) \exp\left(-\frac{z-z_t}{H_{T_i}}\right) = n_T \exp\left(-\frac{z_t-z_{T_i}}{H_{j,n}}\right) \exp\left(-\frac{z-z_t}{H_{j,n}}\right) \\ n_{j,n}(z) &= n_0 \exp\left(-\frac{z_{T_i}}{H_{T_i}}\right) \exp\left(-\frac{z_t-z_{T_i}}{H_{j,n}}\right) \exp\left(-\frac{z-z_t}{H_{j,n}}\right) \end{aligned} \quad (D.4)$$

En exprimant z en fonction x et en se plaçant dans l'approximation où $z \ll R_p$ alors :

$$\begin{aligned} (R_p + z)^2 &= R_p^2 + 2R_p z + z^2 = (R_p + z_t)^2 + x^2 = R_p^2 + 2R_p z_t + z_t^2 + x^2 \\ z - z_t &= \frac{x^2}{2R_p} \end{aligned} \quad (D.5)$$

Nous pouvons donc remplacer l'expression approximative de z dans Eq. (D.8). x étant au carré, nous pouvons inverser le signe de l'intégration sur le côté nuit et ainsi :

$$\tau = n_0 \sigma_{mol} \exp\left(-\frac{z_{T_i}}{H_{T_i}}\right) \int_0^\infty \sum_{n,j} \exp\left(-\frac{z_t-z_{T_i}}{H_{j,n}}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2R_p H_{j,n}}\right) dx \quad (D.6)$$

$$\tau = n_0 \sigma_{mol} \exp\left(-\frac{z_{T_i}}{H_{T_i}}\right) \left(\exp\left(-\frac{z_t-z_{T_i}}{H_j}\right) \sqrt{\frac{\pi R_p H_j}{2}} + \exp\left(-\frac{z_t-z_{T_i}}{H_n}\right) \sqrt{\frac{\pi R_p H_n}{2}} \right) \quad (D.7)$$

$$\tau = n_0 \sigma_{mol} \left(\exp\left(-\frac{z_t H_{T_i} - z_{T_i} (H_{T_i} - H_j)}{H_j H_{T_i}}\right) \sqrt{\frac{\pi R_p H_j}{2}} + \exp\left(-\frac{z_t H_{T_i} - z_{T_i} (H_{T_i} - H_n)}{H_n H_{T_i}}\right) \sqrt{\frac{\pi R_p H_n}{2}} \right) \quad (D.8)$$

$$\tau = n_0 \sigma_{mol} \exp\left(-\frac{H_{T_i} z_t - (H_{T_i} - H_j) z_{T_i}}{H_j H_{T_i}}\right) \sqrt{\frac{\pi R_p H_j}{2}} \left(1 + \exp\left(-\frac{z_t (H_j - H_n) - z_{T_i} (H_j - H_n)}{H_n H_j}\right) \right) \sqrt{\frac{\pi R_p H_n}{2}} \quad (D.9)$$

$$\tau = \tau_j \left(1 + \exp\left(-\frac{z_t (H_j - H_n) - z_{T_i} (H_j - H_n)}{H_n H_j}\right) \right) \sqrt{\frac{\pi R_p H_n}{2}} \quad (D.10)$$

$$(D.11)$$

Nous avons noté τ_j la profondeur optique de la moitié jour. En l'absence de la couche isotherme, et donc avec $z_T = 0$, Eq. (D.8) se simplifie comme :

$$\tau = n_0 \sigma_{mol} \left(\exp\left(-\frac{z_t}{H_j}\right) \sqrt{\frac{\pi R_p H_j}{2}} + \exp\left(-\frac{z_t}{H_n}\right) \sqrt{\frac{\pi R_p H_n}{2}} \right) \quad (D.12)$$

$$\tau = n_0 \sigma_{mol} \exp\left(-\frac{z_t}{H_j}\right) \sqrt{\frac{\pi R_p H_j}{2}} \left(1 + \exp\left(-\frac{z_t (H_n - H_j)}{H_n H_j}\right) \right) \sqrt{\frac{H_n}{H_j}} \quad (D.13)$$

$$\tau = \tau_j \left(1 + \exp\left(-\frac{z_t (H_j - H_n)}{H_n H_j}\right) \right) \sqrt{\frac{H_n}{H_j}} \quad (D.14)$$

$$\tau = \tau_j \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{z_t (H_j - H_n)}{H_n H_j}\right) \right) \sqrt{\frac{H_n}{H_j}} \quad (D.15)$$

D.1.2 $z_t < z_{T_i}$

Dans le cas où $z_t < z_{T_i}$, nous devons tenir compte de la partie traversée par les rayons au sein de l'isotherme :

$$\begin{aligned} \tau = n_0 \sigma_{mol} & \left[\exp\left(-\frac{z_{T_i}}{H_{T_i}}\right) \int_{\sqrt{2(z_{T_i}-z_t)R_p}}^{\infty} \sum_{n,j} \exp\left(-\frac{z_t - z_{T_i}}{H_{j,n}}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2R_p H_{j,n}}\right) dx \right] \\ & + n_0 \sigma_{mol} \left[\exp\left(-\frac{z_t}{H_{T_i}}\right) \int_{-\sqrt{2(z_{T_i}-z_t)R_p}}^{\sqrt{2(z_{T_i}-z_t)R_p}} \exp\left(-\frac{x^2}{2R_p H_{T_i}}\right) dx \right] \end{aligned} \quad (D.16)$$

Nous pouvons décomposer les intégrales afin de rendre plus visible l'influence de cette couche isotherme sur le l'identité spectroscopique du rayon échantillon :

$$\begin{aligned} \tau = n_0 \sigma_{mol} & \left[\exp\left(-\frac{z_{T_i}}{H_{T_i}}\right) \int_0^{\infty} \sum_{n,j} \exp\left(-\frac{z_t - z_{T_i}}{H_{j,n}}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2R_p H_{j,n}}\right) dx \right] \\ & - n_0 \sigma_{mol} \left[\exp\left(-\frac{z_{T_i}}{H_{T_i}}\right) \int_0^{\sqrt{2(z_{T_i}-z_t)R_p}} \sum_{n,j} \exp\left(-\frac{z_t - z_{T_i}}{H_{j,n}}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2R_p H_{j,n}}\right) dx \right] \\ & + 2n_0 \sigma_{mol} \left[\exp\left(-\frac{z_t}{H_{T_i}}\right) \int_0^{\sqrt{2(z_{T_i}-z_t)R_p}} \exp\left(-\frac{x^2}{2R_p H_{T_i}}\right) dx \right] \end{aligned} \quad (D.17)$$

$$\begin{aligned} \tau = \tau_{z_t > z_{T_i}} - n_0 \sigma_{mol} & \left[\exp\left(-\frac{z_{T_i}}{H_{T_i}}\right) \int_0^{\sqrt{2(z_{T_i}-z_t)R_p}} \sum_{n,j} \exp\left(-\frac{z_t - z_{T_i}}{H_{j,n}}\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2R_p H_{j,n}}\right) dx \right] \\ & + 2n_0 \sigma_{mol} \left[\exp\left(-\frac{z_t}{H_{T_i}}\right) \int_0^{\sqrt{2(z_{T_i}-z_t)R_p}} \exp\left(-\frac{x^2}{2R_p H_{T_i}}\right) dx \right] \end{aligned} \quad (D.18)$$

Dans le cas où la température de la couche isotherme s'identifie à celle du côté jour, nous pouvons simplifier l'expression ci-dessus comme :

$$\begin{aligned} \tau = \tau_{z_t > z_{T_i}} - n_0 \sigma_{mol} & \left[\exp\left(-\frac{z_t H_{T_i} - z_{T_i} (H_{T_i} - H_n)}{H_{T_i} H_n}\right) \int_0^{\sqrt{2(z_{T_i}-z_t)R_p}} \exp\left(-\frac{x^2}{2R_p H_n}\right) dx \right] \\ & + n_0 \sigma_{mol} \left[\exp\left(-\frac{z_t}{H_{T_i}}\right) \int_0^{\sqrt{2(z_{T_i}-z_t)R_p}} \exp\left(-\frac{x^2}{2R_p H_{T_i}}\right) dx \right] \end{aligned} \quad (D.19)$$

Dans ce cas de figure, tout se passe comme si le côté jour s'était enfoncé dans le côté nuit, réduisant significativement son impact sur la profondeur optique.

D.1.3 Illustration avec les atmosphères champignons de Chapitre 5

Les figures Figure D.1 et Figure D.2 correspondent aux résultats analytiques obtenus à partir des équations Eq. (D.8), Eq. (D.15) et Eq. (D.18) pour les atmosphères étudiées dans le chapitre Chapitre 5. Nous avons considéré 6 niveaux compatibles avec les spectres que nous avons obtenu et dans chaque cas, nous proposons le rapport entre la contribution nuit et la contribution jour à la profondeur optique totale. À gauche sont traitées les atmosphères à colonnes isothermes, et donc ne présentant pas de couche isotherme, et à droite celles à deux températures, avec une couche isotherme à la même température que le côté jour. Nous avons fait varier la hauteur d'échelle entre 70 km et 570 km et nous n'avons illustré que les résultats obtenus avec une exoplanète de type GJ 1214 b.

238 Calcul analytique des profondeurs optiques pour des exoplanètes à gradient de température Jour/Nuit

Lorsque le niveau sondé est compris dans la couche isotherme, nous avons représenté le rapport entre la contribution du côté nuit et la somme de la contribution du côté jour et de l'isotherme. En effet, leurs températures s'identifiant, ils portent la même signature spectroscopique. Une valeur très faible de ce rapport, et ce, quelle que soit la hauteur d'échelle du côté nuit, indique que lorsque le niveau est trop bas, et donc trop envahi par l'isotherme, le côté nuit est totalement écranté. Contrairement au cas d'une profondeur optique plus grande que la moitié jour grâce à une contribution nuit non négligeable qui altère la signature spectroscopique (en ajoutant une dépendance en T et en λ de la section efficace), son augmentation via la contribution isotherme renforce la signature du côté jour, et les algorithmes de traitement du signal interprètent différemment ces deux situations :

- **Dans la première** : comme le comportement avec la température de la section efficace est différent pour chaque longueur d'onde, l'algorithme perçoit la mixité de température et tente de chercher un compromis entre la cohérence spectroscopique et les aspects atmosphériques (hauteur d'échelle locale). Il trouvera donc une température plus faible que celle du côté jour.
- **Dans la deuxième** : comme les comportements des sections efficaces sont identiques, tout se passe comme si seul le côté jour existait. L'algorithme réagit en réévaluant sa compensation par le rayon planétaire. A terme, il retrouve une atmosphère isotherme, à la température du côté jour et aux bonnes dimensions.

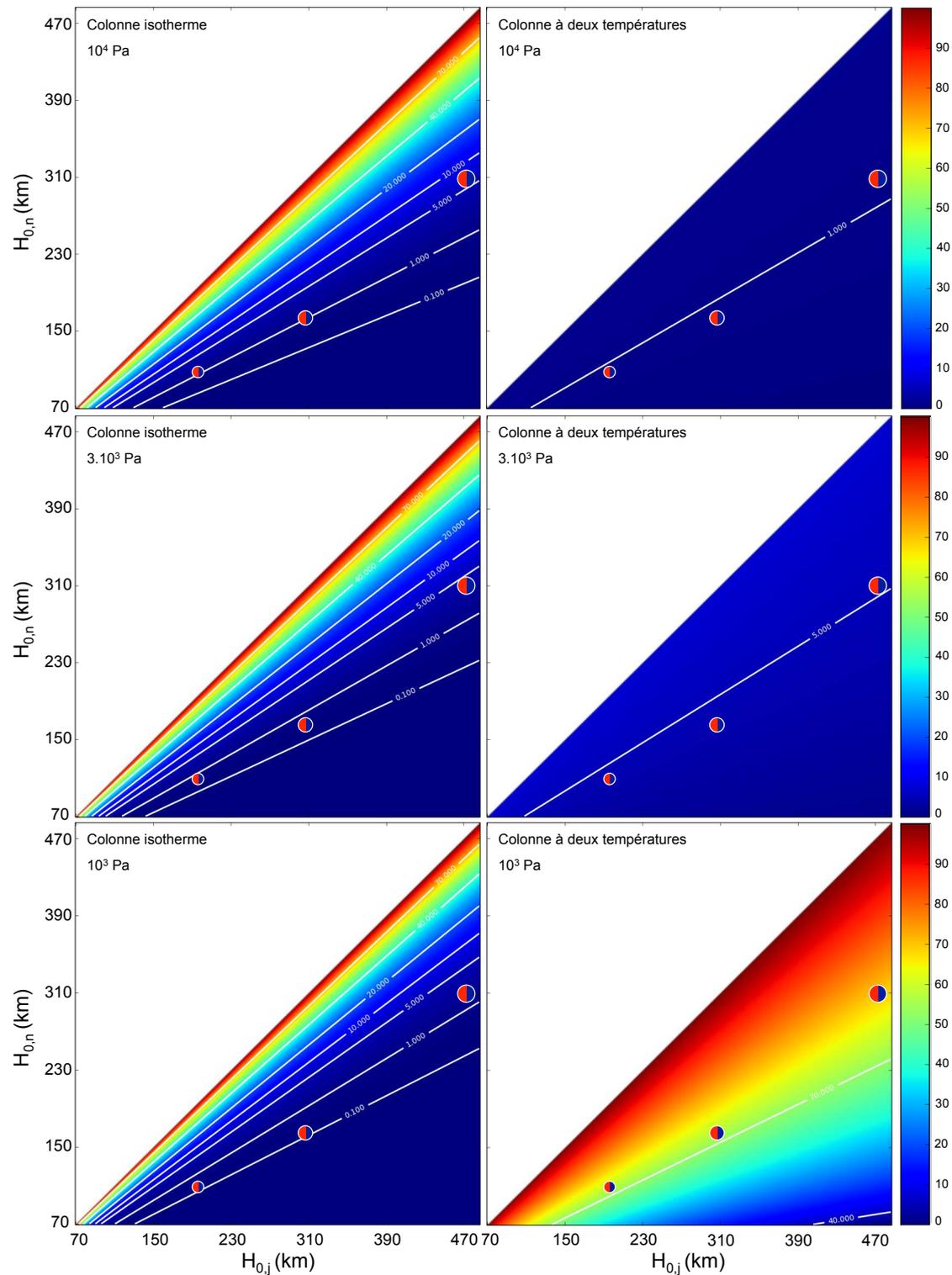


Figure D.1: Évaluation de la contribution chemin optique côté nuit par rapport au chemin optique côté jour. À gauche pour des atmosphères isothermes, et à droite pour des atmosphères hétérogènes. Cette évaluation est représentée en fonction de la hauteur d'échelle jour H_j et de la hauteur d'échelle nuit H_n . Nous l'avons effectué pour 6 niveaux de pression : 2 à des pressions élevées (10^4 Pa et 3.10^3 Pa), 1 au niveau de la pression limite de la couche isotherme (10^3 Pa) et 3 en dessous de cette interface (3.10^2 Pa, 10^2 Pa et 10^1 Pa). Sont représentées par des cercles bicolores les atmosphères synthétiques de GJ 1214 b des 3 doublets 300 - 650 K, 500 - 1000 K et 1000 - 1500 K dans le cas où $\beta = 0^\circ$.

240 Calcul analytique des profondeurs optiques pour des exoplanètes à gradient de température
Jour/Nuit

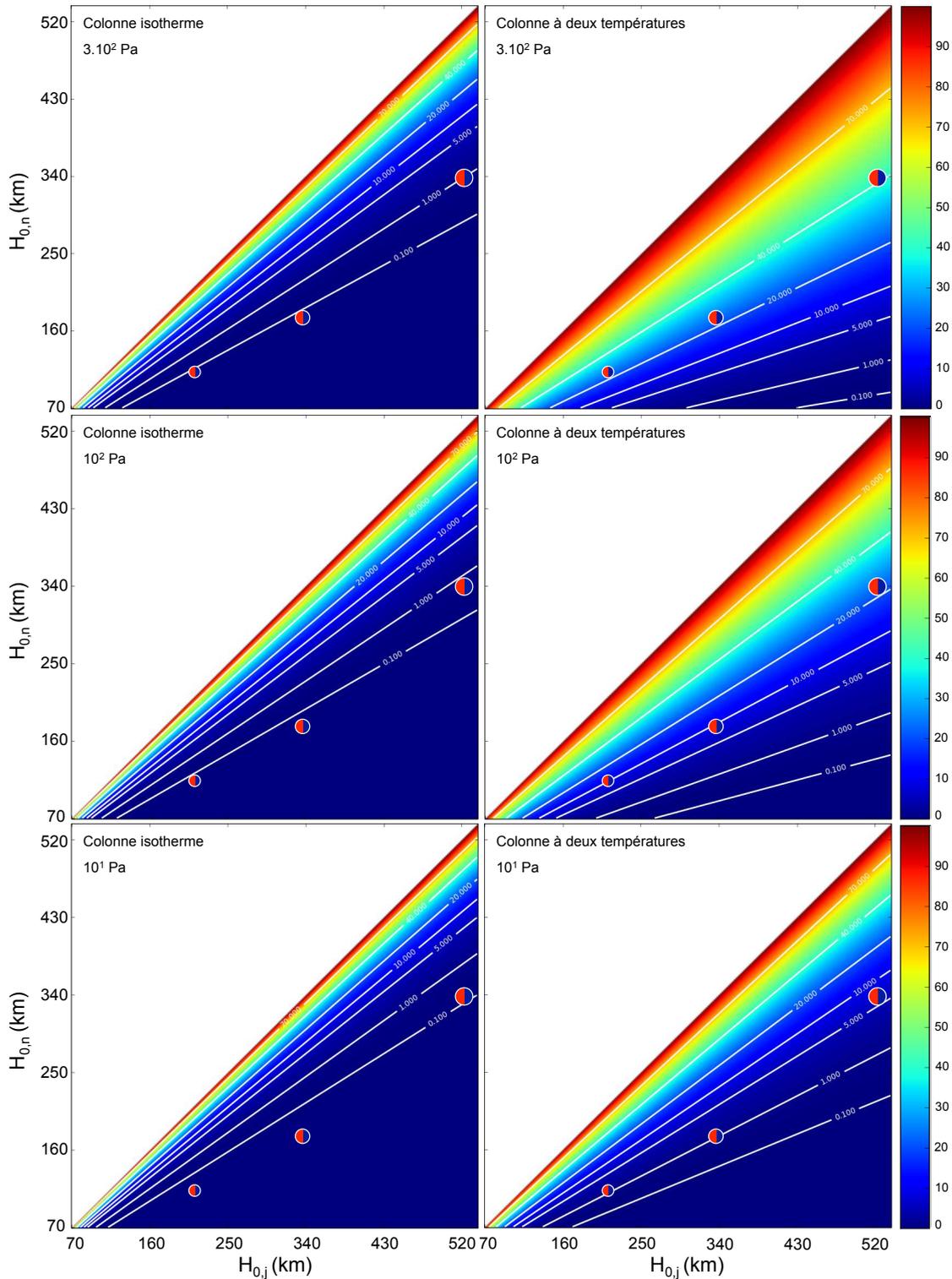


Figure D.2: Evaluation de la contribution chemin optique côté nuit par rapport au chemin optique côté jour. À gauche pour des atmosphères isothermes, et à droite pour des atmosphères hétérogènes. Cette évaluation est représentée en fonction de la hauteur d'échelle jour H_j et de la hauteur d'échelle nuit H_n . Nous l'avons effectué pour 6 niveaux de pression : 2 à des pressions élevées (10^4 Pa et $3 \cdot 10^3$ Pa), 1 au niveau de la pression limite de la couche isotherme (10^3 Pa) et 3 en dessous de cette interface ($3 \cdot 10^2$ Pa, 10^2 Pa et 10^1 Pa). Sont représentées par des cercles bicolores les atmosphères synthétiques de GJ 1214 b des 3 doublets 300 - 650 K, 500 - 1000 K et 1000 - 1500 K dans le cas où $\beta = 0^\circ$.

Appendix E

Article et collaborations ayant fait l'objet d'une publication

Effects of a fully 3D atmospheric structure on exoplanet transmission spectra: retrieval biases due to day-night temperature gradients

A. Caldas¹, J. Leconte¹, F. Selsis¹, I.P. Waldmann², P. Bordé¹, M. Rocchetto², and B. Charnay³

¹ Laboratoire d'astrophysique de Bordeaux, Univ. Bordeaux, CNRS, B18N, allée Geoffroy Saint-Hilaire, 33615 Pessac, France

² Department of Physics and Astronomy, University College London (UCL), United Kingdom

³ LESIA, Observatoire de Paris, PSL Research University, CNRS, Sorbonne Université, Univ. Paris Diderot, Sorbonne Paris Cité, 92195, Meudon, France

September 27, 2018

ABSTRACT

Transmission spectroscopy provides us with information on the atmospheric properties at the limb, which is often intuitively assumed to be a narrow annulus around the planet. Consequently, the few recent studies on the effect of atmospheric horizontal heterogeneities on transmission spectra have used approaches sensitive to variations *along* the limb only. Here we demonstrate that the region probed in transmission – the limb – actually extends significantly toward the day and night sides of the planet. Consequently we show that the strong day-night thermal and compositional gradients expected on synchronous exoplanets create sufficient heterogeneities *across* the limb to result in important systematic effects on the spectrum and bias its interpretation. To quantify these effects, we developed a 3D radiative transfer model able to generate transmission spectra of atmospheres based on 3D atmospheric structures, whether they come from a Global Climate Model or more parametrized models. We first apply this tool to a simulation of the atmosphere of GJ 1214 b to produce synthetic JWST observations and show that producing a spectrum using only atmospheric columns at the terminator results in errors greater than expected noise. This demonstrates the necessity of a real 3D approach to model data for such precise observatories. Second, we investigate how day-night temperature gradients cause a systematic bias in retrieval analysis performed with 1D forward models. For that purpose we synthesize a large set of forward spectra for prototypical HD 209458 b and GJ 1214 b type planets varying the temperatures of the day and night sides as well as the width of the transition region. We then perform typical retrieval analyses and compare the retrieved parameters to the *ground truth* of the input model. This study reveals systematic biases on the retrieved temperature (found to be higher than the terminator temperature) and absorber abundances. This is due to the fact that the hotter dayside is more extended vertically and screens the nightside—a result of the nonlinear properties of atmospheric transmission. These biases will be difficult to detect as the 1D profiles used in the retrieval procedure are found to provide an excellent match to the observed spectra based on standard fitting criteria (χ^2 , posterior distributions). This fact needs to be kept in mind when interpreting current and future data.

Key words. exoplanet, spectroscopy, radiative transfer, GCM

1. Introduction

1.1. Biases in the analysis of transmission spectra of tridimensional planets

With the first spectroscopic observations of exoplanets, we are now able to study planetary atmospheres beyond our solar system. In recent years, spectroscopic observations have seen tremendous developments, and the coming years are even more promising, particularly because of the launch of the James Webb Space Telescope (JWST; [Beichman et al. 2014](#)) and the dedicated ARIEL mission ([Tinetti et al. 2017](#)).

One of the most common method to interpret atmospheric spectra is based on inverse atmospheric retrieval modelling ([Madhusudhan 2018](#)). However, because of the complex thermal structure of the atmosphere and the numerous gases to retrieve (with their possibly complex spatial distribution) the number of parameters to handle can render the inversion computational cost prohibitive—that is if there are enough data to have a well-constrained problem to start with. As a result, retrieval al-

gorithm are required to make drastic assumptions on the forward model to render the problem tractable.

The problem is that when these assumptions do not hold to a sufficient degree in the observed atmosphere, that creates a systematic bias that can lead the retrieval algorithm far from meaningful solutions. Identifying and alleviating these biases is thus a crucial goal to prepare for the next generation of precision observatories, and there have been several attempts in this direction. For example, the often made assumption of uniform mixing ratio in the atmosphere led [Evans et al. \(2017\)](#) to retrieve a 100-1000× solar VO/H₂O ratio in the atmosphere of WASP-121 b. But [Parmentier et al. \(2018\)](#) showed that accounting for the chemical dissociation of some species at the hottest altitudes allowed them to understand the data with solar abundances. [Rocchetto et al. \(2016\)](#) also thoroughly quantified the impact of assuming a vertically isothermal atmosphere.

Yet, all current retrieval algorithms are still fundamentally limited by the assumption of a spherically symmetric atmo-

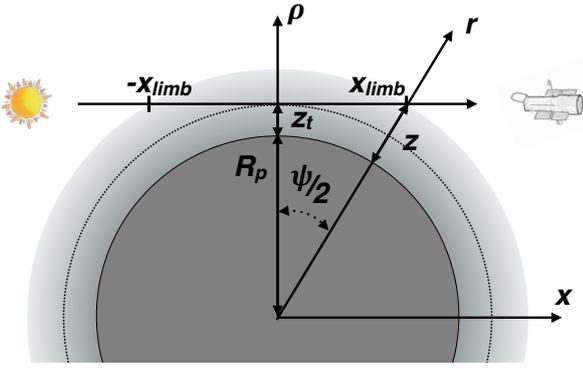


Fig. 1. Schematic of the geometry of a light ray crossing the atmosphere. The inner circle is the arbitrary reference surface of the planet of radius R_p . The lighter grey region is the atmosphere. The distance from the center of the planet is $r = R_p + z$. A light ray is defined by its distance of closest approach to the planet's center, ρ , and the corresponding tangential altitude $z_t = \rho - R_p$. The direction of the light ray defines the x direction. As we further discuss the extent of the limb along the ray, we introduce x_{limb} so that the absorption outside the $[-x_{\text{limb}}, x_{\text{limb}}]$ segment is negligible in determining the transit radius, and the corresponding limb opening angle ψ .

sphere: they use one-dimensional forward models to constraint spectra and atmospheric parameters of three-dimensional objects for which we expect heterogeneities. Such an approach is bound to create counter-intuitive biases that we need to quantify. With that in mind, Feng et al. (2016) investigated how the non-uniform flux emitted by the planet could actually create a false positive signal for methane in emission. In the same vein, Blečić et al. (2017) used the dayside emission spectrum computed with a post-processed 3D Global Climate Model (GCM) to identify the region effectively probed by the retrieval of secondary eclipse data.

On the transmission spectroscopy side, the study of the horizontal atmospheric heterogeneities have focused on the effect of clouds, with Line & Parmentier (2016) who have showed that the presence of clouds on parts of the limb only could mimic a high mean molecular weight atmosphere. Yet, this study produced their forward spectra by simply averaging two 1D models so that only a limited kind of heterogeneities could be investigated. To go further Charnay et al. (2015) and Lines et al. (2018), for example, have produced transit spectra from 3D atmospheric simulations. However, because of the difficult geometry, they still rely on a 1D radiative transfer transmission code that is either fed an average limb profile from a 3D simulation or that performs spectra of all the columns at the terminator of the model before averaging. Even if the second approach – that we will hereafter call *limb-averaged* or (1+1)D method – does capture the spatial variations of the atmosphere *along* the terminator, it completely neglects horizontal variations *across* it. Indeed, as the ray goes from the day side to the night side before coming to the observer, it crosses one of the most steeply changing region of the atmosphere: the transition from day to night side. The effect of such a thermo-compositional transition within the limb on retrieved parameters is unknown at present. Indeed, to our knowledge, only Fortney et al. (2010) developed a fully consistent transmission model able to predict such effects. However, these authors have not tried to retrieve physical parameters from their forward spectra.

1.2. How wide can the limb be: a simple estimate

The day-night transition would not be a problem if the region probed in transmission were infinitely thin. We would just see a slice of the atmosphere. But in fact, and quite counter-intuitively, the width of this region – that will be our definition of the limb – is much larger on some planets that is generally expected. Therefore, the transit spectrum encodes a much wider diversity of temperatures and compositions.

Although the effect of this larger extent of the limb will be demonstrated *a posteriori* by the results of our 3D transit model, let us here try to give simple arguments to estimate how different planets can be affected. In other words, how wide can we expect the limb to be on any given planet.

Of course, the problem in providing such a simple estimate is that the region that will contribute to the transit spectrum does not only depend on the global parameters of the planet, but also on the precise chemical-physical conditions in the atmosphere and how they vary spatially, as will be demonstrated later on. There is thus a certain degree of arbitrariness if one wants to come up with a simple general estimate. For this reason, we will first use a simple geometrical argument. The advantage of this is that it will allow us to identify the key dimensionless parameter controlling the limb width. In Appendix A we derive a model of a more specific case of chemical inhomogeneity and show that the two approaches indeed yield similar results.

Let us consider a light ray passing through the limb as shown in Fig. 1. Estimating the width of the limb comes down to the computation of the maximum distance from the terminator, x_{limb} , at which the atmosphere still affects *measurably* the optical depth along all the observed rays, and especially the deepest one. The choice we have to make here is the highest pressure probed in transit (P_{bot} , that we will assume to define the planetary radius R_p) and the lowest pressure at which the atmosphere is still able to significantly affect the transmission of a given ray (P_{top}). Then the width of the limb is given by

$$\psi \equiv 2 \arccos \left(\frac{R_p}{R_p + z(P_{\text{top}})} \right). \quad (1)$$

Since, in a isothermal atmosphere with a atmospheric scale height at the surface equal to H and a varying gravity, the isometric relation writes

$$z(P_{\text{top}}) - z(P_{\text{bot}}) = H \ln \left(\frac{P_{\text{bot}}}{P_{\text{top}}} \right) \left(\frac{1}{1 - \frac{H}{R_p} \ln \left(\frac{P_{\text{bot}}}{P_{\text{top}}} \right)} \right), \quad (2)$$

we get

$$\psi \equiv 2 \arccos \left(1 - \frac{H}{R_p} \ln \left(\frac{P_{\text{bot}}}{P_{\text{top}}} \right) \right). \quad (3)$$

The first important result is that we see that the important dimensionless quantity in our problem is the ratio of the scale height to the planetary radius. The higher this parameter, the larger the curvature effects in the atmosphere. This parameter will often appear later on. We also directly see that the larger the pressure range probed, the wider the limb. Many models predict that the lowest levels probed in transit are around 100 mb in the visible/near infrared. On the other hand, Kreidberg et al. (2014) have shown that in order to explain the flat spectrum of GJ 1214 b, an opaque aerosol deck is needed as high as 10^{-3} - 10^{-2} mb, showing that absorbers at such altitudes can indeed still affect the transit spectrum.

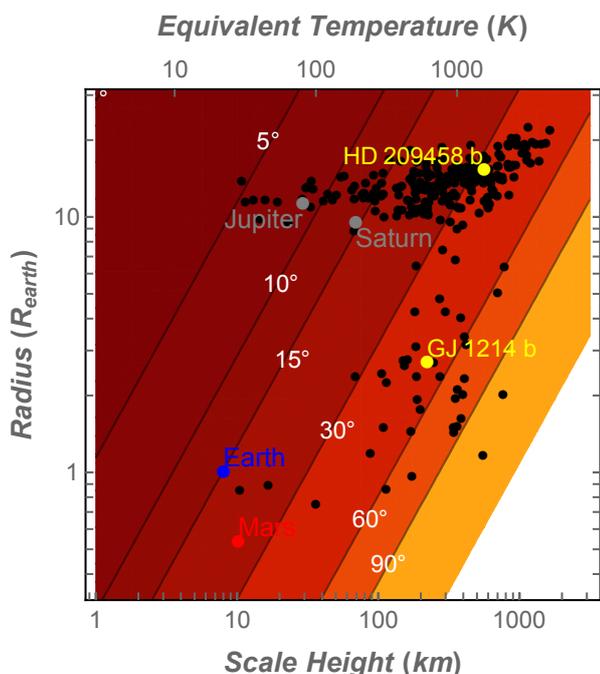


Fig. 2. Simple estimate of the opening angle of the region around the terminator that affects the transmission spectrum (i.e. the limb). The contours give the opening angle in degrees as a function of the planetary radius and the atmospheric scale height of the atmosphere at 10 mb (the variation of gravity with height is accounted for). Black dots are known planets for which the radius and surface gravity are measured. Some key objects are identified. The equivalent temperature is derived from the scale height assuming an atmosphere of hydrogen and helium (solar abundances) and a surface gravity of 10 m/s^2 . For hot, low gravity planets like GJ 1214 b, the limb can cover almost half the surface of the planet!

To get a quantitative idea, Fig. 2 shows the result of Eq. (3) as a function of the planetary radius and scale height of the atmosphere. To have a relatively conservative estimate, we restrained the pressure range to $(P_{\text{bot}}, P_{\text{top}}) = (10 \text{ mb}, 10^{-2} \text{ mb})$. One can see that even for the Earth, the limb region already spans more than ten degrees. For a warm sub-neptune planet like GJ 1214 b, this can be as large as 45° - 50° . In numerical terms, this means that within a typical resolution 3D atmosphere model of this planet, say 128 grid points in longitude for sake of concreteness, a single ray would interact with about 24 consecutive horizontal cells before leaving the planet. From these numbers, it becomes evident that the 1+1D approach, by picking only one out of those 24 cells as representative of the terminator, is a crude approximation to a real transmission spectrum.

1.3. Goals of the study

Our goal is thus to identify the various biases of retrieval methods created by thermal and compositional – including clouds – inhomogeneities in the atmosphere in transmission. To that purpose, we need a transmission spectrum generator able to match the complexity of a real three-dimensional planet. We thus developed a tool able to compute transmission spectra using a parametrized 3D atmospheric structure or the outputs of a 3D atmospheric simulation by a global climate model—namely the LMD Generic model (Wordsworth et al. 2011; Leconte et al. 2013; Charnay et al. 2015). This tool, Pytmosph3R, and its architecture are described in Sect. 2. Then we show an extensive

validation in Sect. 3. Next, Sect. 4 presents a first application of this tool to a simulation of the atmosphere of GJ 1214 b where we demonstrate the necessity of a real 3D approach to model data for such precise observatories. Finally, we investigate how day-night temperature gradients expected for exoplanets cause a systematic bias in retrieval analysis of real data performed with 1D forward models (Sect. 5).

2. Presentation of Pytmosph3R

Pytmosph3R is designed to compute transmission spectra based on 3D atmospheric simulations performed with the LMDZ generic global climate model (ref). It produces transmittance maps of the atmospheric limb at all wavelength that can then be spatially integrated to yield the transmission spectrum. The code is entirely written in python.

In this section we present the various modules of the code:

- The geometrical framework used to map the atmospheric structure from the spherical coordinates used by the GCM onto cylindrical coordinates that are more suitable to follow photons crossing the atmosphere,
- The two algorithms that can be used for the calculation of the slant optical path – a discretized and an integral method,
- The various sources of opacity included in our radiative transfer model,
- The spatial integration to produce spectra.

2.1. Definition of coordinate systems

2.1.1. The spherical grid used in atmospheric simulations

Typical 3D atmospheric simulations – LMDZ included – provide state variables such as temperature and mixing ratios of various absorbers/scatterers on a longitude/latitude/pressure grid. Although pressure is convenient variable to compute atmospheric motions, transit spectroscopy is fundamentally about knowing the physical area of the opaque region of the atmosphere. We thus first have to interpolate the outputs of the climate model on a spherical (λ, φ, z) grid, where λ is the longitude, φ is the latitude, and z the altitude. When needed, we will also refer to $r \equiv R_p + z$ the distance to the planet center, or α the colatitude.

The longitude/latitude grid is evenly spaced and follows the native grid of the atmospheric model. The altitude grid is also evenly spaced. However, as will be discussed in detail in Sect. 3, the resolution of this grid can, and usually should, be higher than the native resolution of the input simulation as it will set the precision of the output spectrum. We find that a good compromise between computation time and accuracy is reached for a vertical resolution of about a tenth of the scale height. Let n_z , n_λ , and n_φ be the number of grid cells in each of the three dimensions.

The top should also be chosen high enough for the atmosphere to be transparent there. This will be quantified hereafter. If this altitude is above the top of the input simulation, the code extrapolates the atmosphere above this top assuming hydrostatic equilibrium and a fixed temperature (or a profile that the user needs to define).

Then, we integrate the hydrostatic equilibrium equation within each column of the model to compute the values of all the necessary variables from the climate model (e.g. temperature and mixing ratios) on this new altitude grid. During this integration, the variation of gravity with altitude is taken into account (see Eq. (7)), an effect that proved to be crucial to reach the precision needed.

2.1.2. The cylindrical grid used for the radiative transfer

As long as the light from the star propagates in straight lines, cylindrical coordinates provide the most natural set to treat transit geometry. Indeed, due to the great distance between the observer and the planet, light rays follow parallel paths so that the radiative transfer can be solved within a hollow cylinder that is tangent to the planetary surface at the bottom and stops at the top of the modeled atmosphere.

We thus define a cylindrical grid whose coordinates will be denoted (ρ, θ, x) where the x axis is the line between the center of the planet and the observer (the line of sight), with x increasing toward the observer (see Fig. 3). The $x=0$ plane corresponds to the plane perpendicular to the line of sight passing through the center of the planet (hereafter called the plane of the sky). ρ is the distance from the x axis in the plane of the sky, and θ is the azimuth, defined here as the angle on the limb measured from a reference direction (see below).

Hereafter we will refer to a " (ρ, θ) -ray" as the ray of light that crosses the limb at those coordinates. The transmittance map of the atmosphere is simply constructed by computing the chord optical depth of the ray along the x direction for every (ρ, θ) . From this, and assuming a luminosity/spectral distribution (limb-darkening, spots) over the stellar disk as well as a transit trajectory, we can produce spectral transit lightcurves.

The resolution of the cylindrical grid is based on that of the spherical one, which has a finer altitude resolution compared to the GCM: $\Delta\rho=\Delta z$ and $\Delta\theta=\Delta\varphi$. There is no benefit in increasing the resolution in θ , GCM cells being considered uniform horizontally. To test the impact of shooting our rays through the middle of our layers or at their interfaces, the ρ grid can be shifted relative to the r grid using the ω parameter ($0 \leq \omega < 1$) so that $\rho = r + \omega \Delta z$. To speed up computation, (ρ, θ) -rays will eventually be divided irregularly along the x direction to follow closely where they go from one spherical cell to another, as explained in 2.2 (see also Fig. 3).

2.1.3. Orientation of the planet and correspondence between coordinate systems

The cylindrical coordinate system needs to be properly oriented with respect to the spherical grid. For this, we require only to know the longitude and latitude of the observer in the spherical coordinates, $(\lambda_{\text{obs}}, \varphi_{\text{obs}})$, at the time of observation (or alternatively the colatitude α_{obs})¹. The unit vector pointing toward the observer, $\hat{\mathbf{u}}_{\text{obs}}$, then defines the direction of the x axis of our cylindrical coordinates.

The last thing that we need to define is the arbitrary reference direction for the azimuth. For this we choose the projection of the rotation axis of the planet onto the plane of the sky.

With these two definitions, there is a unique relationship between the spherical and cylindrical coordinates for a given point. The translation from one system to the other with an arbitrary orientation however requires to solve a set of nonlinear equations that is detailed in Appendix B.

2.2. Dividing (ρ, θ) -rays into subpaths

Along each (ρ, θ) -ray (identified by the indices i_ρ and i_θ) we locate all the intersections with relevant interfaces of the spherical-

¹ In the simple case of a planet with a null obliquity, $\varphi_{\text{obs}} = |\pi/2 - i|$, where i is the orbital inclination with respect to plane of the sky. The sign depends on the convention for i . Furthermore, at conjunction, $\lambda_{\text{obs}} = \lambda_\star + \pi$, where λ_\star is the substellar longitude.

grid and divide the ray into segments of irregular lengths, each of them belonging to a different cell. All quantities used to calculate the optical path – pressure and density excepted – are considered constant within each segment/cell. The pressure/density can be either kept constant within a segment/cell or assumed to follow hydrostatic equilibrium.

In practice we first divide each (ρ, θ) -ray with a constant Δx step, calculate the spherical coordinates of the resulting discrete points and give them the three indices $(i_r, i_\lambda, i_\varphi)$ of the spherical cell they belong to (see Appendix B). The step Δx is chosen small enough ($< \Delta z$) so that two successive points can only belong to either the same cell or to two adjacent cells (i.e., cells separated by a facet, an edge, or a corner). One, two, or all three indices $(i_r, i_\lambda, i_\varphi)$ can be incremented between two successive points.

When a change of index occurs between two points, the code determines analytically the position of the intersection(s) between the (ρ, θ) -ray and the surface(s) separating cells. This comes down to solving for the unknown position x_{int} along the ray knowing ρ, θ , and the equation of the surface(s) crossed. The equations to be solved for the three type of intersections (depending on the varying index) are detailed in Appendix C

From these positions, the length of the subpaths belonging to individual cells can be measured. When more than one index is incremented between two points (near an edge or a corner, which implies that a third cell has been crossed) and once the intersections have been located, their x -position are sorted in increasing order so that subpaths can be measured and attributed to specific cells.

2.3. Optical depth

At this point, all the (ρ, θ) -rays are now subdivided into $N_x(\rho, \theta)$ segments of length $\{\Delta x_i(\rho, \theta)\}_{i=1, N_x}$. The number and length of these segments of course changes for each (ρ, θ) -rays depending on the number of intersections found in the previous step. Each of these segments has been assigned to a given cell of the spherical grid so that we know all the quantities describing the physical state of the atmosphere in the i -th segment: temperature (T_i), volume mixing ratio of the j -th of the N_{spe} species ($\chi_{j,i}$), and mass mixing ratio of the k -th of the N_{con} species of condensed particles ($q_{k,i}$).

The goal is now to compute the optical depth (hence the transmittance) of the atmosphere for each (ρ, θ) which is given by

$$\tau(\rho, \theta) = \sum_i^{N_x} \Delta\tau_i(\rho, \theta), \quad (4)$$

where $\Delta\tau_i$ is the optical depth of a given segment.

Pytmosph3R can calculate optical depth in two ways. Pressure (and density) can be either considered constant within a cell, hereafter called the *discretized* method, or it can be integrated along the optical path assuming a hydrostatic vertical structure within the cell, the so-called *semi-integral* method. In both cases, we assume that cross-sections are constant along the given sub-path to spare considerable CPU time. This approximation yields negligible errors as long as the simulation is sufficiently resolved in the vertical.

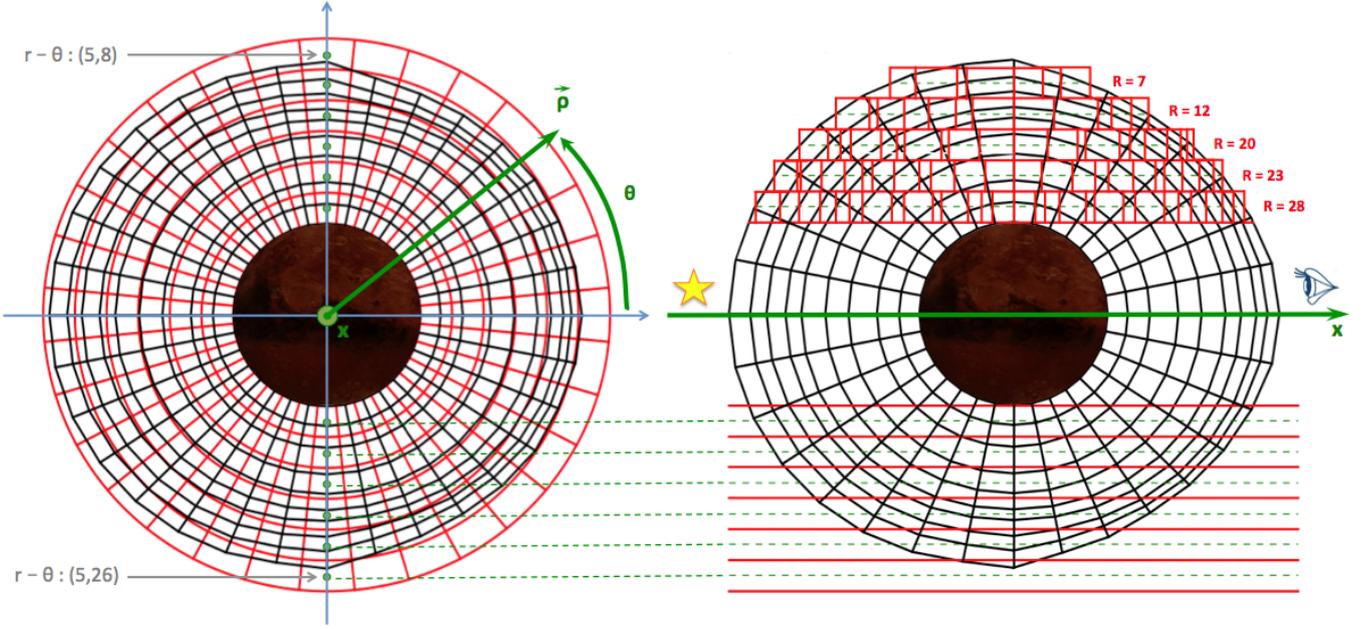


Fig. 3. Schematic showing the cylindrical grid (in green). The left panel shows the grid as seen from the observer. The planet moves to the right, which defines the $\theta = 0$ axis. The pink dots are examples of (ρ, θ) -rays (To follow the python convention used by the code, the indices given start at 0). The native GCM grid at the terminator of an example simulation is shown in black to illustrate its non-uniform vertical spacing. The right panel shows this from the side where we can follow light rays (dashed lines) as they go horizontally from left to right. The red boxes illustrate how the x -discretization is computed for each rays to follow closely where it goes from one cell of the spherical grid to another.

2.3.1. Discretized calculation of the optical depth

With the *discretized* method, pressure and density are considered constant so that the optical depth of a segment simply reduces to

$$\Delta\tau_i = \left(\frac{P_i}{k_B T_i} \sum_j^{N_{\text{spe}}} \chi_{j,i} (\sigma_{\text{mol},j} + \sigma_{\text{sca},j} + \sigma_{\text{con},j}) + \sum_k^{N_{\text{con}}} k_{\text{mie},k} \right) \Delta x_i \quad (5)$$

where σ_{mol} , σ_{sca} , and σ_{con} are the cross-sections for the molecular, Rayleigh scattering, and continuum absorptions. k_{mie} is the absorption coefficient associated to the Mie scattering by aerosols. The parametrization used for these absorptions is discussed hereafter.

2.3.2. Integral method

With the *integral* method, we know assume that the pressure follows the hydrostatic law within a segment, thus varying with altitude. The optical depth of a segment for any contribution is then given by

$$\Delta\tau_i = \int_{x_i}^{x_i+\Delta x_i} \frac{P(x)}{k_B T_i} \chi \sigma dx = \frac{\chi \sigma}{k_B T_i} \int_{x_i}^{x_i+\Delta x_i} P(x) dx, \quad (6)$$

where x_i is the positions of the beginning of the segment. Let us call z_i the corresponding altitude. The simplification comes from the fact that the altitude profile of the pressure within an isothermal atmosphere is analytical even if the gravity varies with height. It is given by

$$\ln\left(\frac{P(z)}{P(z_1)}\right) = \int_{z_1}^z \frac{-Mg(z_1)}{RT} \frac{dz}{\left(1 + \frac{z-z_1}{R_p+z_1}\right)^2} = -\frac{Mg(z_1)}{RT} \left(\frac{z-z_1}{1 + \frac{z-z_1}{R_p+z_1}} \right), \quad (7)$$

where M is the molar mass of the gas, R the universal gas constant, and $g(z)$ the gravity at a given altitude. This entails

$$\begin{aligned} \int P(z(x)) dx &= \int P(z_1) \exp\left[-\frac{Mg(z_1)}{RT_i} \left(\frac{z-z_1}{1 + \frac{z-z_1}{R_p+z_1}} \right)\right] dx \\ &= \int P(z_1) \exp\left[-\frac{Mg(z_1)}{RT_i} \left(\frac{z-z_1}{1 + \frac{z-z_1}{R_p+z_1}} \right)\right] \times \\ &\quad \times \frac{(R_p+z)}{\sqrt{(R_p+z)^2 - \rho^2}} dz, \quad (8) \end{aligned}$$

where the last integration is carried out numerically between the lowest and the highest point of the segment. The increased accuracy of this method comes from two reasons: i) the variation of gravity with height is built in, and ii) more importantly the exponential variation of pressure is fully accounted for. This explains why a much lower number of vertical layers are needed with this method to reach numerical convergence.

2.4. Sources of opacity

2.4.1. Molecular lines

Pytmosph3R deals with molecular absorptions in two possible ways: tables of monochromatic cross-sections or correlated- k coefficients (also called k -distribution method; Fu & Liou 1992).

Using k -distributions considerably reduces the computing time but new k -tables must be pre-computed each time one wants to change the atmospheric composition or the resolution of the output spectrum.

Because our code is designed to work with the TauRex retrieval code (Waldmann et al. 2015), we use the same set of high-resolution cross-sections produced by the ExoMol project. This data set is precomputed on a $T - \log P$ grid going from 200 K

to 2800 K every 100 K and from 10^{-3} to 10 bar every 0.3 dex. Pythmosph3R users can either choose linear or *optimal* interpolation in temperature. For the optimal interpolation we follow Hill et al. (2013) who prescribes

$$\sigma_{i,\lambda}(T) = a_{i,\lambda} \exp\left(-\frac{b_{i,\lambda}}{T}\right), \quad (9)$$

where i is the molecular/atomic species index, λ the wavelength, and T the temperature of the cell. The (a, b) scaling factors are given by

$$b_{m,\lambda} = \left(\frac{1}{T_l} - \frac{1}{T_u}\right)^{-1} \ln \frac{\sigma_{i,\lambda}(T_u)}{\sigma_{i,\lambda}(T_l)} \quad (10)$$

$$a_{i,\lambda} = \sigma_{i,\lambda}(T_u) \exp\left(\frac{b_{i,\lambda}}{T_u}\right), \quad (11)$$

where T_u and T_l are upper and lower temperatures respectively. k -distributions can only be interpolated linearly in temperature. Along the pressure coordinate, the interpolation is log-linear.

The effect of using different interpolations schemes has been tested and we find that it does not introduce significant differences.

2.4.2. Continuum absorptions

Our principal source of continuum opacity is due to collision induced absorptions. We account for this process for all the species for which such information is available in the HITRAN database and following the prescriptions of Richard et al. (2011). Furthermore, for specific species such as water vapor, we can add a continuum that is accounting for the truncation of the far wings of the lines and the neglect of many weak lines in some of our sets of cross-sections or correlated- k tables. In such case, the water continuum is added using the CKD model (Clough et al. 1989). We however note that care must be taken to ensure that the molecular opacities used must be computed consistently to do not count some effects twice.

2.4.3. Rayleigh Scattering

Multiple scattering is neglected. The contribution of Rayleigh scattering is thus treated as a simple extinction. The cross-section of any single gas molecule is given by the common formula

$$\sigma_{\text{sca}}(\lambda) = \frac{24\pi^3}{N_{\text{std}}^2 \lambda^4} \left(\frac{n_\lambda^2 - 1}{n_\lambda^2 + 2}\right)^2 F_k(\lambda), \quad (12)$$

where λ is the wavelength (here in m), N_{std} is the number density of a gas under standard conditions, n_λ is wavelength-dependent, real refractive index of the gas and $F_k(\lambda)$ is the King correction factor which accounts for the depolarization. The accuracy of this essential part of the radiative transfer mainly depends of the calculation of refraction indices. We used the most recent data available in the literature. For sake of completeness, we have reviewed the parametrization that we use for H_2 , He, H_2O , N_2 , CO, CO_2 , CH_4 , O_2 and Ar in Appendix D and in Table D.1.

2.4.4. Mie scattering for aerosols

Transmission spectra of transiting exoplanets are affected by clouds and hazes. The LMDZ GCM can include cloud physics and provide the properties and 3D distribution of liquid/solid

condensates and aerosols. Assuming spherical particles with a size similar to or larger than the considered wavelengths, we use Mie scattering formalism compute their extinction factor Q_{ext} and resulting opacities, following the same method as in radiative transfer modules of the GCM (Madeleine et al. 2011). We linearly interpolate the value Q_{ext} on effective radius and wavelength using pre-calculated lookup tables. The absorption coefficient is estimated as

$$k_{\text{mie},k}(\lambda) = \frac{3}{4} \frac{Q_{\text{ext}}(r_{\text{eff}}, \lambda)}{\rho_{\text{con}} r_{\text{eff}}} q_k \rho_{\text{gas}}, \quad (13)$$

where Q_{ext} is the extinction coefficient for the wavelength λ and a given effective radius r_{eff} , q_k and ρ_{con} are the mass mixing ratio and the density of the species considered, and ρ_{gas} the total gas density.

2.5. Generation of transmittance maps and spectra

To generate the global absorption spectrum of the planet, the wavelength-dependent (ρ, θ) map of optical depth is first converted into a transmittance map

$$\mathcal{T}(\rho, \theta, \lambda) = e^{-\tau(\rho, \theta, \lambda)}. \quad (14)$$

In the most general case, the in-transit flux should be computed by convolving this transmittance map with a given surface brightness distribution for the star. However, in the most simple case of a homogeneous stellar disk the effective area of the planet reads

$$\begin{aligned} A_p(\lambda) &= \pi R_p^2 + \sum_{\rho, \theta} (1 - \mathcal{T}(\rho, \theta, \lambda)) S_\rho \\ &= \pi R_p^2 + \sum_{\rho, \theta} (1 - e^{-\tau(\rho, \theta, \lambda)}) S_\rho, \end{aligned} \quad (15)$$

where R_p is the radius of planet (at the bottom of our model atmosphere), $S_\rho = 2\pi(\rho + \Delta\rho/2)\Delta\rho/N_\theta$ the number of θ points, and $\Delta\rho$ the layer thickness. Eventually, the relative dimming of the stellar flux due to the planet is given by

$$\Delta F(\lambda) = \frac{A_p}{\pi R_\star^2} = \left(\frac{R_p}{R_\star}\right)^2 + \sum_{\rho, \theta} \frac{(1 - e^{-\tau(\rho, \theta, \lambda)}) S_\rho}{\pi R_\star^2} \quad (16)$$

where R_\star is the stellar radius. For each monochromatic transit depth, we can determine an effective radius of the planet defined as

$$R_{\text{eff}}(\lambda) = R_\star \sqrt{\Delta F(\lambda)}. \quad (17)$$

One can simulate a realistic light curve by locating precisely the planet transmittance map over the weighted stellar disk at each timestep of the transit. During ingress and egress, where the stellar disk is hidden by a fraction only of the planet, only the elements in front of the stellar surface need to be considered. Then, astrophysical (stellar) noise can be added by simulating a realistic spatial distribution of the star luminosity and its variability during a transit, e.g. by taking into account limb darkening, spots, and granulation (Chiavassa et al. 2017). This model complements other codes able to produce synthetic emission/reflection spectra and light curves from GCM simulations (Selsis et al. 2011; Turbet et al. 2016, 2017).

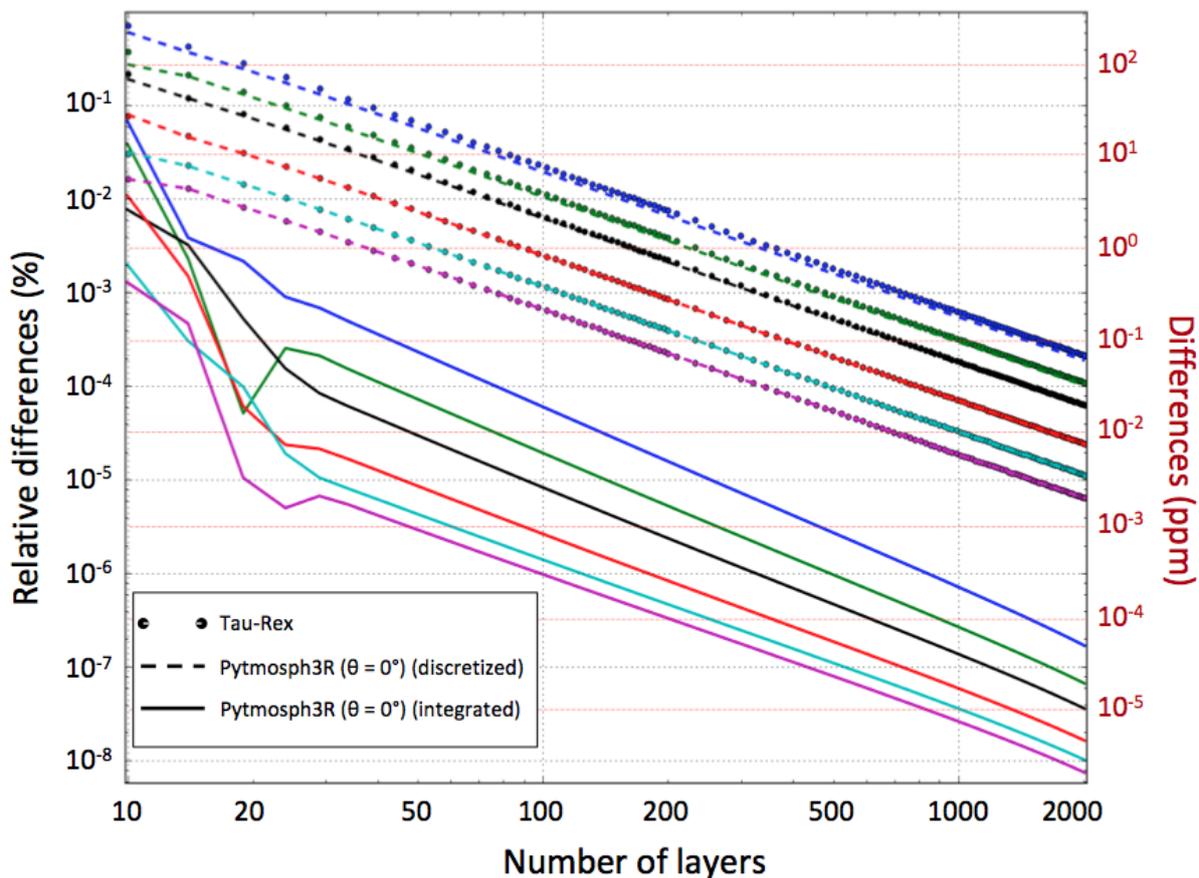


Fig. 4. Relative difference in percents between the transit radius computed for a given model and number of layers and our reference case (Integral method, 50 000 layers). The dots show the results of Tau-Rex, the dashed lines represent Pytmosph3R in its *discretized* version, and the solid lines are for the *integral* version. Results are plotted for 6 representative examples of R_p/H that increase from top to bottom for each set of curves. Blue: 100, GJ 1214b-like hot-Neptune; Green: 180, HD 209458b-like hot-Jupiter; Black: 300, HD 189733b-like hot-Jupiter; Red: 750, Earth-like; Cyan: 1500, Corot 9b-like cold super-Earth; Purple: 2800, Jupiter-like. For Pytmosph3R, we use the results of one sector only ($\theta = 0^\circ$) to keep the computing time reasonable for the most resolved simulations. The axis on the right converts this radius difference into a transit depth difference in a conservative case (i.e. a one Jupiter radius planet in front of a 0.2 solar radius star). To rescale this for any type of planet or star, multiply by $(R_p/R_j)(0.2R_\odot/R_\star)^2$.

3. Model validation

3.1. Validation approach

In this section we validate the different modules of the code: calculation of the vertical structure, 3D geometry of the radiative transfer, integration scheme for the optical depth, interpolation scheme for the opacities, etc. In the absence of another validated code able to produce synthetic transmission spectra from 3D simulations, we decided to compare our code with a hierarchy of 1D models with increasing complexity—from a purely analytical model (Sect. 3.2) to the more realistic forward spectrum generator used in the TauREx retrieval tool (Waldmann et al. 2015; Sect. 3.3).

In each case, the comparison with a given 1D model proceeds as follows: On one hand we generate a spectrum from the 1D model with a given vertical temperature profile (possibly isothermal). On the other hand, we use the same vertical profile to generate a full spherically symmetric-3D structure on our spherical grid. This structure goes through our whole code to generate a spectrum that should, ideally, be the same as the 1D one. Finally, we increase the resolution of our 1D/3D grids until convergence is reached.

It appeared relatively early in our tests that, to numerical precision, our transmittance map were completely insensitive to the azimuth angle, θ , in any spherically symmetric configuration, as it should be. This not completely trivial result shows that our careful way of computing the path length of the ray in each cell does get rid of the singularities – in particular at the poles – of our initial longitude/latitude grid. This also allowed us to test the convergence of the algorithm of vertical integration at very high resolutions. Indeed, when a very large number of layers is used – above ~ 1000 , which is already much larger than what needs to be used in practice to be converged – the computing time for the full 3D code becomes prohibitive. For this reason, in some cases below, the results shown are derived from a sector of the limb only (i.e. a given θ). This approach is made possible by the fact that the numerical differences between the various sectors is negligible.

As expected from our analytical arguments, we find that the most, and in fact almost only, important parameter determining the resolution needed to model a given atmosphere is the ratio of the planetary radius to the scale height (R_p/H): the lower this parameter, the larger the vertical resolution needed. It stems from two reasons. A lower ratio means that i) gravity will vary more significantly in each vertical layer, and ii) curvature effects

will be more pronounced and rays will pass through more atmospheric columns along their path (see Fig. 2). As a result the validation cases we present focus on covering a wide variety of R_p/H .

Because the scale height is not set, but determined from the composition and temperature of the atmosphere and from the surface gravity, if we want to fix R_p/H , one of these parameters will have to vary to compensate. This can sometimes result in a physically inconsistent set of planetary parameters that we deem acceptable in the context of our validation. The compensation parameter is given in each case. The values used for the other parameters are given in Table 1, unless otherwise stated.

As will become clear in the following, our 3D model can reproduce our validation cases to numerical precision. We thus used these tests to further derive some guidelines on the number of layers and the model roof pressure to use in various cases to reach a satisfactory accuracy. To quantify what we call a "satisfactory accuracy", we use the difference on the predicted transit depth between two models and ask that it be significantly smaller than the photon noise that can be expected for the given target in one transit. If one wants a more stringent condition, one can use the expected systematic noise floor for a given instrument (expected to be on the order of a few ppm with JWST, for example).

3.2. Validation with a monochromatic, analytical model at constant gravity

To focus on the radiative transfer basics we first compare the optical depths computed with our model with those given by an analytical solution. For an isothermal, horizontally uniform atmosphere with constant gravity and a scale height $H \ll R_p$, Guillot (2010) provides an analytical formula for the transmission optical depth as a function of the distance to the center of the planet:

$$\tau_{\text{tr}} = \tau_{\perp} \left(\frac{2\pi R_p}{H} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (18)$$

where τ_{tr} is the chord optical depth, τ_{\perp} the vertical optical depth. As described in Appendix A, we use this formula to calculate the planet transit. We then compare the results with those of Pytmosph3R for a wide range of vertical resolution: 50 to more than 10 000 levels. For 1000 levels and more, and as long as the thin atmosphere assumption is respected, the effective absorption radii from both models agree within ~ 1 centimeter (i.e. $\sim 10^{-9}$ relative accuracy).

Table 1. Numerical values for the parameters used in our fiducial validation case.

Planetary Radius	R_p [m]	7×10^7
Surface gravity	g_0 [m^2/s]	8.8
Surface pressure	P_s [Pa]	1×10^6
Top pressure	P_{top} [Pa]	1×10^{-4}
He mass fraction		0.17
Water volume mixing ratio	$\chi_{\text{H}_2\text{O}}$	0.05
Mean molar mass	M_a [kg/mol]	2.7×10^{-3}
Opacity of gray absorber	κ [$\text{m}^2 \cdot \text{kg}^{-1}$]	1×10^{-3}

3.3. Comparison to the Tau-REx forward model

3.3.1. Why benchmarking against the forward model of an atmospheric retrieval tool

As one of our main goals is to be able to perform a retrieval on a spectrum derived from a 3D model as if it were from a real planet, we decided to use the forward model of an existing, and validated, atmospheric retrieval code for our comparison.

The added benefit of this validation approach is that we make sure that in the relevant case of spherically symmetric atmosphere, both our 1D and 3D forward model can produce spectra without any numerical biases—meaning here that the differences between the spectra can always be reduced to be much smaller than the noise that will be prescribed in the retrieval step by choosing a sufficient vertical resolution.

As a result, we know that when we retrieve the properties of an atmosphere generated with our 3D model, the various potential biases in the retrieved parameters are entirely due to the heterogeneities of the atmosphere and not the differences in the numerics.

In our case, we are using Tau-REx, whose forward model is described in more details in Waldmann et al. (2015). For the reasons mentioned above, we decided to use the same philosophy used in Tau-REx in the implementation of many physical processes, in particular concerning the molecular opacities and the Rayleigh scattering. Two notable exceptions are i) the vertical grid and ii) the optical path calculations that will be discussed more specifically in the next section. Let us just mention here that our requirement that our 3D model be as compatible with Tau-REx as possible is the reason why we keep two algorithms for the calculations of the optical depth in the code: the *integral* scheme which is the optimal scheme in terms of convergence and should be used in general, and the *discretized* one that always gives a result closer to Tau-REx when the same number of layers are used in both models.

3.3.2. Validation for a isothermal, gray atmosphere with varying gravity

We now assume an isothermal atmosphere with an altitude-dependent gravity. We consider a uniform composition of $\text{H}_2/\text{He}/\text{H}_2\text{O}$. In this first step, to validate only the geometrical part of the code, we assume that H_2 and He are transparent, and that water has a gray opacity that is independent of temperature and pressure. In this set of simulations, the scale height is set to the prescribed value by adjusting the temperature of the atmosphere, all other parameters being kept fixed to the value given in Table 1.

For each R_p/H ratios, we first compute the transit radius of a high resolution reference model using Pytmosph3R with 50 000 layers. Then we compute the difference between this reference and the transit radius given by our three models at various vertical resolutions. This is summarized in Fig. 4 where the results for Pytmosph3R/discretized method are shown by dashed lines, for Pytmosph3R/integral method by solid lines, and Tau-REx by dots. The various colors are for different R_p/H . Note that although we quote some planet names for each ratio to give an idea of what type of planet it describes, calculations where all performed for the same planetary radius ($1 R_J$).

The conclusions that can be drawn from this test are the following:

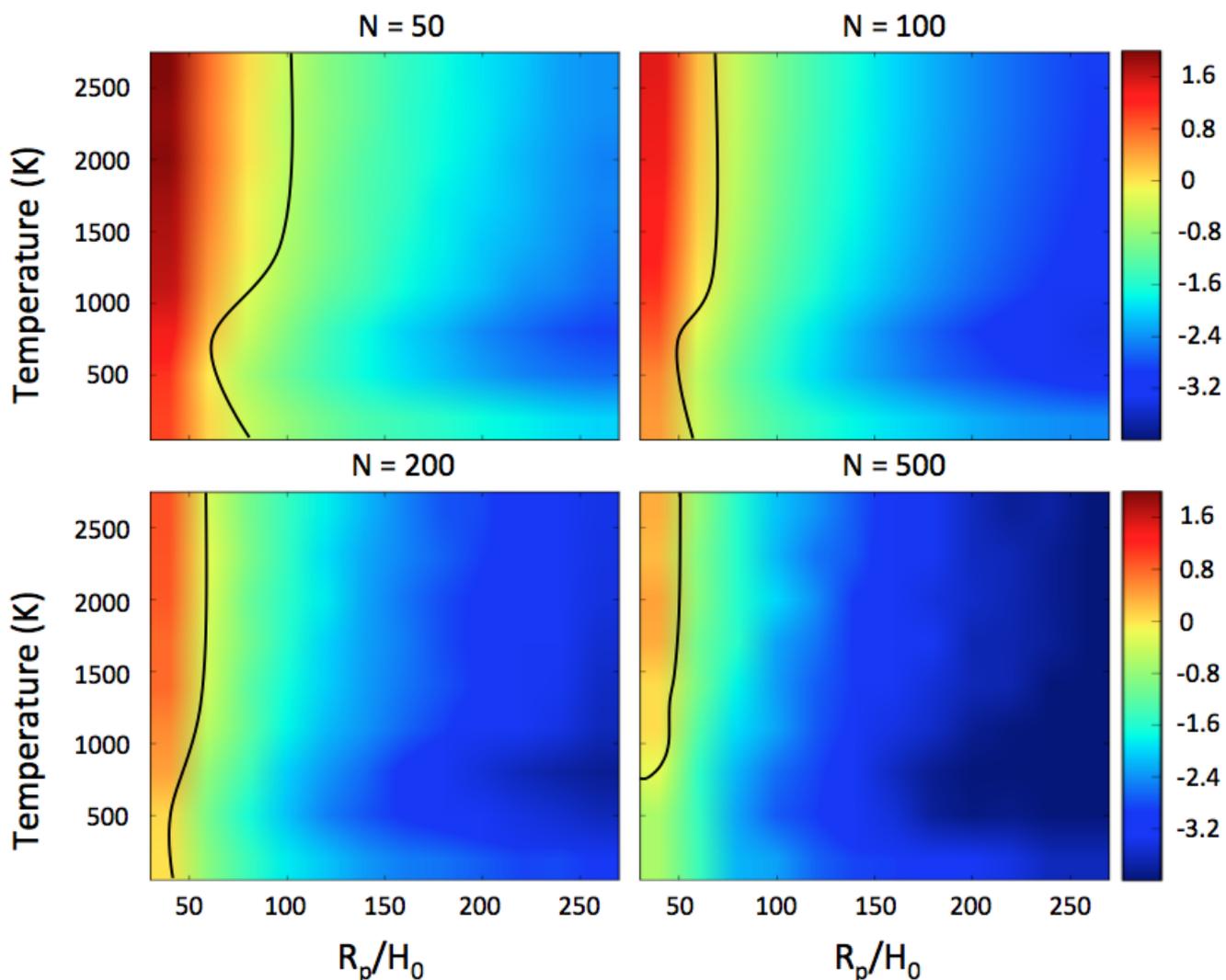


Fig. 5. The figure shows the decimal logarithm of the reduced chi-square for the effective radius between our 3D model and the full forward model from TauREx over a range of temperature between 200 and 2600 K and of ratio R_p/H between 40 and 260. The black line shows where the reduced χ^2 equals unity, i.e. where model differences become insignificant compared to the noise. We assumed an error calculated with a sun-like star at 100 a.l., 1 hour of integration and JWST instruments. The same work has been done for four vertical resolutions : 50, 100, 200 and 500 layers.

- All three models converge toward the same result as vertical resolution is increased so that the differences can be reduced to an arbitrarily low value,
- As advertised, atmospheres with a low R_p/H require less vertical layers to reach a given accuracy,
- For the same number of layers, the accuracy of our integral version of the code is orders of magnitude better than the discretized one. This is thus the preferred mode for most applications,
- As expected, the discretized mode, although less accurate, is always closer to Tau-REx and should probably be used if a retrieval analysis is to be performed. This indeed introduces as little biases as possible during the retrieval step.

In terms of the number of layers needed to reach convergence, the integral mode of Pytmosph3R requires as little as 50 layers in almost all practical cases of interest. This yields about 5 points per pressure decade or about 2 per scale height. For the discretized version as well as for Tau-REx and indeed most forward model using the same philosophy, 100 layers are generally

enough, but this should be taken with caution. Especially hot or low gravity objects require a finer resolution and some published models have probably reached convergence only marginally.

Despite our efforts, it can be seen that for a given number of layers, the discrete version of Pytmosph3R is not exactly equivalent to Tau-REx. We find that this small discrepancy is fundamentally due the fact that our vertical grid uses altitude rather than pressure levels as usually done in 1D models. When gravity varies with altitude, an iso altitude grid is not equivalent to an iso-log pressure one, hence the small difference.

3.3.3. Comparison with the full Tau-REx forward model

Here we compare spectra from Pytmosph3R and Tau-REx for isothermal atmospheres with the same composition as before. There are two differences however. First, we now compute a full spectrum with all our opacity sources varying with wavelength, temperature, and pressure. Second, we now fix the atmosphere temperature beforehand and adapt the surface gravity of

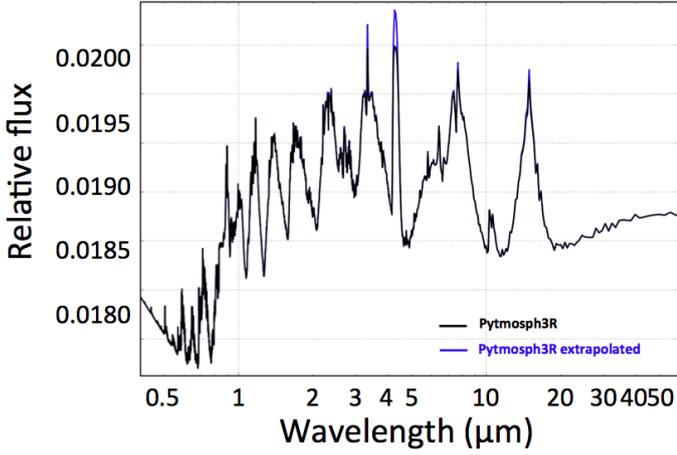


Fig. 6. Transit spectrum generated by Pytmosph3R from the outputs of a GCM simulation of GJ 1214 b (Charnay et al. 2015). The black curve represents the effective radius obtained when accounting only for the part of the atmosphere explicitly modeled by the GCM (Down to ~ 0.5 Pa). The blue curve shows the result when the model is extended by an isothermal atmosphere down to 10^{-4} Pa. Further lowering the pressure of the model top does not alter the spectrum.

the planet to get the desired R_p/H ratio. This stems from the fact that will now impact the molecular features directly and not only through the scale height. This allows us to test our interpolations in the opacity databases as well.

As the model produces a full spectrum and not only a monochromatic transit radius, we quantify the differences between the two codes using a reduced chi-square calculated as follows:

$$\chi^2 = \sum_{\lambda} \frac{(\delta_{3D,\lambda} - \delta_{1D,\lambda})^2}{\sigma_{\text{obs},\lambda}^2} \frac{1}{N_{\lambda}} \quad (19)$$

where $\delta_{3D,\lambda}$ and $\delta_{1D,\lambda}$ are the transit depths at the wavelength λ given by Pytmosph3R and Tau-REx, N_{λ} is the number of spectral bins, and $\sigma_{\text{obs},\lambda}$ is the stellar photon noise computed for a JWST observations. The latter is given by

$$\sigma_{\text{obs},\lambda} = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{obs},\lambda}}}, \quad (20)$$

where

$$N_{\text{obs},\lambda} = \frac{\pi \tau_{\lambda} c \Delta t R_s^2 A}{2d^2} \int_{\lambda_{\text{wl}}}^{\lambda_{\text{wl}+1}} \frac{d\lambda}{\lambda^4 \left(\exp\left(\frac{h\nu c}{k_B T_s \lambda} - 1\right) \right)}. \quad (21)$$

The parameters are τ_{λ} is the system throughput, R_{\star} and T_s the radius and temperature of the host star, A the collecting area of the telescope (here 25 m²), Δt the integration time, and d the distance of the target. In our example, we considered a Sun-like star, a 1-hour integration, and a system at 100 ly. Increasing the noise tends towards making Pytmosph3R and Tau-REx spectra indistinguishable.

We computed the logarithm of this reduced chi-squared as a function of the atmospheric temperature and R_p/H for four different vertical resolutions. Results are shown in Fig. 5.

As already discussed, we can see that the agreement between the two codes at a given vertical resolution generally increases with R_p/H . At a given R_p/H ratio and in this specific example, the agreement also slightly depends on temperature. This

is due to the overall increase of H₂O opacity with temperature that pushes the opaque region upward and increases the opening angle (see Fig. 2). With high enough vertical resolution the two models can however agree well within the noise budget. As the lowest encountered R_p/H is about 100 (for a Hot neptune like GJ 1214b), we confirm that 50 layers should be sufficient in most cases. These maps can however be used as a guide to chose the resolution needed if a more stringent case is found.

3.4. Effect of model top altitude

When computing transmission spectra, if the model does not reach a height in the atmosphere that is transparent enough at all wavelengths, the transit radius of the planet may be underestimated in opaques parts of the spectrum. The choice of the model top pressure thus generally results from a trade-off between computation time and convergence.

This point is even more crucial here because several other technical reasons can limit the maximum altitude of a 3D climate model to a few tenths of pascals or more (short radiative timescales, absence of non-LTE radiative treatment or conductive heat transfer, etc.).

To illustrate these limitations, Fig. 6 shows two spectra computed by Pytmosph3R for a simulation of GJ 1214b (see Sect. 4). The black spectrum uses directly the outputs of the global climate model and stop around a pressure level of 0.5 Pa. The blue spectrum is obtained by extending the model upward to 0.001 Pa assuming that the atmosphere remains isothermal above the GCM model top. Extending the model to lower pressures does not significantly change the resulting spectrum.

4. The case of GJ 1214b as an illustration of Pytmosph3R capabilities

In this section, we apply Pytmosph3R to GCM simulations of the atmosphere of GJ 1214b to illustrate the possibilities of the code. This also allows us to show examples of horizontal inhomogeneities and some of their effects on transmission spectra. Despite the flat spectra currently obtained with WFC3/HST, possibly due to high-altitude clouds/aerosols (Kreidberg et al. 2014), GJ 1214b is one of the rare known targets that is not a gas giant but still offers a favorable configuration for transmission spectroscopy : the vicinity to the Sun (13 pc), a low-density implying the presence of an atmosphere, a short period (1.58 d), a red dwarf host and an expected high scale height to radius ratio (see Fig. 2). Modeling the formation, distribution and spectral signature of aerosols motivated the use of a 3D atmospheric model of the atmosphere (Charnay et al. 2015) that we used to compute transmission maps and spectra with Pytmosph3R.

4.1. Input 3D atmospheric model

We use the 100 \times solar metallicity simulation of Charnay et al. (2015) made with the LMDZ generic global climate model. The simulation has a 64 \times 48 horizontal resolution with 50 layers equally spaced in log pressure, spanning 80 bars to ~ 0.5 Pa. An important assumption in this simulation is the local chemical equilibrium : in each cell, the composition is imposed by the local temperature, pressure and elemental composition. As the simulation assumes a circular orbit with null obliquity and a synchronized rotation, the state of the atmosphere after convergence is fairly stable, exhibiting only stochastic variations. We use an arbitrary timestep to produce synthetic spectra. The ther-

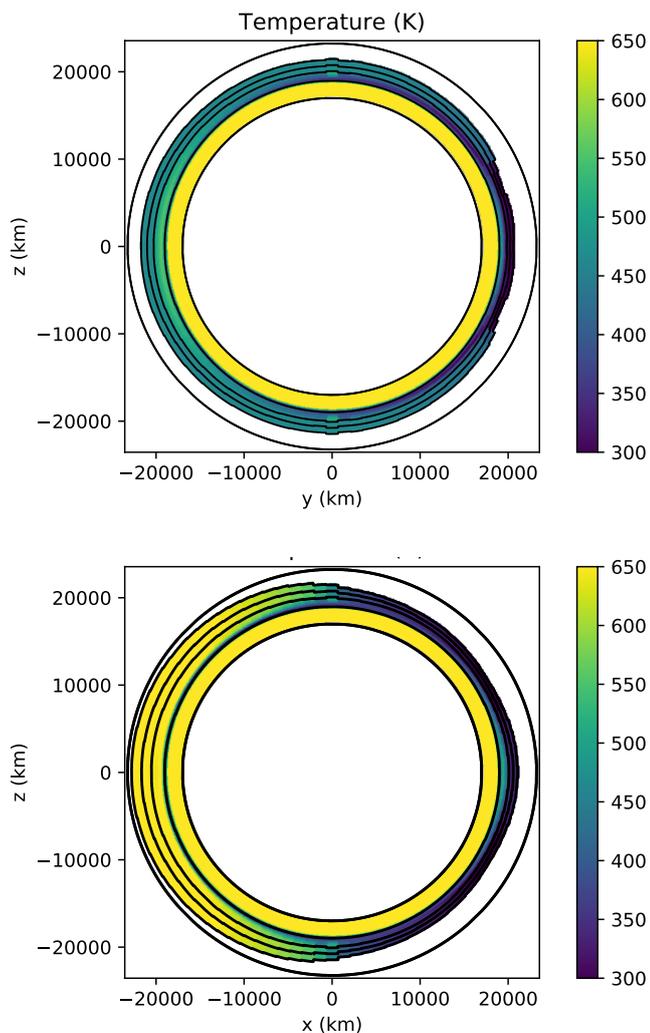


Fig. 7. Color maps showing the temperature distribution in the model atmosphere of the $100\times$ solar metallicity simulation from Charnay et al. (2015). The inner white disk represents the inner part of the planet with a radius assumed to be equal to the one of GJ 1214 b (17.600 km). Top: Temperature at the terminator. The planet is seen from the observer, the poles being at the top and bottom. Bottom: The star is on the left and the observer on the right on the $z = 0$ axis. The poles are on the $x = 0$ axis. From center outward, the 5 solid lines are respectively the 10^6 , 10^3 , 1, 10^{-2} , and 10^{-4} Pa pressure levels. The outer circle is there as an eye guide to highlight the asymmetries. Temperature is well homogenized below $\sim 10^3$ Pa level. Maps are *to scale* and show that the dayside is noticeably more extended vertically than the nightside.

mal structure is shown in Fig. 7 and the absorbers/clouds distribution in Fig. 8. We redirect the reader to Charnay et al. (2015) for more details on the model.

4.2. Transmittance maps

In order to understand the global transmission spectrum Pytmosph3R offers the possibility to draw transmittance map in any spectral bin of the spectrum. Viewing the azimuthal and vertical inhomogeneities provides some important piece of information to interpret spectral features.

Fig. 9 shows transmittance maps for GJ 1214b simulated atmosphere, with and without the effect of clouds. Temperature is directly or indirectly at the origin of the inhomogeneities.

Colder eastward regions are less extended vertically and locally induce a smaller absorption radius. As the simulation imposes a local chemical equilibrium, eastward colder regions are also poorer in CO_2 and richer in CH_4 , affecting the transmittance distribution in the displayed CO_2 (14.9 and 4.3 μm) and CH_4 (1.17 μm) bands. In the 14.9 μm CO_2 bands another thermal effect comes from the strong temperature dependency of the absorption cross-section, which strongly enhances the transmittance inhomogeneities compared with the 4.3 μm band, much less sensitive to the temperature. The effect of clouds is the strongest at 0.95 μm although they mask some chemical inhomogeneities at high pressure.

4.3. Comparison with averaging methods based on 1D models

In the absence of a code like Pytmosph3R, producing a transmission spectrum from a 3D simulation using a radiative transfer model based on a horizontally-homogeneous atmospheric profile implies an average of some kind.

4.3.1. Mean profile

One method consists in averaging first the atmospheric quantities and then computing a transmission spectrum. One single atmospheric profile (temperature, pressure, chemical abundances and cloud properties as a function of altitude) is obtained by averaging the $2N - 2$ profiles found on the terminator, weighted by the fraction of azimuth covered by each cell (N being the number of latitude points on the simulation grid). The transmission spectrum is then computed assuming that this atmospheric profile covers the whole planet. Fig. 10 shows the comparison between spectra resulting from this *mean profile* method and those generated by Pytmosph3R.

The difference is in large part due to the lower temperature patch at the morning limb near the equator (west of the substellar point) which is due to the equatorial jet bringing cold air from the nightside there (see Fig. 7). This difference is considerably larger than the expected photon noise with JWST over most of the spectrum making this method clearly inadequate. This, in a sense, already highlights why 1D retrieval methods may be biased when interpreting the spectra of real atmospheres.

4.3.2. Limb integration

A better technique that is usually applied, for instance by Charnay et al. (2015) or Lines et al. (2018), involves computing in a first step $2N - 2$ transmission spectra assuming a horizontally-homogeneous atmosphere, one for each atmospheric column found on the terminator. Then the total transmission spectrum is calculated as an average of these intermediate spectra, weighted by the fraction of azimuth covered by each column. Fig. 11 compares spectra obtained with this *limb integration* technique and shows the comparison between spectra resulting from this approach (red line) and from Pytmosph3R (red line).

A rapid comparison of Figs. 10 and 11 clearly shows that *limb integration* performs much better than the mean profile approach. However, there still remains significant discrepancies throughout the spectrum and especially in some molecular bands. By definition, these differences only come from the atmospheric inhomogeneities *along* the path of the ray. They are due to the effect of the

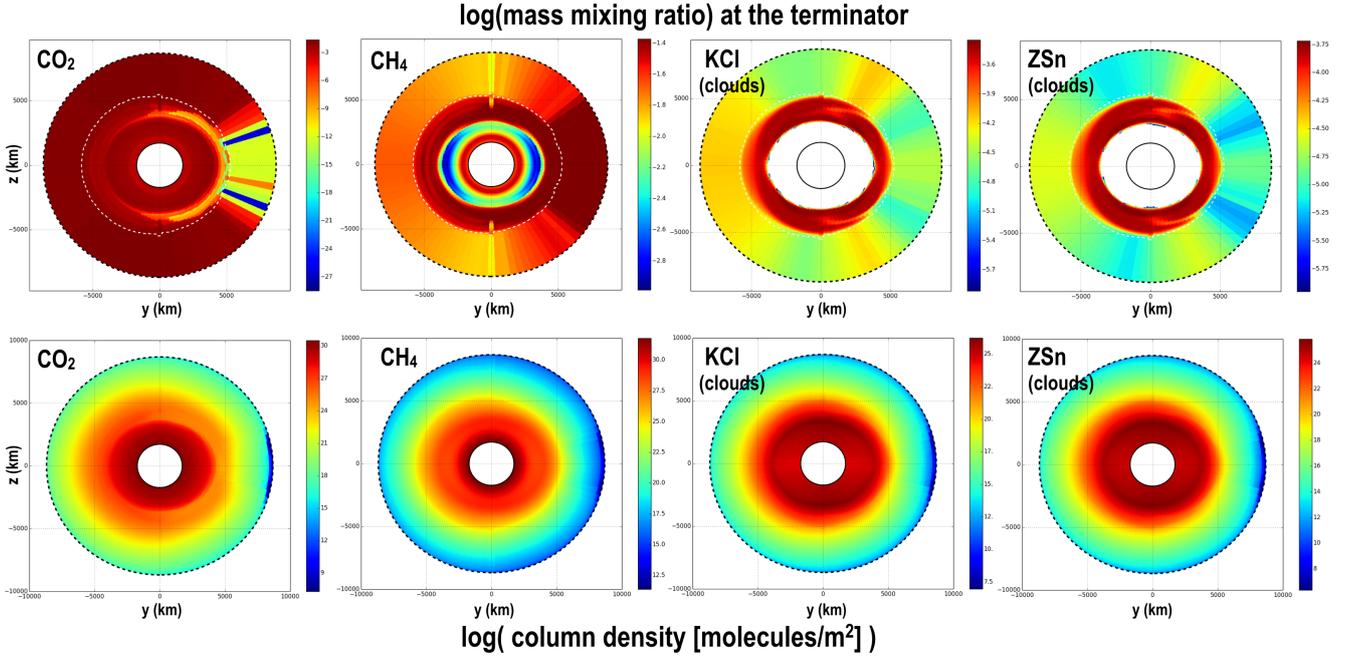


Fig. 8. Distribution of some absorbing species in a simulation of the atmosphere of GJ 1214b by Charnay et al. (2015). The upper row shows the mass mixing ratio of at the terminator while column densities in the star-observer direction are given in the lower row. For KCl and ZSn, only the molecules in the condensed phase are considered.

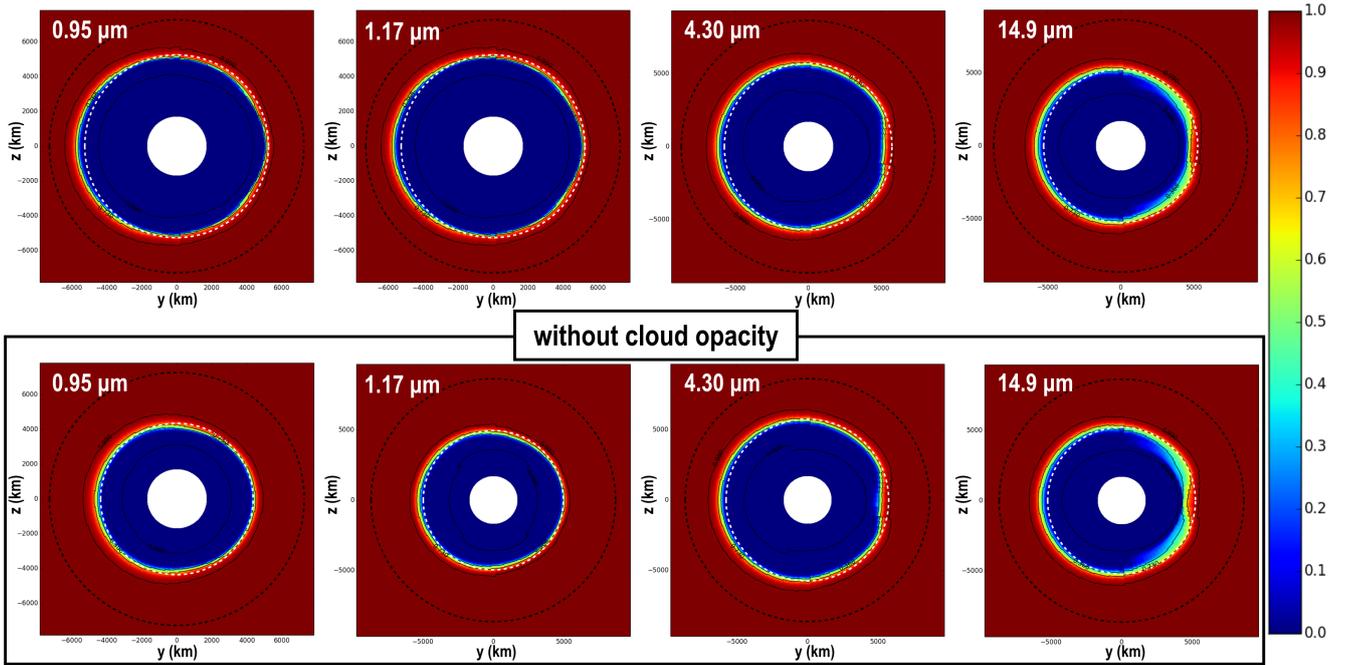


Fig. 9. Transmittance maps obtained with a simulation of the atmosphere of GJ 1214b by Charnay et al. (2015). The inner white disk represents the opaque section of the planet and is reduced for clarity (compared with its actual 17,000 km radius). The white dotted circle corresponds to the effective radius : the radius of the opaque disk resulting in the same overall absorption as the simulation over a homogeneous stellar disk. The outer dotted circle indicates the top of the model (not the simulation) at the terminator. The maps on the lower part are obtained with Mie scattering turned off in order to show the effect of clouds. Methane is the main gaseous absorber at 1.17 μm and carbon dioxide at 3.40 and 14.9 μm . The corresponding CO_2 , CH_4 and cloud distribution are shown in Fig. 8

- Day to night temperature gradient: as the dayside is hotter than the night side, the vertical extent of the atmosphere changes along the ray. As shown in Sect. 5, this causes a net increase in absorption visible in the water bands (see lower panels of Fig. 11). Although this effect is on the order of the photon noise for a single transit for the (relatively) cold at-

mosphere of GJ1214 b, it can strongly affect the retrieval of the properties of hotter planets as demonstrated in the next section.

- Day to night compositional gradient: for the absorption bands due to absorbers with a heterogeneous distribution (like CO_2 is our case, which absorbs prominently at 4.5 and

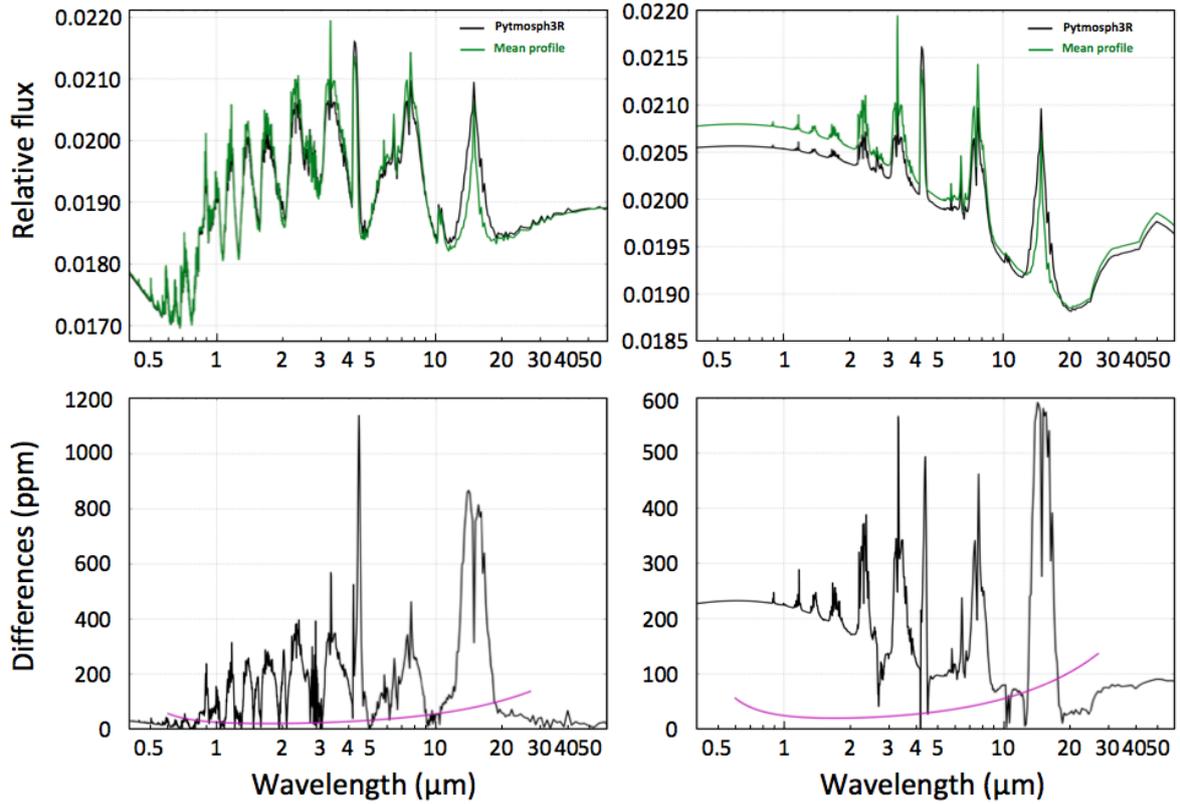


Fig. 10. Transit spectra computed from a 3D simulation of GJ 1214b atmosphere by Charnay et al. (2015) with Pytmosph3R (black) and a *mean profile* approximation (see text). Spectra are shown with (right) and without (left) the radiative effects from the *KCl* and *ZnS* clouds. In both cases the atmosphere is extrapolated vertically beyond the top of the simulation. Cloud particle radius is fixed to $0.5 \mu\text{m}$. The plots on the lower part show the difference between the two methods. The purple line indicates the photon noise with a JWST aperture, an exposure time of twice the transit duration and a (low) resolution of $R = 100$.

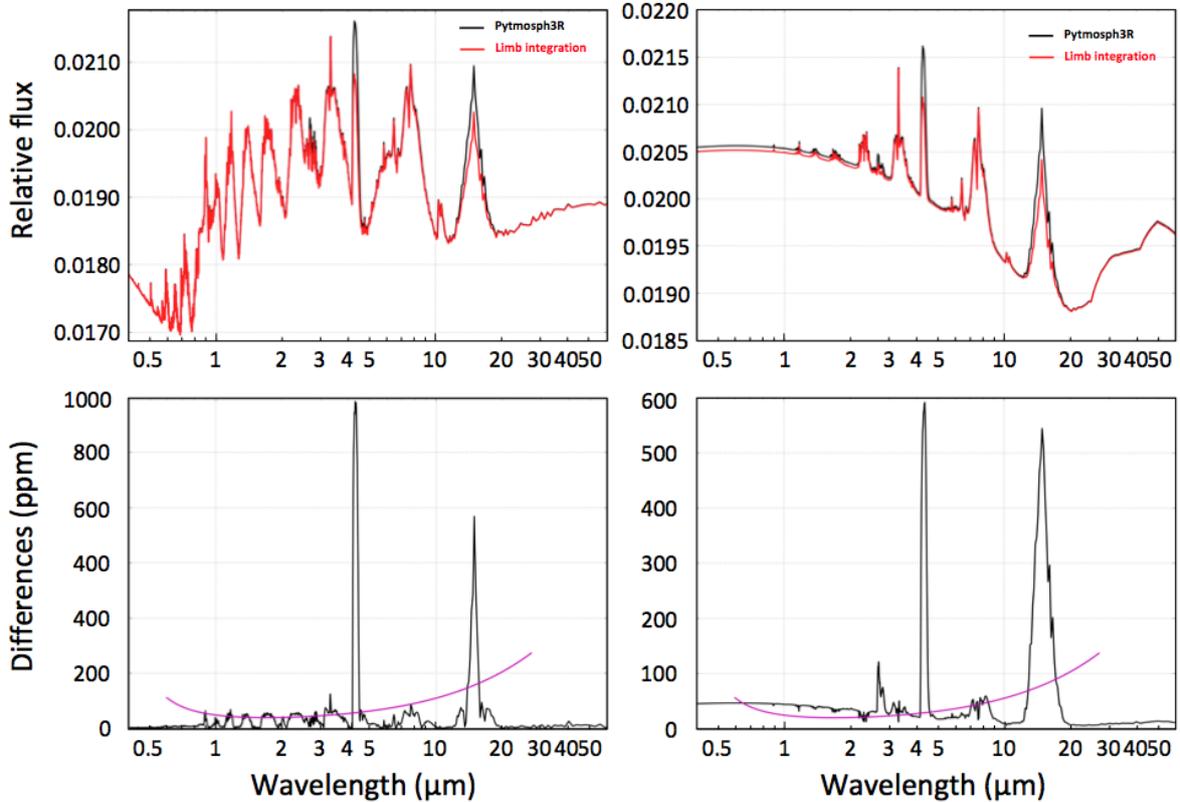


Fig. 11. Same as Fig. 10 but the Pytmosph3R spectra (black) are compared here with those obtained with the *limb integration* approximation (red).

15 μm) a change of composition along the line of sight creates a signal that is much greater than the expected noise and that cannot be modeled by the *limb integration* method. See below for the possible causes of such a compositional gradient. Although it is the most prominent effect in our GJ 1214 b model, the parameter space to cover to fully quantify it is large and will have to wait a future study.

- Day to night asymmetry of the cloud distribution: the temperature change at the terminator, in turn, allows us to expect changes in the properties of the clouds there (Lee et al. 2016). This will also be looked at in a future study.

4.4. Comments on the possible causes of compositional heterogeneities

In the model of GJ 1214b we use, the concentrations of CO, CO₂ and CH₄ are computed assuming chemical equilibrium. For such atmospheres and cooler ones, the 3D variations of these species are thus strongly overestimated. While the hottest regions of the atmosphere (above ~ 1000 K) are expected to reach equilibrium faster than typical dynamic timescales, it is not the case in the coldest layers (below ~ 700 K) probed by transmission, where endothermic reaction become extremely slow. As a consequence, thermochemistry is expected to produce a more homogeneous composition controlled by the hottest/deepest regions.

However, more irradiated planets must have overall hotter atmospheres spanning a larger range of temperatures (due to shorter radiative timescales) with very different equilibrium compositions and kinetics fast enough to main local equilibrium (Agúndez et al. 2014). These atmospheres are expected to exhibit the strongest horizontal variations of temperature and composition. Parmentier et al. (2018) recently showed that water itself may be dissociated on the dayside of some Hot Jupiters and recombine close to their terminator. In addition, UV-driven photochemistry may create additional heterogeneities by allowing some reactions to take place on the dayside of the planet only.

We can thus expect hot planets to exhibit strong day to night compositional gradients that may become a dominant issue in retrieving atmospheric properties through transmission spectroscopy. Quantifying the stellar irradiation at which these effects become significant will need further modeling.

5. Effect of Day/night side temperature differences on retrieval

As visible in Fig. 2, the region probed in primary transit is much larger than is usually acknowledged, especially on hot and/or low gravity objects. So during transit, we are not only probing a thin plane – the so-called terminator – but an area that can extend significantly on both the day and night sides. Because these two parts of the planets are expected to exhibit quite different temperatures (as visible in Fig. 7), it seems important to quantify the extent of the imprint of this temperature inhomogeneity on the transit spectrum of the planet, and how it will affect any attempt to retrieve the temperature at the terminator.

To answer these questions, we conduct a simple experiment. For two prototypical planets (respectively based on GJ 1214 b and HD 209458 b), we build idealized 3D atmospheric structures that are symmetric about the star-planet axis but that continuously go from a high temperature T_{day} on the dayside to a lower one, T_{night} , on the nightside. The atmosphere is assumed to have a *uniform composition* to enable us to concentrate on thermal effects. We then simulate the transit spectrum and try to invert it. Finally, the retrieved temperature is compared to the input one.

5.1. Parametrization of the atmospheric structure

The structure that we chose for the atmosphere is inspired by the 3D simulations of Charnay et al. (2015) for GJ 1214 b whose temperature distribution is shown in Fig. 7. Its most salient feature is the continuous transition in temperature between the day and night side. For sake of simplicity, we assume that this transition occurs linearly over a region that is parametrized by its opening angle β .

Moreover, as is well known and further exemplified by Fig. 7, the atmosphere of gaseous exoplanets is usually well mixed at depth. The temperature is thus assumed to be uniform below a pressure level P_{iso} (that will taken to be 10 mb as in the simulation, although some models do predict inhomogeneities to persist at deeper levels).

In summary, for a given location identified by its pressure, P , and the (possibly negative) local solar elevation angle, α_* , the temperature is given by

$$\begin{cases} P > P_{\text{iso}} & T = T_{\text{day}} \\ P < P_{\text{iso}} & \begin{cases} 2\alpha_* > \beta & T = T_{\text{day}} \\ \beta > 2\alpha_* > -\beta & T = T_{\text{night}} + (T_{\text{day}} - T_{\text{night}}) \frac{\alpha_* + \beta/2}{\beta} \\ -\beta > 2\alpha_* & T = T_{\text{night}} \end{cases} \end{cases} \quad (22)$$

Examples of such idealized atmospheric structures are shown in Fig. 12 for three different opening angles. We chose to show the structures that are most representative of the real GJ 1214 b case to allow for a direct comparison with Fig. 7. For brevity we will also refer hereafter to the "uniform case": this stands for a case where the whole upper atmosphere has a uniform temperature equal to the one at the terminator that serves as a comparison. Therefore, in this case,

$$\begin{cases} P > P_{\text{iso}} & T = T_{\text{day}} \\ P < P_{\text{iso}} & T = (T_{\text{day}} + T_{\text{night}})/2 \end{cases} \quad (23)$$

Once our four parameters – T_{day} , T_{night} , β , and P_{iso} – have been chosen, the 3D atmospheric structure is integrated from the surface of the planet that is assumed to be the 10 bar level. Hereafter, we call the radius of this isobar R_p , and assume that it contains most of the mass of the object so that the gravity above this level only depends on the altitude.

The reason we are not performing such test on idealized structures and not more realistic ones from a GCM is that we want to isolate the effect of the day-night heterogeneities. In a GCM simulation, there would also be vertical and equator-pole temperature variations that would preclude the identification of a single effect.

5.2. Effect of the day/night temperature difference on the transmission spectrum

One might naively expect that because of the symmetry of our temperature distribution, the contributions of the hot and cold sides should cancel out. This is however not the case, as can be seen in Fig. 13.

Indeed, by comparing the transmittance map for a given planet in a uniform case, or with a day-night temperature gradient, we directly see that the opaque region extends higher up in the latter case. The greater scale height on the dayside is not compensated by the lower one on the night side.

This can be understood easily using a slightly modified version of the analytical model of Guillot (2010) or Vahidinia et al. (2014) where we separate the atmosphere into two hemispheres

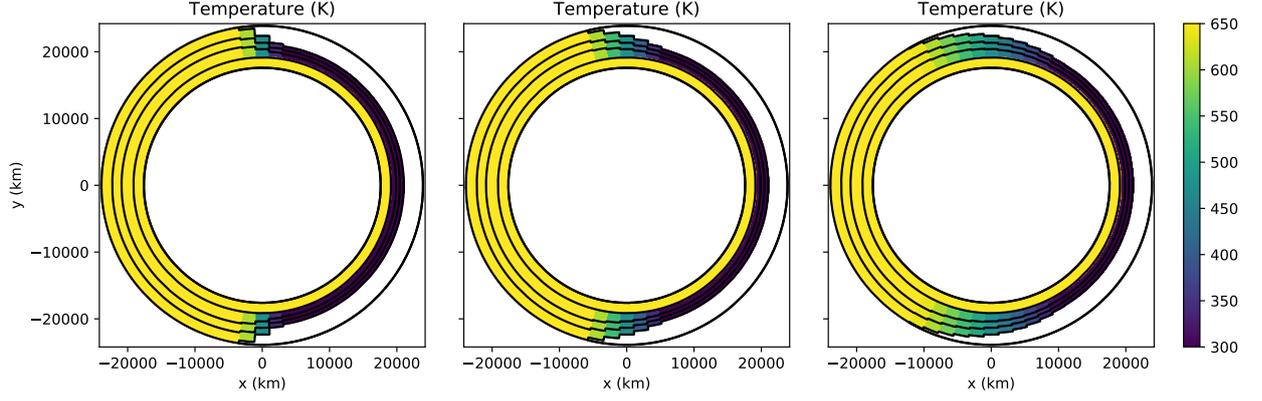


Fig. 12. These color maps show the temperature distribution of our model atmospheres in a plane perpendicular to the terminator for three different opening angle of the transition region between a 650 K dayside and a 300 K nightside (from left to right, the opening angle is $\beta=15^\circ$, 30° , and 60°). The inner white circle represents the inner part of the planet with a radius assumed to be equal to the one of GJ 1214 b (17.600 km). The star is on the left and the observer on the right on the $y = 0$ line. From center outward, the 5 solid lines are respectively the 10^6 , 10^3 , 1, 10^{-2} , and 10^{-4} Pa pressure levels. Below the 10^3 Pa level, the atmosphere is assumed to efficiently redistribute heat and is horizontally isothermal. These maps are *to scale* and show that the dayside is noticeably more extended than the nightside.

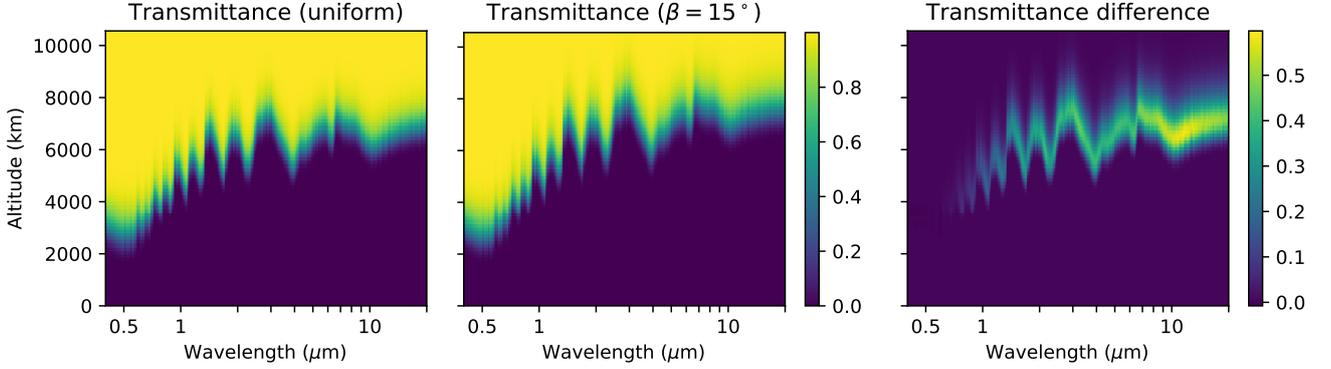


Fig. 13. Maps of the spectral transmittance of the atmosphere of HD 209458 b as a function of wavelength and altitude. The parameters are $T_{\text{day}} = 1800$ K, $T_{\text{night}} = 1000$ K, and $P_{\text{iso}} = 10$ mb, that are representative of the real planet (Parmentier et al. 2013). A low transmittance – blue shades – is representative of opaque regions deep down and a transmittance near unity – yellow – is representative of the transparent upper atmosphere. The left panel shows the case with a uniform upper temperature of 1400 K, and middle one, the case with a $\beta = 15^\circ$ transition region between the day and night side. The higher opacity of the middle case is further highlighted by the right panel that shows the map of the transmittance difference between the left and the middle case. The altitude of the top of the isothermal region is ~ 3800 km.

that differ only through their temperatures – and thus atmospheric scale heights (H_{day} and H_{night}) – above the pressure level P_{iso} which is located at an altitude z_{iso} above the reference radius of the planet R_p . Below z_{iso} , the scale height is the same everywhere (H_{iso}). In essence, this corresponds to the case described above in the limit where $\beta \rightarrow 0$.

We follow the notations in Fig. 1 and the formalism in Appendix A. The difference here is that the scale height variations entail that the number density at a given altitude is

$$n(z) = \begin{cases} n_0 e^{-\frac{z}{H_{\text{iso}}}} & z < z_{\text{iso}} \\ n_0 e^{-\frac{z_{\text{iso}}}{H_{\text{iso}}}} e^{-\frac{z-z_{\text{iso}}}{H_i}} & z > z_{\text{iso}} \end{cases}, \quad (24)$$

where i is either day or night depending on the hemisphere.

In the limit where all the altitudes in the atmosphere are small compared to R_p , the slant optical depth is the sum of the day and

night side contribution, yielding

$$\begin{aligned} \tau_{\text{tr}}|_{z_i > z_{\text{iso}}} &= \overbrace{\int_{-\infty}^0 n \sigma_{\text{mol}} dx}^{\text{day}} + \overbrace{\int_0^{\infty} n \sigma_{\text{mol}} dx}^{\text{night}} \\ &= \sigma_{\text{mol}} n_0 e^{-\frac{z_{\text{iso}}}{H_{\text{iso}}}} \left(\sum_{i=\text{day}}^{\text{night}} e^{-\frac{z_i - z_{\text{iso}}}{H_i}} \int_0^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2R_p H_i}} dx \right) \\ &= \sigma_{\text{mol}} n_0 e^{-\frac{z_{\text{iso}}}{H_{\text{iso}}}} \left(e^{-\frac{z_i - z_{\text{iso}}}{H_{\text{day}}}} \sqrt{\frac{\pi R_p H_{\text{day}}}{2}} + e^{-\frac{z_i - z_{\text{iso}}}{H_{\text{night}}}} \sqrt{\frac{\pi R_p H_{\text{night}}}{2}} \right), \end{aligned} \quad (25)$$

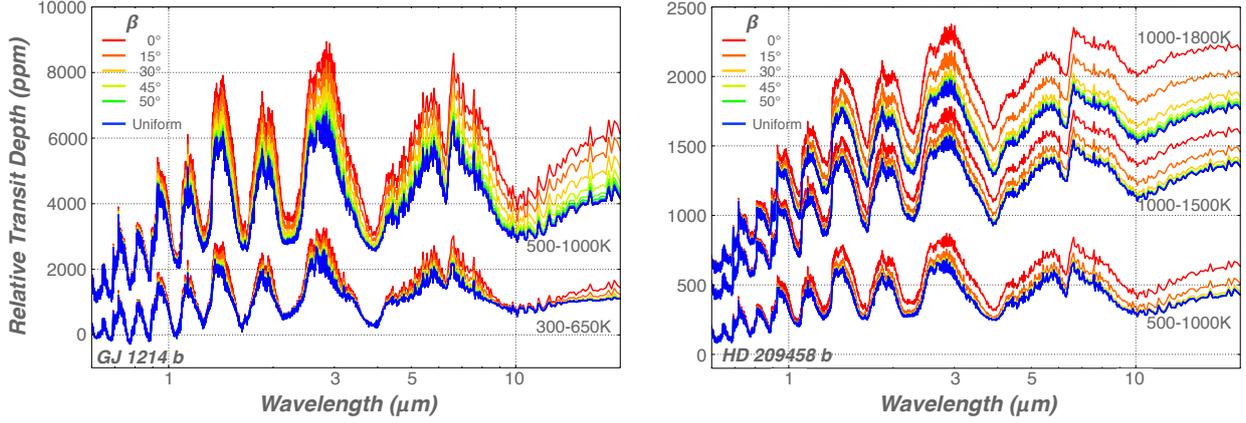


Fig. 14. Spatially integrated spectra of the relative transit depth (in ppm) expected for GJ 1214 b (left) and HD 209458 b (right) as a function of the opening angle of the day-night transition region (β). The color goes from red to green when β goes from 0° to 50° every 15° . The blue curve is the reference uniform case. Spectra with larger β are undistinguishable from the uniform case. The different groups of curves are for our various sets of day-night temperatures that are specified near each group. It can be seen that the transit depth increases monotonically when β decreases.

if $z_t > z_{\text{iso}}$, and

$$\begin{aligned} \tau_{\text{tr}|z_t < z_{\text{iso}}} &= \sigma_{\text{mol}} n_0 \left(\int_{-\sqrt{2(z_{\text{iso}}-z_t)R_p}}^{\sqrt{2(z_{\text{iso}}-z_t)R_p}} e^{-\frac{z_t}{H_{\text{iso}}}} e^{-\frac{x^2}{2R_p H_{\text{iso}}}} dx \right. \\ &\quad \left. + e^{-\frac{z_{\text{iso}}}{H_{\text{iso}}}} \sum_{\text{i=day}}^{\text{night}} \int_{\sqrt{2(z_{\text{iso}}-z_t)R_p}}^{\infty} e^{-\frac{z_t-z_{\text{iso}}}{H_i}} e^{-\frac{x^2}{2R_p H_i}} dx \right) \\ &= \sigma_{\text{mol}} n_0 \left(e^{-\frac{z_t}{H_{\text{iso}}}} \sqrt{2\pi R_p H_{\text{iso}}} \operatorname{erf} \left[\sqrt{\frac{z_{\text{iso}}-z_t}{H_{\text{iso}}}} \right] \right. \\ &\quad \left. + e^{-\frac{z_{\text{iso}}}{H_{\text{iso}}}} \sum_{\text{i=day}}^{\text{night}} e^{-\frac{z_t-z_{\text{iso}}}{H_i}} \sqrt{\frac{\pi R_p H_i}{2}} \left(1 - \operatorname{erf} \left[\sqrt{\frac{z_{\text{iso}}-z_t}{H_i}} \right] \right) \right), \end{aligned} \quad (26)$$

if $z_t < z_{\text{iso}}$. Note that in the above equations, σ_{mol} is the mean cross section of the gas normalized to the total density.

Now, to see the increase in optical depth, let us divide the result above by the optical depth in the uniform case (τ_{uni}) given by Eq. (A.3). This yields

$$\frac{\tau_{\text{tr}|z_t > z_{\text{iso}}}}{\tau_{\text{uni}}} = \frac{1}{2} \left(\sqrt{1 + \widehat{\Delta H}} e^{\frac{\widehat{\Delta H} \widehat{\Delta z}}{1 + \widehat{\Delta H}}} + \sqrt{1 - \widehat{\Delta H}} e^{-\frac{\widehat{\Delta H} \widehat{\Delta z}}{1 - \widehat{\Delta H}}} \right), \quad (27)$$

where $(H_{\text{day}}, H_{\text{night}}) = H_{\text{iso}}(1 \pm \widehat{\Delta H})$ and $\widehat{\Delta z} = (z_t - z_{\text{iso}})/H_{\text{iso}}$. The expansion in $\widehat{\Delta H}$ gives

$$\frac{\tau_{\text{tr}|z_t > z_{\text{iso}}}}{\tau_{\text{uni}}} \approx 1 + \frac{1}{8} \left(-1 - 4\widehat{\Delta z} + 4\widehat{\Delta z}^2 \right) \widehat{\Delta H}^2 + \mathcal{O}(\widehat{\Delta H}^4). \quad (28)$$

First, we see that because of the symmetry of the setup, the first order term disappears. Second, it readily results that the optical depth in the heterogeneous case is larger than in the uniform case for all the rays with a tangent altitude that is $(1 + \sqrt{2})/2 \approx 1.2$ scale heights greater than the altitude of the isothermal region. This qualitatively explains why there is little difference in the transmittance below the altitude of the isothermal region (~ 3800 km) in Fig. 13.

Finally, when these transmittance maps are integrated vertically, we get the transmission spectra shown in Fig. 14. As expected, the effective altitude at which the atmosphere becomes

opaque systematically increases when the horizontal thermal gradient is increased near the terminator.

An important point is that the spectrum for the non-uniform case does appear as the spectrum that would be obtained by a uniform, but globally hotter atmosphere. It is thus not surprising that a retrieval algorithm would be biased and retrieve a hotter atmosphere.

5.3. Bias in retrieved temperatures

The last step of our analysis is to actually run a 1D retrieval procedure on the transmittance spectra obtained with our parametrized 3D atmospheric structures to assess the biases entailed by such an approach. To do so, we use the JWST simulation tool Pandexo (Batalha et al. 2017) to simulate the expected uncertainties over a wavelength range of 1.0 - 10 μm for the duration of a single transit. For this, we combined the simulated spectra of the NIRISS/SOSS, NIRSpec/G395M and MIRI/LRS instruments. Observed error-bars above 10 μm were too large to have a significant impact on retrieval results and were discarded. Finally, we binned the simulated observations to a resolution of 100 constant in wavelength.

For each model of our grid in temperatures and opening angles, we ran the spectrum through the TauREx retrieval software (Waldmann et al. 2015). Here we considered water as the only trace gas with absorption cross sections computed using the Barber et al. (2006) line list. We include Rayleigh scattering and collision-induced absorption of H_2 - H_2 and H_2 -He (Borysow et al. 2001; Borysow 2002; Rothman et al. 2013) and assumed the atmosphere to be cloud-free. The vertical temperature-pressure profile was modeled to be isothermal. A typical posterior distribution for the retrieved parameters resulting from this procedure is shown in Fig. 15, along with the input simulated spectrum and the fitted one.

The retrieved temperatures and water abundances as a function of the opening angle of the transition region (β) for our GJ 1214 b case are shown in Fig. 16. Fig. 17 shows the temperature result for HD 209458 b. We tested different day and night side temperatures to see how planets with various irradiances would behave. To be able to compare the retrieved temperature (T_{ret}) in these different cases, we use the relative retrieved tem-

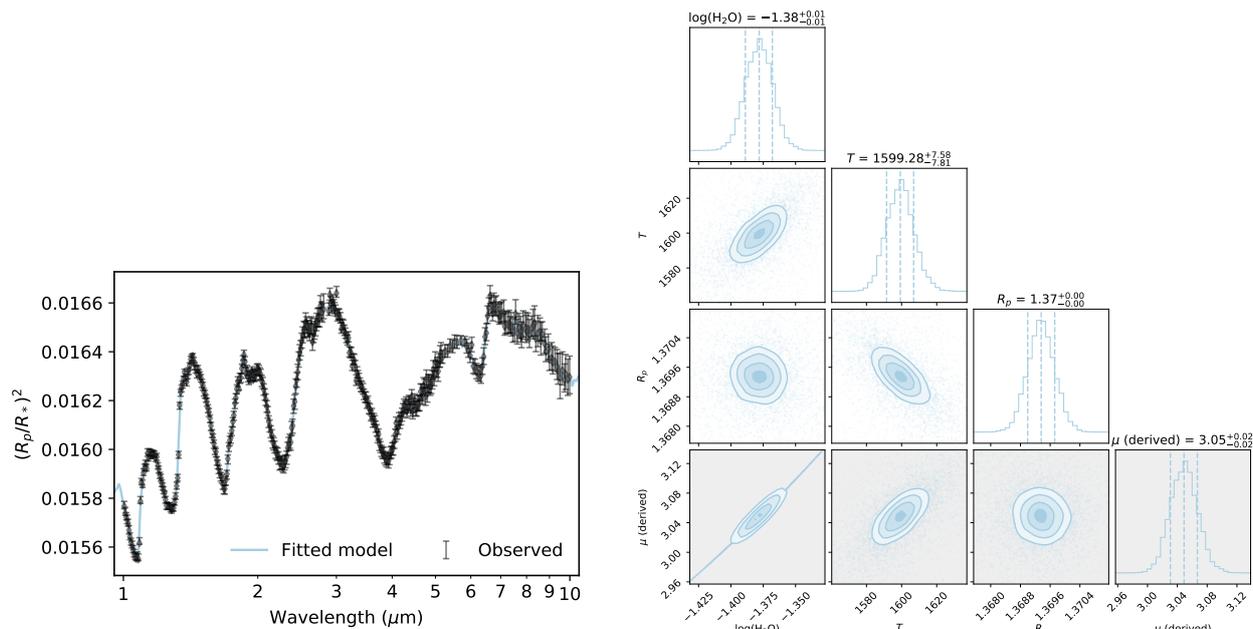


Fig. 15. Typical result of the retrieval procedure. This specific case is HD 209458 b with $\beta = 15^\circ$ and temperatures of 1800 and 1000 K on the day and night sides respectively. The left panel is the best fit 1D spectrum (blue curve) along with the spectrum produced by our 3D tool used as input for the retrieval (black points with error bars being the 1σ uncertainty computed with Pandexo). The right panel shows the posterior distribution for the retrieved parameters. This shows that the retrieval finds an acceptable fit, which results in relatively peaked posterior distribution and small error bars on the retrieved parameters. These values are however biased as the actual terminator temperature (1400 K) and atmospheric water abundance ($\log_{10}[\text{H}_2\text{O}] = -1.3$) are outside the range of values shown.

perature

$$\Theta \equiv \frac{T_{\text{ret}} - T_{\text{night}}}{T_{\text{day}} - T_{\text{night}}}, \quad (29)$$

which should thus be equal to 0.5 if we were to retrieve the terminator temperature. Although there are some quantitative differences among these cases, some robust trends emerge:

- The retrieved temperature is systematically biased toward a higher temperature than that of the terminator ($\Theta \geq 0.5$).
- There are two regimes separated by a critical opening angle that depends on the characteristics of the planet and is roughly consistent with our estimate of the opening angle of the part of the planet that is probed in transit, i.e. the limb (ψ ; See Fig. 2).
- For $\beta < \psi$, the retrieved temperature decreases roughly linearly with the opening angle. As the opening angle between the day and night side goes to zero (very sharp transition expected for the hottest planets), the retrieved temperature approaches the dayside temperature.
- For $\beta > \psi$, the temperature structure within the limb, hence the retrieved temperature, does not vary much. Whether the actual retrieved temperature is equal to the temperature at the terminator depends on the case (see below).
- Despite the uniform composition in our models, the retrieved abundance is always significantly biased – in the sense that the real abundance is outside the formal error bars of the retrieval – although the magnitude and direction depends on the specific case. It is sensible to assume that other more complex biases will arise if chemical gradients are present as well.

If in the HD 209458 b case (see Fig. 17), the retrieved temperature converges toward the temperature at the terminator

when the latter becomes more uniform ($\beta \rightarrow 180^\circ$), it is not necessarily the case for GJ 1214 b. We find that this absence of convergence at large angles always occurs when the hot, deep atmosphere below the P_{iso} level is probed by the transit spectrum: the retrieval is biased by the *vertical* temperature gradient. This does not happen for our Hot Jupiter case because of the larger radius that push the transit photosphere at lower pressures. Although an important bias in itself, it has already been studied by Rocchetto et al. (2016), and will not be further discussed here.

5.4. Could we see that something is wrong?

Could an observer, having performed the retrieval, detect that the retrieved quantities are biased by the day to night temperature gradient? This is indeed a crucial point.

Unfortunately, this seems precluded, even with the exquisite precision of JWST. As can be seen in Fig. 15, the best-fit 1D, isothermal spectrum does not miss any feature of the input 3D spectrum. In fact, Fig. 18 shows that the reduced χ^2 of the optimal retrieved models are always near or below 1. Based on this metric, the 1D isothermal atmosphere model thus provides an acceptable fit to the data, at least in the low resolution mode that we have explored here. In fact, it even seems that the fit is better when the bias is the strongest (low opening angle). This counter intuitive result comes from the fact that when the temperature transition is sharp, we probe almost exclusively the dayside. The atmosphere thus appears more homogeneous.

A procedure that would use a radiative transfer code similar to Pythmosph3R to retrieve a 3D structure/composition (which would imply formidable computing resources) would admittedly reveal the issue as its posterior distributions would expose the full extent of the degeneracies and result in larger, more reliable error bars on the retrieved quantities. Nevertheless, such

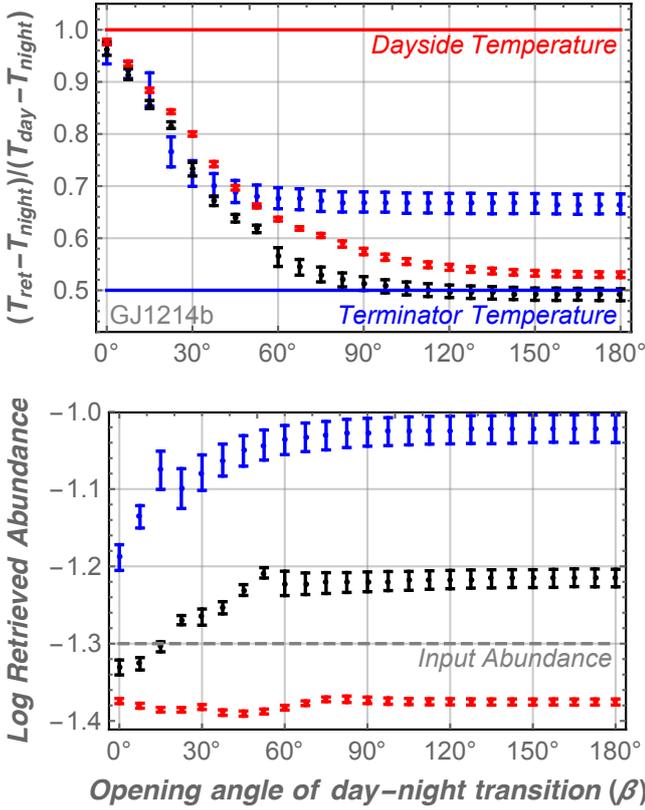


Fig. 16. Retrieved temperature (top) and water abundance (bottom) as a function of the opening angle of the transition region between the day and nightside of a planet with the radius and surface gravity of GJ 1214 b. The colors correspond to the temperature range (Blue: 300-650 K; Black: 500-1000 K; Red: 1000-1500 K). To put all cases on a single diagram we show the relative retrieved temperature, $\Theta \equiv (T_{\text{ret}} - T_{\text{night}})/(T_{\text{day}} - T_{\text{night}})$, so that in all cases $\Theta = 0.5$ at the terminator. The retrieved temperature is systematically biased toward the dayside temperature ($\Theta \geq 0.5$), especially when the transition is sharp.

a sophisticated tool may not be able to achieve a better retrieval. Indeed, even if a better χ^2 may be found with a forward model using a 3D thermal and compositional structure, the 1D model already provides an excellent match and the improvement, if any, would be achieved at the expense of adding so many parameters that parsimony criteria may favor the most simple model.

However, a much higher resolution may change this state of affairs. Especially, if we start to be sensitive to the line shape of individual lines. This will have to be assessed in a future study.

6. Which atmospheres are affected?

Since the first detections of the thermal emission of a planet, the existence of a strong day-night temperature gradient on hot exoplanets has been well established (Cowan & Agol 2011). A clear trend has even emerged that the hotter the planet, the greater the thermal contrast (Komacek et al. 2017; Keating & Cowan 2018) — a thermal contrast that can reach more than a thousand degrees. The bias on the retrieved limb temperatures on real planets is thus potentially huge. The yet rather observationally unconstrained parameter is the width of the day-night transition region (here β) and how it compares to the width of the limb that is effectively probed in transmission (ψ). In the absence of observations, we turn to published models.

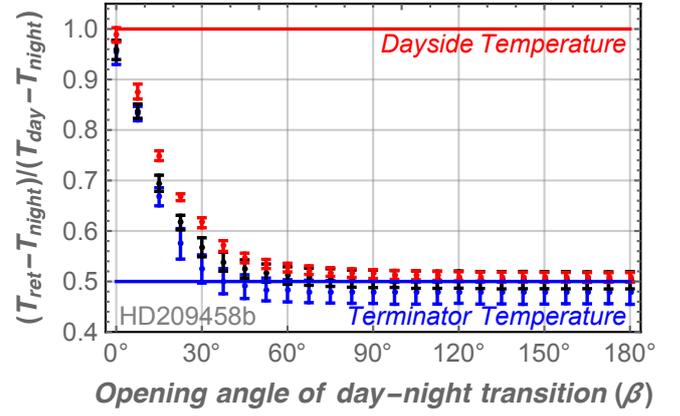


Fig. 17. Dimensionless retrieved temperature as a function of the opening angle of the transition region between the day and nightside of a planet with the radius and surface gravity of HD 209458 b. The colors correspond to the temperature range (Blue: 500-1000 K; Black: 1000-1500 K; Red: 1000-1800 K). Bottom panel: temperature bias ($T_{\text{ret}} - T_{\text{night}})/(T_{\text{day}} - T_{\text{night}} - 0.5$).

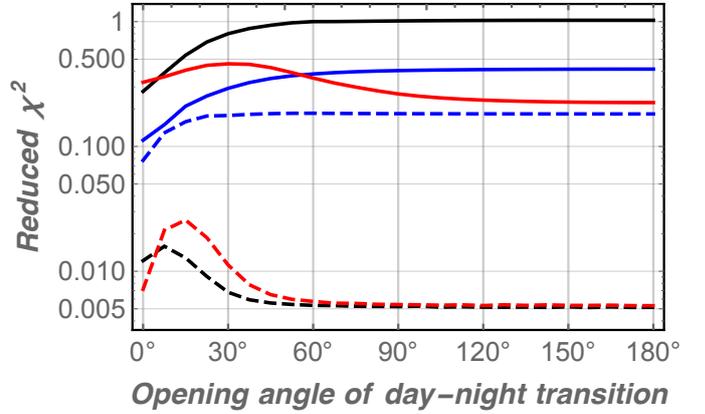


Fig. 18. Reduced χ^2 for the fit of the optimal retrieved models from Figs. 16 and 17. The color coding is the same as for those figures. Solid curves are for GJ 1214 b and dashed are for HD 209458 b. As the reduced χ^2 is always close to or smaller than 1, the fit would always be considered satisfactory.

For Neptune-like planets such as GJ 1214 b, our predictions based on a GCM tell us that the thermal-only effect of the day-night temperature gradient is on the order of 50-100 ppm in the water bands, and clearly detectable by JWST (see Fig. 11). It is thus sensible to assume that any hotter Neptune-like planet should be increasingly affected because of their higher H/R_p ratio and their stronger thermal day-night contrast (see Fig. 14). On the contrary, how cold — the stratosphere of colder planets being more uniform — will a planet need to be before such effects are undetectable remains to be elucidated.

However, keep in mind that we discussed here only the direct thermal effect, leaving out the possible chemical heterogeneities. The strong signature of day-night gradients in the CO_2 and CH_4 bands the spectrum in Fig. 11, which can reach 600-1000ppm, are believed to be of even greater importance and could possibly strongly hamper the ability of conventional retrieval algorithm to retrieve meaningful molecular abundances in the case of heterogeneous atmospheres.

Such considerations are even more important for Hot Jupiters. Despite their higher gravity, they can be much hotter, which entails that the day night contrasts are expected to

be much stronger—both thermally and compositionally because chemical timescales are expected to be short compared to the advection timescales. A good example are the so-called Ultra Hot Jupiters where it is predicted that some very abundant molecules on the nightside, such as water, could be almost completely absent on the dayside due to thermal dissociation (Parmentier et al. 2018).

7. Conclusion

Overall, our most important conclusion is that the region of the atmosphere probed in by transit spectroscopy, i.e. the limb, is not confined to a narrow annulus around the planet as often implied, but can indeed extend relatively far throughout its two hemispheres. This is especially true for hot and/or low gravity objects, the most significant metric being the ratio of the atmospheric scale height to the radius of the planet.

As a result, in addition to the variations of atmospheric properties of the atmosphere *along* the terminator, the transit spectrum is also affected by their variations *across* the limb, i.e. along the path of the light rays.

To investigate all these effects, we have developed Pytmosph3R, a transit spectrum generator that can work with a 3D atmospheric structure, whether it is the output of a global circulation model or a more idealized one. Using this tool along with a 3D atmospheric model of GJ 1214 b, we have recovered previous results that the temperature and compositional variations along the terminator significantly affect the transit spectrum and will have to be accounted for in future studies. These effects can in principle be partially accounted for by using a (1+1)D, or limb integrated, approach where one 1D spectrum is generated for each part of the limb before it is weighted and added to the others to generate the global one.

However, our fully 3D framework has shown that at the precision that will be reached by future observatories, the limb integrated approach is insufficient. Indeed, we have shown that for temperature gradients realistically expected for observable exoplanets, the transit spectrum is significantly affected by the structure of the atmosphere across the limb, i.e. the thermal and compositional gradients between the day and night side of the planet. We further demonstrated that this effect systematically biases 1D retrieval methods toward the temperature of the day side. The extent of this bias, however, depends on the strength of the temperature contrast as well as its sharpness around the terminator, the latter being the most difficult to predict.

In other words, one should be aware of the fact that the temperature (or its profile) retrieved from transmission spectra may not apply to the terminator itself, and that temperatures at the terminator are in fact significantly smaller. This will of course be a routine problem for future high precision observatories, but we have demonstrated that the effect on the spectrum is well above the precision that can be achieved with HST and Spitzer. So current observations of Hot Jupiter are certainly already affected. To what extent? this remains to be elucidated.

Acknowledgements. This project has received funding from the European Research Council (ERC) under the European Union’s Horizon 2020 research and innovation programme (grant agreement n° 679030/WHIPLASH and n° 776403/ExoplanETS A)

Appendix A: Slant optical depth and transit radius of an isothermal, gray atmosphere with constant gravity

Appendix A.1: Homogeneous case

We first start by computing the optical depth along a ray crossing the atmosphere of a planet where temperature, gravity, and composition are constant. Here, we will follow the notations of Vahidinia et al. (2014), but the reader is referred to Guillot (2010) for a more in depth discussion. Notations are summarized in Fig. 1.

The constant atmospheric scale height, H , entails that the gas number density is given by

$$n = n_0 e^{-z/H}, \quad (\text{A.1})$$

where n_0 is the density at the reference radius (R_p). For a ray with a given tangent altitude z_t , the altitude in the atmosphere at a distance x from the terminator is given by

$$z = z_t + \frac{x^2}{2R_p}, \quad (\text{A.2})$$

to first order in z_t/R_p . The optical depth along a ray from the star to a given position x due to a given species is thus

$$\begin{aligned} \tau_{\text{tr}}(z_t) &= \int_{-\infty}^x \sigma_{\text{mol}} \chi n_0 e^{-z_t/H} e^{-x'^2/(2R_p H)} dx' \\ &= \sigma_{\text{mol}} \chi n_0 e^{-z_t/H} \int_{-\infty}^x e^{-x'^2/(2R_p H)} dx' \\ &= \sqrt{2\pi R_p H} \sigma_{\text{mol}} \chi n_0 e^{-z_t/H} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{2R_p H}} \right) \right) \\ &\xrightarrow{x \rightarrow \infty} \sqrt{2\pi R_p H} \sigma_{\text{mol}} \chi n_0 e^{-z_t/H}, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

where χ is the volume mixing ratio of the considered species, and σ_{mol} its cross section at the wavelength considered. Noting that the vertical optical depth is given by

$$\tau_{\perp}(z_t) = H \sigma_{\text{mol}} \chi n_0 e^{-z_t/H}, \quad (\text{A.4})$$

we retrieve the result from Guillot (2010) that

$$\tau_{\text{tr}} = \left(\frac{2\pi R_p}{H} \right)^{\frac{1}{2}} \tau_{\perp}. \quad (\text{A.5})$$

Following Sect. 2.5, to first order, the transit depth is given by

$$\delta = R_{\star}^{-2} \left(R_p^2 + 2 \int_{R_p}^{\infty} (1 - e^{-\tau_{\text{tr}}(\rho)}) \rho d\rho \right), \quad (\text{A.6})$$

where $\rho = R_p + z_t$. Along with Eq. (A.3), Eq. (A.6) is used to validate our model in Sect. 3.2.

Appendix A.2: Heterogeneous composition

In this subsection, we will slightly modify the model above to answer the following question: how far from the limb plane can an increase in the abundance of a given species still affect the transit in the relevant bands. To answer that, we will assume that the mixing ratio of the considered species is χ_{day} along the line ray for $x < x_{\text{limb}}$ (where x_{limb} is negative if the transition is on the day side) and χ_{night} beyond that. This is supposed to mimic a situation where an absorber, like TiO, becomes less abundant at the limb and on the night side because it condenses at cooler

temperatures. Because of the symmetry of the problem, this also treats the situation where an absorber becomes more abundant on the night side. Following Fig. 1, x_{limb} is also parametrized by the limb angle $\tan(\psi/2) = x_{\text{limb}}/(R_p + z_t)$.

If the composition were uniform, the optical depth at a given tangent altitude would be

$$\tau_{\text{tr}} = \sqrt{2\pi R_p H} \sigma_{\text{mol}} \chi_{\text{night}} n_0 e^{-z_t/H}. \quad (\text{A.7})$$

Using $\tau_{\text{tr}} \sim 1$ as a criterion for the effective altitude of absorption of the atmosphere, we get an effective altitude for the uniform case that is

$$z_{\text{uni}} = H \ln \left(\sqrt{2\pi R_p H} \sigma_{\text{mol}} \chi_{\text{night}} n_0 \right). \quad (\text{A.8})$$

Now, in the heterogeneous case, using the penultimate line of Eq. (A.3) yields

$$\tau_{\text{tr}} = \sqrt{2\pi R_p H} \sigma_{\text{mol}} n_0 e^{-z_t/H} \times \left(\frac{\chi_{\text{day}} + \chi_{\text{night}}}{2} + \frac{\chi_{\text{day}} - \chi_{\text{night}}}{2} \operatorname{erf} \left(\frac{x_{\text{limb}}}{\sqrt{2R_p H}} \right) \right), \quad (\text{A.9})$$

which is equal to the uniform case in the $x_{\text{limb}} \rightarrow -\infty$ limit, as expected. The effective altitude is then

$$z_{\text{het}} = z_{\text{uni}} - H \ln 2 + H \ln \left(\left(\frac{\chi_{\text{day}}}{\chi_{\text{night}}} + 1 \right) + \left(\frac{\chi_{\text{day}}}{\chi_{\text{night}}} - 1 \right) \operatorname{erf} \left(\frac{x_{\text{limb}}}{\sqrt{2R_p H}} \right) \right). \quad (\text{A.10})$$

At what angular distance from the limb plane can we still see such an increase of a given species in the transit spectrum? To answer this question, one needs to quantify at which angle ψ does the resulting change in effective transit altitude of the atmosphere due to the heterogeneity become measurable. This writes

$$\delta_{\text{het}} - \delta_{\text{het}} > \sigma_{\text{obs}} \Leftrightarrow z_{\text{het}}(\psi) - z_{\text{uni}} > \frac{R_*^2}{2R_p} \sigma_{\text{obs}}, \quad (\text{A.11})$$

where σ_{obs} is the relative precision level of the observations. Using the parameters for HD 209458 b and assuming a noise floor of 10 ppm – which is probably conservative for JWST – we see that an increase of the TiO abundance on the dayside of only a factor 100 is visible as far as 15° from the limb. This increase is also conservative as the abundance of TiO at temperature below 1600 K is less than 10^{-10} (Lodders 2002). This results in a limb width $\sim 30^\circ$ which is consistent with our other estimate (see Fig. 2).

Appendix B: Finding the spherical coordinates of a cell in the cylindrical grid

To link our two coordinate systems, we will use a cartesian reference frame centered around the center of the planet and whose orthonormal reference axes are $\{\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{Y}}, \hat{\mathbf{Z}}\}$. $\hat{\mathbf{Z}}$ is the unit vector along the rotation axis of the planet (pointing toward the north pole). $\hat{\mathbf{X}}$ points toward a reference point at the equator which will be the origin of longitudes. $\hat{\mathbf{Y}}$ is chosen to have a direct basis. The coordinates of any point in this system are $\mathbf{u} = (X, Y, Z)$.

Given the position of the observer

$$\hat{\mathbf{u}}_{\text{obs}} \equiv \begin{pmatrix} X_{\text{obs}} \\ Y_{\text{obs}} \\ Z_{\text{obs}} \end{pmatrix}_{\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{Y}}, \hat{\mathbf{Z}}} = \begin{pmatrix} \sin \alpha_{\text{obs}} \cos \lambda_{\text{obs}} \\ \sin \alpha_{\text{obs}} \sin \lambda_{\text{obs}} \\ \cos \alpha_{\text{obs}} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.1})$$

we need to know what are the physical conditions in the atmosphere at any given point \mathbf{u} determined by its cylindrical coordinates (ρ, θ, x) . For this we need to find the set of spherical coordinates (r, λ, α) corresponding to \mathbf{u} .

This can be done by first noticing that with our definitions (see Sect. 2.1.3), \mathbf{u} can be decomposed into a component in the plane of the sky and one along the line of sight

$$\mathbf{u}(\rho, \theta, x) = \mathbf{u}_{\text{ray}}(\rho, \theta) + x \hat{\mathbf{u}}_{\text{obs}}, \quad (\text{B.2})$$

where $\mathbf{u}_{\text{ray}} = (X_{\text{ray}}, Y_{\text{ray}}, Z_{\text{ray}})$ is the intersection between a (ρ, θ) -ray and the plane of the sky.

The first step is to compute $X_{\text{ray}}, Y_{\text{ray}}$, and Z_{ray} . These are uniquely determined thanks to the three following definitions that can be combined into one degree-two equation:

- Since θ is the angle between the projection of the planetary rotation vector onto the plane of the sky and \mathbf{u}_{ray} , it can be shown that $Z_{\text{ray}} = \rho \sin \alpha_{\text{obs}} \cos \theta$.
- \mathbf{u}_{ray} is in the plane of the sky so that $\mathbf{u}_{\text{ray}} \cdot \hat{\mathbf{u}}_{\text{obs}} = 0 = X_{\text{ray}} X_{\text{obs}} + Y_{\text{ray}} Y_{\text{obs}} + Z_{\text{ray}} Z_{\text{obs}}$.
- By definition, $\rho \equiv |\mathbf{u}_{\text{ray}}| = \sqrt{X_{\text{ray}}^2 + Y_{\text{ray}}^2 + Z_{\text{ray}}^2}$.

Once these three components are known for each (ρ, θ) , the spherical coordinates of a point are given by solving

$$r^2 = \rho^2 + x^2, \quad (\text{B.3})$$

$$\lambda = \arctan \left(\frac{Y_{\text{ray}}(\rho, \theta) + x Y_{\text{obs}}}{X_{\text{ray}}(\rho, \theta) + x X_{\text{obs}}} \right), \quad (\text{B.4})$$

$$\alpha = \arccos \left(\frac{Z_{\text{ray}}(\rho, \theta) + x Z_{\text{obs}}}{r} \right). \quad (\text{B.5})$$

Finally, for numerical reasons, we determine the set of indices $(i_r, i_\lambda, i_\alpha)$ representing this specific cell in the spherical grid.

To give a concrete example, for the simple case of a synchronous planet for which the origin of longitudes is chosen at the substellar point and observed when the star, planet, and observer are perfectly aligned, we have $\hat{\mathbf{u}}_{\text{obs}} = (-1, 0, 0)$. Then, solving the equations above yields $\mathbf{u}_{\text{ray}}(\rho, \theta) = (0, \rho \sin \theta, \rho \cos \theta)$, and the correspondance relationship is

$$r^2 = \rho^2 + x^2, \quad (\text{B.6})$$

$$\lambda = \arctan \left(\frac{\rho \sin \theta}{-x} \right), \quad (\text{B.7})$$

$$\alpha = \arccos \left(\frac{\rho \cos \theta}{r} \right). \quad (\text{B.8})$$

Appendix C: Computing the position of the intersection of a ray with a given interface of the spherical grid

In a spherical grid, the separation between cells is done by three types of surfaces: spheres, planes of constant longitude (meridians), and cones of constant (co)latitude. Our goal is to compute the location along a ray (x_{int}) of the intersection of this ray with any given of those surfaces. Because we know the indices of the cells before and after the intersection, we always know what type of surface we are crossing, and the value of the constant radius/longitude/colatitude identifying this surface (respectively $r_{\text{int}}, \lambda_{\text{int}}$, and α_{int}).

Because we also know the (ρ, θ) -ray we are dealing with and the observer's location, bear in mind that both $\mathbf{u}_{\text{ray}} = (X_{\text{ray}}, Y_{\text{ray}}, Z_{\text{ray}})$ and $\hat{\mathbf{u}}_{\text{obs}} = (X_{\text{obs}}, Y_{\text{obs}}, Z_{\text{obs}})$ are known.

The equations to be solved are

- Intersection with a sphere:

$$x_{\text{int}} = \pm \sqrt{r_{\text{int}}^2 - \rho^2}. \quad (\text{C.1})$$

The value is positive between the terminator and the observer and negative otherwise.

- Intersection with a meridian: Using Eq. (B.4), we can solve for the intersection, which yields

$$x_{\text{int}} = \frac{Y_{\text{ray}}(\rho, \theta) - X_{\text{ray}}(\rho, \theta) \tan \lambda_{\text{int}}}{X_{\text{obs}} \tan \lambda_{\text{int}} - Y_{\text{obs}}}. \quad (\text{C.2})$$

- Intersection with a cone of constant colatitude: Combining Eqs. (B.3) and (B.5) we get a second degree equation in x_{int}/ρ

$$0 = (\cos^2 \alpha_{\text{int}} - \cos^2 \alpha_{\text{obs}}) \left(\frac{x_{\text{int}}}{\rho} \right)^2 - (2 \cos \alpha_{\text{obs}} \sin \alpha_{\text{obs}} \cos \theta) \left(\frac{x_{\text{int}}}{\rho} \right) + (\cos^2 \alpha_{\text{int}} - \sin^2 \alpha_{\text{obs}} \cos^2 \theta). \quad (\text{C.3})$$

As can be seen from the equation above, the equation is the same for α_{int} and $\pi - \alpha_{\text{int}}$ (i.e. $\pm \varphi_{\text{int}}$). This means that one cannot know *a priori* whether the solutions found are in the northern or southern hemisphere. In fact, when two solutions exist, the ray either intersects the cone twice in the same hemisphere (when $|\varphi_{\text{obs}}| < |\varphi_{\text{int}}|$), or once on each side of the equator. To remove this degeneracy, one can compute the position of the intersection of the ray with the equator x_{equ} . Then if $x_{\text{int}} > x_{\text{equ}}$ the intersection is in the same hemisphere than the observer and vice versa.

Appendix D: Rayleigh scattering data

Typically, refractive indices follow the generic expression

$$(n - 1)10^8 = A + \frac{B}{C - \lambda^{-2}}, \quad (\text{D.1})$$

with terms and their values as described in Table D.1, along with the corresponding King correction factor equations. This term is taken as unity for mono-atomic gases and is calculated *ab initio* as described in Bates, R. et al. (1984) for diatomic gases. The wavelength dependency of variables is also specified in Table D.1. Note that for all the formulae in this section, the wavelength is expressed in μm .

Some molecules have non-standard parametrizations. For CO_2 (Sneep, M. & Ubachs, W. (2004))

$$\left(\frac{n_{\lambda}^2 - 1}{n_{\lambda}^2 + 2} \right) \times 10^8 = 1.1427 \times 10^{14} \times \left(\frac{5.79925 \times 10^{-5}}{5.0821 \times 10^2 - 1/\lambda^2} + \frac{1.2005 \times 10^{-6}}{7.9608 \times 10^1 - 1/\lambda^2} + \frac{5.3334 \times 10^{-8}}{5.6306 \times 10^1 - 1/\lambda^2} + \frac{4.3244 \times 10^{-8}}{4.619 \times 10^1 - 1/\lambda^2} + \frac{1.2181 \times 10^{-13}}{5.8474 \times 10^{-2} - 1/\lambda^2} \right) \quad (\text{D.2})$$

and

$$F_k = 1.1364 + \frac{2.53 \times 10^{-3}}{\lambda^2} \quad (\text{D.3})$$

For CH_4 (Sneep, M. & Ubachs, W. (2004))

$$(n_{\lambda} - 1) = 4.6662 \cdot 10^{-4} + \frac{4.02 \times 10^{-6}}{\lambda^2} \quad (\text{D.4})$$

For H_2O , if $\lambda > 0.23 \mu\text{m}$

$$(n_{\lambda} - 1) = \frac{4.92303 \times 10^{-2}}{2.380185 \cdot 10^2 - 1/\lambda^2} + \frac{1.42723 \times 10^{-3}}{5.73262 \times 10^1 - 1/\lambda^2} \quad (\text{D.5})$$

and if $\lambda < 0.23 \mu\text{m}$

$$(n_{\lambda} - 1) = 6.85143 \times 10^{-2} + \frac{2.10884 \times 10^{-2}}{1.32274 \times 10^2 - 1/\lambda^2} + \frac{1.4837 \times 10^{-3}}{3.932957 \times 10^1 - 1/\lambda^2} \quad (\text{D.6})$$

For molecular hydrogen we calculate the cross-section as described in Dalgarno & Williams (1962), if $\lambda > 30 \mu\text{m}$

$$\sigma_s(\nu) = \frac{8.49 \times 10^{-33}}{\lambda^4} \quad (\text{D.7})$$

and if $\lambda < 30 \mu\text{m}$

$$\sigma_s(\nu) = \frac{8.14 \times 10^{-33}}{\lambda^4} + \frac{1.28 \times 10^{-34}}{\lambda^6} + \frac{1.61 \times 10^{-35}}{\lambda^8} \quad (\text{D.8})$$

References

- Agúndez, M., Parmentier, V., Venot, O., Hersant, F., & Selsis, F. 2014, A&A, 564, A73
- Barber, R. J., Tennyson, J., Harris, G. J., & Tolchenov, R. N. 2006, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 368, 1087
- Batalha, N. E., Mandell, A., Pontoppidan, K., et al. 2017, PASP, 129, 064501
- Bates, R., Zarana, K. J., Tolbert, M. A., & Volkamer, R. 1984, Planet Space Science, 32, 785
- Beichman, C., Benneke, B., Knutson, H., et al. 2014, PASP, 126, 1134
- Blecic, J., Dobbs-Dixon, I., & Greene, T. 2017, ApJ, 848, 127
- Borysow, A. 2002, A&A, 390, 779
- Borysow, A., Jorgensen, U. G., & Fu, Y. 2001, J. Quant. Spec. Radiat. Transf., 68, 235
- Charnay, B., Meadows, V., Misra, A., Leconte, J., & Arney, G. 2015, ApJ, 813, L1
- Chiavassa, A., Caldas, A., Selsis, F., et al. 2017, A&A, 597, A94
- Clough, S., Kneizys, F., & Davies, R. 1989, Atmospheric Research, 23, 229
- Cowan, N. B. & Agol, E. 2011, ApJ, 729, 54
- Dalgarno, A. & Williams, D. A. 1962, ApJ, 136, 690
- Evans, T. M., Sing, D. K., Kataria, T., et al. 2017, Nature, 548, 58
- Feng, Y. K., Line, M. R., Fortney, J. J., et al. 2016, ApJ, 829, 52
- Fortney, J. J., Shabram, M., Showman, A. P., et al. 2010, ApJ, 709, 1396
- Fu, Q. & Liou, K. N. 1992, Journal of Atmospheric Sciences, 49, 2139
- Guillot, T. 2010, A&A, 520, A27+
- Hill, C., Yurchenko, S. N., & Tennyson, J. 2013, Icarus, 226, 1673
- Keating, D. & Cowan, N. B. 2018, ArXiv e-prints
- Komacek, T. D., Showman, A. P., & Tan, X. 2017, ApJ, 835, 198
- Kreidberg, L., Bean, J. L., Désert, J.-M., et al. 2014, Nature, 505, 69
- Leconte, J., Forget, F., Charnay, B., Wordsworth, R., & Pottier, A. 2013, Nature, 504, 268
- Lee, G., Dobbs-Dixon, I., Helling, C., Bognar, K., & Woitke, P. 2016, A&A, 594, A48
- Line, M. R. & Parmentier, V. 2016, ApJ, 820, 78
- Lines, S., Manners, J., Mayne, N. J., et al. 2018, ArXiv e-prints
- Lodders, K. 2002, ApJ, 577, 974
- Madeleine, J.-B., Forget, F., Millour, E., Montabone, L., & Wolff, M. J. 2011, Journal of Geophysical Research (Planets), 116, E11010
- Madhusudhan, N. 2018, ArXiv e-prints
- Parmentier, V., Line, M. R., Bean, J. L., et al. 2018, ArXiv e-prints
- Parmentier, V., Showman, A. P., & Lian, Y. 2013, A&A, 558, A91
- Richard, C., Gordon, I., Rothman, L., et al. 2011, Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 116, 11010
- Rocchetto, M., Waldmann, I. P., Venot, O., Lagage, P.-O., & Tinetti, G. 2016, ApJ, 833, 120
- Rothman, L. S., Gordon, I. E., Babikov, Y., et al. 2013, J. Quant. Spec. Radiat. Transf., 130, 4
- Selsis, F., Wordsworth, R. D., & Forget, F. 2011, A&A, 532, A1
- Sneep, M. & Ubachs, W. 2004, Elsevier, 92, 293
- Thalman, R., Zarana, K. J., Tolbert, M. A., & Volkamer, R. 2014, Elsevier, 147, 171
- Tinetti, G., Drossart, P., Eccleston, P., et al. 2017, European Planetary Science Congress, 11, EPSC2017
- Turbet, M., Bolmont, E., Leconte, J., et al. 2017, ArXiv e-prints
- Turbet, M., Leconte, J., Selsis, F., et al. 2016, A&A, 596, A112
- Vahidinia, S., Cuzzi, J. N., Marley, M., & Fortney, J. 2014, ApJ, 789, L11
- Waldmann, I. P., Tinetti, G., Rocchetto, M., et al. 2015, ApJ, 802, 107
- Wordsworth, R. D., Forget, F., Selsis, F., et al. 2011, ApJ, 733, L48

Table D.1. Values of the parameters used in Eq.(6).

Gas	Wavelength (μm)	$A/10^4$	$B/10^6(\mu\text{m}^{-2})$	$C/10^2(\mu\text{m}^{-2})$	King factor F_k	References
He	<i>all</i>	0.2283	0.2283	1.532	1	Thalman, R. et al. (2014)
N ₂	$\lambda > 0.460$	0.6498	3.0740	1.44	$1.034 + 3.17 \times 10^{-4}/\lambda^2$	Thalman, R. et al. (2014)
	$0.460 > \lambda > 0.254$	0.6677	3.1882	1.44		Bates, R. et al. (1984)
O ₂	$\lambda < 0.254$	0.6999	3.2336	1.44	$1,096 + 1.385 \times 10^{-3}/\lambda^2 + 1.448 \times 10^{-4}1/\lambda^4$	Thalman, R. et al. (2014)
	$\lambda > 0.546$	2.1351	0.218567	0.409		Bates, R. et al. (1984)
	$0.546 < \lambda < 0.288$	2.0564	0.248090	0.409		Sneep, M. (2004)
	$0.288 > \lambda < 0.221$	2.21204	0.203187	0.409		
CO	<i>all</i>	2.2851	0.0456	0.51018	1.016	Sneep, M. (2004)
Ar	<i>all</i>	0.6432135	0.028606	1.44	1	Thalman, R. et al. (2014)

The nature of the TRAPPIST-1 exoplanets

Simon L. Grimm¹, Brice-Olivier Demory¹, Michaël Gillon², Caroline Dorn^{1,19}, Eric Agol^{3,4,17,18}, Artem Burdanov², Laetitia Delrez^{2,5}, Marko Sestovic¹, Amaury H. M. J. Triaud^{6,7}, Martin Turbet⁸, Émeline Bolmont⁹, Anthony Caldas¹⁰, Julien de Wit¹¹, Emmanuël Jehin², Jérémy Leconte¹⁰, Sean N. Raymond¹⁰, Valérie Van Grootel², Adam J. Burgasser¹², Sean Carey¹³, Daniel Fabrycky¹⁴, Kevin Heng¹, David M. Hernandez¹⁵, James G. Ingalls¹³, Susan Lederer¹⁶, Franck Selsis¹⁰, and Didier Queloz⁵

¹ University of Bern, Center for Space and Habitability, Gesellschaftsstrasse 6, 3012 Bern, Switzerland
e-mail: brice.demory@csh.unibe.ch

² Space Sciences, Technologies and Astrophysics Research (STAR) Institute, Université de Liège, Allée du 6 août 19C, 4000 Liège, Belgium

³ Astronomy Department, University of Washington, Seattle, WA 98195, USA

⁴ NASA Astrobiology Institute's Virtual Planetary Laboratory, Seattle, WA 98195, USA

⁵ Cavendish Laboratory, JJ Thomson Avenue, Cambridge CB3 0HE, UK

⁶ Institute of Astronomy, Madingley Road, Cambridge CB3 0HA, UK

⁷ School of Physics & Astronomy, University of Birmingham, Edgbaston, Birmingham B15 2TT, UK

⁸ Laboratoire de Météorologie Dynamique, IPSL, Sorbonne Universités, UPMC Univ. Paris 06, CNRS, 4 place Jussieu, 75005 Paris, France

⁹ Université Paris Diderot, AIM, Sorbonne Paris Cité, CEA, CNRS, 91191 Gif-sur-Yvette, France

¹⁰ Laboratoire d'astrophysique de Bordeaux, Univ. Bordeaux, CNRS, B18N, Allée Geoffroy Saint-Hilaire, 33615 Pessac, France

¹¹ Department of Earth, Atmospheric and Planetary Sciences, Massachusetts Institute of Technology, 77 Massachusetts Avenue, Cambridge, MA 02139, USA

¹² Center for Astrophysics and Space Science, University of California San Diego, La Jolla, CA 92093, USA

¹³ IPAC, Mail Code 314-6, Calif. Inst. of Technology, 1200 E California Blvd, Pasadena, CA 91125, USA

¹⁴ Department of Astronomy and Astrophysics, Univ. of Chicago, 5640 S Ellis Ave, Chicago, IL 60637, USA

¹⁵ Department of Physics and Kavli Institute for Astrophysics and Space Research, Massachusetts Institute of Technology, 77 Massachusetts Ave., Cambridge, MA 02139, USA

¹⁶ NASA Johnson Space Center, 2101 NASA Parkway, Houston, TX 77058, USA

¹⁷ Guggenheim Fellow

¹⁸ Institut d'Astrophysique de Paris, 98 bis Boulevard Arago, 75014 Paris, France

¹⁹ University of Zurich, Institute of Computational Sciences, Winterthurerstrasse 190, 8057 Zurich, Switzerland

Received 3 November 2017 / Accepted 21 January 2018

ABSTRACT

Context. The TRAPPIST-1 system hosts seven Earth-sized, temperate exoplanets orbiting an ultra-cool dwarf star. As such, it represents a remarkable setting to study the formation and evolution of terrestrial planets that formed in the same protoplanetary disk. While the sizes of the TRAPPIST-1 planets are all known to better than 5% precision, their densities have significant uncertainties (between 28% and 95%) because of poor constraints on the planet's masses.

Aims. The goal of this paper is to improve our knowledge of the TRAPPIST-1 planetary masses and densities using transit-timing variations (TTVs). The complexity of the TTV inversion problem is known to be particularly acute in multi-planetary systems (convergence issues, degeneracies and size of the parameter space), especially for resonant chain systems such as TRAPPIST-1.

Methods. To overcome these challenges, we have used a novel method that employs a genetic algorithm coupled to a full N-body integrator that we applied to a set of 284 individual transit timings. This approach enables us to efficiently explore the parameter space and to derive reliable masses and densities from TTVs for all seven planets.

Results. Our new masses result in a five- to eight-fold improvement on the planetary density uncertainties, with precisions ranging from 5% to 12%. These updated values provide new insights into the bulk structure of the TRAPPIST-1 planets. We find that TRAPPIST-1 c and e likely have largely rocky interiors, while planets b, d, f, g, and h require envelopes of volatiles in the form of thick atmospheres, oceans, or ice, in most cases with water mass fractions less than 5%.

Key words. methods: numerical – planets and satellites: detection – planets and satellites: individual: TRAPPIST-1

1. Introduction

The TRAPPIST-1 system, which harbours seven Earth-size exoplanets orbiting an ultra-cool star (Gillon et al. 2017), represents a fascinating setting to study the formation and evolution of tightly packed small planet systems. While the TRAPPIST-1

planet sizes are all known to better than 5%, their densities suffer from significant uncertainty (between 28% and 95%) because of loose constraints on planet masses. This critically impacts in turn our knowledge of the planetary interiors, formation pathway (Ormel et al. 2017; Unterborn et al. 2018) and long-term stability of the system. So far, most exoplanet masses

Modelling climate diversity, tidal dynamics and the fate of volatiles on TRAPPIST-1 planets

Martin Turbet¹, Emeline Bolmont², Jeremy Leconte³, Francois Forget¹, Franck Selsis³, Gabriel Tobie⁴, Anthony Caldas³, Joseph Naar^{1,5} and Michaël Gillon⁶

¹ Laboratoire de Météorologie Dynamique, IPSL, Sorbonne Universités, UPMC Univ Paris 06, CNRS, 4 place Jussieu, 75005 Paris, France. e-mail: martin.turbet@lmd.jussieu.fr

² Laboratoire AIM Paris-Saclay, CEA/DRF - CNRS - Université Paris Diderot, IRFU/SAP Centre de Saclay, 91191, Gif-sur-Yvette.

³ Laboratoire d'astrophysique de Bordeaux, Univ. Bordeaux, CNRS, B18N, allée Geoffroy Saint-Hilaire, 33615 Pessac, France.

⁴ Laboratoire de Planétologie et Géodynamique, UMR-CNRS 6112, University of Nantes, 2 rue de la Houssinière, F-44322 Nantes, France.

⁵ Département de géosciences, École Normale Supérieure, PSL Research University, 75005 Paris, France.

⁶ Space Sciences, Technologies and Astrophysics Research (STAR) Institute, Université de Liège, Allée du 6 Août 19C, B-4000 Liège, Belgium.

Received; accepted

ABSTRACT

TRAPPIST-1 planets are invaluable for the study of comparative planetary science outside our Solar System and possibly habitability. Both Time Transit Variations (TTV) of the planets and the compact, resonant architecture of the system suggest that TRAPPIST-1 planets could be endowed with various volatiles today. First, we derive from N-body simulations possible planetary evolution scenarios, and show that all the planets are likely in synchronous rotation. We then use a versatile 3-D Global Climate Model (GCM) to explore the possible climates of cool planets around cool stars, with a focus on the TRAPPIST-1 system. We look at the conditions required for cool planets to prevent possible volatile species to be lost permanently by surface condensation, irreversible burying or photochemical destruction. We also explore the resilience of the same volatiles (when in condensed phase) to a runaway greenhouse process. We find that background atmospheres made of N₂, CO or O₂ are rather resistant to atmospheric collapse. However, even if TRAPPIST-1 planets were able to sustain a thick background atmosphere by surviving early X/UV radiation and stellar wind atmospheric erosion, it is difficult for them to accumulate significant greenhouse gases like CO₂, CH₄ or NH₃. CO₂ can easily condense on the permanent nightside, forming CO₂ ice glaciers that would flow toward the substellar region. A complete CO₂ ice surface cover is theoretically possible on TRAPPIST-1g and h only, but CO₂ ices should be gravitationally unstable and get buried beneath the water ice shell in geologically short timescales. Given TRAPPIST-1 planets large EUV irradiation (at least $\sim 10^3 \times$ Titan's flux), CH₄ and NH₃ are photodissociated rapidly and are thus hard to accumulate in the atmosphere. Photochemical hazes could then sedimentate and form a surface layer of tholins that would progressively thicken over the age of the TRAPPIST-1 system. Regarding habitability, we confirm that few bars of CO₂ would suffice to warm the surface of TRAPPIST-1f and g above the melting point of water. We also show that TRAPPIST-1e is a remarkable candidate for surface habitability. If the planet is today synchronous and abundant in water, then it should always sustain surface liquid water at least in the substellar region, whatever the atmosphere considered.

1. Introduction

TRAPPIST-1 planets recently discovered by Gillon et al. (2016, 2017) are the closest known transiting temperate Earth-sized exoplanets. The TRAPPIST-1 system hosts at least seven planets that are similar in size (from ~ 0.72 to $\sim 1.13R_{\oplus}$) and irradiation (from ~ 0.14 to $\sim 4.3S_{\oplus}$) to Solar System rocky planets. Considering that the parent star TRAPPIST-1 is an ultra-cool ($T_{\text{eff}} = 2550$ K), low-mass ($M_{\star} = 0.09 M_{\odot}$) star, the planets of the system should have potentially followed evolutionary pathways very different from what the Solar System planets experienced. They are therefore invaluable probes for comparative planetary science and habitability.

In a first approach, we can speculate on what TRAPPIST-1 planets might look like by comparing their size and irradiation with Solar System planets. TRAPPIST-1b ($0.64 S_{\text{Mercury}}$) and TRAPPIST-1c ($1.19 S_{\text{Venus}}$) might be airless planets like

Mercury, or endowed with a thick atmosphere like Venus. TRAPPIST-1d ($1.14 S_{\oplus}$) is located near the inner edge of the Habitable Zone, traditionally defined as the range of orbital distances within which a planet can possibly maintain liquid water on its surface (Kasting et al. 1993; Kopparapu et al. 2013). Its capacity to host surface oceans, assuming an Earth-like atmosphere and water content, should depend on 1) its rotation mode and 2) subtle cloud albedo feedbacks (Yang et al. 2013; Kopparapu et al. 2016). TRAPPIST-1e ($0.66 S_{\oplus}$) lies at the right distance to maintain surface liquid water if enough water is available and the atmosphere suitable. TRAPPIST-1f ($0.89 S_{\text{Mars}}$) and TRAPPIST-1g ($0.60 S_{\text{Mars}}$), being slightly bigger than Mars, could have retained a thick CO₂ atmosphere and thus conditions potentially similar to Early Mars for a long period of time. Eventually, TRAPPIST-1h ($0.30 S_{\text{Mars}}$, 12

Measuring stellar granulation during planet transits

A. Chiavassa¹, A. Caldas², F. Selsis², J. Leconte², P. Von Paris², P. Bordé², Z. Magic^{3,4}, R. Collet^{5,6}, M. Asplund⁵

¹ Laboratoire Lagrange, Université Côte d'Azur, Observatoire de la Côte d'Azur, CNRS, Blvd de l'Observatoire, CS 34229, 06304 Nice cedex 4, France

e-mail: andrea.chiavassa@oca.eu

² Laboratoire d'astrophysique de Bordeaux, Univ. Bordeaux, CNRS, B18N, allée Geoffroy Saint-Hilaire, 33615 Pessac, France

³ Niels Bohr Institute, University of Copenhagen, Juliane Maries Vej 30, DK-2100 Copenhagen, Denmark

⁴ Centre for Star and Planet Formation, Natural History Museum of Denmark, University of Copenhagen, Øster Voldgade 5-7, DK-1350 Copenhagen, Denmark

⁵ Research School of Astronomy & Astrophysics, Australian National University, Cotter Road, Weston ACT 2611, Australia

⁶ Stellar Astrophysics Centre, Department of Physics and Astronomy, Ny Munkegade 120, Aarhus University, DK-8000 Aarhus C, Denmark

...; ...

ABSTRACT

Context. Stellar activity and convection-related surface structures might cause bias in planet detection and characterization that use these transits. Surface convection simulations help to quantify the granulation signal.

Aims. We used realistic three-dimensional (3D) radiative hydrodynamical (RHD) simulations from the STAGGER grid and synthetic images computed with the radiative transfer code OPTIM3D to model the transits of three prototype planets: a hot Jupiter, a hot Neptune, and a terrestrial planet.

Methods. We computed intensity maps from RHD simulations of the Sun and a K-dwarf star at different wavelength bands from optical to far-infrared that cover the range of several ground- and space-based telescopes which observe exoplanet transits. We modeled the transit using synthetic stellar-disk images obtained with a spherical-tile imaging method and emulated the temporal variation of the granulation intensity generating random images covering a granulation time-series of 13.3 hours. We measured the contribution of the stellar granulation on the light curves during the planet transit.

Results. We identified two types of granulation noise that act simultaneously during the planet transit: (i) the intrinsic change in the granulation pattern with timescale (e.g., 10 minutes for solar-type stars assumed in this work) is smaller than the usual planet transit (~hours as in our prototype cases), and (ii) the fact that the transiting planet occults isolated regions of the photosphere that differ in local surface brightness as a result of convection-related surface structures. First, we showed that our modeling approach returns granulation timescale fluctuations that are comparable with what has been observed for the Sun. Then, our statistical approach shows that the granulation pattern of solar and K-dwarf-type stars have a non-negligible effect of the light curve depth during the transit, and, consequentially on the determination of the planet transit parameters such as the planet radius (up to 0.90% and ~ 0.47% for terrestrial and gaseous planets, respectively). We also showed that larger (or smaller) orbital inclination angles with respect to values corresponding to transit at the stellar center display a shallower transit depth and longer ingress and egress times, but also granulation fluctuations that are correlated to the center-to-limb variation: they increase (or decrease) the value of the inclination, which amplifies the fluctuations. The granulation noise appears to be correlated among the different wavelength ranges either in the visible or in the infrared regions.

Conclusions. The prospects for planet detection and characterization with transiting methods are excellent with access to large amounts of data for stars. The granulation has to be considered as an intrinsic uncertainty (as a result of stellar variability) on the precise measurements of exoplanet transits of planets. The full characterization of the granulation is essential for determining the degree of uncertainty on the planet parameters. In this context, the use of 3D RHD simulations is important to measure the convection-related fluctuations. This can be achieved by performing precise and continuous observations of stellar photometry and radial velocity, as we explained with RHD simulations, before, after, and during the transit periods.

Key words. Planet-star interactions – Stars: activity – Techniques: photometry – stars: atmospheres – hydrodynamics – radiative transfer

1. Introduction

Among the different methods used to detect exoplanets, the transit method is a very successful technique: 1147 planets and 3787 transit candidates have been confirmed with it (as of November 2015 from <http://exoplanets.org>, Wright et al. 2011). A transit event occurs when the planet crosses the line of sight between the star and the observer, thus occulting part of the star. This creates a periodic dip in the brightness of the star. The typical stellar light blocked is ~ 1%, 0.1%, and

0.01% for Jupiter-, Neptune- and Earth-like planets transiting in front of a Sun-like star, respectively (Borucki & Summers 1984), making the detection very challenging, in particular for Earth-like planets. During the transit, the flux decrease is proportional to the squared ratio of planet and stellar radii. For sufficiently bright stars, the mass can also be measured from the host star's radial velocity semi-amplitude (Mislis et al. 2012). When the mass and radius of an exoplanet are known, its mean density can also be deduced and provide useful information for the physical formation processes. Today and in the near future,

Bibliography

- Andrieu, C., N. De Freitas, A. Doucet, and M. I. Jordan (2003, June). An introduction of MCMC for machine learning. *Kluwer Academic Publishers* 50, 5–43.
- Barber, R. J., J. K. Strange, C. Hill, O. L. Polyansky, G. C. Mellau, S. N. Yurchenko, and J. Tennyson (2014, January). ExoMol line lists - III. An improved hot rotation-vibration line list for HCN and HNC. *MNRAS* 437, 1828–1835.
- Barber, R. J., J. Tennyson, G. J. Harris, and R. N. Tolchenov (2006, May). A high-accuracy computed water line list. *MNRAS* 368, 1087–1094.
- Barstow, J. K., S. Aigrain, P. G. J. Irwin, L. N. Fletcher, and J.-M. Lee (2013, September). Constraining the atmosphere of GJ 1214b using an optimal estimation technique. *MNRAS* 434, 2616–2628.
- Barstow, J. K., S. Aigrain, P. G. J. Irwin, and D. K. Sing (2017, January). A Consistent Retrieval Analysis of 10 Hot Jupiters Observed in Transmission. *ApJ* 834, 50.
- Barton, E. J., S. N. Yurchenko, and J. Tennyson (2013, September). ExoMol line lists - II. The ro-vibrational spectrum of SiO. *MNRAS* 434, 1469–1475.
- Barton, E. J., S. N. Yurchenko, J. Tennyson, S. Béguier, and A. Campargue (2016, July). A near infrared line list for NH₃: Analysis of a Kitt Peak spectrum after 35 years. *Journal of Molecular Spectroscopy* 325, 7–12.
- Batalha, N. E., A. Mandell, K. Pontoppidan, K. B. Stevenson, N. K. Lewis, J. Kalirai, N. Earl, T. Greene, L. Albert, and L. D. Nielsen (2017, June). PandExo: A Community Tool for Transiting Exoplanet Science with JWST and HST. *PASP* 129(6), 064501.
- Bates, D. R. (1984, June). Rayleigh scattering by air. *Planet. Space Sci.* 32, 785–790.
- Beaulieu, J. P., S. Carey, I. Ribas, and G. Tinetti (2008, April). Primary Transit of the Planet HD 189733b at 3.6 and 5.8 μm . *ApJ* 677, 1343–1347.
- Bétrémieux, Y. and L. Kaltenegger (2014, August). Impact of Atmospheric Refraction: How Deeply can We Probe Exo-Earth's Atmospheres during Primary Eclipse Observations? *ApJ* 791, 7.
- Bétrémieux, Y. and L. Kaltenegger (2015, August). Refraction in planetary atmospheres: improved analytical expressions and comparison with a new ray-tracing algorithm. *MNRAS* 451, 1268–1283.
- Charbonneau, D., Z. K. Berta, J. Irwin, C. J. Burke, P. Nutzman, L. A. Buchhave, C. Lovis, X. Bonfils, D. W. Latham, S. Udry, R. A. Murray-Clay, M. J. Holman, E. E. Falco, J. N. Winn, D. Queloz, F. Pepe, M. Mayor, X. Delfosse, and T. Forveille (2009, December). A super-Earth transiting a nearby low-mass star. *Nature* 462, 891–894.

- Charnay, B., F. Forget, G. Tobie, C. Sotin, and R. Wordsworth (2014, October). Titan's past and future: 3D modeling of a pure nitrogen atmosphere and geological implications. *Icarus* 241, 269–279.
- Charnay, B., V. Meadows, and J. Leconte (2015, November). 3D Modeling of GJ1214b's Atmosphere: Vertical Mixing Driven by an Anti-Hadley Circulation. *ApJ* 813, 15.
- Chiavassa, A., A. Caldas, F. Selsis, J. Leconte, P. Von Paris, P. Bordé, Z. Magic, R. Collet, and M. Asplund (2017, January). Measuring stellar granulation during planet transits. *A&A* 597, A94.
- Clough, S., F. Kneizys, and R. Davies (1989). Line shape and the water vapor continuum. *Atmospheric Research* 23(4), 229 – 241.
- Cowan, N. B., T. Greene, D. Angerhausen, N. E. Batalha, M. Clampin, K. Colón, I. J. M. Crossfield, J. J. Fortney, B. S. Gaudi, J. Harrington, N. Iro, C. F. Lillie, J. L. Linsky, M. Lopez-Morales, A. M. Mandell, and K. B. Stevenson (2015, March). Characterizing Transiting Planet Atmospheres through 2025. *PASP* 127, 311.
- Crisp, D. (1997). Absorption of sunlight by water vapor in cloudy conditions: A partial explanation for the cloud absorption anomaly. *Geophys. Res. Lett.* 24, 571–574.
- Dalgarno, A. and D. A. Williams (1962, September). Rayleigh Scattering by Molecular Hydrogen. *ApJ* 136, 690–692.
- Demory, B.-O., J. de Wit, N. Lewis, J. Fortney, A. Zsom, S. Seager, H. Knutson, K. Heng, N. Madhusudhan, M. Gillon, T. Barclay, J.-M. Desert, V. Parmentier, and N. B. Cowan (2013, October). Inference of Inhomogeneous Clouds in an Exoplanet Atmosphere. *ApJ* 776, L25.
- Demory, B.-O., S. Seager, N. Madhusudhan, H. Kjeldsen, J. Christensen-Dalsgaard, M. Gillon, J. F. Rowe, W. F. Welsh, E. R. Adams, A. Dupree, D. McCarthy, C. Kulesa, W. J. Borucki, and D. G. Koch (2011, July). The High Albedo of the Hot Jupiter Kepler-7 b. *ApJ* 735, L12.
- Dubos, T., S. Dubey, M. Tort, R. Mittal, Y. Meurdesoif, and F. Hourdin (2015, October). DYNAMICO-1.0, an icosahedral hydrostatic dynamical core designed for consistency and versatility. *Geoscientific Model Development* 8, 3131–3150.
- Dubos, T., Y. Meurdesoif, A. Spiga, E. Millour, L. Fita, F. Hourdin, M. Kageyama, A.-K. Traore, S. Guerlet, and J. Polcher (2017, April). DYNAMICO, an atmospheric dynamical core for high-performance climate modeling. In *EGU General Assembly Conference Abstracts*, Volume 19 of *EGU General Assembly Conference Abstracts*, pp. 11045.
- Feroz, F. and M. P. Hobson (2008, February). Multimodal nested sampling: an efficient and robust alternative to Markov Chain Monte Carlo methods for astronomical data analyses. *MNRAS* 384, 449–463.
- Forget, F. (1998). Improved optical properties of the Martian atmospheric dust for radiative transfer calculations in the infrared. *Geophys. Res. Lett.* 25, 1105–1108.
- Fu, G., D. Deming, H. Knutson, N. Madhusudhan, A. Mandell, and J. Fraine (2017, October). Statistical Analysis of Hubble/WFC3 Transit Spectroscopy of Extrasolar Planets. *ApJ* 847, L22.
- Gilli, G., S. Lebonnois, L. Salmi, F. Gonzalez-Galindo, M. A. Lopez-Valverde, V. Eymet, and F. Forget (2014, April). Thermal structure of Venus upper atmosphere by a ground-to-thermosphere GCM: a preliminary study. *European Planetary Science Congress* 9, EPSC2014–352.

- Grimm, S. L., B.-O. Demory, M. Gillon, C. Dorn, E. Agol, A. Burdanov, L. Delrez, M. Sestovic, A. H. M. J. Triaud, M. Turbet, É. Bolmont, A. Caldas, J. d. Wit, E. Jehin, J. Leconte, S. N. Raymond, V. V. Grootel, A. J. Burgasser, S. Carey, D. Fabrycky, K. Heng, D. M. Hernandez, J. G. Ingalls, S. Lederer, F. Selsis, and D. Queloz (2018, June). The nature of the TRAPPIST-1 exoplanets. *A&A* 613, A68.
- Guillot, T. (2010, September). On the radiative equilibrium of irradiated planetary atmospheres. *A&A* 520, A27.
- Hill, C., S. N. Yurchenko, and J. Tennyson (2013, November). Temperature-dependent molecular absorption cross sections for exoplanets and other atmospheres. *Icarus* 226, 1673–1677.
- Irwin, P. G. J., N. A. Teanby, R. de Kok, L. N. Fletcher, C. J. A. Howett, C. C. C. Tsang, C. F. Wilson, S. B. Calcutt, C. A. Nixon, and P. D. Parrish (2008, April). The NEMESIS planetary atmosphere radiative transfer and retrieval tool. *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.* 109, 1136–1150.
- Jackson, J. (1999). *Classical electrodynamics, 3rd ed.* New York: Wiley. Cox, J. P. & Giuli, R. T.
- Kataria, T., A. P. Showman, J. J. Fortney, K. B. Stevenson, M. R. Line, L. Kreidberg, J. L. Bean, and J.-M. Désert (2015, March). The Atmospheric Circulation of the Hot Jupiter WASP-43b: Comparing Three-dimensional Models to Spectrophotometric Data. *ApJ* 801, 86.
- Keeton, C. R. (2011, June). On statistical uncertainty in nested sampling. *MNRAS* 414, 1418–1426.
- King, L. (1923). *On the complex anisotropic molecule in relation to the dispersion and scattering of light.* *Proc Roy Soc London.* Cox, J. P. & Giuli, R. T.
- Kreidberg, L., J. L. Bean, J.-M. Désert, B. Benneke, D. Deming, K. B. Stevenson, S. Seager, Z. Bert-Thompson, A. Seifahrt, and D. Homeier (2014, January). Clouds in the atmosphere of the super-Earth exoplanet GJ1214b. *Nature* 505, 69–72.
- Kreidberg, L., M. R. Line, J. L. Bean, K. B. Stevenson, J.-M. Désert, N. Madhusudhan, J. J. Fortney, J. K. Barstow, G. W. Henry, M. H. Williamson, and A. P. Showman (2015, November). A Detection of Water in the Transmission Spectrum of the Hot Jupiter WASP-12b and Implications for Its Atmospheric Composition. *ApJ* 814, 66.
- Kreidberg, L., M. R. Line, V. Parmentier, K. B. Stevenson, T. Louden, M. Bonnefoy, J. K. Faherty, G. W. Henry, M. H. Williamson, K. Stassun, T. G. Beatty, J. L. Bean, J. J. Fortney, A. P. Showman, J.-M. Désert, and J. Arcangeli (2018, July). Global Climate and Atmospheric Composition of the Ultra-hot Jupiter WASP-103b from HST and Spitzer Phase Curve Observations. *AJ* 156, 17.
- Lacis, A. A. and V. Oinas (1991, May). A description of the correlated-k distribution method for modelling nongray gaseous absorption, thermal emission, and multiple scattering in vertically inhomogeneous atmospheres. *J. Geophys. Res.* 96, 9027–9064.
- Lebonnois, S., F. Forget, and F. Hourdin (2008, December). Using Terrestrial GCMs to Understand Climate on Venus, Mars and Titan. *AGU Fall Meeting Abstracts* 00, U34B–02.
- Lee, J.-M., K. Heng, and P. G. J. Irwin (2013, December). Atmospheric Retrieval Analysis of the Directly Imaged Exoplanet HR 8799b. *ApJ* 778, 97.
- Line, M. R. and V. Parmentier (2016, March). The Influence of Nonuniform Cloud Cover on Transit Transmission Spectra. *ApJ* 820, 78.

- Lines, S., N. J. Mayne, I. A. Boutle, J. Manners, G. K. H. Lee, C. Helling, B. Drummond, D. S. Amundsen, J. Goyal, D. M. Acreman, P. Tremblin, and M. Kerslake (2018, July). Simulating the cloudy atmospheres of HD 209458 b and HD 189733 b with the 3D Met Office Unified Model. *A&A* 615, A97.
- Madeleine, J.-B., F. Forget, E. Millour, L. Montabone, and M. J. Wolff (2011, November). Revisiting the radiative impact of dust on Mars using the LMD Global Climate Model. *Journal of Geophysical Research (Planets)* 116(15), E11010.
- Mandel, K. and E. Agol (2002, December). Analytic Light Curves for Planetary Transit Searches. *ApJ* 580, L171–L175.
- Marshall, B. R. and R. C. Smith (1990, January). Raman scattering and in-water ocean optical properties. *Appl. Opt.* 29, 71–84.
- Mayor, M. and D. Queloz (1995, November). A Jupiter-mass companion to a solar-type star. *Nature* 378, 355–359.
- Meadows, V. S. and D. Crisp (1996). Ground-based near-infrared observations of the Venus nightside: The thermal structure and water abundance near the surface. *J. Geophys. Res.* 101, 4595–4622.
- Misra, A., V. Meadows, and D. Crisp (2014, September). The Effects of Refraction on Transit Transmission Spectroscopy: Application to Earth-like Exoplanets. *ApJ* 792, 61.
- Moses, J. I., C. Visscher, J. J. Fortney, A. P. Showman, N. K. Lewis, C. A. Griffith, S. J. Klippenstein, M. Shabram, A. J. Friedson, M. S. Marley, and R. S. Freedman (2011, August). Disequilibrium Carbon, Oxygen, and Nitrogen Chemistry in the Atmospheres of HD 189733b and HD 209458b. *ApJ* 737, 15.
- Parmentier, V., M. R. Line, J. L. Bean, M. Mansfield, L. Kreidberg, R. Lupu, C. Visscher, J.-M. Désert, J. J. Fortney, M. Deleuil, J. Arcangeli, A. P. Showman, and M. S. Marley (2018, September). From thermal dissociation to condensation in the atmospheres of ultra hot Jupiters: WASP-121b in context. *A&A* 617, A110.
- Polyansky, O. L., A. A. Kyuberis, N. F. Zobov, J. Tennyson, S. N. Yurchenko, and L. Lodi (2018, October). ExoMol molecular line lists XXX: a complete high-accuracy line list for water. *MNRAS* 480, 2597–2608.
- Qiang, F. and K. N. Liou (1992, November). On the correlated k-distribution method for radiative transfer in nonhomogeneous atmospheres. *Journal of Atmospheric Sciences* 49, 2139–2156.
- Richard, C., I. Gordon, L. Rothman, M. Abel, L. Frommhold, M. Gustafsson, J.-M. Hartmann, C. Hermans, W. Lafferty, G. Orton, K. Smith, and H. Tran (2011). New section of the hitran database: Collision-induced absorption (cia). *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* -(0), –.
- Richardson, L. J., D. Deming, K. Horning, S. Seager, and J. Harrington (2007, February). A spectrum of an extrasolar planet. *Nature* 445, 892–895.
- Rogers, L. A. and S. Seager (2010, June). Three Possible Origins for the Gas Layer on GJ 1214b. *ApJ* 716, 1208–1216.
- Roman, M. and E. Rauscher (2017, November). Modeling the Effects of Inhomogeneous Aerosols on the Hot Jupiter Kepler-7b Atmospheric Circulation. *ApJ* 850, 17.

- Rothman, L. S., R. R. Gamache, R. H. Tipping, C. P. Rinsland, M. A. H. Smith, D. C. Benner, V. M. Devi, J.-M. Flaud, C. Camy-Peyret, and A. Perrin (1992). The HITRAN molecular data base - Editions of 1991 and 1992. *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.* 48, 469–507.
- Rothman, L. S., I. E. Gordon, R. J. Barber, H. Dothe, R. R. Gamache, A. Goldman, V. I. Perevalov, S. A. Tashkun, and J. Tennyson (2010, October). HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database. *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.* 111, 2139–2150.
- Sing, D. K. (2010, February). Stellar limb-darkening coefficients for CoRot and Kepler. *A&A* 510, A21.
- Skilling, J. (2004, November). Nested Sampling. In R. Fischer, R. Preuss, and U. V. Toussaint (Eds.), *American Institute of Physics Conference Series*, Volume 735 of *American Institute of Physics Conference Series*, pp. 395–405.
- Sneep, M. and W. Ubachs (2005, May). Direct measurement of the Rayleigh scattering cross section in various gases. *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.* 92, 293–310.
- Strutt, J. (1899, September). On the transmission of light through an atmosphere containing small particles in suspension, and on the origin of the blue of the sky. *Philos Mag* 1899 ;47:375 ?84 2, Reprinted in: Lord Rayleigh, *Scientific papers*, Part IV, New York: Dover Publications ; 1964. p. 397.
- Tennyson, J. and S. N. Yurchenko (2012, September). ExoMol: molecular line lists for exoplanet and other atmospheres. *MNRAS* 425, 21–33.
- Thalman, R., K. J. Zarzana, M. A. Tolbert, and R. Volkamer (2014, November). Rayleigh scattering cross-section measurements of nitrogen, argon, oxygen and air. *J. Quant. Spec. Radiat. Transf.* 147, 171–177.
- Tinetti, G., S. Carey, N. Allard, G. Ballester, B. Barber, J.-P. Beaulieu, M.-C. Liang, A. Noriega-Crespo, I. Ribas, F. Selsis, D. Sing, J. Tennyson, and Y. Yung (2007, August). Probing water vapor and CO in the atmosphere of HD 209458b. Spitzer Proposal.
- Tsiaras, A., I. P. Waldmann, T. Zingales, M. Rocchetto, G. Morello, M. Damiano, K. Karpouzas, G. Tinetti, L. K. McKemmish, J. Tennyson, and S. N. Yurchenko (2018, April). A Population Study of Gaseous Exoplanets. *AJ* 155, 156.
- Turbet, M., E. Bolmont, J. Leconte, F. Forget, F. Selsis, G. Tobie, A. Caldas, J. Naar, and M. Gillon (2018, May). Modeling climate diversity, tidal dynamics and the fate of volatiles on TRAPPIST-1 planets. *A&A* 612, A86.
- Waldmann, I. P., M. Rocchetto, G. Tinetti, E. J. Barton, S. N. Yurchenko, and J. Tennyson (2015, November). Tau-REx II: Retrieval of Emission Spectra. *ApJ* 813, 13.
- Waldmann, I. P., G. Tinetti, M. Rocchetto, E. J. Barton, S. N. Yurchenko, and J. Tennyson (2015, April). Tau-REx I: A Next Generation Retrieval Code for Exoplanetary Atmospheres. *ApJ* 802, 107.
- Wong, A., S. N. Yurchenko, P. Bernath, H. S. P. Müller, S. McConkey, and J. Tennyson (2017, September). ExoMol line list - XXI. Nitric Oxide (NO). *MNRAS* 470, 882–897.
- Yadin, B., T. Veness, P. Conti, C. Hill, S. N. Yurchenko, and J. Tennyson (2012, September). ExoMol line lists - I. The rovibrational spectrum of BeH, MgH and CaH in the $X^2\Sigma^+$ state. *MNRAS* 425, 34–43.

Yurchenko, S. N., D. S. Amundsen, J. Tennyson, and I. P. Waldmann (2017, July). VizieR Online Data Catalog: CH₄ and hot methane continuum hybrid line list (Yurchenko+, 2017). *VizieR Online Data Catalog* 360, 1649–1661.

Yurchenko, S. N., R. J. Barber, and J. Tennyson (2011, May). A variationally computed line list for hot NH₃. *MNRAS* 413, 1828–1834.

Yurchenko, S. N. and J. Tennyson (2014, May). ExoMol line lists - IV. The rotation-vibration spectrum of methane up to 1500 K. *MNRAS* 440, 1649–1661.