



HAL
open science

Effets de la structure tridimensionnelle des atmosphères d'exoplanètes chaudes sur les observations et les modèles d'inversion de données

William Pluriel

► To cite this version:

William Pluriel. Effets de la structure tridimensionnelle des atmosphères d'exoplanètes chaudes sur les observations et les modèles d'inversion de données. Astrophysique [astro-ph]. Université de Bordeaux, 2020. Français. NNT : 2020BORD0167 . tel-03121137

HAL Id: tel-03121137

<https://theses.hal.science/tel-03121137>

Submitted on 26 Jan 2021

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



UNIVERSITÉ DE BORDEAUX

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 9 novembre 2020 pour obtenir le grade de

Docteur en Physique

de l'Université de Bordeaux

Spécialité : Astrophysique, plasmas, nucléaire

par William PLURIEL

**Effets de la structure tridimensionnelle
des atmosphères d'exoplanètes chaudes
sur les observations et les modèles
d'inversion de données**

Membres du jury :

Présidente :	Dr. Valentine WAKELAM	LAB Bordeaux
Rapporteurs :	Dr. Tristan GUILLOT	OCA Nice
	Dr. Claire MOUTOU	IRAP Toulouse
Examineurs :	Dr. Bruno BÉZARD	LESIA Paris
	Dr. Olivia VENOT	LISA Paris
Directeur de thèse :	Dr. Jérémy LECONTE	LAB Bordeaux

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

Résumé

Effets de la structure tridimensionnelle des atmosphères d'exoplanètes chaudes sur les observations et les modèles d'inversion de données

Nous sommes aujourd'hui en mesure non seulement de découvrir de plus en plus d'exoplanètes, mais aussi d'observer leurs atmosphères afin d'obtenir des informations sur leurs propriétés physiques, dynamiques et chimiques. Avec la nouvelle génération de télescopes spatiaux tels que le JWST ou Ariel, nous serons en mesure d'observer des caractéristiques spectrales aujourd'hui non-observables. Cependant, lors des observations en transits, la structure géométrique des atmosphères, et notamment la dichotomie jour-nuit des Jupiters chauds et ultra chauds, affecte le spectre en transmission et génère des biais dans l'interprétation des modèles d'inversion de données. Ma thèse se concentre sur l'étude des effets de la structure tridimensionnelle des atmosphères d'exoplanètes, en particulier des plus chaudes d'entre elles. Le but est de déterminer leurs importances et leurs origines pour permettre une meilleure analyse des données spectrales. Pour y parvenir, j'ai mis en place une expérience numérique simulant des observations de Jupiters chauds où je contrôle l'ensemble de la chaîne observationnelle, de la génération de l'atmosphère à l'inversion de données. En complément, j'ai analysé des observations du télescope spatial Hubble de Kelt-7 b, un Jupiter chaud, pour lier mes analyses numériques à des données réelles. Mes travaux ont montré que la structure particulière des Jupiters les plus chauds affecte significativement les données d'observations, impliquant des biais importants dans les résultats des modèles d'inversion de données 1D. Bien que ces modèles restent valables sur une large gamme de planètes, j'ai démontré que pour les exoplanètes les plus chaudes, ils sont intrinsèquement incapables de trouver l'abondance des espèces. Je suis parvenu à quantifier ces biais et à comprendre leurs origines, apportant une amélioration à l'avenir des interprétations faites à partir des modèles 1D. Par ailleurs, je conclus qu'il est nécessaire de développer en parallèle des modèles 2D pour tenter de résoudre ces biais.

Mots-clés : *Atmosphères, Exoplanètes, Simulations, Inversions de données, Observations*

Abstract

Effects of the three-dimensional structure of hot exoplanet atmospheres on observations and retrieval models

Nowdays, we are able to discover more and more exoplanets, and even more important we can observe their atmospheres and we are starting to get information on their physical, dynamic and, chemical properties. With the new generation of space telescopes such as the JWST or Ariel, we will be able to observe spectral features that are now unobservable. However, during transit observations, the geometric structure of the atmospheres, and in particular the day to night dichotomy of hot and ultra hot Jupiters, affects the transmission spectrum and generates biases in the interpretations of retrieval outputs analysis. The aim of my thesis is to study the effects of the three-dimensional structure of exoplanet atmospheres, and in particular the hottest ones, in order to determine the importance and the origin of these biases to allow a better analysis of the spectral data. I set up a numerical experiment simulating observations of hot Jupiters where I control the entire observational chain, from the atmosphere's simulation to the retrieval. In addition, I analyzed observations of Kelt-7 b, a hot Jupiter, from the Hubble Space Telescope, to link my numerical analysis to real data. My work has shown that the particular structure of the hottest Jupiters significantly affects observations, implying significant biases in the results of 1D retrieval models. Although these models are valid over a large range of planets, I have demonstrated that for the hottest exoplanets, they are unable to find the abundances of species. I succeeded in quantifying these biases and in understanding their origins, hence an improvement in the interpretation of future results from 1D retrieval models. Furthermore, I conclude that it is necessary to develop 2D retrieval models to try to resolve these biases.

Key works: *Atmospheres, Exoplanets, Simulations, Retrieval, Observations*

Remerciements

Tout d'abord je remercie mon directeur de thèse, Jérémy Leconte, sans qui tout ce travail n'aurait pas vu le jour. Je te remercie pour la confiance que tu m'as accordé tout au long de la thèse et pour ton encadrement. Tu m'as laissé une grande liberté dans mes choix, autant au niveau des collaborations avec d'autres chercheurs, des choix de conférences, que de l'organisation de mon travail. Je te remercie aussi pour ton soutien et ton enthousiasme sur mes initiatives hors recherche (enseignements, organisation de réunion des non permanents, conseil de l'OASU, etc) qui m'ont permis de m'intégrer plus encore au sein du LAB. Tu m'as aussi donné de nombreux et précieux conseils m'aidant à progresser et à faire de moi un chercheur. En plus de tes qualités scientifiques qui sont une véritable source d'inspiration pour moi, tes qualités humaines ont rendu ces trois années très agréables au quotidien et je t'en remercie.

Je remercie les membres de mon jury pour leur retours positifs et leurs commentaires constructifs. Merci à Tristan Guillot et Claire Moutou d'avoir accepté d'être les rapporteurs de ce travail, et merci de l'enthousiaste dont vous avez fait preuve dans vos rapports. Merci également aux autres membres de ce jury, Bruno Bézard, Olivia Venot et Valentine Wakelam pour leur commentaires pertinents. Je suis très honoré que vous ayez tous acceptés d'être membre de mon jury de thèse.

Merci également aux relecteurs non officiels de mon manuscrit. D'abord merci à Yassin pour ses commentaires scientifiques qui ont aidé à améliorer mon manuscrit et à le rendre plus clair. Merci aussi à Fanny pour ta relecture attentive, tu pourras te vanter d'être une des rares institutrices à avoir lu une thèse d'astrophysique !

Merci également Jérémy Leconte, Pascal Bordé et Franck Selsis d'avoir participé à mes répétitions de soutenance. Vous m'avez donné de nombreux conseils avisés me permettant d'aborder avec plus d'assurance et de sérénité la soutenance du 9 novembre.

J'en profite pour souhaiter un bon anniversaire à ma grand-mère Germaine Pluriel, qui fêtera ses 87 ans le jour de ma soutenance. Tu as toujours voulu un docteur dans la famille..certes tu entends par là un médecin, mais c'est mieux que rien !

Une thèse est un travail collectif et la science ne fait pas seul. J'aimerais donc remercier l'ensemble des collaborateurs avec qui j'ai travaillé et grâce à qui toute la recherche produite durant ma thèse à été possible.

Je remercie tout particulièrement Vivien Parmentier, avec qui j'ai collaboré tout au long de ma thèse. Les échanges que nous avons eu durant ces trois années ont été d'une grande utilité pour mes travaux, et de nombreux résultats que j'ai mis en évidence ont été possible grâce à toi. Merci pour les données que

tu nous as transmises, merci pour les discussions que nous avons eu ensemble avec Jérémy.

I would like to thanks the whole ARES crew, and especially the Captain Jean-Philippe Beaulieu. Thanks to you, we created a great collaboration which was both scientifically and humaly success. A particular thanks to Niall Whiteford, our collaboration was successful, and thanks to you I saw the wonderful town of Edemburth ! Thanks also to Billy Edwards, Quentin Changeat, K. H. Yip, Angelos Tsiaras and Ingo Waldmann. I enjoyed work with you, and our discussions was very helpful for my thesis. Hopefully we will have work to do together with Ariel space mission now adopted !

Je remercie Emmanuel Marcq, qui a été un enseignant motivant, un excellent directeur de stage de M2 et dont les conseils m'ont décidé à postuler au LAB avec Jérémy. Merci également de m'avoir permis d'écrire mon premier article en premier auteur grâce au travail que nous avons fait durant mon stage.

Merci aussi à Franck Selsis pour les nombreuses discussions que nous avons eu. D'abord merci pour les discussions scientifiques où je finissais à chaque fois la tête remplie d'idées à approfondir, à explorer, à tester. Merci également pour toutes les réponses à mes petites questions, c'est un vrai plaisir de t'avoir comme voisin de couloir ! Un grand merci également pour les conversations science fiction et cinéma. Ton amour pour le 7ème art est transmissible et j'ai découvert grâce à toi des films dingues !

Thank you Tiziano, I really appreciate the collaboration we did and we are still doing. Thanks to you I learned a lot on the bayesian processes and especially on TauREx retrieval code. You are a great colleague and friend..despite your weird italien sens of humor (that make me laugh I have to admit). I'm looking forward to visit Sicily with you !

Je tiens également à remercier tous mes collègues du laboratoire. Merci en particulier à Cécile, Annick et Nathalie. Vous avez toujours été très réactives et grâce à vous le stress des contraintes administratives est considérablement diminué. Votre bonne humeur est un vrai atout pour le laboratoire !

Merci à tous les doctorants, post-doctorants et ingénieurs de passage au laboratoire : César Gattano, Pierre Auclair-Desrotour, Audrey Coutens, Anthony Caldas, Thomas Vidal, Nuria Miret Roig, Maxime Paillassa, Baptiste Boutin-Basillais, Jordan Molet, Lars Bonne, Sacha Gavino, Javier Olivares Romero, Yoann tarricq, Tiziano Zingales, Maria Gomez, Yassin Jaziri, Takanori Kodama, Jean-Paul Melisse, Bilal benmahi, Melisse Bonfand-Caldeira, Laure Bouscasse, Laia Casamiquela, Phillip Galli. C'était un plaisir de vous retrouver en "réunion jeunes du LAB", et les échanges et conseils que nous avons pu nous transmettre ont été profitable à tous. Un grand merci pour les moments passés ensemble !

Je tiens à remercier mon co-bureau Yassin. Ton arrivée au LAB a encore augmenté la cohésions entre les non-permanents, et grâce à ton enthousiasme nous avons pu faire plein d'activités hors boulot. Merci pour ta bonne humeur, tes blagues, ton soutiens..et aussi ton niveau au ping-pong qui me permettait de gagner (moins sur les dernières parties il est vrai..) ! Merci aussi pour les nombreux échanges sur nos travaux, grâce à toi je comprends bien mieux la partie chimie des GCMs. Ma thèse n'aurait pas été la même sans toi, merci pour tout !

Merci à Marie, Fanny et Mika qui ont été présents tout au long de cette aventure. Une pensée toute particulière pour toi Marie, j'ai hâte de t'apporter le même soutient pour ta soutenance de thèse en 2021 ! Merci aussi de vous êtes occupés de notre chat Moustache quand ses maîtres ingrats partaient en

weekend...

J'aimerais remercier ma famille. Merci à mes oncles et tantes, cousines et cousins pour vos messages de soutiens et vos encouragements. Je serai donc le premier "docteur des étoiles" (mon titre officiel donné par Manon) de la famille ! Merci aussi à mon grand frère Thibaut, pour ton intérêt et ton soutien. Je t'envierai une version de ma thèse pour tes éventuelles insomnies... Enfin un grand merci à mes parents, vous m'avez toujours laissé libre de mes choix et soutenus dans mes études. Vous vous êtes toujours intéressés à ce que je faisais et cela malgré la spécificité de mon sujet. J'espère que l'accomplissement de cette thèse vous rendra fiers et surtout heureux !

Je voudrais terminer en remerciant la personne qui a fait de moi l'homme que je suis aujourd'hui et le futur père que je vais devenir grâce à elle. Merci Églantine pour ton soutien, ta gentillesse, ta bonté, ta confiance, ton amour. Tu m'as accompagné durant toutes ces années d'études, sans hésitation et avec enthousiasme. Tu as été et tu restes ma plus grande source d'inspiration et de motivation sans quoi tout ceci n'aurait pas été possible...

Table des matières

1	Observer les Jupiters Chauds	1
1.1	Introduction générale	3
1.2	Les Jupiters chauds	7
1.2.1	Description générale	7
1.2.2	Dynamique	8
1.2.3	Chimie	8
1.2.4	Physique	9
1.3	Sonder les atmosphères exoplanétaires	11
1.3.1	Éclipse primaire : transit	11
	Calcul de la profondeur de transit	13
	Spectre en transmission	15
1.3.2	Éclipse secondaire : émission	16
	Calcul de la profondeur de l'éclipse	17
	Spectre en émission	19
2	Les deux faces de Kelt-7 b	21
2.1	Outils pour l'analyse des données spectroscopiques	23
2.1.1	Réduction et extraction des données HST avec <i>Iraclis</i>	23
2.1.2	Généralités sur <i>TauREx</i>	26
	Les données en entrée	26
	Le modèle et le traitement de données	28
	Minimisation et échantillonnage	28
	Les sorties	29
2.2	Analyse des spectres observés par HST et réduits par <i>Iraclis</i>	29
2.2.1	Pourquoi étudier Kelt-7 b ?	29
2.2.2	Extraction des données HST de Kelt-7 b	30

2.2.3	Indice de Détectabilité Atmosphérique (IDA)	31
2.2.4	Modélisation de l'équilibre chimique avec <i>petitCODE</i>	33
2.2.5	Spectre en transit	33
2.2.6	Spectre en émission	36
2.3	Complément d'observations avec les données Spitzer et TESS	41
2.3.1	Analyse des données HST+Spitzer	41
2.3.2	Analyse des données HST+Spitzer+TESS	42
2.3.3	Raffinement des éphémérides	42
2.4	L'atmosphère de Kelt-7 b	46
2.5	Limites de cette analyse	48
2.5.1	Futures observations	48
2.5.2	Limites de HST	51
2.5.3	Combinaison de jeux de données	51
2.5.4	Biais intrinsèque au spectre	52
3	Démêler les biais des modèles d'inversion de données	55
3.1	Mise en place du problème	57
3.1.1	Les Jupiters ultra chauds	57
3.1.2	Géométrie du problème	57
3.1.3	Dissociation thermique des molécules	58
3.1.4	Description de la méthode suivie	60
	Wasp-121 b comme objet d'étude	60
	SPARC/MIT gcm	60
	Génération des spectres en transmission avec <i>Pytmosph3R</i>	64
	<i>TauREx</i>	67
3.2	Modèles d'entrée : des cas simples jusqu'aux simulations GCM	68
3.2.1	Atmosphères 3D idéalisées avec un gradient jour-nuit	68
	Effets du gradient en température jour-nuit	68
	Effets sur la composition chimique dus à la dissociation de certaines molécules	72
3.2.2	Modèle GCM 3D de l'atmosphère de Wasp-121 b	73
3.3	Spectres en transits 3D générés par <i>Pytmosph3R</i>	73
3.3.1	H ₂ constant dans l'atmosphère	74
3.3.2	H ₂ variable dans l'atmosphère	74
3.4	Résultats du modèle d'inversion de données <i>TauREx</i>	75

3.4.1	H ₂ et H ₂ O constant dans l'atmosphère	75
3.4.2	Dissociation thermique de H ₂ O avec H ₂ constant	78
3.4.3	Dissociation thermique de H ₂ et H ₂ O	81
3.4.4	Que retenir des biais mis en évidence ?	82
3.5	Comparaison avec les observations	83
3.5.1	Wasp-121 b	84
3.5.2	Wasp-33 b	86
3.6	Limites et perspectives	88
4	Étude de la limite des impacts des effets tridimensionnels sur les modèles d'inversions 1D	91
4.1	Vers des Jupiters de moins en moins chauds	93
4.1.1	Objectifs de cette étude	93
4.1.2	Mise en place d'une expérience numérique	93
4.2	Simulations numériques GCM 3D	95
4.2.1	Modèles avec inversion thermique des profils T-P côté jour	95
	Spectre 3D pour les profils avec inversion thermique	99
4.2.2	Modèles avec profils T-P sans inversion thermique du côté jour	103
	Spectre 3D pour les profils sans inversion thermique	103
4.3	Inversion de données <i>TauREx</i>	107
4.3.1	Inversion de données isotherme	107
4.3.2	Inversion de données avec profil vertical	110
4.4	Bilan global des effets 3D sur les inversions de données 1D	116
4.4.1	Effets verticaux	116
4.4.2	Effets horizontaux le long des limbes	117
4.4.3	Effets horizontaux au travers des limbes	118
5	Limites, Conclusions & Perspectives	119
5.1	Limites	121
5.1.1	GCM SPARC/MIT	121
5.1.2	<i>Pytmosph3R</i>	121
5.1.3	<i>TauREx</i>	122
5.2	Conclusions	124
5.3	Vers de nouveaux outils plus performants	125
5.3.1	<i>Pytmosph3R 2.0</i>	125
5.3.2	<i>TauREx 2D</i>	127

A	Liste des publications	131
A.1	Publications avec relecture par les pairs	131
A.2	Présentations données dans des conférences	132
B	Manuel d'utilisation de Pytmosph3R 1.3	133
C	Complément de résultats des inversions de données sur les simulations de Jupiters ultra chauds	144
	Bibliography	155

Table des figures

1.1	Exoplanètes détectées dans un diagramme période orbitales (en jour) en fonction de la masse de la planète (en M_J). La couleur et la taille des points indiquent respectivement la température d'équilibre calculée de la planète (en Kelvin) et le rayon planétaire (en R_J). Les Jupiters chauds et ultra chauds se distinguent nettement dans la partie supérieure gauche de ce diagramme.	4
1.2	Schéma d'une exoplanète en transit autour de son étoile hôte (haut) suivi d'un exemple de la courbe de phase du Jupiter chaud HD189733 b observé à $4.5 \mu\text{m}$ par l'instrument IRAC de Spitzer (bas). Figure adaptée de Seager and Deming (2010); Knutson et al. (2012).	12
1.3	Schéma présentant la géométrie de la planète lors d'un transit.	13
1.4	Spectre en transmission généré par <i>TauREx</i> pour une planète homogène ayant une température de 1000 K et une atmosphère composée de He, H ₂ , H ₂ O et CO. Les contributions de la diffusion Rayleigh, H ₂ O, CO, et de l'absorption due aux collisions (CIA) sont respectivement tracées en vert, turquoise, bleu et bleu foncé. Le spectre observé, correspondant au produit des transmittances de toutes ces contributions, est tracé en violet. 16	16
1.6	Schéma présentant la géométrie de la planète lors d'une éclipse secondaire.	17
1.5	Flux de corps noir (en unités de $10^{-26} \text{Wm}^2 \text{Hz}^{-1}$) de certains objets du système solaire comme observé à 10 pc. Le Soleil est représenté par un corps noir à 5750 K. Les planètes Jupiter, Vénus, la Terre et Mars sont représentées ainsi qu'un Jupiter chaud d'une température d'équilibre de 1600 K. Les planètes présentent deux pics dans leur spectre, le premier de courte longueur d'onde est dû à la lumière du soleil diffusée par l'atmosphère de la planète et est calculé à l'aide de l'albédo géométrique de celle-ci, le second pic à grande longueur d'onde provient de l'émission thermique de la planète et est estimé par un corps noir de la température effective de la planète. L'albédo du Jupiter chaud est supposé être de 0.05, les données de température et d'albédo étant tirées de Cox (2000). Figure adaptée de Seager and Deming (2010).	18

1.7	Spectre en émission généré par <i>TauREx</i> pour une planète ayant une température d'équilibre de 1000 K et une atmosphère composée de He, H ₂ , H ₂ O et CO. Les contributions de la diffusion Rayleigh, H ₂ O, CO, et de l'absorption due aux collisions (CIA) sont respectivement tracées en vert, turquoise, bleu et bleu foncé. Le spectre observé, correspondant à la somme de toutes ces contributions, est tracé en violet.	20
2.1	Courbe de lumière blanche pour les observations de Kelt-7 b en transmission (haut) et en émission (bas). Respectivement de haut en bas : courbe de lumière brute après normalisation, courbe de lumière divisée par le modèle le mieux adapté aux erreurs systématiques, résidus et fonction d'auto-corrélation des résidus.	25
2.2	Ajustements des courbes de lumières à partir d' <i>Iraclis</i> pour les spectres en transmission (gauche) et en émission (droite). Pour faciliter la lecture de courbes, un décalage vertical a été appliqué. Chaque figure est séparée en deux : la partie gauche présente les courbes de lumières spectrales tandis que la partie droite montre les résidus. $\bar{\chi}^2$ est le carré réduit indiquant la qualité de l'ajustement. $\bar{\sigma}$ est le rapport entre l'écart-type des résidus et le bruit de photons, et AC est l'auto-corrélation de l'ajustement.	26
2.3	Schéma illustrant le fonctionnement de <i>TauREx</i> qui se divise en 4 parties : les entrées, les données et le traitement de données, l'échantillonnage et la minimisation, et les sorties. Extrait et traduit de Waldmann et al. (2015).	27
2.4	Spectre en transmission de Kelt-7 b observé par WFC3/HST (en noir) avec le meilleur ajustement à 3σ calculé par <i>TauREx</i> utilisant une modèle simple uniquement composé de nuages (en bleu).	32
2.5	Distributions postérieures de l'inversion de données atmosphériques du spectre en transmission de la planète Kelt-7 b. Les paramètres inversés sont le rayon de la planète [R_p], la température [K], les abondances en H ₂ O, CO, TiO, VO, FeH et H ⁻ [$\log(\text{VMR})$] et la pression des nuages [bar]. Le spectre en transmission ainsi que le meilleur ajustement à 3σ (en bleu) sont également tracés en haut à droite, les points noirs étant les données HST/WFC3.	34
2.6	Contribution du spectre en transmission (haut) et du spectre en émission (bas). Nous voyons que les caractéristiques d'émission de H ⁻ , semblable à un continuum, apparaissent en émission bien que sa contribution soit faible. En transmission, il apparaît que l'on sonde assez haut dans l'atmosphère, autour de 1 Pa.	35
2.7	Contributions des différentes sources d'opacités au spectre en transmission calculées par <i>TauREx</i> . Nous voyons que H ₂ O (en vert) et H ⁻ (en bleu) sont les contributeurs dominants. A noter que le TiO (en turquoise) et le VO (en cyan) peuvent être observés dans cette bande spectrale et semblent contribuer au second ordre.	37

2.8	Spectres des meilleurs ajustements (gauche) ainsi que des profils température-pression (droite), avec l'erreur à 1σ dans chaque cas, pour les observations en transit (haut et milieu) et en éclipse (bas) de Kelt-7 b avec les données HST seules (bleu), HST et Spitzer (rouge), HST, Spitzer et TESS (vert). Seules les figures du milieu ont été obtenu en n'incluant pas l'opacité H^- tandis que les autres la prennent en compte.	38
2.9	Distributions postérieures de l'inversion de données atmosphérique du spectre en émission de la planète Kelt-7 b. Les paramètres inversés sont le rayon de la planète [R_p], 3 températures [K], à la surface, en haut de l'atmosphère et entre les deux ainsi que les pressions [Pa] associées à celles-ci et les abondances en H_2O , CO, TiO, VO, FeH [$\log(\text{VMR})$]. Le spectre en émission ainsi que le meilleur ajustement à 3σ (en rouge) sont également tracés en haut à droite, les points noirs étant les données HST/WFC3. Un ajustement par un corps noir émettant à 2500 K est tracé en pointillés jaunes.	39
2.10	Distributions postérieures de l'inversion de données atmosphérique du spectre en transmission de la planète Kelt-7 b pour différentes combinaisons d'observations.	43
2.11	Distributions postérieures de l'inversion de données atmosphérique du spectre en transmission de la planète Kelt-7 b pour différentes combinaisons d'observations, mais sans prendre en compte la source d'opacité H^-	44
2.12	Distributions postérieures de l'inversion de données atmosphérique du spectre en émission de la planète Kelt-7 b avec et sans les données Spitzer (bleu et rouge respectivement). L'ajout de données Spitzer apporte peu de changements aux propriétés atmosphériques à l'exception notable de l'abondance en eau qui apparaît clairement avec les données Spitzer.	45
2.13	En haut : observations TESS de Kelt-7 b. À gauche : données de transit (en noir) et meilleur ajustement (en rouge). À droite : résidus de l'ajustement. En bas : temps de transit observés moins temps de transit calculés (O-C) pour la planète Kelt-7 b. Les mesures de transit à mi-temps de cette étude sont indiquées en jaune (HST) et en bleu (TESS), tandis que la valeur de la littérature T_0 est en rouge. La ligne noire indique les nouvelles éphémérides obtenues par cette étude avec les incertitudes à $1-\sigma$ associées (lignes pointillées) et le point de donnée du tracé noir indiquant le T_0 mis à jour. A titre de comparaison, les éphémérides de la littérature précédente et leurs incertitudes à $1-\sigma$ sont indiquées en rouge. La figure insérée montre un agrandissement mettant en évidence la précision des ajustements à mi-temps de TESS.	47

2.14	Résultats du modèle auto-cohérent <i>petitCODE</i> pour Kelt-7 b ainsi que les résultats de <i>TauREx</i> sur les données WFC3. En haut à gauche : comparaison des profils de température-pression. Le modèle <i>petitCODE</i> (noir) présente une inversion de température à 1 mbar environ, en raison de l'absorption par TiO et VO, et correspond étroitement au profil inversé par <i>TauREx</i> . En haut à droite : abondances moléculaires pour la simulation <i>petitCODE</i> . Les fractions d'équilibres de la plupart des molécules restent à peu près constantes pour des pressions supérieures à 1 mbar, mais chutent rapidement à des pressions atmosphériques inférieures en raison de la dissociation thermique. La zone bleue indique l'abondance en H ₂ O inversée par <i>TauREx</i> en comptant les incertitudes. En bas à gauche : comparaison des abondances moléculaires contraintes par <i>TauREx</i> en transmission (lignes pointillées) à celles de la simulation <i>petitCODE</i> (lignes pleines). L'abondance de l'eau rentre à 1- σ de ce qui est prévu. En bas à droite : comparaison des limites supérieures placées sur les abondances moléculaires en émission avec celles de la simulation <i>petitCODE</i> . La limite supérieure de 1- σ sur l'abondance de l'eau est nettement inférieure à celle des simulations <i>petitCODE</i> . Tant en transmission qu'en émission, les limites supérieures de 1- σ sur TiO, VO et FeH sont bien au-dessus des abondances prévues, suggérant que les données ne sont pas suffisantes pour commenter sur leur présence ou leur absence.	49
2.15	Simulations d'observations JWST (gauche) et Ariel (droite) des meilleures solutions ajustées dans ces travaux. Le spectre en transmission est représenté en haut tandis que le spectre en émission est en bas. Pour Ariel, 2 observations ont été supposées alors que pour JWST nous avons modélisé une seule observation avec NIRISS GR700XD ainsi qu'une observation avec NIRSpec G395M.	50
2.16	Schéma représentant la géométrie d'une observation en transit (coupe équatoriale). La région de pénétration (en bleu) indique la zone où la profondeur optique τ vaut e^{-1}	53
3.1	Schéma de l'atmosphère d'un Jupiter ultra chaud dont le côté chaud est enflé par rapport au côté froid. Nous basons cette illustration à partir d'un modèle GCM de la planète Wasp-121 b (Parmentier et al. 2018).	58
3.2	Abondance en H ₂ O et en H ₂ (rapport de mélange de volume) en fonction de la pression (bar) et de la température (K), pour une métallicité solaire. Attention, les échelles des barres de couleur sont différentes, car calquées sur l'abondance solaire de l'espace.	61
3.3	Simulation GCM de Wasp-121 b sans prendre en compte la dissociation de H ₂ . Sont représentés la température en K (haut) et l'abondance en H ₂ O en VMR (bas) selon la coupe équatoriale (gauche), aux limbes (milieu) et polaire (droite). En partant du centre jusqu'à l'extérieur, les lignes noires indiquent respectivement les niveaux de pressions à $1.434 \cdot 10^7$, 10^3 , 1, 10^{-2} , et 10^{-4} Pa. Le rayon de la planète ainsi que celui de l'atmosphère sont tracés à l'échelle.	63
3.4	Mêmes cartes que la Figure 3.3 mais en considérant ici la dissociation thermique de H ₂	63

- 3.5 Structure atmosphérique d'un modèle symétrique idéalisé de Wasp-121 b (∇^-T), supposant l'absence ou la présence de dissociation thermique de H_2 (gauche et droite respectivement). Nous montrons la carte en température (haut) et la carte d'abondance en H_2O (bas). Les températures vont de 1400 K à 2800 K, avec un angle de transition de 20° autour de la ligne du terminateur et un anneau à 2500 K à la pression $P=0.13$ bar à partir de la pression de surface. Le code couleur pour les cartes d'abondance d'eau indique la VMR de $5 \cdot 10^{-4}$ à 10^{-7} . En partant du centre jusqu'à l'extérieur, les lignes noires indiquent respectivement les niveaux de pressions à $1, 434 \cdot 10^7, 10^3, 1, 10^{-2},$ et 10^{-4} Pa. Le rayon de la planète ainsi que celui de l'atmosphère sont tracés à l'échelle. 69
- 3.6 Mêmes cartes que la Figure 3.5 mais pour le cas ∇^+T . Les températures vont ici de 500 K à 3500 K, avec un angle de transition de 10° autour de la ligne du terminateur et un anneau à 2500 K à la pression $P=0.13$ bar à partir de la pression de surface. 70
- 3.7 Spectres en transmission pour les simulations ∇^-T (haut), ∇^+T (milieu) et GCM (bas) tracés à une résolution $R = 100$. Gauche : abondance en H_2 constante dans toute l'atmosphère. Lorsque la dissociation de l'eau est prise en compte (courbe bleu), les bandes d'absorption de l'eau deviennent moins profondes que lorsque nous supposons qu'il n'y a pas de dissociation de l'eau (courbe cyan). Droite : prise en compte de la dissociation de H_2 dans l'atmosphère. Lorsque la dissociation de H_2 est considérée (courbe bleu foncée), les bandes d'absorption de CO apparaissent encore plus clairement que lorsque nous négligeons la dissociation de H_2 (courbe bleue). Les courbes noires et grises correspondent aux spectres de transmission pour une atmosphère sans CO respectivement avec et sans dissociation de H_2O afin de mettre en évidence les bandes d'absorption de CO. 76
- 3.8 Résumé des résultats du modèle d'inversion de données *TauREx* pour les simulations ∇^-T, ∇^+T et GCM. Nous avons représenté le rapport $[CO]/[H_2O]$ (en haut à gauche), la température (en haut à droite), les abondances logarithmiques du CO (milieu gauche) et de H_2O (milieu droite), le $\tilde{\chi}^2$ (en bas à gauche) et le rayon planétaire (en bas à droite). Ces résultats ont été calculé avec un bruit de photon supposant un palier à 30ppms sur l'ensemble du domaine spectral. La ligne rouge représente la valeur d'entrée de nos simulations et la ligne noire pointillée montre où $\tilde{\chi}^2=1$ 77
- 3.9 Distributions postérieurs de *TauREx* supposant une abondance constante en H_2 dans l'atmosphère. Sont présentés les simulations ∇^+T (gauche) et GCM (droite) faisant l'hypothèse, respectivement, d'une absence de dissociation de l'eau (haut) et de sa présence (bas). Les paramètres inversés par le modèle, au nombre de 5, sont les abondances en H_2O, CO ($\log_{10}[VMR]$), le niveau de pression des nuages en bar, la température en Kelvin ainsi que le rayon planétaire en rayon de Jupiter. Le poids moléculaire moyen de l'atmosphère est dérivé à partir de ces paramètres mais ne fait pas l'objet d'une inversion de données. Les distributions postérieures de l'ensemble des cas modélisés sont présentés dans l'annexe C. 79

3.10	Solution trouvée par <i>TauREx</i> dans le cas GCM supposant la dissociation de H ₂ O et H ₂ constant. En bas : nous montrons la contribution au spectre en transmission inversé par <i>TauREx</i> de chaque composant, à savoir H ₂ O CO, et le CIA. En haut : nous traçons la différence (en ppm) entre le spectre en entrée généré par <i>Pytmosph3R</i> et le meilleur ajustement obtenu par <i>TauREx</i>	80
3.11	Spectre en transmission de Wasp-121 b tracés à une résolution R=100 pour une atmosphère composée de He, H ₂ , H ₂ O, CO, TiO, VO, Na, K et H ⁻ en utilisant l'ajustement analytique pour la dissociation thermique des espèces décrit dans Parmentier et al. (2018) (Bleu). Nous avons comparé ce modèle avec des données HST/WFC3 extraites de Evans et al. (2016) (point noir) et avec deux modèles de Parmentier et al. (2018), le premier sans nuages (magenta) et le second avec des nuages de CaTiO ₃ (vert).	85
3.12	Simulation GCM de Wasp-33 b prenant en compte la dissociation de H ₂ . Sont représentées la température (gauche) et l'abondance en H ₂ O (droite) selon la coupe équatoriale. Le code couleur pour les cartes d'abondance en H ₂ O indique le VMR de 5.10 ⁻⁴ à 10 ⁻⁸ . En partant du centre jusqu'à l'extérieur, les lignes noires indiquent respectivement les niveaux de pressions à 1,434.10 ⁷ , 10 ³ , 1, 10 ⁻² , et 10 ⁻⁴ Pa. Le rayon de la planète ainsi que celui de l'atmosphère sont tracés à l'échelle (haut) et agrandis 5 fois (bas).	87
3.13	Haut : Spectres en transmission de Wasp-33 b générés par <i>Pytmosph3R</i> pour une simulation sans dissociation thermique (cyan), considérant uniquement la dissociation de H ₂ O (bleu) et prenant en compte à la fois la dissociation de H ₂ O et H ₂ (bleu foncé). L'atmosphère simulée est composée de H ₂ , He, H ₂ O et CO. Bas : Distributions postérieures obtenues à l'aide du code d'inversion de données <i>TauREx</i> . Nous supposons une atmosphère isotherme pour trois scénarii : un scénario de référence avec une abondance d'eau et de H ₂ constante quelles que soient la pression et la température (bleu), le modèle prenant en compte la dissociation de H ₂ O uniquement (rouge) et enfin le modèle nominal ou H ₂ O et H ₂ peuvent se dissocier (violet). Nous faisons varier 4 paramètres : les abondances en H ₂ O et CO, la température (K) et le rayon planétaire (R_J).	89
4.1	Coupe équatoriale de la température [K] pour les 8 simulations GCM de Jupiters chauds présentant une inversion thermique du côté jour. La température d'équilibre de chaque simulation est précisée, elles vont ici de 1400 K à 2100 K. H ₂ est supposé constant (moitié gauche) alors que sa dissociation thermique est prise en compte (moitié droite).	97
4.2	Coupe aux limbes de la température [K] pour les 8 simulations GCM de Jupiters chauds présentant une inversion thermique du côté jour. La température d'équilibre de chaque simulation est précisée, elles vont ici de 1400 K à 2100 K. H ₂ est supposé constant (moitié gauche) alors que sa dissociation thermique est prise en compte (moitié droite).	98

4.3	Coupe équatoriale de l'abondance en eau [VMR] pour les 8 simulations GCM de Jupiters chauds présentant une inversion thermique du côté jour. La température d'équilibre de chaque simulation est précisée, elles vont ici de 1400 K à 2100 K. H ₂ est supposé constant (moitié gauche) alors que sa dissociation thermique est prise en compte (moitié droite).	100
4.4	Coupe aux limbes de l'abondance en eau [VMR] pour les 8 simulations GCM de Jupiters chauds présentant une inversion thermique du côté jour. La température d'équilibre de chaque simulation est précisée, elles vont ici de 1400 K à 2100 K. H ₂ est supposé constant (moitié gauche) alors que sa dissociation thermique est prise en compte (moitié droite).	101
4.5	Spectres en transmission des 8 simulations GCM allant de T _{eq} = 1400 K jusqu'à T _{eq} = 2100 K par pas de 100 K. Lorsque la dissociation de H ₂ est considérée (bas), les bandes d'absorption de CO apparaissent encore plus clairement que lorsque nous négligeons la dissociation de H ₂ (haut).	102
4.6	Coupes équatoriales en température (en K) pour 12 simulations GCM de Jupiters chauds sans inversion thermique calculées respectivement de haut en bas et de gauche à droite pour T _{eq} = 1000 K jusqu'à T _{eq} = 2100 K par pas de 100 K. Sans TiO et VO dans le modèle GCM, aucune inversion thermique ne se produit dans la stratosphère impliquant une atmosphère bien moins étendue et plus froide aux altitudes élevées.	104
4.7	Même figure que la Figure 4.6 représentant les abondances en eau [VMR]. Nous remarquons que sans inversion thermique une absence totale de dissociation thermique de l'eau est observée.	105
4.8	Spectres en transmission des 12 simulations GCM sans inversion thermique, allant de T _{eq} = 1000 K jusqu'à T _{eq} = 2100 K par pas de 100 K. Sont superposés respectivement en pointillés noir et gris les spectres en transmission pour T _{eq} = 1400 K et T _{eq} = 2100 K, générés à partir d'une simulation avec inversion thermique.	106
4.9	Résumé des résultats du modèle d'inversion de données <i>TauREx</i> pour un profil inversé isotherme. Toutes les simulations y sont représentées : sans inversion thermique (cyan), avec inversion thermique supposant H ₂ constant (bleu) et supposant H ₂ variable (bleu foncé). Nous avons représenté le rapport [CO]/[H ₂ O] (en haut à gauche), la température (en haut à droite), les abondances logarithmiques du CO (milieu gauche) et de H ₂ O (milieu droite), le $\tilde{\chi}^2$ (en bas à gauche) et le rayon planétaire (en bas à droite). Ces résultats ont été calculé avec un bruit de photon supposant un palier à 30 ppms sur l'ensemble du domaine spectral. La ligne rouge représente la valeur d'entrée de nos simulations et la ligne noire pointillée montre où $\tilde{\chi}^2 = 1$.	109

4.10	Résumé des résultats du modèle d'inversion de données <i>TauREx</i> pour un profil inversé non isotherme. Toutes les simulations y sont représentées : sans inversion thermique (cyan), avec inversion thermique supposant H ₂ constant (bleu) et supposant H ₂ variable (bleu foncé). Nous avons représenté le rapport [CO]/[H ₂ O] (en haut à gauche), le $\tilde{\chi}^2$ (en haut à droite), les abondances logarithmiques du CO (en bas à droite) et de H ₂ O (en bas à gauche). Ces résultats ont été calculés avec un bruit de photon supposant un palier à 30 ppms sur l'ensemble du domaine spectral. La ligne rouge représente la valeur d'entrée de nos simulations et la ligne noire pointillée montre où $\tilde{\chi}^2 = 1$	112
4.11	Profils en température inversés par <i>TauREx</i> pour les simulations GCM sans inversion thermique (haut), avec inversion thermique et H ₂ constant (milieu) et avec inversion thermique et H ₂ variable (bas).	113
4.12	Profils de température des modèles GCM sans TiO/VO pour T _{eq} = 1400 K (gauche) et T _{eq} = 2100 K (droite). De haut en bas, nous représentons le limbe est (longitude 90°) pour toutes les latitudes et le limbe ouest (longitude 170°) pour toutes les latitudes (dégradé de couleur du bleu vers le rouge, respectivement du pôle nord au pôle sud) puis l'équateur (latitude 0°) pour toutes les longitudes (dégradé de couleur du bleu vers le rouge, respectivement du limbe ouest jusqu'au limbe est). Nous représentons aussi le profil de température inversé par <i>TauREx</i> dans le cas isotherme (en gris) et dans le cas d'un profil vertical à 4 points (en noir).	114
4.13	Identique à la Figure 4.12 pour les simulations GCM avec inversion thermique et la dissociation thermique de H ₂ prise en compte.	115
5.1	Contribution des spectres en transmission de la planète Kelt-7 b (haut) et de la planète Wasp-121 b (bas). Il est clair que certaines raies sont présentes à des pressions inférieures à 10 ⁻¹ Pa, bien que cela soit bien plus important pour Kelt-7 b que pour Wasp-121 b.	123
5.2	Schéma de la section d'une atmosphère le long de la direction des rayons de lumière depuis l'étoile (située à gauche) jusqu'à l'observateur (situé à droite).	127
5.3	Système de coordonnées 2D de type polaire de la section représentée à la Figure 5.2. La coordonnée angulaire est définie par le nombre de coupes n_{coupes} de la section. L'angle α est implémenté en degrés tel que $\alpha = 180/n_{slices}$. L'angle β , fixé par l'utilisateur, définit la partie de l'atmosphère comprise entre le côté jour et le côté nuit (la température évolue progressivement dans cette partie). R correspond au rayon de la planète (généralement à 10 bar). Le profil d'altitude z est calculé en utilisant le profil de pression du côté jour de la planète, et dz est la différence entre l'altitude d'une couche et la suivante. Un rayon de lumière traversant l'atmosphère, par d'exemple dans la partie de couleur rouge, correspondant à la couche i , associée à une altitude de base de z_i (ici, $i = 3$), et la tranche j , est associée à un angle de $j \times \alpha$ (ici $j = 3$).	128

C.1	Distributions postérieures de l'inversion de données atmosphériques du spectre en transmission simulé dans le cas ∇^-T ainsi que les contributions de chaque absorbant au spectre inversé (en haut à gauche) dans l'hypothèse où ni H_2O ni H_2 ne se dissocient thermiquement. Les paramètres inversés sont le rayon de la planète [R_J], la température [K], les abondances en H_2O et CO [$\log(\text{VMR})$] et la pression des nuages [bar]. Le poids moléculaire moyen de l'atmosphère est dérivé à partir de ces paramètres mais ne fait pas l'objet d'une inversion de données.	145
C.2	Même graphique que la Figure C.1 en considérant ici que H_2O peut se dissocier thermiquement, H_2 restant constant.	146
C.3	Même graphique que la Figure C.1 en considérant ici que H_2O et H_2 peuvent se dissocier thermiquement.	147
C.4	Distributions postérieures de l'inversion de données atmosphériques du spectre en transmission simulé dans le cas ∇^+T ainsi que les contributions de chaque absorbant au spectre inversé (en haut à gauche) dans l'hypothèse où H_2O et H_2 sont constants. Les paramètres inversés sont le rayon de la planète [R_J], la température [K], les abondances en H_2O et CO [$\log(\text{VMR})$] et la pression des nuages [bar]. Le poids moléculaire moyen de l'atmosphère est dérivé à partir de ces paramètres mais ne fait pas l'objet d'une inversion de données.	148
C.5	Même graphique que la Figure C.4 en considérant ici que H_2O peut se dissocier thermiquement, H_2 restant constant.	149
C.6	Même graphique que la Figure C.4 en considérant ici que H_2O et H_2 peuvent se dissocier thermiquement.	150
C.7	Distributions postérieures de l'inversion de données atmosphériques du spectre en transmission simulé dans le cas GCM ainsi que les contributions de chaque absorbant au spectre inversé (en haut à gauche) dans l'hypothèse où H_2O et H_2 sont constants. Les paramètres inversés sont le rayon de la planète [R_J], la température [K], les abondances en H_2O et CO [$\log(\text{VMR})$] et la pression des nuages [bar]. Le poids moléculaire moyen de l'atmosphère est dérivé à partir de ces paramètres mais ne fait pas l'objet d'une inversion de données.	151
C.8	Même graphique que la Figure C.7 en considérant ici que H_2O peut se dissocier thermiquement, H_2 restant constant.	152
C.9	Même graphique que la Figure C.7 en considérant ici que H_2O et H_2 peuvent se dissocier thermiquement.	153

Liste des tableaux

1.1	Comparaison des rayons apparents entre plusieurs systèmes très différents, un Jupiter chaud autour d'une étoile F et une planète de type mini-Neptune autour d'une naine M. Nous remarquons que le rapport rayon planétaire sur rayon stellaire est du même ordre de grandeur pour tous ces objets, indiquant qu'ils sont tous détectables par nos instruments actuels.	13
2.1	Paramètres de la cible Kelt-7 b et de son étoile.	30
2.2	Table des paramètres inversés par le modèle <i>TauREx</i> pour les spectres en émission et en transmission de la planète Kelt-7 b ainsi que la mise à jour des éphémérides.	40
2.3	Données spectrales de Kelt-7 b utilisées dans cette étude.	54
3.1	Paramètres de la planète Wasp-121 b et de son étoile.	62
3.2	Paramètres utilisés dans les trois configurations de simulation de Wasp-121 b.	67
3.3	Paramètres du Jupiter ultra chauds Wasp-33 b et de son étoile.	86
4.1	Angle Γ (en degré) entre le point sub-stellaire et le point le plus chaud de l'atmosphère pour les simulations sans inversion thermique.	106

Chapitre 1

Observer les Jupiters Chauds

Sommaire

1.1	Introduction générale	3
1.2	Les Jupiters chauds	7
1.2.1	Description générale	7
1.2.2	Dynamique	8
1.2.3	Chimie	8
1.2.4	Physique	9
1.3	Sonder les atmosphères exoplanétaires	11
1.3.1	Éclipse primaire : transit	11
1.3.2	Éclipse secondaire : émission	16

1.1 Introduction générale

La découverte des exoplanètes et leur étude depuis ces 25 dernières années ont mis en évidence une très grande variété d'objets orbitant autour de différents types d'étoiles (M, K, G, F, A), révélant une diversité de masses, de rayons et de périodes orbitales possibles qui ont fortement remis en question les théories en place à cette époque sur la formation des planètes et leur évolution. Sur les plus de 4000 exoplanètes découvertes à ce jour, nous avons découvert une étonnante diversité de systèmes planétaires présentant des propriétés physiques, chimiques ou orbitales surprenantes qui ne pouvaient être expliquées par les théories développées sur la seule connaissance des planètes du système solaire.

Cette diversité d'objets a pu être mise en évidence notamment grâce à la combinaison, lorsque c'est possible, de deux techniques de détection, à savoir les méthodes des vitesses radiales et des transits, utilisées entre autres par le télescope au sol HARPS (High Accuracy Radial velocity Planet Searcher) et le télescope spatial Kepler pour la première méthode, les télescopes spatiaux Hubble, Spitzer, Corot, Kepler et TESS (Transiting Exoplanet Survey Satellite) pour la seconde. La première technique donne accès à la masse et aux propriétés orbitales (distance avec l'étoile hôte, période de rotation, excentricité) de l'exoplanète par analyse spectroscopique du mouvement induit par le système planète-étoile, et à son rayon pour la seconde. Ces informations permettent alors de déduire la densité et la température d'équilibre de l'atmosphère. C'est ainsi que nous avons découvert de nouveaux types de planètes qui ne se trouvent pas dans notre système solaire, tels que les super-Terre, planètes rocheuses de tailles et masses supérieures à la Terre ou les Jupiter chauds (Mayor and Queloz 1995), planètes orbitant très proches de leurs étoiles hôtes et présentant donc des températures d'équilibre pouvant dépasser les 2500 K avec des rayons et des masses pouvant être bien supérieurs à ceux de Jupiter. A ce jour, voici les principales catégories d'exoplanètes ayant été détectées :

1. Les géantes froides, massives, grandes et froides, équivalentes à Saturne ou Jupiter.
2. Les planètes de type Terre, Super-Terre et Neptune.
3. Les Jupiters chauds et ultra chauds, planètes massives, présentant une courte période orbitale et un grand rayon planétaire, en haut à gauche du diagramme Fig. 1.1.

La Fig. 1.1 représente les exoplanètes détectées à ce jour quelle que soit la méthode de détection pour lesquelles nous avons les données suivantes : masse, rayon, température d'équilibre calculée et période orbitale¹. Ce diagramme met en évidence la catégorie des Jupiters chauds et ultra chauds, dont le large rayon et la faible période orbitale les rend aisément observable en transit.

En outre, ces nouvelles techniques, et plus particulièrement la méthode des transits, nous donnent aussi accès à des informations sur les atmosphères des exoplanètes. L'étude de ces dernières est aujourd'hui à la pointe de la recherche sur les exoplanètes et les observations spectroscopiques sondent désormais ces mondes tant à la recherche de leurs caractéristiques physiques qu'à l'établissement de la composition chimique de leurs atmosphères. Il reste néanmoins difficile d'obtenir des données précises sur toutes les atmosphères puisque le rapport signal sur bruit dépend du rapport des rayons de la planète

1. Ce diagramme ne présente donc pas l'ensemble des exoplanètes découvertes à ce jour, mais il met en évidence celles qui vont nous intéresser dans cette thèse.

sur celui de son étoile (R_p/R_s), limitant ainsi l'étude des atmosphères soit aux plus grandes exoplanètes, soit à celles gravitant autour de petites étoiles afin de ne pas atteindre les limites de détection (Tsiras et al. 2018). Aussi, la faible couverture spectrale et la relative faible résolution spectrale disponible avec les instruments actuellement en fonctionnement (HST, Spitzer, Kepler, TESS) limitent fortement le nombre de molécules qu'il serait possible de détecter.

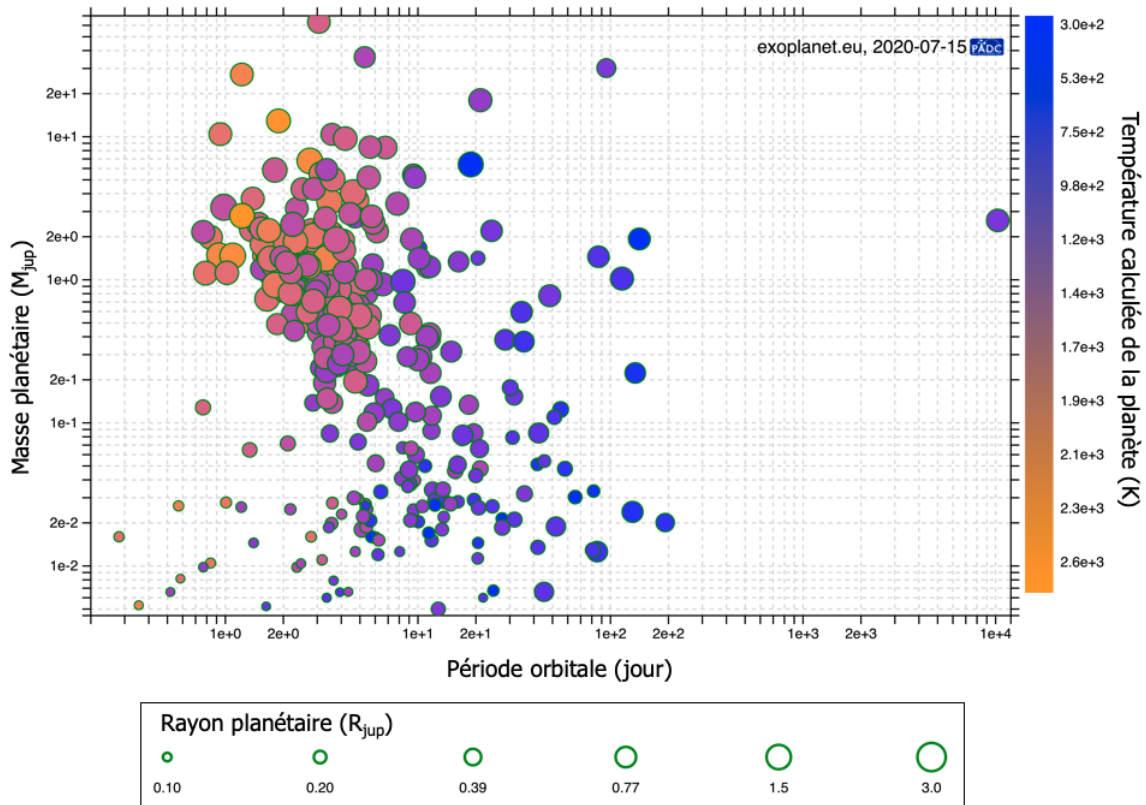


FIGURE 1.1 – Exoplanètes détectées dans un diagramme période orbitales (en jour) en fonction de la masse de la planète (en M_J). La couleur et la taille des points indiquent respectivement la température d'équilibre calculée de la planète (en Kelvin) et le rayon planétaire (en R_J). Les Jupiters chauds et ultra chauds se distinguent nettement dans la partie supérieure gauche de ce diagramme.

Pour pallier ces limites, deux nouvelles missions vont être lancées dans les prochaines années, le *James-Webb Space Telescope* (JWST) développé par la NASA et l'ESA et le télescope spatiale européen *Atmospheric Remote-sensing Infrared Exoplanet Large-survey* (Ariel) développé par l'ESA. Ces missions couvrant un grand domaine spectral allant du visible à l'infrarouge moyen impliqueront un bond en avant dans la caractérisation des atmosphères d'exoplanètes. Ces programmes de hautes précisions permettront par des observations spectroscopiques en transit ou en émission d'obtenir de nombreux paramètres physico-chimiques (présences de brumes, nuages ou aérosols, composition moléculaire, profil pression-température) et dynamiques (profil de vents zonaux, absence ou présence de convection, chimie hors équilibre, etc) sur les atmosphères étudiées. Aux vues des performances attendues pour les nouveaux télescopes spatiaux Ariel et JWST dont la précision sur les observations sera sans précédent, il est

essentiel de se demander si les modèles actuels seront en mesure de fournir des résultats en adéquation avec ces précisions. En effet, dans l'hypothèse même où nous atteindrions des précisions encore supérieures, deux questions majeures demeurent ; n'y aurait-il pas une limite intrinsèque à ces observations en transit à laquelle nous ne pourrions pas échapper ? Possédons-nous des modèles capables d'analyser sans biais ces données ?

Pour analyser les données recueillies lors d'observations en transit ou en émission et ainsi déduire un maximum d'informations sur la composition chimique, les propriétés physiques et dynamiques de l'atmosphère observée, une méthode efficace va consister à simuler un grand nombre de spectres en transit ou en émission afin de converger statistiquement vers le modèle qui ajustera le mieux les observations. Cette méthode d'inversion de données, basée sur une approche bayésienne, donne ainsi la solution la plus probable permettant de reproduire les données. Elle a l'avantage de contraindre un nombre important de paramètres physiques et chimiques de l'atmosphère. Cependant, il s'agit d'une méthode coûteuse en terme de calculs car il faut générer des milliers de spectres pour avoir une statistique suffisante permettant au code de converger vers une solution. Or, la complexité des atmosphères est grande et surtout tridimensionnelle, obligeant donc ces modèles numériques à faire des hypothèses fortes sans quoi ils seraient incapable de converger dans un temps raisonnable.

Plusieurs de ces codes ont donc été développés au cours des années tels que *Nemesis* (Irwin et al. 2008), *petitCODE* (Mollière et al. 2015, 2017), *ARCIS* (Min et al. 2020), ou encore *TauREx* (Waldmann et al. (2015), *Tau Retrieval for Exoplanets*) dont la dernière version beaucoup plus rapide en temps de calcul a été publiée récemment (Al-Refaie et al. 2019). Prenons le cas de *TauREx*, puisque c'est sur cet algorithme que les résultats de la thèse se basent. *TauREx* suppose une atmosphère homogène et isotrope, considérant qu'une colonne d'atmosphère peut être généralisée à l'ensemble de la planète. C'est ce que l'on appelle un modèle unidimensionnel (1D). Il est évident qu'une hypothèse aussi forte limite considérablement la capacité de ce code à représenter la complexité d'une atmosphère qui est un objet en 3D. Malgré tout, et même si cela peut paraître contre-intuitif, cette hypothèse reste raisonnable et de nombreux modèles de simulations d'atmosphère donnent des résultats exploitables en 1D. Par exemple, si nous pouvions observer le spectre en transit de la planète Terre, supposer que la Terre à le même climat qu'une colonne atmosphérique au-dessus de la France n'est pas une si mauvaise hypothèse au premier ordre. Une seconde hypothèse est généralement faite lors de l'analyse des résultats des codes d'inversion tel que *TauREx*, à savoir que l'on suppose que le spectre en transit ne sonde que la région des limbes de l'atmosphère. Seuls les effets verticaux le long des limbes sont alors considérés tandis que les effets au travers des limbes sont négligés. La validité de ces hypothèses est fortement remise en question, notamment pour les planètes dont le rapport de l'échelle de hauteur sur le rayon de la planète n'est pas trop petit, typiquement supérieur à 0.1. L'invalidité de ces hypothèses concerne ainsi une large gamme de planètes, s'étendant des Neptunes tièdes jusqu'aux Jupiters chauds et ultra chauds.

La première exoplanète confirmée découverte par Mayor and Queloz (1995) est un Jupiter Chaud. De nombreuses autres planètes de ce type ont été détectées depuis, et les études statistiques montrent que les Jupiters chauds ne représentent qu'environ 1 pourcent de la population des exoplanètes de notre galaxie (Wright et al. 2012 ; Howard et al. 2012 ; Fressin et al. 2013). Sont comptabilisées dans cette

catégorie les exoplanètes dont le rayon est supérieur à environ $0.7 R_J$, la masse supérieure à environ $0.1 M_J$ et dont la température d'équilibre dépasse 1000 K (voir Fig. 1.1) : les études sur ces objets, n'ayant aucun équivalent dans le système solaire, ont montré des propriétés dynamiques, physiques et chimiques exotiques. La plupart de ces exoplanètes sont en rotation synchrone autour de leur étoile hôte due aux intenses effets de marée qu'elles subissent étant donné leur faible période orbitale. Cela implique alors un fort contraste entre le côté jour et le côté nuit de la planète. Les Modèles de Climats Globaux 3D (GCM) révèlent d'ailleurs une dynamique des vents très forte avec la présence de vents zonaux intenses et de super rotations, notamment due à cette dichotomie jour/nuit. La chimie des atmosphères de ces exoplanètes est également complexe, et plus particulièrement pour les Jupiters Ultra Chauds (UHJ) car les températures atteintes dans leur atmosphère autorisent la dissociation thermique de certaines espèces (Lodders and Fegley 2002; Visscher et al. 2006, 2010) générant des hétérogénéités chimiques fortes. La complexité tridimensionnelle de ces exoplanètes met donc en défaut les hypothèses 1D des modèles d'inversion de données tels que *TauREx*.

C'est dans ce contexte que cette thèse s'inscrit, visant d'une part à mettre en évidence l'impact de la structure tridimensionnelle sur les observations des exoplanètes chaudes afin de pouvoir caractériser les biais induits par la géométrie 3D des planètes sur les spectres en transit. D'autre part nous cherchons à établir le domaine (rayon, masse, température d'équilibre, distance à l'étoile, etc) à partir duquel ces biais deviennent importants, et par conséquent à partir de quand ils s'avèrent négligeables.

Ce manuscrit est articulé en cinq chapitres. Le chapitre 1 est une introduction, d'abord générale sur l'observation des exoplanètes et de leur analyse, puis sur une catégorie d'exoplanète qui va être étudiée tout au long de cette thèse, les Jupiters Chauds. Ce chapitre va introduire la technique d'observation en transit, qui est une méthode centrale dans tout le processus d'analyse de l'atmosphère des exoplanètes, et en particulier des Jupiters Chauds.

Le chapitre 2 porte sur l'étude de la planète Kelt-7 b, un Jupiter Chaud observé par l'instrument Wide Field Camera 3 (WFC3) du télescope spatial Hubble (HST), l'instrument InfraRed Array Camera (IRAC) du télescope spatial Spitzer et aussi le télescope spatial TESS, dont nous possédons des données à la fois en éclipse primaire et secondaire. Le but ici est d'introduire plus en détails le modèle d'inversion de données *TauREx*, de montrer ses capacités pour extraire de l'information sur les propriétés physico-chimiques de son atmosphère mais aussi de voir ses limites sur l'analyse de données observationnelles en transit et en émission avec les instruments actuels. Ce chapitre va également permettre d'introduire une première réflexion sur les potentiels biais induits par l'analyse 1D d'une atmosphère 3D.

Le chapitre 3 se concentre sur une étude théorique concernant les biais dans la composition atmosphérique causés par les hétérogénéités chimico-physiques entre l'hémisphère jour et l'hémisphère nuit des exoplanètes ultra chaudes, avec Wasp-121 b comme exemple. Pour y parvenir, nous procédons en 3 temps : premièrement nous nous servons d'un modèle GCM (SPARC/MIT, Parmentier et al. (2018)) pour simuler en 3D l'atmosphère de Wasp-121 b. Ensuite, grâce au modèle *Pytmosph3R* (Caldas et al. 2019) nous calculons des spectres en transit prenant en compte la géométrie tridimensionnelle de l'atmosphère basée sur la simulation 3D du GCM. Cela nous permet ainsi d'obtenir une simulation d'observation de Wasp-121 b prenant compte de la complexité 3D de l'atmosphère telle que les télescopes spatiaux JWST

ou Ariel le feront. Enfin, nous utilisons le code d'inversion de données *TauREx* afin de voir si celui-ci est capable de converger vers des solutions raisonnables.

Le chapitre 4 s'attèle à établir l'évolution des biais mise en évidence dans le précédent chapitre lorsque l'on étudie des exoplanètes de moins en moins chaudes. La mise en évidence d'une limite sur l'impact des biais induit par la géométrie 3D des atmosphères permet de fournir à la communauté des bases quantitatives solides indiquant la validité ou non des modèles d'inversions de données 1D.

Le chapitre 5 rappelle les principaux résultats de cette thèse, les limites des modèles, des méthodes et détermine les perspectives que ces travaux ont ouvertes. Il indique aussi les futurs travaux à venir à court et moyen terme pour pallier les différentes limites mises en évidence.

Les chapitres de ce manuscrit s'enchaînent dans un ordre logique, c'est pourquoi nous conseillons au lecteur de suivre cet ordre pour une meilleure compréhension de cette thèse. Nous démarrons avec une étude montrant ce que nous sommes en mesure de faire aujourd'hui avec le peu de données d'observations que nous avons. Nous analysons ensuite les biais sur les observations actuelles et sur les futures observations à venir. Enfin nous mettons en perspective ces biais afin d'établir leur domaine de validité et ainsi nous fournissons des recommandations solides sur le domaine de validité des modèles d'inversion 1D.

1.2 Les Jupiters chauds

1.2.1 Description générale

Les Jupiters chauds sont des exoplanètes comme il n'en existe pas d'équivalents dans notre système solaire. Bien que ces planètes géantes gazeuses soient de masses et de rayons comparables à ceux de Jupiter, elles diffèrent de celle-ci par plusieurs aspects : orbitaux, physiques, dynamiques et chimiques.

Leurs périodes orbitales sont très faibles ($\lesssim 10$ jours), impliquant qu'elles soient dans leur immense majorité en rotation synchrone autour de leur étoile hôte (Guillot et al. 1996; Showman et al. 2008) et présentent en général des excentricités faibles voir nulles. Les Jupiters Chauds se trouvent alors dans un régime de rotation intermédiaire, allant des atmosphères dominées par la rotation rapide pour les planètes de périodes orbitales les plus courtes jusqu'aux atmosphères dominées par une rotation plus lente pour les plus éloignées.

Étant donnée la faible distance qui les sépare de leur étoile hôte, le flux lumineux reçu par leurs atmosphères est considérablement plus élevé que ce que nous connaissons dans le système solaire. Par exemple, le Jupiter chaud Kelt-7 b reçoit un flux stellaire d'environ 10^6 W/m² alors que Mercure reçoit 2280 W/m², la Terre 340 W/m², et Jupiter 13 W/m²². Ces planètes auront alors une température d'équilibre bien plus élevée que les géantes de notre système solaire, et cela va avoir d'importantes conséquences sur leur dynamique, leur physique et leur chimie.

2. Il s'agit du flux reçu en moyenne sur le disque planétaire πR_p^2

1.2.2 Dynamique

La dynamique des planètes géantes est étudiée depuis de nombreuses années dans notre système solaire que ce soit par une approche observationnelle ou par la modélisation à l'aide de GCM (Guillot and Hueso 2006; Showman et al. 2008; Guerlet et al. 2014; Guillot et al. 2018), et continue de l'être avec des missions comme JUICE ou JUNO. La découverte des Jupiters chauds, qui évoluent dans un régime différent des planètes géantes de notre système solaire, a permis d'en apprendre plus sur la dynamique des planètes géantes dans des conditions différentes de celles de notre système solaire.

Les travaux théoriques ont démontré l'importance de deux longueurs fondamentales dans la dynamique des atmosphères. Premièrement, le rayon de déformation de Rossby, désignant l'échelle de longueur caractéristique à partir de laquelle la force de Coriolis résiste aux perturbations en pressions. Il est défini comme $R_d = NH/f_c$, où N est la fréquence de Brunt-Väisälä régissant la période des ondes de gravité, H l'échelle de hauteur de l'atmosphère et $f_c \equiv 2\Omega \sin\phi$ le paramètre de Coriolis régissant les mouvements inertiels avec Ω le taux de rotation angulaire de la planète et ϕ la latitude (Vallis 2017).

Deuxièmement, la longueur de Rhines, définie comme $(U/\beta)^{1/2}$, est l'échelle à partir de laquelle la rotation de la planète implique des vents est-ouest forts, aussi appelés jets. U représente la vitesse caractéristique du vent horizontal et $\beta \equiv 2\Omega \cos(\phi/a)$ est le gradient longitudinal de la rotation de la planète où Ω et ϕ sont les mêmes que définis précédemment et a est le rayon de la planète. Nous savons que les turbulences tendent à être isotrope horizontalement aux petites échelles, mais aux grandes échelles, lorsque nous atteignons la longueur de Rhines, les turbulences ont tendance à évoluer préférentiellement dans la direction est-ouest, impliquant alors la mise en place de forts jets zonaux (Showman et al. 2008).

Ainsi, avec les grandes échelles de hauteur et le taux de rotation modéré des Jupiters chauds, le rayon de déformation de Rossby et la longueur de Rhines sont typiquement de l'ordre du rayon de la planète impliquant alors une dynamique à l'échelle de la planète, contrairement aux planètes géantes du système solaire.

1.2.3 Chimie

La composition des Jupiters chauds est encore relativement mal connue aujourd'hui, principalement dû au manque de données spectroscopiques de résolution spectrale et spatiale suffisante. Il est par ailleurs difficile de généraliser les découvertes faites sur une exoplanète à toutes les autres, car même si la découverte de telle ou telle molécule sur un Jupiter chaud nous permet de mieux comprendre la composition chimique de ces objets, rien ne nous prouve que c'est le cas partout. C'est notamment pour ces raisons que des télescopes spatiaux comme le JWST ou Ariel ont été créés. En outre, étant donné les conditions extrêmes de température, d'insolation et de dynamique, il est également difficile d'estimer si la chimie de ces atmosphères est à l'équilibre ou hors équilibre, si la photo-dissociation y joue un rôle majeur ou non. Nous expliciterons plus en détails ces aspects dans la partie 1.2.4.

Néanmoins, grâce aux différents instruments spatiaux ou aux sols existants (HST, Spitzer, HAPRS, etc) nous avons depuis plusieurs années découvert un certain nombre de molécules dans les Jupiters chauds étudiés. Nous avons ainsi mis en évidence, et la liste est non-exhaustive, la présence d'eau (Tinetti

et al. 2007; Grillmair et al. 2008), d'alcalins, Na et K (Redfield et al. 2008; Casasayas-Barris et al. 2017), de monoxyde de carbone (de Kok et al. 2013) mais aussi de molécules un peu plus exotiques comme le monoxyde de Titane TiO et le monoxyde de vanadium VO (Sedaghati et al. 2017; Nugroho et al. 2017; Tsiaras et al. 2018). Dans les exoplanètes les plus chaudes, la thermo-dissociation de certaines espèces, notamment l'eau et le dihydrogène, peut se produire (Lodders and Fegley 2002; Parmentier et al. 2018; Pluriel et al. 2020) entraînant alors la présence d'autres espèces telles que l'hydrogène atomique H, H⁻, O, et bien d'autres. La composition chimique de ces exoplanètes est sûrement très riche, et la présence de nombreuses espèces sont prédites par les modèles chimiques (Lodders and Fegley 2002; Visscher et al. 2006, 2010; Moses et al. 2011; Visscher and Moses 2011; Moses et al. 2013); il reste encore à les confirmer par l'analyse des observations que nous ferons de celles-ci, pour celles qui seront détectables.

1.2.4 Physique

La physique de ces atmosphères est dominée par la quantité importante de flux lumineux reçus par son étoile, et donc par sa température d'équilibre qui va de 1000 K pour les Jupiters chauds les plus froids jusqu'à plus de 2500 K pour les Jupiters ultra chauds. L'interaction entre la chimie, la dynamique et la physique va alors être très différente par rapport à des atmosphères plus froides.

Pour illustrer cette spécificité, nous allons nous intéresser aux différentes échelles de temps caractéristiques de ces atmosphères, nous en développerons 3 :

1. L'échelle de temps radiatif τ_{rad} correspondant au temps de retour exponentielle vers une température d'équilibre.
2. τ_{dyn} , l'échelle de temps dynamique, correspondant au temps nécessaire à la dynamique (advection et ondes de gravité) pour lisser la température de l'atmosphère (Showman et al. 2013).
3. τ_{chi} , l'échelle de temps de l'équilibre thermodynamique chimique qui indique le temps nécessaire à une espèce chimique pour être à l'équilibre en fonction de la température et de la pression.

Afin de comprendre comment la hiérarchisation de ces différentes échelles de temps affectent l'atmosphère des Jupiters chauds, nous généralisons ces grandeurs à l'ensemble de l'atmosphère. Il s'agit d'une hypothèse forte, permettant d'expliquer à l'ordre zéro le comportement d'une atmosphère, tantôt dominée radiativement, ou dynamiquement par exemple, mais il faut rappeler que τ_{rad} , τ_{dyn} et τ_{chi} sont des échelles de temps définies localement.

Tout d'abord, intéresserons nous à la relation entre τ_{rad} et τ_{dyn} et ses implications sur l'atmosphère. Prenons une parcelle d'air à une température T_0 , et considérons qu'elle se déplace dans un milieu de température $T(\rho, \phi, \theta)$ où $T(\rho, \phi, \theta) \neq T_0$, avec ρ l'altitude, ϕ la longitude et θ la latitude. Si $\tau_{rad} \ll \tau_{dyn}$, les processus radiatifs sont dominants, les flux de chaleur par mouvements atmosphériques horizontaux sont alors faibles par rapport au taux de refroidissement local par effets radiatifs. Avec $\tau_{rad} \ll \tau_{dyn}$, une parcelle se trouve approximativement en équilibre radiatif local avec le milieu extérieur de sorte que la température de la parcelle pendant son mouvement est déterminée par les flux radiatifs locaux. Lorsqu'une parcelle est advectée, elle se refroidit rapidement dans le milieu de sorte que sa signature de

température initiale est rapidement perdue. Par conséquent, sur une planète avec $\tau_{rad} \ll \tau_{dyn}$, le gradient de température équateur-pôle est très important, en réponse aux variations latitudinales du rayonnement solaire. En outre, comme le refroidissement radiatif de la parcelle atmosphérique est tellement efficace, une très grande variation diurne de la température est attendue.

En revanche, si $\tau_{rad} \gg \tau_{dyn}$, les transports dynamiques de chaleur dominant sur le refroidissement radiatif. Ce régime, caractéristique de Vénus, Jupiter et Saturne, se produit parce que la vitesse caractéristique des vents zonaux est très grande, indiquant des transports rapides de chaleur par des mouvements horizontaux. Considérons à nouveau le mouvement d'une parcelle dans l'atmosphère. Avec une vitesse de refroidissement radiatif lente, la température de la parcelle varie de façon adiabatique, en conservant sa signature thermique initiale. Ainsi, pour $\tau_{rad} \gg \tau_{dyn}$, une différence de température équateur-pôle très faible ou négligeable est attendue. Pour des raisons similaires, la variation diurne de la température sur une telle planète serait faible, impliquant une homogénéité longitudinale. Précisons que les ondes de gravité jouent aussi un rôle important dans le transport de l'énergie au sein de l'atmosphère, et notamment dans le transport horizontal par les ondes de Rossby.

Dans les Jupiters chauds, les échelles de temps radiatif au-dessus de la photosphère sont très courtes alors que leurs intérieurs homogènes se situent plus profondément sur une zone allant de 100 à 1000 bars environ, bien en-dessous de la photosphère autour de 0.01 à 1 bar (Guillot and Showman 2002; Iro et al. 2005; Showman et al. 2008). Il est donc très probable d'observer de très forts contrastes jour-nuit en température dans les atmosphères de telles planètes au-dessus de la photosphère. Néanmoins, les connaissances actuelles sur ces exoplanètes ne permettent pas de connaître avec précision la circulation qui a lieu dans ces atmosphères, et donc τ_{dyn} . Par ailleurs, comme τ_{rad} peut également dépendre de la circulation, il est nécessaire d'obtenir plus d'information sur ces objets pour pouvoir avoir confiance dans les simulations atmosphériques que nous calculons.

τ_{chi} représente le temps nécessaire pour qu'une réaction chimique soit à l'équilibre thermodynamique, par conséquent pour une atmosphère donnée, la chimie de celle-ci va dépendre de la valeur de cette échelle de temps par rapport aux autres échelles de temps caractéristiques du milieu, à savoir τ_{dyn} et τ_{rad} . Il convient alors d'analyser les différents cas possibles.

Si $\tau_{chi} \ll \tau_{dyn}$, nous sommes dans la situation où l'équilibre chimique d'une parcelle d'air, dont les propriétés physiques et dynamiques changeraient, se passe instantanément. Nous pouvons alors considérer l'équilibre chimique partout dans une telle atmosphère. Si maintenant $\tau_{chi} \gg \tau_{dyn}$ et $\tau_{chi} \gg \tau_{rad}$, l'évolution thermodynamique très lente implique que l'équilibre chimique n'est jamais atteint et l'atmosphère est alors hors équilibre. Enfin, il est important de préciser que l'échelle de temps d'équilibre chimique τ_{chi} peut fortement varier selon que l'on se trouve du côté jour ou du côté nuit de l'atmosphère de ces exoplanètes, impliquant alors des phénomènes de trempe qui affectent fortement la chimie de ces atmosphères. Par exemple, Agúndez et al. (2014) ont montré que la prise en compte de ces effets d'échelle de temps chimiques impliquent des différences importantes de composition chimique au sein de certaines atmosphères. Il arrive que certaines espèces (CH_4/CO ou O_2/OH) soient absentes de ces atmosphères car $\tau_{chi} \gg \tau_{dyn}$ du côté nuit alors que $\tau_{chi} \ll \tau_{dyn}$ du côté jour. Cela implique que du côté diurne, l'équilibre chimique soit rapidement atteint tandis que du côté nocturne, la vitesse de mise à

l'équilibre est trop lente par rapport au transport. Ainsi, seul l'équilibre chimique du côté jour se maintient dans la composition chimique de ces atmosphères. Nous parlons de blocage cinétique (ou quenching en anglais).

Bien évidemment, les cas intermédiaires où les échelles de temps sont du même ordre de grandeur ne peuvent être résumés simplement et doivent être étudiés au cas par cas à l'aide de modèles appropriés. Par ailleurs nous n'avons pas évoqué la photo-dissociation qui affecte également la chimie de ces atmosphères et complexifie l'ensemble des processus physique, dynamique et chimique de ces atmosphères.

1.3 Sonder les atmosphères exoplanétaires

1.3.1 Éclipse primaire : transit

Lors d'un transit, la planète passe devant son étoile et masque alors une partie du flux lumineux que nous recevons, impliquant une baisse de luminosité captée par photométrie. Cette baisse de flux va fortement dépendre du diamètre apparent de l'exoplanète par rapport à celui de son étoile, rendant plus ou moins facile la détection de cette baisse de flux lumineux. C'est pour cette raison que les Jupiters chauds sont des cibles privilégiées pour l'étude de leur spectre en transmission, car ce sont des planètes orbitant proches de leur étoile, ayant une atmosphère enflée et donc ayant un rayon apparent par rapport à celui de leur étoile est suffisamment grand pour être facilement observable. La Figure 1.2 montre la courbe de phase correspondant à une observation d'une planète en transit et illustre le principe de l'éclipses primaire (aussi appelé transit) et secondaire. L'étude de la courbe de phase apporte de nombreuses informations sur l'exoplanète observée et sur son étoile (Parmentier and Crossfield 2018). Il est très utile d'obtenir des points de mesure sur l'ensemble de la courbe de phase, comme c'est le cas dans l'exemple du Jupiter chaud HD189733 b montré à la Figure 1.2, afin de pouvoir dé-corréler plus facilement le flux lumineux provenant uniquement de l'étoile (lors de l'éclipse secondaire), celui provenant de la face diurne (juste avant l'éclipse secondaire) et celui de la face nocturne (éclipse primaire).

Néanmoins, d'autres cibles très intéressantes existent, dans une configuration totalement différente, à savoir des systèmes de planètes compactes, plus petites (super-Terre, sub-Neptune) orbitant autour d'étoiles bien plus froides telles que les naines M et donc ayant un diamètre apparent également plus petit. Le système K2-18 (Sarkis et al. 2018) est un de ces systèmes, avec une planète de type mini-Neptune, orbitant très proche de la naine M K2-18a. Nous pouvons également citer le système extrêmement compacte Trappist-1, présentant 7 planètes en transit dont nous avons pu contraindre assez précisément le rayon (Gillon et al. 2017). La Table 1.1 compare plusieurs systèmes planétaires différents (Wasp-121 b, Kelt-7 b, HD-3167 b, K2-18 b et Trappist-1 b), allant d'un Jupiter ultra chaud orbitant autour d'une étoile F6 jusqu'à une planète de type Terre orbitant autour d'une naine M et montre que le rapport des rayons apparents entre tous ces systèmes est du même ordre de grandeur, donc que les atmosphères de ces planètes sont détectables et analysables par nos instruments.

Si nous supposons que la planète transitant possède une atmosphère, celle-ci va alors occulter une partie du rayonnement de l'étoile lors de son transit. Cependant, la quantité de lumière absorbée par

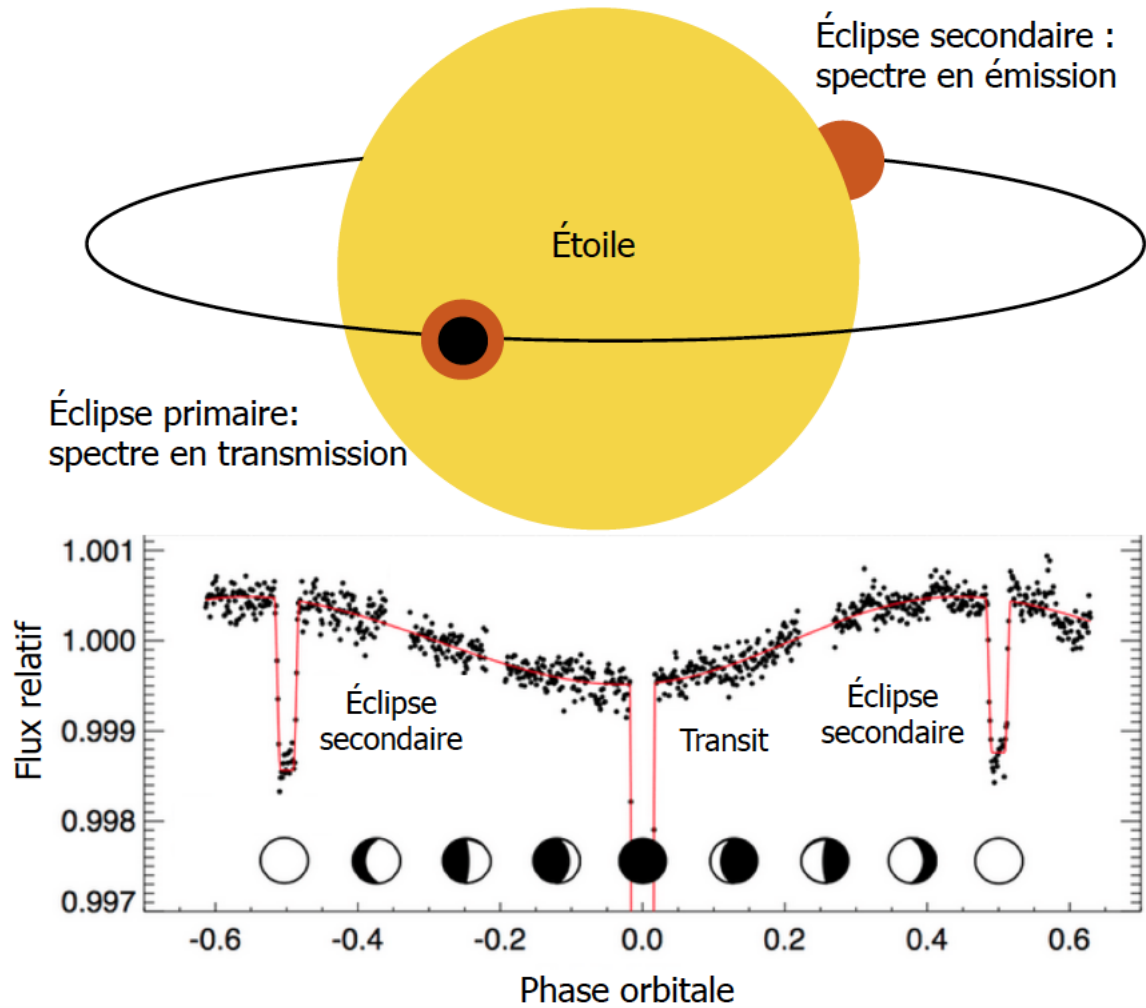


FIGURE 1.2 – Schéma d’une exoplanète en transit autour de son étoile hôte (haut) suivi d’un exemple de la courbe de phase du Jupiter chaud HD189733 b observé à $4.5 \mu\text{m}$ par l’instrument IRAC de Spitzer (bas). Figure adaptée de [Seager and Deming \(2010\)](#); [Knutson et al. \(2012\)](#).

Planète	Type étoile	Type planète	R_p/R_*	Références
Wasp-121 b	F6 V	Jupiter ultra chaud	0.129	Delrez et al. (2016)
Kelt-7 b	F	Jupiter chaud	0.085	Bieryla et al. (2015)
HD-3167 b	K0 V	Neptune chaud	0.029	Delrez et al. (2016)
K2-18 b	M2.5 V	mini-Neptune	0.053	Sarkis et al. (2018)
Trappist-1 b	M	Terre	0.083	Gillon et al. (2017)

TABLE 1.1 – Comparaison des rayons apparents entre plusieurs systèmes très différents, un Jupiter chaud autour d’une étoile F et une planète de type mini-Neptune autour d’une naine M. Nous remarquons que le rapport rayon planétaire sur rayon stellaire est du même ordre de grandeur pour tous ces objets, indiquant qu’ils sont tous détectables par nos instruments actuels.

l’atmosphère sera différente en fonction de la longueur d’onde à laquelle nous l’observons³. En analysant les variations de rayons apparents en fonction de la longueur d’onde, nous pouvons générer un spectre en transmission à partir duquel il devient possible d’accéder à des informations sur la composition chimique (présence de certaines molécules, atomes, ions) et la présence de nuages ou de brumes ([Tinetti et al. 2007](#)). Nous décrivons ci-après comment obtenir ce spectre et comment en extraire des informations sur les atmosphères planétaires.

Calcul de la profondeur de transit

Afin de comprendre comment fonctionne la méthode d’analyse des atmosphères par transit, nous allons ici établir les équations permettant de calculer le flux lumineux occulté par la planète et son atmosphère en fonction de la longueur d’onde. Lors d’un transit, l’aire de la planète et de son atmosphère va occulter une partie du flux lumineux émis par l’étoile et une partie de ce flux va traverser l’atmosphère. Or, comme dans tout milieu non vide, l’intensité d’un rayon de lumière monochromatique va varier selon la loi de Beer-Lambert qui établit la variation de l’intensité lumineuse dans un milieu donné.

Au regard de la géométrie donnée à la Figure 1.3, la longueur du trajet à l’intérieur de l’atmosphère, et donc la profondeur optique de l’atmosphère, τ , est fonction de la distance projetée entre le

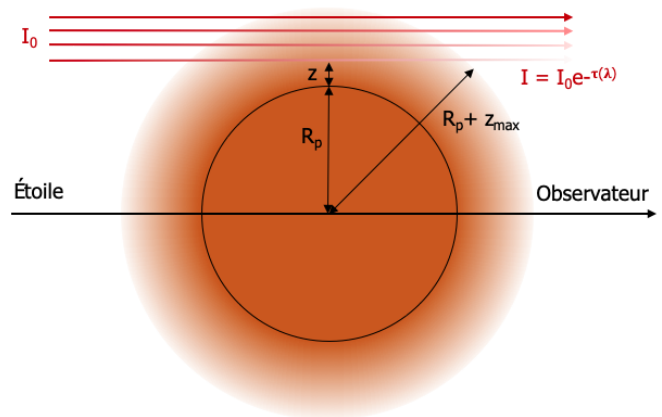


FIGURE 1.3 – Schéma présentant la géométrie de la planète lors d’un transit.

3. Voir paragraphe ci-après et Figure 1.4.

centre de la planète et la ligne de visée, z , nous pouvons alors écrire la relation suivante :

$$I(\lambda, z) = I_0(\lambda)e^{-\tau(\lambda, z)} \quad (1.1)$$

où $I(\lambda, z)$ et I_0 sont respectivement l'intensité lumineuse finale et initiale, λ est la longueur d'onde et τ la profondeur optique de l'atmosphère. L'absorption totale de l'atmosphère à une longueur d'onde donnée $\alpha(\lambda)$ peut alors être calculée en intégrant le produit de l'aire atmosphérique projetée dA avec l'opacité atmosphérique κ pour l'ensemble des altitudes z :

$$dA = 2\pi(R_p + z)dz \quad (1.2)$$

$$\kappa = 1 - e^{-\tau(\lambda, z)} \quad (1.3)$$

$$\alpha(\lambda) = 2\pi \int_0^{z_{max}} (R_p + z)(1 - e^{-\tau(\lambda, z)})dz \quad (1.4)$$

où R_p est le rayon de la planète, ce qui signifie, pour les planètes gazeuses, la limite à partir de laquelle nous considérons la profondeur optique infinie et z_{max} est l'altitude maximum considérée dans cette atmosphère. La variation de flux stellaire due à la planète et son atmosphère en fonction de la longueur d'onde s'exprime alors comme suit :

$$\Delta F(\lambda) = \frac{\pi R_p^2 + \alpha(\lambda)}{\pi R_*^2} \quad (1.5)$$

où R_* est le rayon de l'étoile. Enfin, nous pouvons calculer le rayon apparent de l'atmosphère en transit selon la relation suivante :

$$R_{\text{eff}}(\lambda) = R_* \sqrt{\Delta F(\lambda)}. \quad (1.6)$$

où le rayon effectif est défini comme étant $R_{\text{eff}}(\lambda) = \sqrt{R_p^2 + \frac{\alpha(\lambda)}{\pi}}$.

Ainsi, nous pouvons déterminer la profondeur de transit pour chaque longueur d'onde permettant alors de tracer un spectre en transmission à partir duquel nous allons déduire des informations sur la composition atmosphérique de l'atmosphère étudiée.

Spectre en transmission

Maintenant que nous avons pu établir comment générer un spectre, nous allons voir comment nous pouvons en extraire de l'information sur son atmosphère. Pour cela, nous allons analyser un spectre extrait d'une simulation numérique 1D généré par le code *TauREx* (Waldmann et al. 2015), (Waldmann et al. 2015). La Figure 1.4 présente ce spectre en transmission pour une atmosphère composée exclusivement de H_2 , He, H_2O et CO et dont la température suit un profil de Guillot (Guillot 2010) pour une température d'équilibre de 1000 K. Les propriétés de l'étoile hôte sont solaires, faisant l'hypothèse d'une émission de corps noir de l'étoile. Il s'agit ici de simuler globalement un spectre en transmission typique d'un Jupiter chaud typique orbitant autour d'une étoile G.

L'analyse d'un spectre revient à identifier les différentes sources d'opacité contribuant à la profondeur de transit pour chaque longueur d'onde en essayant de minimiser les dégénérescences. Dans notre exemple, nous avons 3 sources d'opacité qui contribuent au spectre :

1. La contribution principale au spectre en transmission provient de l'opacité des molécules de l'atmosphère, dont l'absorption dépend de la température, de la pression, de la longueur d'onde et bien entendu de l'espèce considéré (CO ou H_2O dans notre exemple). Les raies d'absorptions pour chaque molécule peuvent être calculées analytiquement⁴ permettant ainsi d'établir des listes de raies d'absorption très haute résolution (plusieurs milliard de raies), comme par exemple la base de donnée ExoMol (Yurchenko et al. 2011 ; Tennyson and Yurchenko 2012 ; Barton et al. 2013 ; Yurchenko et al. 2014 ; Barton et al. 2014) ou HITRAN (Rothman et al. 2009 ; Gordon et al. 2013). En établissant un ajustement entre les bandes d'absorption des bases de données et le spectre en transmission, nous pouvons établir la présence ou l'absence de telle ou telle molécule dans l'atmosphère ainsi que l'abondance moléculaire de ces espèces. En prenant l'exemple de la Figure 1.4, nous voyons que la contribution de l'eau domine la majeure partie du spectre, avec deux bandes du CO observées à 2.3 et 4.5 μm .
2. Une seconde contribution au spectre provient de la diffusion Rayleigh, dont la dépendance en λ^{-4} implique une opacité importante aux courtes longueurs d'ondes. Par ailleurs, la diffusion Rayleigh ne dépend que de la molécule considérée (ici He, H_2 , H_2O ou CO) et de la longueur d'onde. Ainsi, observer l'absorption de la diffusion Rayleigh permet d'obtenir des informations sur la composition de l'atmosphère.
3. Enfin, l'absorption due aux collisions entre les molécules (en anglais "collision induced absorption", noté CIA) contribue également au spectre en transmission. Ces collisions créent des dipôles transitoires dont la durée de vie des états excités est généralement de l'ordre de la durée de la collision, donc courte. C'est pour cette raison que les CIA produisent généralement des absorptions très larges, formant une sorte de continuum⁵. Cette absorption dépend fortement de la pression, car plus elle est importante, plus les collisions entres molécules se produisent.

4. Nous ne rentrons pas dans les détails des équations, pour plus de précisions, voir la Section 1.4.2 dans Turbet (2018).

5. Il est possible de calculer analytiquement les CIA, mais cela reste difficile car il faut connaître avec précision le potentiel d'interaction entre deux molécules en collision à des distances courtes et grandes. Les mesures en laboratoire sont donc essentielles pour déterminer avec précision les CIA pour diverses paires de molécules en collision, un exemple avec la base de donnée HITRAN (Karman et al. 2019).

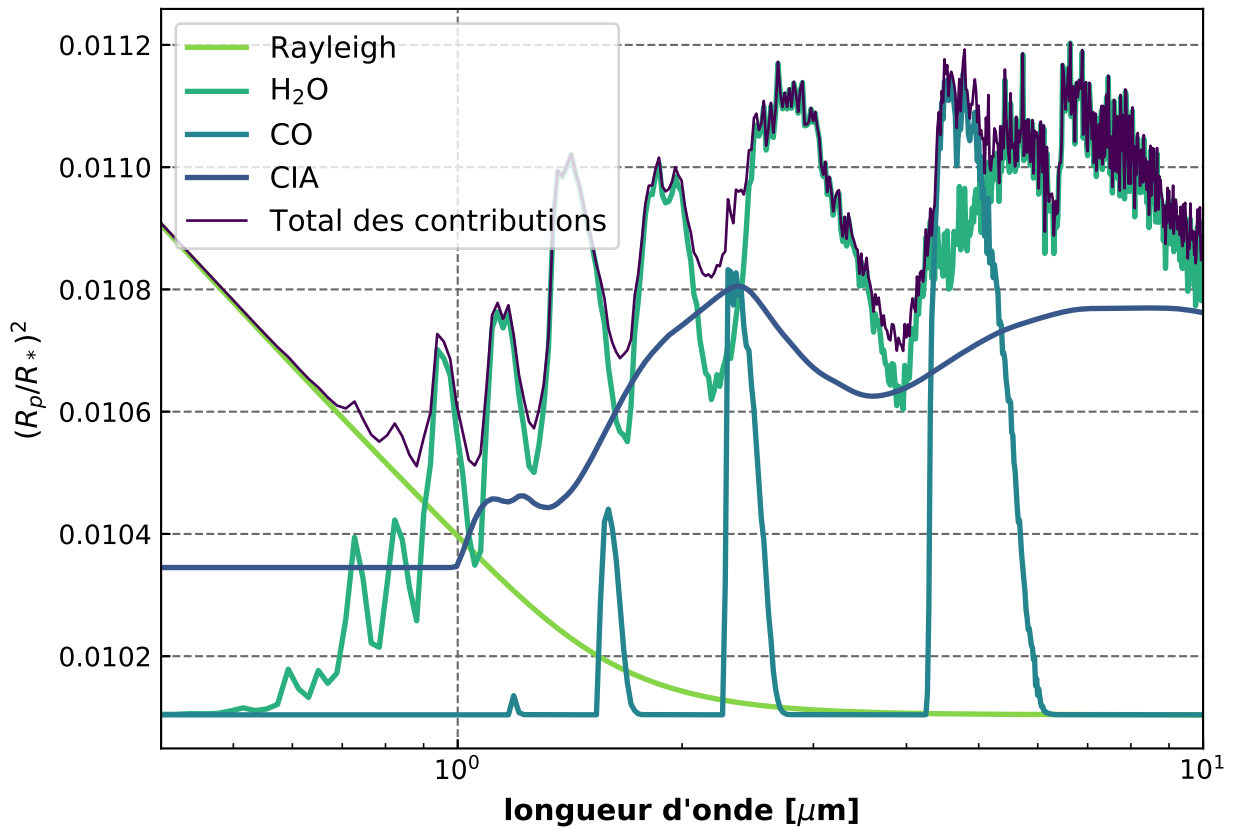


FIGURE 1.4 – Spectre en transmission généré par *TauREx* pour une planète homogène ayant une température de 1000 K et une atmosphère composée de He, H₂, H₂O et CO. Les contributions de la diffusion Rayleigh, H₂O, CO, et de l'absorption due aux collisions (CIA) sont respectivement tracées en vert, turquoise, bleu et bleu foncé. Le spectre observé, correspondant au produit des transmittances de toutes ces contributions, est tracé en violet.

Dans notre exemple, et de manière générale sur les Jupiters chauds, le fait que H₂ et He sont les espèces atmosphériques dominantes implique que les CIA H₂-H₂, He-He, et X-H₂ X-He (ou X représente n'importe quelle autre espèce) contribuent majoritairement.

Le spectre en transmission observé est alors le produit des transmittances de ces diverses contributions pour chaque longueur d'onde. Nous verrons plus tard que les modèles d'inversion de données se basent sur ces différentes contributions pour ajuster les paramètres de l'inversion de données.

1.3.2 Éclipse secondaire : émission

La lumière que nous recevons d'un système étoile-planète peut se séparer en plusieurs composantes. Tout d'abord, la source principale de lumière en terme de flux est celle que nous recevons directement de l'étoile. Nous recevons également la lumière de l'étoile réfléchi par la planète (et son atmosphère

si celle-ci en possède une) et enfin la lumière émise par la planète. Bien que la quantité de photons émis par l'étoile soit de plusieurs ordres de grandeurs supérieurs à celui de la planète, étoile et planète n'émettent pas dans les mêmes gammes de longueur d'onde. En effet, plus l'étoile sera chaude, plus celle-ci émettra dans le visible et l'ultraviolet tandis que la planète émettra principalement dans l'infrarouge d'après la loi de Wien ($\lambda_{max} = \frac{2.898 \cdot 10^{-3}}{T} m$), comme le montre la Figure 1.5. Ceci reste néanmoins une approximation, car certaines étoiles plus froides, telles que les naines M, peuvent émettre un flux UV plus intense que des étoiles plus chaudes s'écartant donc d'une émission de corps noir (Ribas et al. 2017). Nous remarquons aussi que pour les Jupiters chauds, dont la température d'équilibre est nettement plus élevée que pour d'autres planètes, la contribution dans le visible du spectre en émission de la planète n'est plus négligeable et recoupe le spectre réfléchi de la lumière de l'étoile sur l'atmosphère, tel que le montre la comparaison entre une étoile de type solaire et un Jupiter chaud de la Figure 1.5.

Calcul de la profondeur de l'éclipse

Lors de l'éclipse secondaire, la profondeur de l'éclipse correspond à la lumière totale réfléchi et émise par le côté jour de la planète. Par conséquent, en mesurant cette profondeur d'éclipse sous l'hypothèse que l'atmosphère de la planète émet comme un corps noir, il est possible d'accéder à la température de brillance et l'albédo du côté jour de la planète (Deming et al. 2005 ; Charbonneau et al. 2005). Par ailleurs, et comme pour le spectre en transit décrit précédemment, il est possible d'établir un spectre, cette fois-ci en émission, pouvant mettre en évidence la présence de certaines molécules (Gillon, M. et al. 2010 ; Delrez et al. 2016) qui vont impliquer une émission de l'atmosphère de la planète s'écartant du corps noir. La profondeur optique de l'éclipse $\delta(\lambda)$ en émission s'exprime alors comme suit :

$$\delta(\lambda) = \frac{F_p(\lambda)}{F_*(\lambda)} \quad (1.7)$$

où $F_p(\lambda)$ et $F_*(\lambda)$ sont les flux de la planète et de l'étoile respectivement. Si nous supposons une atmosphère homogène émettant comme un corps noir, nous pouvons écrire :

$$\delta(\lambda) = \left(\frac{R_p}{R_*} \right)^2 \frac{B(T_p, \lambda)}{B(T_*, \lambda)} \quad (1.8)$$

où R_p et R_* sont respectivement les rayons de la planète et de l'étoile, $B(T_p, \lambda)$ et $B(T_*, \lambda)$ sont respectivement la loi de Planck pour la température de la planète T_p et pour la température de l'étoile T_* .

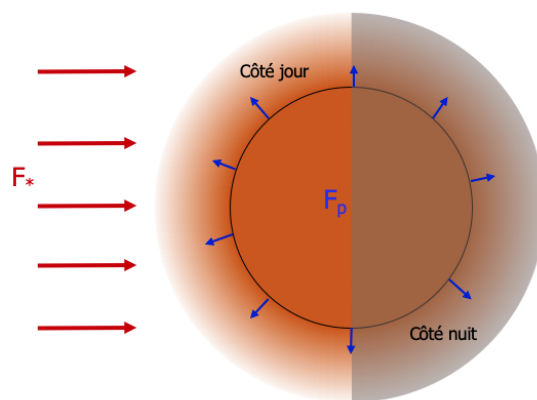


FIGURE 1.6 – Schéma présentant la géométrie de la planète lors d'une éclipse secondaire.

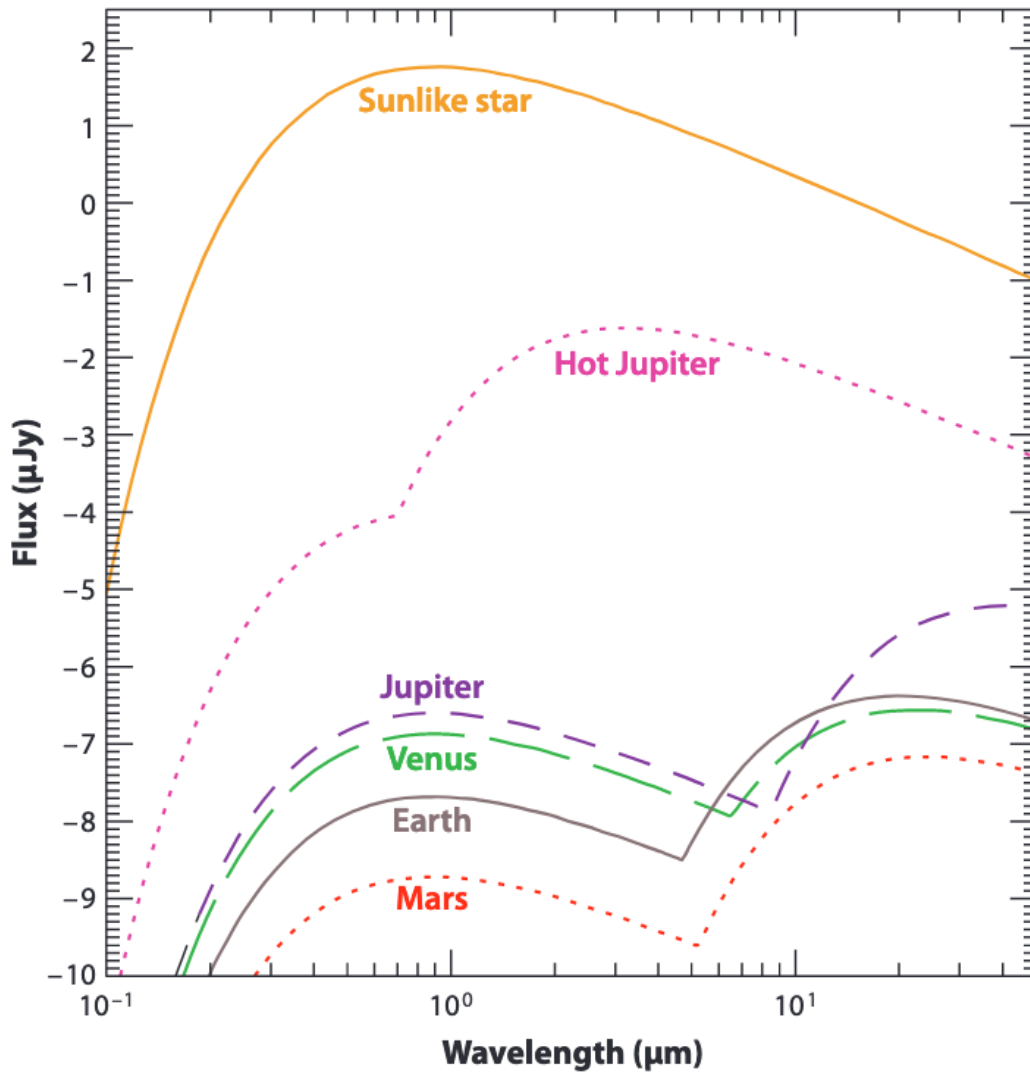


FIGURE 1.5 – Flux de corps noir (en unités de $10^{-26} W m^2 Hz^{-1}$) de certains objets du système solaire comme observé à 10 pc. Le Soleil est représenté par un corps noir à 5750 K. Les planètes Jupiter, Vénus, la Terre et Mars sont représentées ainsi qu'un Jupiter chaud d'une température d'équilibre de 1600 K. Les planètes présentent deux pics dans leur spectre, le premier de courte longueur d'onde est dû à la lumière du soleil diffusée par l'atmosphère de la planète et est calculé à l'aide de l'albédo géométrique de celle-ci, le second pic à grande longueur d'onde provient de l'émission thermique de la planète et est estimé par un corps noir de la température effective de la planète. L'albédo du Jupiter chaud est supposé être de 0.05, les données de température et d'albédo étant tirées de Cox (2000). Figure adaptée de Seager and Deming (2010).

Grâce à un spectre en émission, il est possible d'utiliser des modèles d'inversion de données permettant ainsi de détecter la présence d'espèces chimiques du côté jour de l'atmosphère.

Spectre en émission

Procédons maintenant au même exercice d'analyse d'un spectre à partir de la même simulation que celle décrite en Section 1.3.1, mais cette fois-ci pour un spectre en émission. La Figure 1.7 présente le spectre et toutes les différentes contributions. En émission, si l'atmosphère est homogène et isotherme, le spectre observé va être celui d'un corps noir à la température de l'atmosphère. En revanche, si le profil en T-P varie avec l'altitude, comme c'est le cas pour notre exemple, nous obtenons un spectre avec des bandes d'absorption ou d'émission. En effet, avec un profile T-P variable, l'émission se produit à partir de régions de l'atmosphère à différentes températures, le flux thermique généré varie alors. Si l'émission se produit à partir de régions plus froides de l'atmosphère, le flux thermique généré est plus faible, et inversement pour les régions plus chaudes. Nous voyons ainsi que le spectre en émission de la Figure 1.7 est largement dominé par l'émission de H₂O, avec une légère contribution du CO à 4.5 μm .

Maintenant que nous avons vu d'une part les connaissances actuelles sur les Jupiters Chauds, et d'autre part une des techniques pour les observer, à savoir la méthode des transits, nous allons pouvoir nous concentrer sur l'étude d'observations réelles afin de voir quelles informations nous pouvons obtenir. Le chapitre 2 va porter sur l'étude de la planète Kelt-7b, un Jupiter Chaud observé par HST-WFC3 mais aussi Spitzer et TESS, dont nous possédons des données à la fois en éclipse primaire et secondaire.

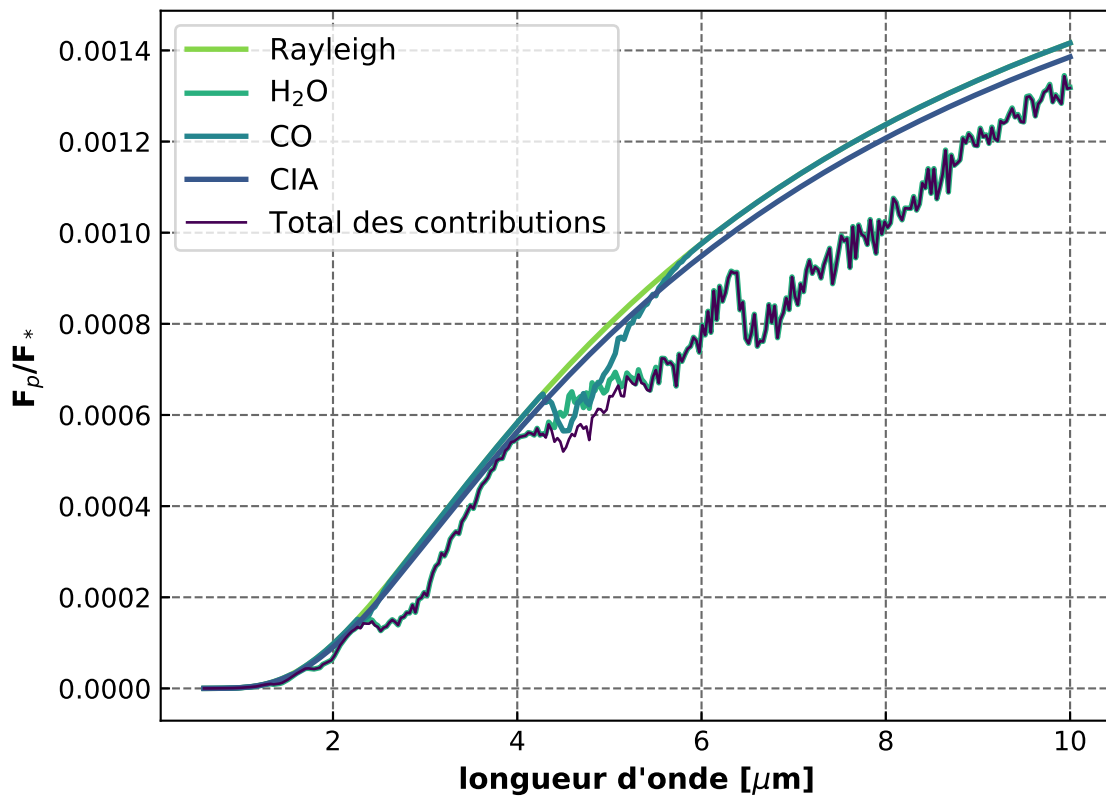


FIGURE 1.7 – Spectre en émission généré par *TauREx* pour une planète ayant une température d'équilibre de 1000 K et une atmosphère composée de He, H₂, H₂O et CO. Les contributions de la diffusion Rayleigh, H₂O, CO, et de l'absorption due aux collisions (CIA) sont respectivement tracées en vert, turquoise, bleu et bleu foncé. Le spectre observé, correspondant à la somme de toutes ces contributions, est tracé en violet.

Chapitre 2

Les deux faces de Kelt-7 b

Sommaire

2.1 Outils pour l'analyse des données spectroscopiques	23
2.1.1 Réduction et extraction des données HST avec <i>Iraclis</i>	23
2.1.2 Généralités sur <i>TauREx</i>	26
2.2 Analyse des spectres observés par HST et réduits par <i>Iraclis</i>	29
2.2.1 Pourquoi étudier Kelt-7 b ?	29
2.2.2 Extraction des données HST de Kelt-7 b	30
2.2.3 Indice de Détectabilité Atmosphérique (IDA)	31
2.2.4 Modélisation de l'équilibre chimique avec <i>petitCODE</i>	33
2.2.5 Spectre en transit	33
2.2.6 Spectre en émission	36
2.3 Complément d'observations avec les données Spitzer et TESS	41
2.3.1 Analyse des données HST+Spitzer	41
2.3.2 Analyse des données HST+Spitzer+TESS	42
2.3.3 Raffinement des éphémérides	42
2.4 L'atmosphère de Kelt-7 b	46
2.5 Limites de cette analyse	48
2.5.1 Futures observations	48
2.5.2 Limites de HST	51
2.5.3 Combinaison de jeux de données	51
2.5.4 Biais intrinsèque au spectre	52

Comme nous l'avons vu dans les sections 1.3.1 et 1.3.2 du chapitre 1, la spectroscopie en transit et en émission sont de très bons moyens pour analyser l'atmosphère des exoplanètes lorsque celles-ci en ont une bien entendu. Plusieurs instruments, soit au sol, soit dans l'espace, sont en mesure d'observer des spectres en transmission ou en émission et donc il existe de nombreuses données pouvant être analysées.

Dans ce second chapitre, nous nous intéresserons à l'analyse d'observations à l'aide d'un modèle d'inversion 1D. Nous verrons quels sont les outils nous permettant d'une part de traiter les données brutes obtenues par les télescopes spatiaux et d'autre part d'en faire l'analyse. Nous concentrons cette étude sur l'exemple d'un Jupiter chaud, Kelt-7 b, à partir de données obtenues par l'instrument WFC3 de HST avec une discussion sur la combinaison de données HST/WFC3, Spitzer/IRAC et TESS. Notre but sera d'une part de mettre en évidence l'intérêt d'étudier ces planètes, et d'autre part d'établir ce que les modèles d'inversion de données 1D nous permettent d'obtenir comme informations sur de telles atmosphères.

Nous décrivons en premier lieu l'outil de réduction et d'extraction des données HST *Iraclis* (Tsiaras et al. 2016) dans la Section 2.1.1. Dans la Section 2.1.2, nous décrivons le code d'inversion de données *TauREx* (Waldmann et al. 2015; Al-Refaie et al. 2019) qui donne accès aux différents paramètres physiques et chimiques de l'atmosphère de la planète. Nous nous intéresserons ensuite dans la Section 2.2 à l'exoplanète Kelt-7 b et à l'analyse de son atmosphère grâce à des observations par le télescope spatial HST que nous compléterons par une discussion de l'analyse de données HST, Spitzer et TESS combinées dans la Section 2.3. Nous résumerons ainsi ce que nous avons appris sur l'atmosphère de Kelt-7 b grâce à l'ensemble des données analysées en Section 2.4. Enfin, nous verrons les différentes limites de cette étude dans la Section 2.5, d'une part au niveau des données observationnelles et d'autre part au niveau de la structure particulière des atmosphères aussi chaudes.

Les résultats, les analyses et les conclusions présentées dans ce chapitre ont fait l'objet d'une publication dans le journal *Astronomical Journal* (Pluriel et al. 2020).

2.1 Outils pour l'analyse des données spectroscopiques

2.1.1 Réduction et extraction des données HST avec *Iraclis*

Afin d'analyser les données observationnelles obtenues par HST, il faut procéder à plusieurs étapes de réductions et de corrections de données avant d'obtenir un spectre que nous pourrions exploiter. L'analyse *Iraclis* commence avec les images spectroscopiques à balayage spatial brutes qu'il convient de réduire et de corriger en appliquant les étapes suivantes dans l'ordre : soustraction à lecture nulle, correction du pixel de référence, correction de non-linéarité, soustraction du courant d'obscurité, gain de conversion, soustraction du fond du ciel, étalonnage, correction en champ plat, correction des mauvais pixels et des rayons cosmiques. Les détails de ces processus se trouvent dans Tsiaras et al. (2016).

Décrivons maintenant la méthode utilisée par *Iraclis* pour obtenir les spectres à partir de la réduction des données, en se basant sur l'exemple de la planète Kelt-7 b que nous allons étudier plus en détails dans ce chapitre. La Figure 2.1 montre la courbe de lumière blanche brute, la courbe de lumière blanche et les résidus d'ajustement pour les observations de la planète Kelt-7 b, en émission et en transmission,

tandis que la Figure 2.2 montre les courbes de lumière spectrale pour chaque longueur d'onde, à partir desquelles nous pouvons tracer le spectre en transmission ou en émission.

Pour extraire le spectre à partir des courbes de lumière (voir Figure 2.2) le code *Iraclis* se base sur la méthode de "division par la courbe de lumière blanche" (Kreidberg et al. 2014; Tsiaras et al. 2016). Il s'agit d'un ajustement du facteur de normalisation n_λ , du modèle de transit $F(\lambda, t)$ et de la pente linéaire avec le temps $(1 + \chi_\lambda(t - T_0))$, le tout divisé par la courbe spectrale de lumière blanche :

$$\frac{n_\lambda(1 + \chi_\lambda(t - T_0))F(\lambda, t)}{F_w(t)} \quad (2.1)$$

où t est le temps, T_0 est le temps moyen de transit, $\chi_\lambda(t - T_0)$ est le coefficient d'une pente linéaire dépendante de la longueur d'onde et $F_w(t)$ est le meilleur modèle d'ajustement de la courbe de lumière blanche.

Dans tous les modèles de transit $F(\lambda, t)$, le seul paramètre libre est le rapport du rayon planétaire sur le rayon de l'étoile $\frac{R_p}{R_*}$, tandis que les autres paramètres sont les mêmes que ceux de la courbe de lumière blanche. Ainsi, pour chaque courbe de lumière, correspondant à chaque longueur d'onde observée, nous obtenons le rapport $\frac{R_p}{R_*}$, à partir duquel nous pouvons tracer le spectre en émission ou en transmission en suivant l'équation (1.6).

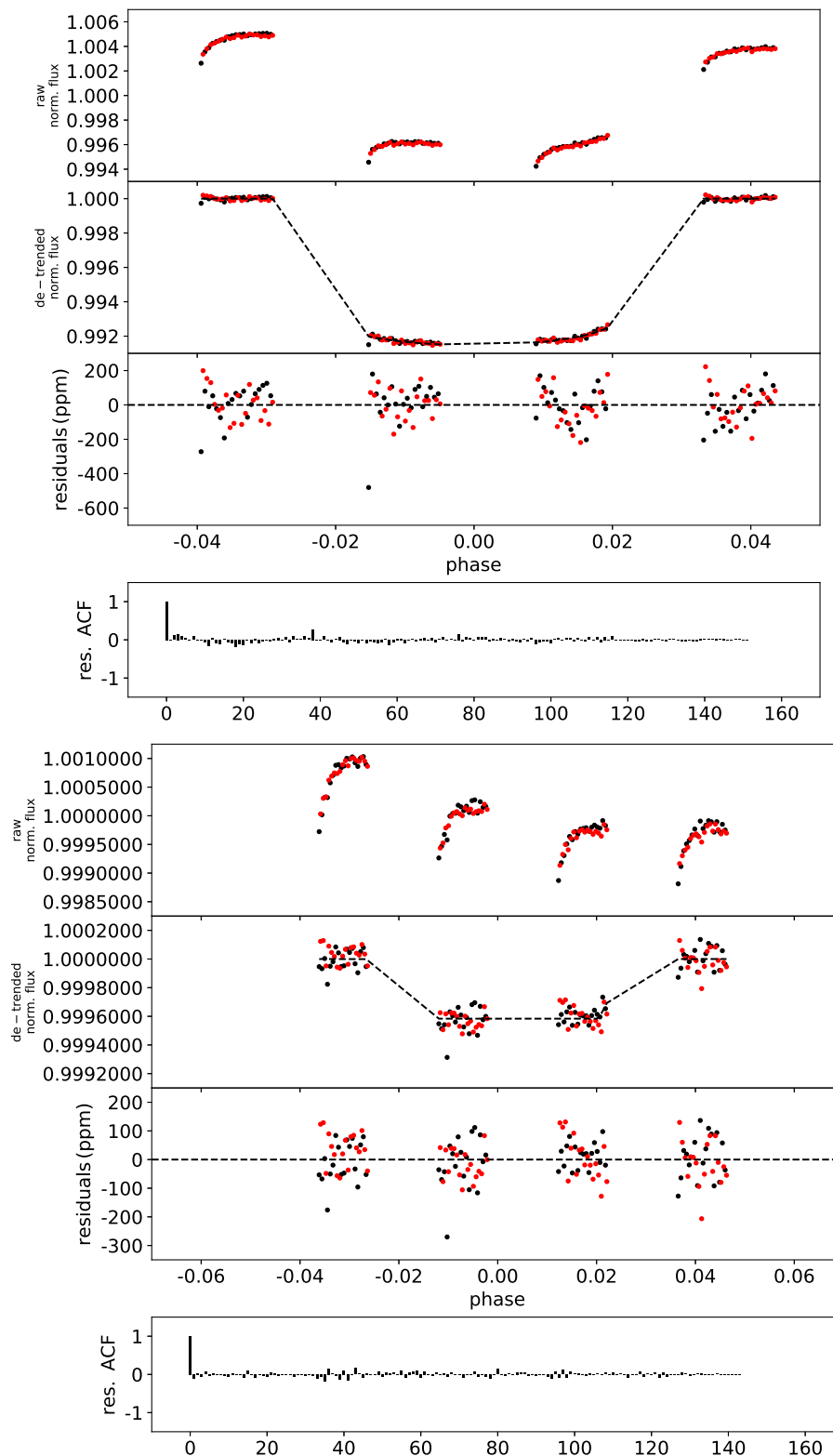


FIGURE 2.1 – Courbe de lumière blanche pour les observations de Kelt-7 b en transmission (haut) et en émission (bas). Respectivement de haut en bas : courbe de lumière brute après normalisation, courbe de lumière divisée par le modèle le mieux adapté aux erreurs systématiques, résidus et fonction d'auto-corrélation des résidus.

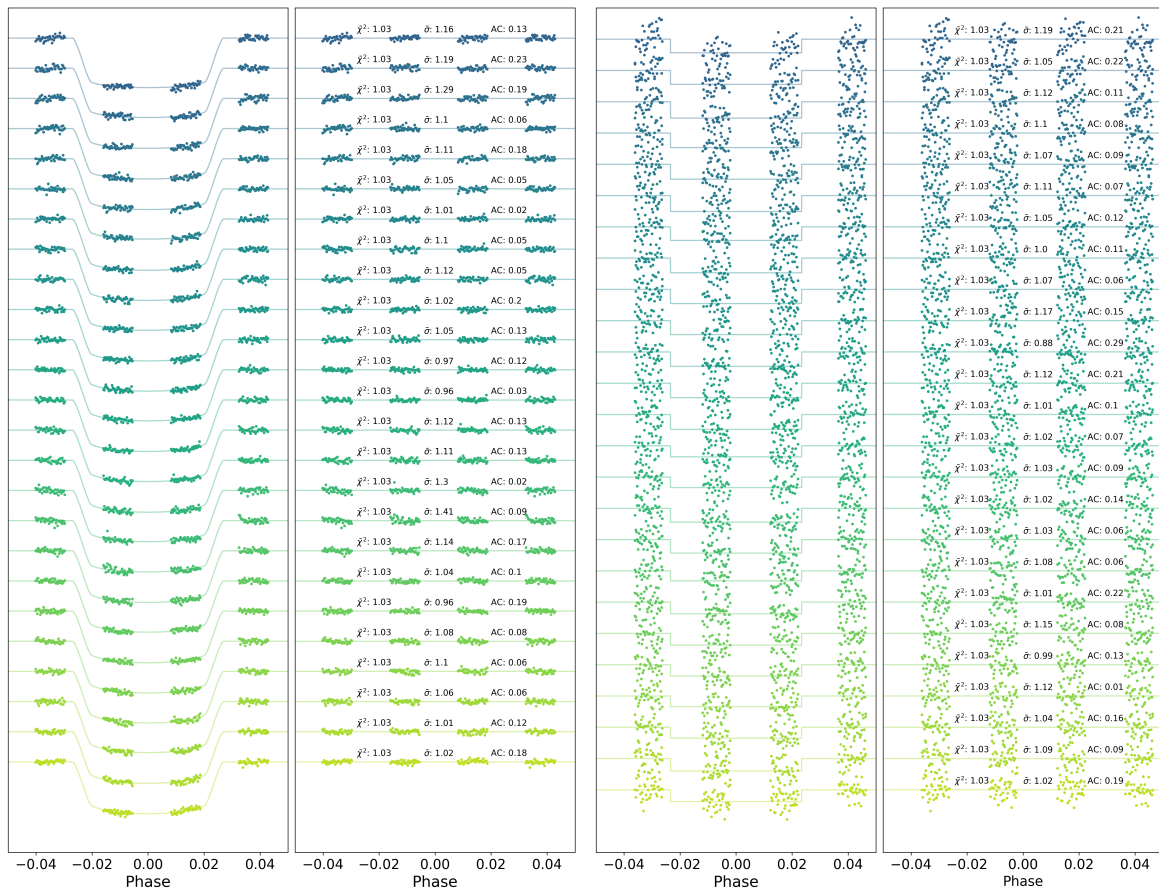


FIGURE 2.2 – Ajustements des courbes de lumières à partir d'*Traclis* pour les spectres en transmission (gauche) et en émission (droite). Pour faciliter la lecture de courbes, un décalage vertical a été appliqué. Chaque figure est séparée en deux : la partie gauche présente les courbes de lumières spectrales tandis que la partie droite montre les résidus. $\bar{\chi}^2$ est le carré réduit indiquant la qualité de l'ajustement. $\bar{\sigma}$ est le rapport entre l'écart-type des résidus et le bruit de photons, et AC est l'auto-corrélation de l'ajustement.

2.1.2 Généralités sur *TauREx*

TauREx est un code d'inversion de données se basant sur l'analyse statistique Bayésienne dont le but est de retrouver les paramètres physico-chimiques (température, couche nuageuse, abondances, rayon, etc) pouvant être déduit à partir d'un spectre en émission ou en transmission.

Comme l'indique le schéma de la Figure 2.3, *TauREx* est divisé en quatre parties que nous allons décrire ci-après.

Les données en entrée

TauREx a besoin de plusieurs entrées pour pouvoir effectuer son analyse. La première donnée essentielle est bien évidemment une observation, à savoir un spectre en transmission ou en émission à analyser. Celui-ci peut soit provenir de données observationnelles, soit de modèles qui génèrent des spectres.

Ensuite, il faut préciser les différents paramètres à prendre en compte pour l'analyse ainsi que la

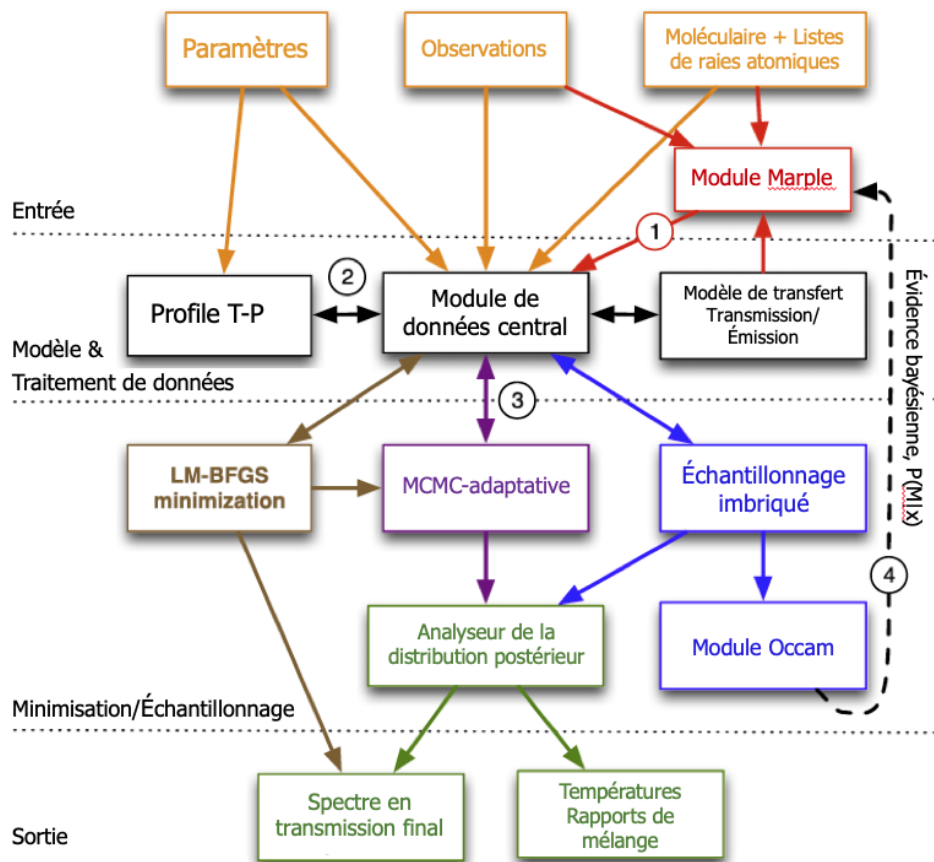


FIGURE 2.3 – Schéma illustrant le fonctionnement de *TauREx* qui se divise en 4 parties : les entrées, les données et le traitement de données, l'échantillonnage et la minimisation, et les sorties. Extrait et traduit de Waldmann et al. (2015).

gamme en longueur d'onde considérée. C'est ici que l'on fait le choix d'ajouter certaines molécules et pas d'autres, de prendre en compte ou non des effets physiques (Rayleigh, CIA, nuages) dans le processus d'inversion en se basant sur les quelques informations que l'on possède en amont sur la planète et son étoile. A noter que *TauREx* modélise la couche nuageuse comme étant un niveau de pression à partir duquel la totalité des photons est absorbée de manière uniforme quelle que soit la longueur d'onde. Il s'agit bien évidemment d'une approximation forte car la physique des nuages est bien plus complexe qu'un simple modèle de corps gris¹. Néanmoins, cette approximation à l'ordre zéro de la couche nuageuse reste utile dans l'analyse des spectres. Il convient également de choisir l'intervalle sur lequel nous souhaitons laisser le modèle explorer l'espace des paramètres. Ainsi, en prenant l'exemple de la température, il est possible de choisir une gamme plus ou moins restreinte de température possible afin de contraindre plus ou moins le modèle selon par exemple la température d'équilibre connue de l'atmosphère. Nous y reviendrons plus en détails dans la Section 2.2 avec l'exemple de l'analyse de l'atmosphère de la planète Kelt-7 b.

1. La prise en compte de nuages plus réalistes nécessite des modèles complexes, ajoutant plusieurs paramètres à considérer : composition des nuages, taille et densité des gouttelettes, etc.

Enfin, ce modèle a besoin de données moléculaires et de listes de raies atomiques qui lui seront nécessaire pour ajuster au mieux les observations avec le modèle. *TauREx* utilise les listes de raies Exo-Mol (Yurchenko et al. 2011 ; Tennyson and Yurchenko 2012 ; Barton et al. 2013 ; Yurchenko et al. 2014 ; Barton et al. 2014), HITRAN (Rothman et al. 2009 ; Gordon et al. 2013) et HITEMP (Gordon et al. 2010).

Le modèle et le traitement de données

Le modèle de transfert radiatif pris en compte dans *TauREx* est unidimensionnel, simulant donc seulement une colonne d’atmosphère généralisée à l’ensemble de l’atmosphère. *TauREx* fait l’hypothèse d’une atmosphère plan-parallèle avec une distribution unidimensionnelle des éléments et du profil en température. Le rayon inversé est supposé être le rayon de la planète à 10 bar, le poids moléculaire moyen est calculé à partir des autres paramètres trouvés par le code, mais il n’est pas directement inversé par *TauREx*. Il existe plusieurs choix de profil de température dans *TauREx*, s’adaptant à l’inversion de données que l’on souhaite effectuer :

1. Le profil isotherme, le plus simple, où la température est la même à toutes les altitudes de l’atmosphère. Ce cas simule une planète parfaitement homogène et isotherme.
2. Le profil à plusieurs points température-pression. Ce choix permet d’inverser un profil T-P plus complexe, donnant au code un degré de liberté supplémentaire. Ce type de profil T-P autorisent par exemple une inversion de température.
3. Le profil de Guillot, décrivant des profils en température pour des planètes fortement irradiées, basé sur les travaux de Guillot (2010).

Il existe par ailleurs un module permettant de découper l’atmosphère en deux couches, et ainsi d’inverser les paramètres physico-chimiques dans chacune de ces couches (Changeat et al. 2019). *TauREx* peut ainsi établir un profil vertical des paramètres physico-chimiques inversés.

Minimisation et échantillonnage

TauREx procède à l’inversion de données par une méthode statistique Bayésienne. Le principe global de cette méthode est de parvenir à trouver la solution la plus probable, selon les paramètres considérés, permettant de reproduire au mieux le spectre en entrée du modèle.

Cette méthode se base sur le théorème de Bayes, qui vise à exploiter le plus efficacement possible l’information apportée par les données, à savoir le spectre, sur les paramètres considérés, c’est à dire la température, le rayon, les abondances, etc, et que l’on peut écrire comme suit :

$$P(\theta | x) = \frac{P(x | \theta) P(\theta)}{P(x)} \quad (2.2)$$

où θ représente les paramètres du modèle (température, abondances, nuages, rayon, etc) et x les données en entrées (en l’occurrence le spectre). Cette méthode exprime la densité de probabilité de la distribution

a posteriori des paramètres sachant les données $P(\theta | x)$, comme étant proportionnelles à la probabilité de la distribution a priori des paramètres du modèle $P(\theta)$ multipliée par la vraisemblance $P(x | \theta)$. Le dénominateur $P(x)$ de l'équation (2.2) représente la vraisemblance maximum pour les données x , et sert aussi de facteur de normalisation pour que $P(\theta | x)$ soit bien égal à une densité de probabilité. Il correspond à l'intégrale sur l'ensemble de la distribution des paramètres θ des vraisemblances $P(x | \theta)$ et de la distribution a priori des paramètres $P(\theta)$:

$$P(x) = \int P(\theta)P(x | \theta)d\theta \quad (2.3)$$

La mise en œuvre de cette méthode Bayésienne par *TauREx* se fait par un échantillonnage imbriqué via Multinest (Feroz and Hobson 2008; Feroz et al. 2009; Feroz et al. 2019) utilisant une approche Monte Carlo pour contraindre l'espace des paramètres. Ainsi, par itérations successives, *TauREx* parvient à optimiser la distribution de paramètres. Basé sur cette distribution, nous pouvons obtenir *in fine* le meilleur ajustement possible.

Les sorties

Lorsque le processus de minimisation a convergé, le code génère les graphiques présentant le meilleur ajustement du modèle sur les données d'observation, l'ensemble des distributions postérieures correspondant à chaque paramètre mis en entrée, les graphiques montrant les contributions de chaque espèce au spectre final, et également la solution globale. Nous verrons en détails ces sorties et leur analyse dans la Section 2.2 sur l'analyse de la planète Kelt-7 b.

2.2 Analyse des spectres observés par HST et réduits par *Iraclis*

2.2.1 Pourquoi étudier Kelt-7 b?

Maintenant que nous avons décrit plus en détails les outils utilisés pour l'analyse des données spectroscopiques (*Iraclis* et *TauREx*), nous allons pouvoir mettre en pratique l'utilisation de ces outils avec l'étude d'observations du Jupiter chaud Kelt-7 b. Cette exoplanète est une cible très intéressante pour les observations à plusieurs égards. D'abord, sa température d'équilibre d'environ 2050 K la situe à la frontière entre les Jupiters Chauds et les Jupiters ultra chauds², et une meilleure compréhension de ce type d'atmosphères très irradiées serait un atout important pour comprendre la physique et la chimie de ces objets. Par ailleurs, il s'agit d'une planète transitant devant son étoile hôte pour laquelle nous possédons des données spectroscopiques à la fois en transmission et en émission. La complémentarité de ces observations va permettre d'étudier les deux hémisphères de cette exoplanète rendant plus robuste et plus large la compréhension de son atmosphère. Enfin, Kelt-7 b a été observée par plusieurs télescopes

2. Il n'existe pour l'instant pas de consensus au sujet de la définition de Jupiter ultra chauds, bien que certains travaux en donne une (Arcangeli et al. 2018; Parmentier et al. 2018).

Paramètres stellaires	
Type spectral	F
Température effective [K]	6789^{+50}_{-49}
[Fe/H]	$0.139^{+0.075}_{-0.081}$
Gravité de surface [cgs]	$4.149^{+0.019}_{-0.019}$
Rayon [R_{\odot}]	$1.732^{+0.043}_{-0.045}$
Paramètres de la planète	
Période [jour]	$2.7347749^{+0.0000039}_{-0.0000039}$
Inclination [deg]	$83.76^{+0.38}_{-0.37}$
Masse [M_J]	$1.28^{+0.18}_{-0.18}$
Rayon [R_J]	$1.533^{+0.046}_{-0.047}$
Température d'équilibre [K]	2048^{+27}_{-27}
$T_0[\text{BJD}_{\text{TBD}}]$	$2456355.229809^{+0.000198}_{-0.000198}$
a/R_*	$5.49^{+0.12}_{-0.11}$
Référence	Bieryla et al. (2015)

TABLE 2.1 – Paramètres de la cible Kelt-7 b et de son étoile.

spatiaux, HST, Spitzer et TESS, permettant ainsi une analyse sur une plus large gamme de longueur d'onde, donnant ainsi accès à d'autres bandes spectrales telles que les bandes d'absorption de CO pour les données Spitzer par exemple.

La Table 2.1 indique les principaux paramètres de la planète Kelt-7 b et de son étoile. Il s'agit d'un Jupiter chaud, de masse $1.28 M_J$, de rayon $1.533 R_J$, orbitant autour d'une étoile chaude de type F, dont la température d'équilibre est d'environ 2050 K.

2.2.2 Extraction des données HST de Kelt-7 b

Nous revenons maintenant brièvement sur la méthode de réduction de données décrite en Section 2.1.1 afin d'expliquer précisément l'extraction que nous avons faite. Nous indiquons en premier lieu que les deux observations de Kelt-7 b que nous avons analysées ont été entreprises en 2017 dans le cadre de la proposition Hubble 14767 menée par David Sing.

En suivant le processus de réduction décrit précédemment, le flux a été extrait des images spectroscopiques balayées spatialement pour créer les courbes de lumière de transit finales par bande en longueur d'onde (voir Figure 2.1 et 2.2). Nous avons considéré une courbe de lumière à large bande (blanche) couvrant toute la gamme de longueurs d'onde dans laquelle l'instrument G141 est sensible (1.088 à 1.68 μm) et des courbes de lumière spectrale avec un pouvoir de résolution de 70 à 1.4 μm . Les bandes des courbes spectrales de lumière sont sélectionnées de telle sorte que le rapport signal sur bruit soit approximativement uniforme sur tout le spectre planétaire. Avant l'ajustement de la courbe de lumière, nous choisissons d'éliminer la première orbite HST de chaque visite, car celle-ci présente des pics beaucoup plus forts que les orbites suivantes (Deming et al. 2013; Zhou et al. 2017). Nos courbes de lumière blanche et spectrales ont été ajustées en utilisant les valeurs de la littérature de la Table 2.2, avec seulement deux paramètres libres : le rapport de rayon planète-étoile et le temps de transit moyen.

Ce choix est motivé par les lacunes d’obscurcissement créées par la Terre, qui impliquent souvent que l’entrée et la sortie du transit manquent dans les données HST, limitant la capacité à affiner le rapport du demi-grand axe au rayon de l’étoile, l’inclinaison et l’excentricité. Les coefficients d’assombrissement centre-bord ont été sélectionnés à partir de la formule quadratique de [Claret \(2000\)](#) utilisant les paramètres stellaires de la Table 2.1 et les modèles stellaires ATLAS ([Kurucz 1970](#); [Espinoza and Jordán 2015](#); [Morello et al. 2020](#)). L’extraction des données HST de Kelt-7 b nous a ainsi permis d’obtenir deux spectres³, l’un en transmission et l’autre en émission, que nous allons pouvoir analyser afin d’en extraire le maximum d’information sur son atmosphère.

2.2.3 Indice de Détectabilité Atmosphérique (IDA)

Afin de s’assurer de la qualité de notre analyse et de sa fiabilité, nous avons calculé l’indice de détectabilité atmosphérique (traduit de l’anglais Atmospheric Detectability Index) permettant d’établir la force et la qualité de la détection faite par *TauREx* ([Tsiaras et al. 2018](#)).

Pour établir cet indice, nous faisons dans un premier temps une inversion de données *TauREx* avec le modèle le plus simple possible où nous n’inversons alors que 3 paramètres, à savoir le rayon de la planète, la température et une couche nuageuse⁴. Or, comme nous l’avons indiqué dans la Section 2.1.2, le modèle de nuages de *TauREx* consiste en un simple niveau à partir duquel tout est absorbé. En prenant l’exemple du spectre en transit de Kelt-7 b, nous obtenons alors l’ajustement présenté en Figure 2.4. C’est alors en comparant cet ajustement, représentant une absence totale de absorptions moléculaires, avec d’autres modèles d’inversions plus complexe⁵ comprenant des molécules, que nous pouvons établir la pertinence de la détection par *TauREx* de ces molécules. Précisons que l’IDA peut aussi être calculé pour les inversions de données sur les spectres en émission. Dans ce cas, le modèle d’inversion de référence est un simple modèle d’émission de corps noir.

Pour ce faire, nous comparons l’évidence Bayésienne du modèle de pur nuage (E_N), indiquant la qualité de la cohérence entre les données et la distribution a posteriori des paramètres, avec celles des meilleurs ajustements des autres modèles (E_F), comme décrit ci-dessous :

$$IDA = \begin{cases} \log(E_N) - \log(E_F), & \text{si } \log(E_N) > \log(E_F) \\ 0, & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.4)$$

L’IDA est une métrique définie positive et équivalente au facteur logarithmique de Bayes ([Kass and Raftery 1995](#)) où $\log(E_N) > \log(E_F)$. [Tsiaras et al. \(2018\)](#) ont établi que les absorptions moléculaires mises en évidence par *TauREx* peuvent être considérées statistiquement significatives lorsque l’IDA est supérieur à 3. Cela signifie donc qu’en dessous de cette valeur d’IDA, quel que soit le modèle d’ajustement trouvé par *TauREx*, il ne sera pas statistiquement plus robuste qu’un modèle comprenant

3. Les données spectrales HST obtenues sont répertoriées en Table 2.3, avec en plus les données TESS et Spitzer.

4. On pourrait considérer qu’il s’agit en fait d’un modèle à 1 paramètre, le rayon planétaire, puisque la température et les nuages sont ici dégénérés.

5. C’est à dire avec plus de paramètres inversés.

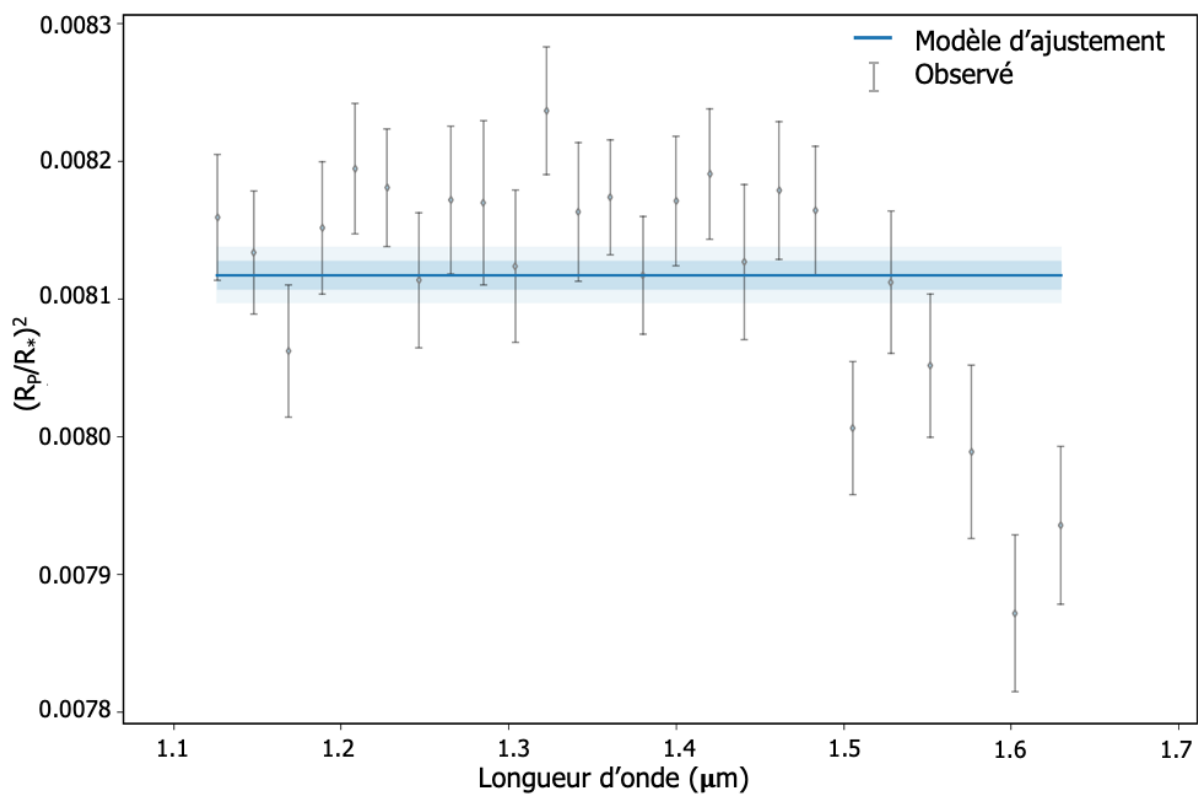


FIGURE 2.4 – Spectre en transmission de Kelt-7 b observé par WFC3/HST (en noir) avec le meilleur ajustement à 3σ calculé par *TauREx* utilisant un modèle simple uniquement composé de nuages (en bleu).

uniquement une simple couche nuageuse. Ce cas se présente quand le spectre en transmission présente peu de variations en fonction de la longueur d'onde, que l'on appelle communément un spectre plat.

En revanche, lorsque l'IDA est supérieur à 3, la présence de molécules inversées par *TauREx* devient statistiquement fiable, et nous pouvons alors avoir confiance dans le modèle suggéré, d'autant plus que l'IDA sera élevé. Néanmoins cet indice n'est qu'un indicateur établissant une échelle de confiance dans le code d'inversion de données *TauREx*, mais il ne résout pas l'ensemble des potentiels biais existant dans le processus d'analyse.

2.2.4 Modélisation de l'équilibre chimique avec *petitCODE*

Pour remettre en contexte nos résultats d'inversion de données *TauREx* sans contrainte sur les abondances moléculaires, nous avons calculé un modèle de transfert radiatif auto-cohérent avec *petitCODE*, un itérateur pression-température 1D résolvant l'équilibre radiatif-convectif et chimique (Mollière et al. 2015, 2017). Ce code contient les opacités pour H_2 , H^- , H_2O , CO , CO_2 , CH_4 , HCN , H_2S , NH_3 , OH , C_2H_2 , PH_3 , SiO , FeH , Na , K , Fe , Fe^+ , Mg , Mg^+ , TiO et VO , ainsi que la diffusion radiative et l'absorption induite par les collisions (CIA) pour H_2-H_2 et H_2-He . L'atmosphère générée par *petitCODE* est supposée sans nuages, mais la possibilité de condenser les espèces réfractaires est incluse dans la chimie à l'équilibre. Notre modèle *petitCODE* pour Kelt-7 b a été calculé en utilisant les paramètres stellaires et planétaires déterminés par Bieryla et al. (2015) et la gravité de surface a été calculée en utilisant la masse et le rayon planétaire. Enfin, nous avons supposé une redistribution moyenne global de l'irradiation autour de la planète.

Nous utiliserons ce modèle pour comparer les résultats obtenus avec *TauREx* afin de s'assurer d'une certaine convergence entre l'atmosphère simulée par *petitCODE* et l'atmosphère inversée par *TauREx*. Par ailleurs, le modèle d'équilibre chimique de *petitCODE*, qui donne un profil vertical d'abondance, va aussi nous permettre de mettre en perspective les abondances inversées par *TauREx* (voir Section 2.4).

2.2.5 Spectre en transit

La Figure 2.5 montre le spectre en transmission avec le meilleur ajustement trouvé par *TauREx* ainsi que les distributions postérieures pour tous les paramètres inclus dans le modèle pour les données HST-WFC3 seules. L'analyse par *TauREx* de ce spectre en transmission est cohérente avec une atmosphère sans nuages, suggérant la présence de H_2O et de H^- . Nous pouvons voir à partir de la Figure 2.6 (graphique du haut) que l'inversion de données semble sonder des pressions comprises environ entre 10 et 0.1 Pa, ce qui est assez haut dans l'atmosphère. La détection de H^- indique que la dissociation thermique de H_2 a lieu dans cette atmosphère, ce qui est cohérent avec sa température d'équilibre de 2050 K. Cette détection de H^- est d'ailleurs visible dans le graphique des contributions de la Figure 2.6. Nous avons calculé l'IDA (Tsiaras et al. 2018) correspondant à ce spectre d'une valeur de 16.8. Cela signifie alors que les absorptions observées sont clairement différentes d'un spectre plat (une couche nuageuse uniforme et constante) accroissant la confiance dans le modèle suggéré par *TauREx*. La température inversée est d'environ 1400 K, ce qui peut correspondre à la région du terminateur et est alors cohérent

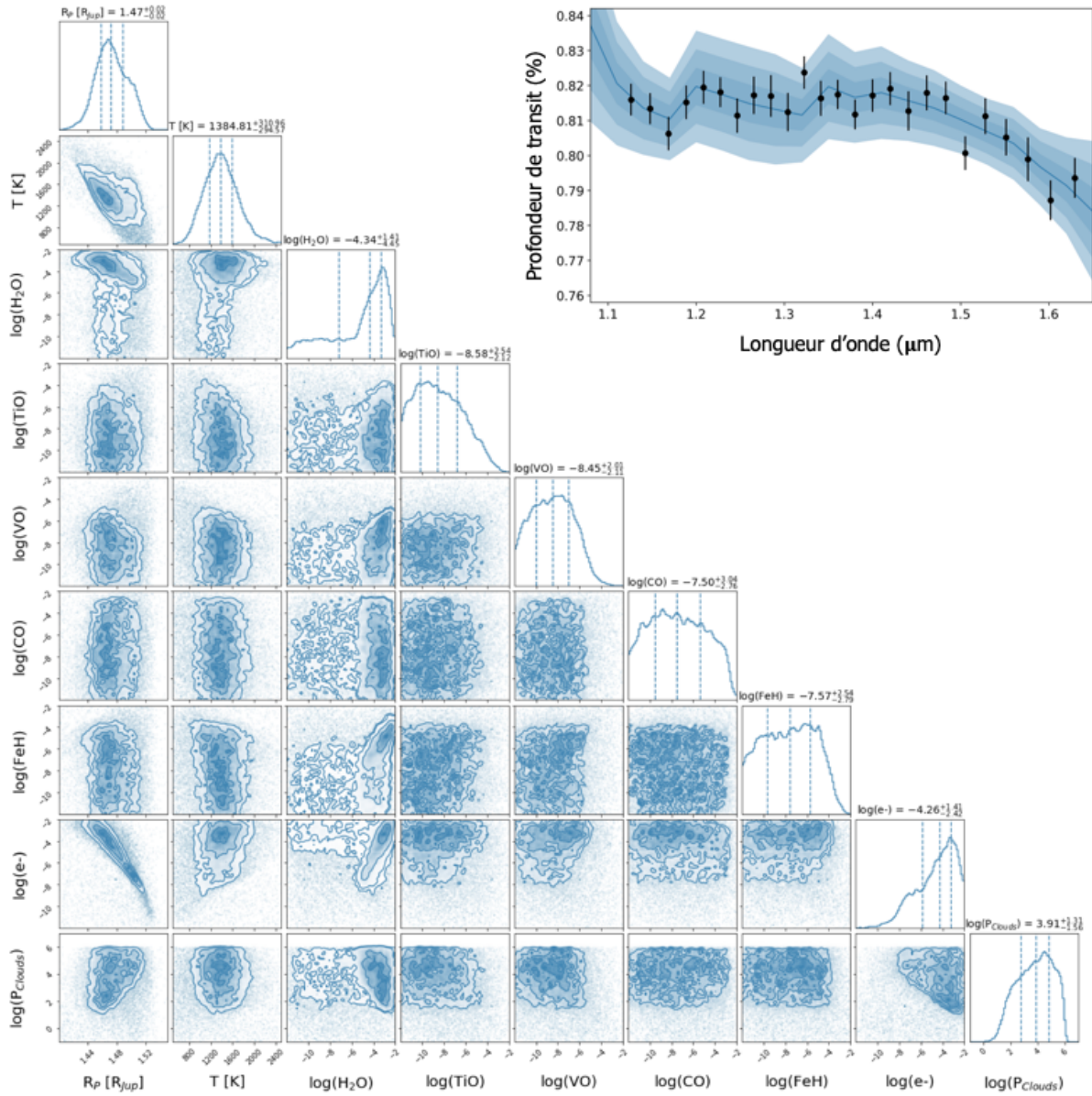


FIGURE 2.5 – Distributions postérieures de l’inversion de données atmosphériques du spectre en transmission de la planète Kelt-7 b. Les paramètres inversés sont le rayon de la planète [R_J], la température [K], les abondances en H_2O , CO, TiO, VO, FeH et H^- [$\log(\text{VMR})$] et la pression des nuages [bar]. Le spectre en transmission ainsi que le meilleur ajustement à 3σ (en bleu) sont également tracés en haut à droite, les points noirs étant les données HST/WFC3.

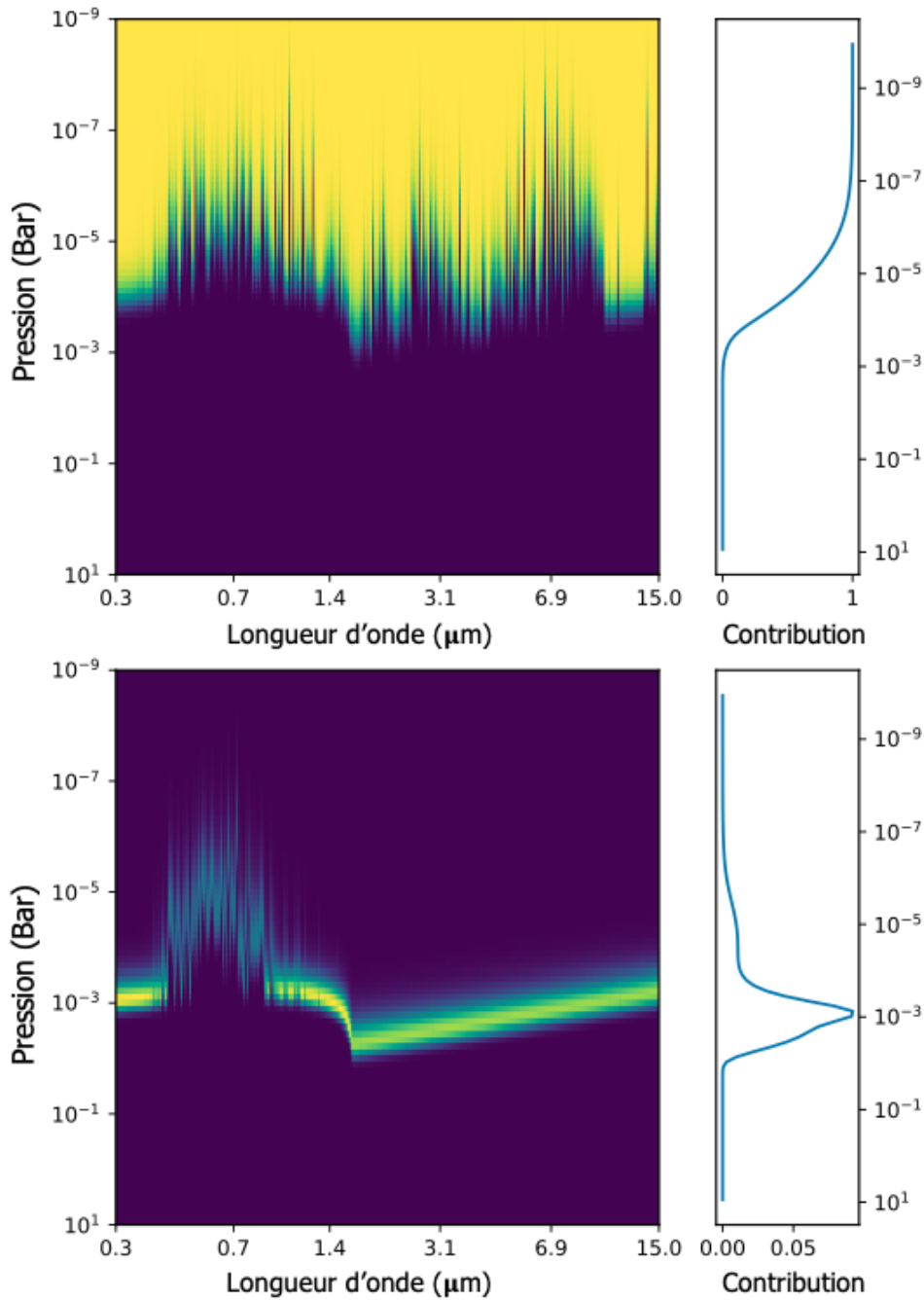


FIGURE 2.6 – Contribution du spectre en transmission (haut) et du spectre en émission (bas). Nous voyons que les caractéristiques d'émission de H^- , semblable à un continuum, apparaissent en émission bien que sa contribution soit faible. En transmission, il apparaît que l'on sonde assez haut dans l'atmosphère, autour de 1 Pa.

avec la température d'équilibre de la planète de 2050 K environ. Néanmoins, l'analyse de la température inversée par *TauREx* mérite d'être plus longuement étudiée car il existe certains biais dus à la géométrie de ces objets, ce que nous ferons en Section 2.5.4 en ce qui concerne Kelt-7 b et surtout dans le chapitre 3 dans une analyse plus globale.

L'analyse de *TauREx* indique clairement la présence de H_2O ⁶ et de H^- dans l'atmosphère de Kelt-7 b avec $\log(\text{H}_2\text{O}) = -4.34_{-4.45}^{+1.41}$ et $\log(\text{H}^-) = -4.26_{-2.42}^{+1.41}$ (voir Table 2.2). La distribution postérieure de la Figure 2.5 montre que des corrélations existent entre les abondances des molécules, et plus particulièrement entre H_2O et H^- . Nous nous attendions à trouver des preuves de la présence de VO, TiO dans ce type d'atmosphères très chaudes puisque celles-ci ont été montrées dans d'autres exoplanètes similaires telles que Wasp-121 b (Evans et al. 2017; Parmentier et al. 2018) ou encore Wasp-33 b (Haynes et al. 2015). L'abondance solaire de ces espèces est certes faible, à savoir $\log(\text{TiO}) = -7.1$ et $\log(\text{VO}) = -9.2$ (Lodders and Fegley 2002), mais ces molécules demeurent détectables avec des observations HST-WFC3 puisqu'elles présentent des bandes d'absorption entre 1.1 et 1.7 μm , comme le montre la courbe des contributions au spectre en transmission de la Figure 2.7. Ce n'est donc pas la faible abondance inversée qui justifie leur non-détection mais bien le manque de corrélations dans les distributions postérieures, comme le montre la Figure 2.5. Néanmoins, ces non-détectations de TiO et de VO dans la région du terminateur est en accord avec les prédictions de Spiegel et al. (2009a). Leur étude suggère que dans les atmosphères hautement irradiées, comme c'est le cas pour Kelt-7 b, TiO et VO seraient condensées dans des pièges froids et ne seraient donc plus observables bien que présents.

Nous avons également analysé ces observations sans prendre en compte l'opacité de H^- , faisant l'hypothèse de la non dissociation de H_2 dans l'atmosphère de Kelt-7 b. Les résultats sont présentés en bleu dans les Figures 2.8 et 2.11 (milieu). Les résultats sont similaires à l'analyse avec H^- (détection de H_2O , température et rayon similaires), mais avec une détection de FeH au lieu de H^- . En effet, ces deux espèces chimiques absorbent dans les mêmes bandes spectrales (au vu de la résolution spectrale de WCF3) créant ainsi une dégénérescence sur leur détection. Par ailleurs, une potentielle détection de VO apparaît dans les distributions postérieures, puisqu'une légère corrélation semble se distinguer entre VO et H_2O même si cela est assez faible. Néanmoins, l'analyse statistique effectuée par *TauREx* privilégie, lorsqu'elle considère, la présence de H^- à la place de FeH et de VO. En outre, la détection de H^- semble correspondre à ce type d'atmosphère irradiée où de la dissociation thermique des espèces peut se produire (Parmentier et al. 2018)⁷, même si la présence de FeH reste à envisager. Il faut donc garder à l'esprit que les résultats des inversions de données sont parfois modèles-dépendant et qu'il convient d'avoir de bons arguments pour justifier l'ajout de telle ou telle molécule dans les analyses par ces modèles.

2.2.6 Spectre en émission

La Figure 2.9 montre le spectre en émission avec le meilleur ajustement trouvé par *TauREx* ainsi que la distribution postérieure pour tous les paramètres inclus dans le modèle. Contrairement aux résultats sur le spectre en transmission, l'analyse du spectre en émission ne révèle aucune absorption moléculaire

6. La large barre d'erreur inversée ne permet en revanche pas de conclure sur une valeur d'abondance.

7. Plus de détails dans le Chapitre 3.

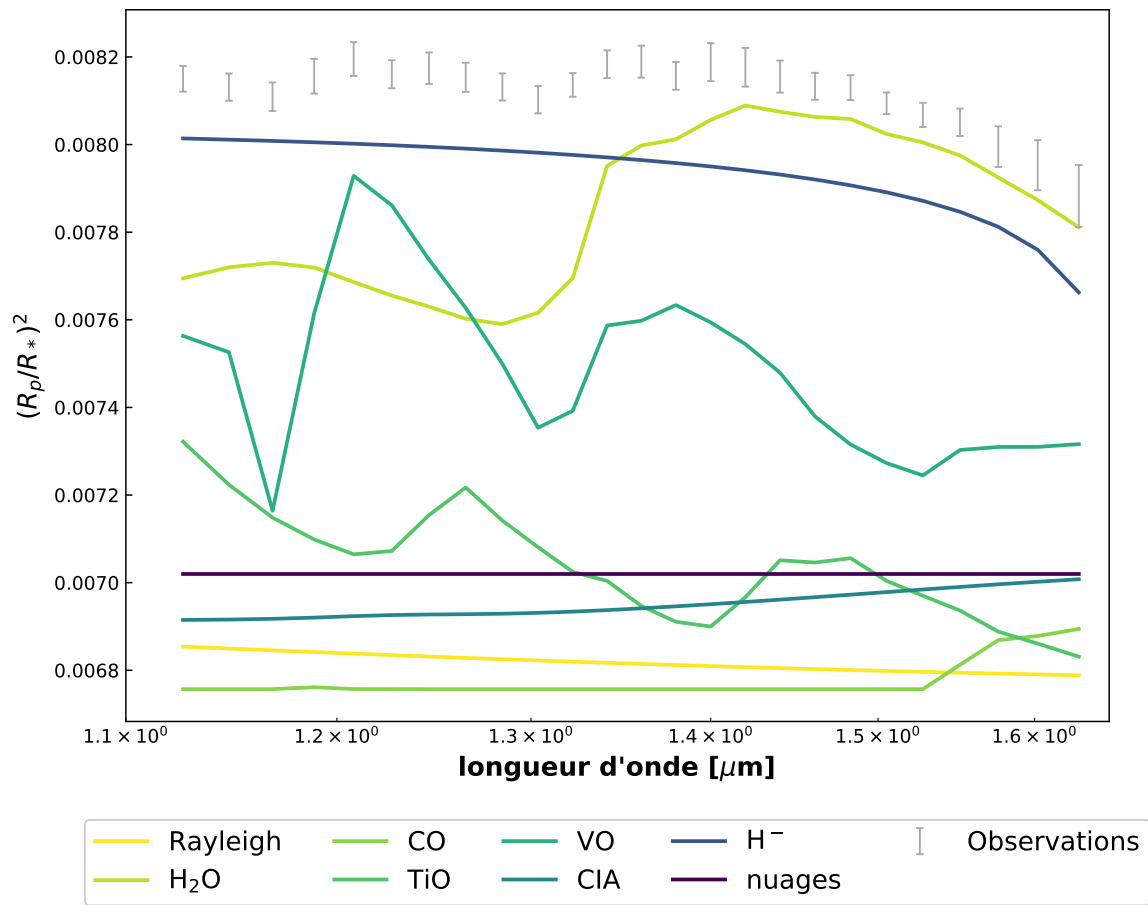


FIGURE 2.7 – Contributions des différentes sources d'opacités au spectre en transmission calculées par *TauREx*. Nous voyons que H_2O (en vert) et H^- (en bleu) sont les contributeurs dominants. A noter que le TiO (en turquoise) et le VO (en cyan) peuvent être observés dans cette bande spectrale et semblent contribuer au second ordre.

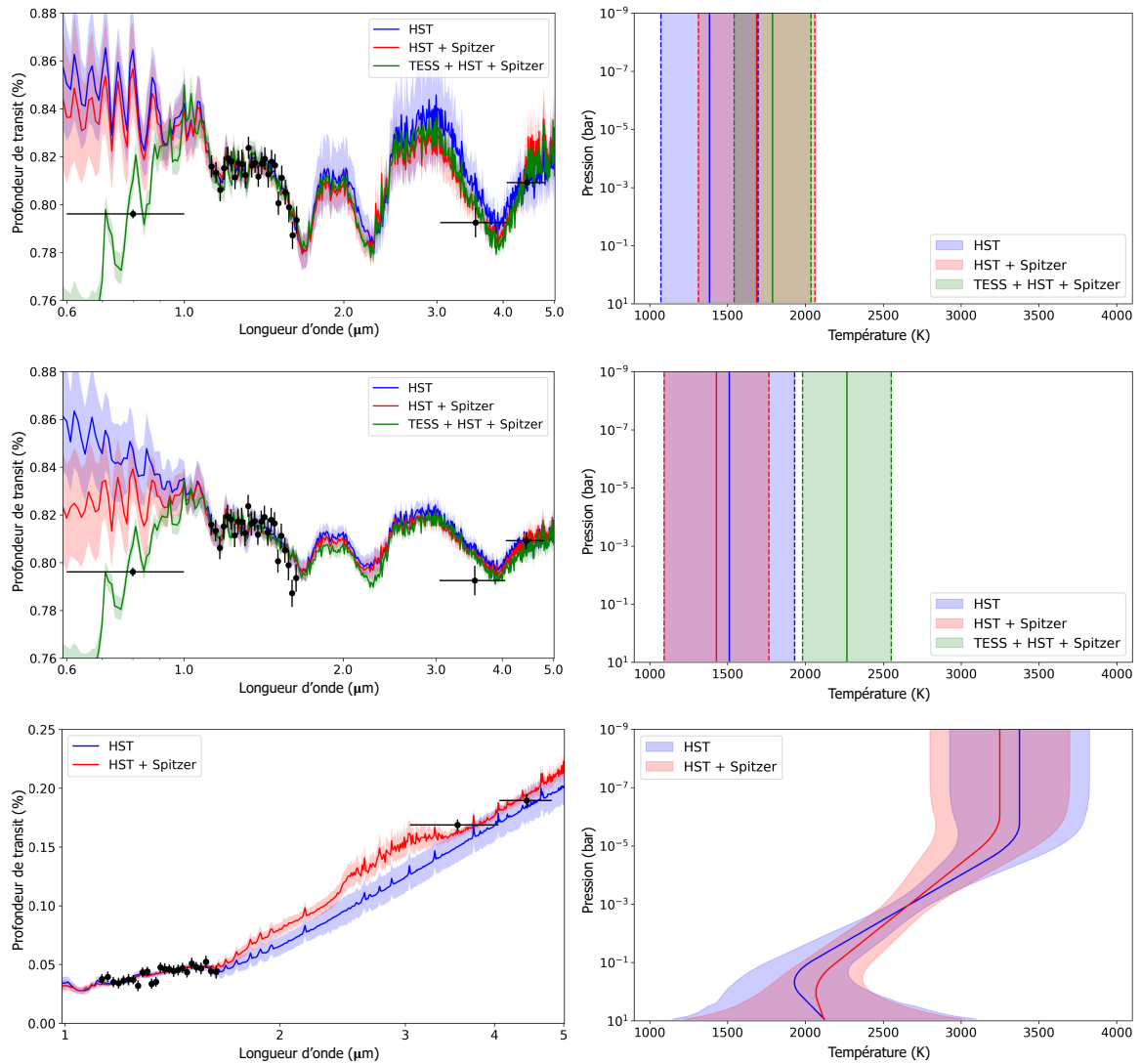


FIGURE 2.8 – Spectres des meilleurs ajustements (gauche) ainsi que des profils température-pressure (droite), avec l'erreur à 1σ dans chaque cas, pour les observations en transit (haut et milieu) et en éclipse (bas) de Kelt-7 b avec les données HST seules (bleu), HST et Spitzer (rouge), HST, Spitzer et TESS (vert). Seules les figures du milieu ont été obtenu en n'incluant pas l'opacité H^- tandis que les autres la prennent en compte.

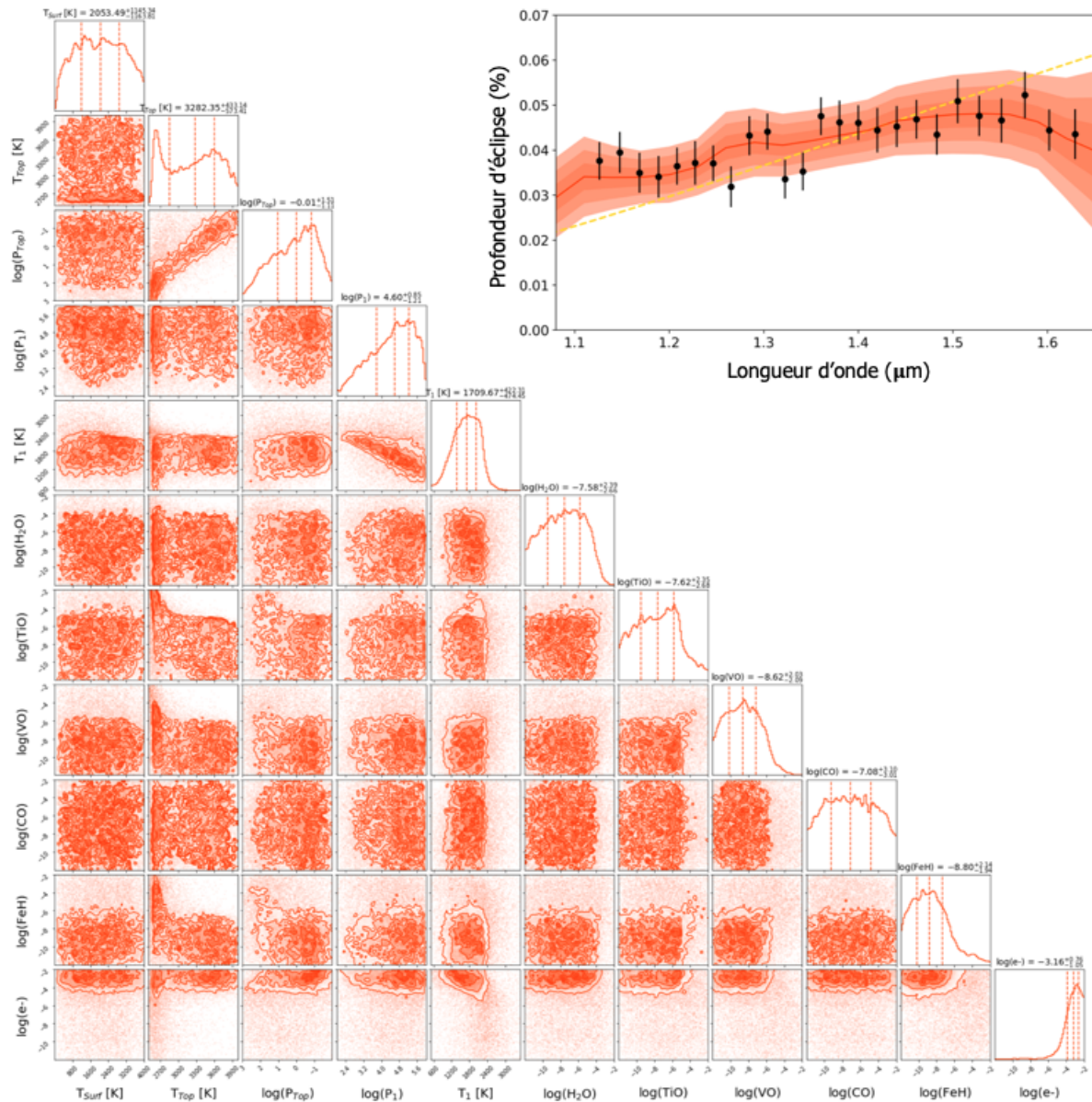


FIGURE 2.9 – Distributions postérieures de l'inversion de données atmosphérique du spectre en émission de la planète Kelt-7 b. Les paramètres inversés sont le rayon de la planète [R_J], 3 températures [K], à la surface, en haut de l'atmosphère et entre les deux ainsi que les pressions [Pa] associées à celles-ci et les abondances en H_2O , CO, TiO, VO, FeH [$\log(\text{VMR})$]. Le spectre en émission ainsi que le meilleur ajustement à 3σ (en rouge) sont également tracés en haut à droite, les points noirs étant les données HST/WFC3. Un ajustement par un corps noir émettant à 2500 K est tracé en pointillés jaunes.

Paramètres inversés	Limites	Transmission	Émission
$\log[H_2O]$	-12 -1	$-4.34^{+1.41}_{-4.45}$	< -5
$\log[H^-]$	-12 -1	$-4.26^{+1.41}_{-2.42}$	< -5
$\log[FeH]$	-12 -1	< -5	< -5
$\log[TiO]$	-12 -1	< -5	< -5
$\log[VO]$	-12 -1	< -5	< -5
$\log[CO]$	-12 -1	< -5	< -5
μ (uma)	-	$2.33^{+0.28}_{-0.02}$	$2.31^{+0.22}_{-0.00}$
$R_p(R_{jup})$	$\pm 50\%$	$1.47^{+0.02}_{-0.02}$	-
$\log P_{nuages}$	-2 - 6	$3.91^{+1.31}_{-1.56}$	-
T_p [K]	1000-4000	1385^{+311}_{-295}	-
T_p^{bas} [K]	1000-4000	-	2053^{+1145}_{-1164}
T_p^{milieu} [K]	1000-4000	-	1710^{+422}_{-474}
T_p^{haut} [K]	1000-4000	-	3282^{+463}_{-573}
ADI	-	16.8	19.6
Niveau- σ	-	$> 5\sigma$	$> 5\sigma$
Éphémérides mises à jour			
Période [jours]		$2.73476541 \pm 0.00000036$	
T_0 [BJD _{TDB}]		$2458384.425577 \pm 0.000099$	

TABLE 2.2 – Table des paramètres inversés par le modèle *TauREx* pour les spectres en émission et en transmission de la planète Kelt-7 b ainsi que la mise à jour des éphémérides.

claire (voir Table 2.2). Cependant, les résultats ne sont pas non plus cohérents avec un ajustement par un simple corps noir qui émettrait à 2500 K, comme le montre l’ajustement de la Figure 2.9. Nous avons d’ailleurs calculé un IDA de 19.6 entre notre inversion de données par *TauREx* et ce simple corps noir. Cela indique alors que l’ajustement par un corps noir n’est pas statistiquement fiable et qu’une atmosphère détectable se trouve autour de la planète Kelt-7 b. Ces résultats pourraient être expliqués par des variations verticales du profil en température impliquant que plusieurs corps noirs de différentes températures contribueraient à ce spectre, mais aussi par l’absorption induite par les collisions, encore appelée Collision Induce Absorption (CIA), ou par la présence de H^- . D’ailleurs, la Figure 2.6 indique que le H^- contribue au spectre en émission, de manière faible mais marquée, à des pressions autour de 100 Pa.

Le profil en température inversée indique clairement, d’après le meilleur ajustement trouvé par *TauREx*, qu’une inversion de température au niveau de la stratosphère est présente du côté jour de l’atmosphère de Kelt-7 b (voir les Figures 2.8 et 2.14). Bien que la partie inférieure de l’atmosphère présente de grandes incertitudes de température (entre 1000 K et 3000 K), les points de température-pression au milieu et en haut de l’atmosphère sont suffisamment bien contraints pour indiquer une inversion de température stratosphérique avec une température au sommet de l’atmosphère comprise entre 2900 K et 3700 K.

2.3 Complément d'observations avec les données Spitzer et TESS

Kelt-7 b a également été étudié, à la fois en transmission et en émission, par le télescope spatial Spitzer en utilisant chacun des canaux $3.6 \mu\text{m}$ et $4.5 \mu\text{m}$ de la caméra InfraRed Array Camera (IRAC). Nous avons donc ajouté ces données de Spitzer pour Kelt-7 b, extraites de [Garhart et al. \(2020\)](#) dont l'étude porte sur 36 Jupiters chauds. Pour l'ajustement des éclipses de Spitzer, [Garhart et al. \(2020\)](#) ont utilisé les paramètres orbitaux de [Bieryla et al. \(2015\)](#), permettant une cohérence entre les deux jeux de données. Les observations en transit ont également été ajustées avec des paramètres orbitaux fixes et des coefficients d'obscurcissement des limbes de ([Claret 2000](#)), montrant à nouveau la cohérence avec nos données HST. Nous avons aussi ajouté les données TESS à notre spectre en transmission, en s'assurant d'utiliser les mêmes paramètres orbitaux. En revanche, la variabilité ou l'activité stellaire et les erreurs systématiques des instruments ne peuvent pas être facilement déterminés sans un chevauchement de la couverture spectrale entre les jeux de données. Nous restons donc prudents sur la compatibilité des jeux de données que nous avons combinés et par conséquent sur les résultats obtenus par les inversions de données (voir Section 2.5.3).

2.3.1 Analyse des données HST+Spitzer

Les meilleurs ajustements des spectres inversés, avec et sans les données Spitzer, sont présentés dans la Figure 2.8. On observe peu de différence entre les différents ajustements, en particulier en transmission où nous restons presque constamment à moins de $1-\sigma$. Les profils de température-pression inversés sont également très proches. Bien que cela puisse suggérer que les données sont compatibles, cela montre en particulier que l'ajout des données Spitzer n'apporte pas beaucoup d'information complémentaire en transmission. Par conséquent, cela questionne sur le rapport bénéfice/risque puisqu'il y a a priori peu d'information à gagner ici. En revanche, l'ajout des données Spitzer en émission se révèle plus important, puisqu'une détection de H_2O du côté jour de l'atmosphère semble se profiler. Même s'il faut rester prudent quant à cette détection, la combinaison de HST et Spitzer peut se révéler utile, notamment en émission d'après cette étude.

Les Figures 2.10 et 2.12 montrent les distributions postérieures avec et sans les données Spitzer, soulignant à nouveau la similitude entre les deux résultats. En transmission, la seule différence notable concerne l'abondance de CO où l'ajout de Spitzer suggère une abondance de $\log(\text{CO}) = -4,56^{+1,72}_{-4,69}$, qui ne pouvait pas être contrainte dans le cas de HST seul. Cette détection est un argument de plus en faveur de la présence du CO dans ce type d'atmosphères chaudes, comme cela a déjà été détectée pour d'autres Jupiters chauds tels que HD-189733 b ([Swain et al. 2008](#)), Wasp-43 b ([Feng et al. 2016](#)) ou plus récemment pour Wasp-18 b ([Gandhi et al. 2020](#)). Le second changement concerne l'abondance d'eau inversée pour le spectre en émission, où la combinaison de HST et Spitzer convergent vers une abondance de $\log(\text{H}_2\text{O}) = -5,11^{+1,37}_{-4,03}$ qui n'était pas détectée avec l'analyse des données HST seules. Cette potentielle détection d'eau serait en accord avec l'étude de [Mikal-Evans et al. \(2020\)](#) qui détectent la présence d'eau du côté jour de Wasp-121 b malgré la dissociation thermique de cette espèce dans cette atmosphère très chaude. Néanmoins, [Mikal-Evans et al. \(2020\)](#) parviennent à détecter H_2O du côté

jour avec les données WCF3 seules, indiquant que de nouvelles observations HST seraient probablement utiles à l'analyse de l'atmosphère de Kelt-7 b.

2.3.2 Analyse des données HST+Sptizer+TESS

Enfin, nous avons ajouté les données TESS aux données HST et Spitzer en transmission, donnant ainsi accès à un point de mesure dans le visible/proche infrarouge. L'ajout de cet unique point a radicalement modifié la solution inversée par *TauREx*, supprimant la détection de H^- , préférant plutôt le FeH pour expliquer l'absorption aux plus courtes longueurs d'onde dans le prisme G141 due à la faible profondeur de transit du point de donnée TESS. Nous avons également exploré les abondances atmosphériques inversées en transmission sans l'opacité H^- , trouvant à nouveau peu de différence avec l'ajout des données Spitzer, comme le montre la Figure 2.11. Dans ce cas, toutes les combinaisons de données s'accordent sur les abondances de H_2O , FeH et CO inversées. En revanche, l'inversion de données avec le point TESS trouve une température plus élevée et un rayon plus faible avec une potentielle présence de TiO et de VO ($\log(TiO,VO) > -10$) montrée par des corrélations dans les distributions postérieures. Il convient cependant de rester prudent sur ces résultats où un seul point modifie fortement les résultats des modèles d'inversion.

2.3.3 Raffinement des éphémérides

En complément de l'analyse des données HST pour en extraire un spectre, nous avons également pu procéder à une analyse du temps de transit de Kelt-7 b afin de mettre à jour les éphémérides de la planète. Une connaissance précise des temps de transit des exoplanètes est en effet fondamentale pour les études atmosphériques. Pour nous assurer que Kelt-7 b pourra être observée à l'avenir, nous avons utilisé le temps moyen de la courbe de lumière blanche des données HST, ainsi que les données de TESS (Ricker et al. 2014), pour mettre à jour les éphémérides de la planète. Les données TESS sont accessibles au public via l'archive MAST et nous utilisons la méthode de Edwards et al. (2020) pour télécharger et ajuster les données. Kelt-7 b avait été étudiée dans le secteur 19 et après avoir exclu les données erronées, nous avons récupéré 9 transits. Ces transits ont été ajustés individuellement avec le rapport de rayon planète-étoile (R_p/R_s) et le temps de transit moyen (T_{mid}) comme paramètres libres. Nous notons que les éphémérides de Kelt-7 b ont également été récemment raffinées par Garhart et al. (2020) et nous avons également utilisé les temps intermédiaires dérivés dans cette étude.

Comme nous l'avons vu en Section 2.1.1, l'observation HST ne couvre pas l'évènement de transit dans son ensemble manquant notamment le début et la fin du transit (voir Figure 2.1), l'ajustement de transit de HST n'est donc pas aussi précis, que celui effectué avec les données TESS qui ont capturé l'évènement dans son ensemble. En utilisant ces nouvelles données, nous avons déterminé que les éphémérides de Kelt-7 b étaient les suivantes :

- Période de la planète : $P = 2.73476541 \pm 0.00000036$ jours
- Temps de référence du milieu de transit : $T_0 = 2458384.425577 \pm 0.000099BJD_{TDB}$

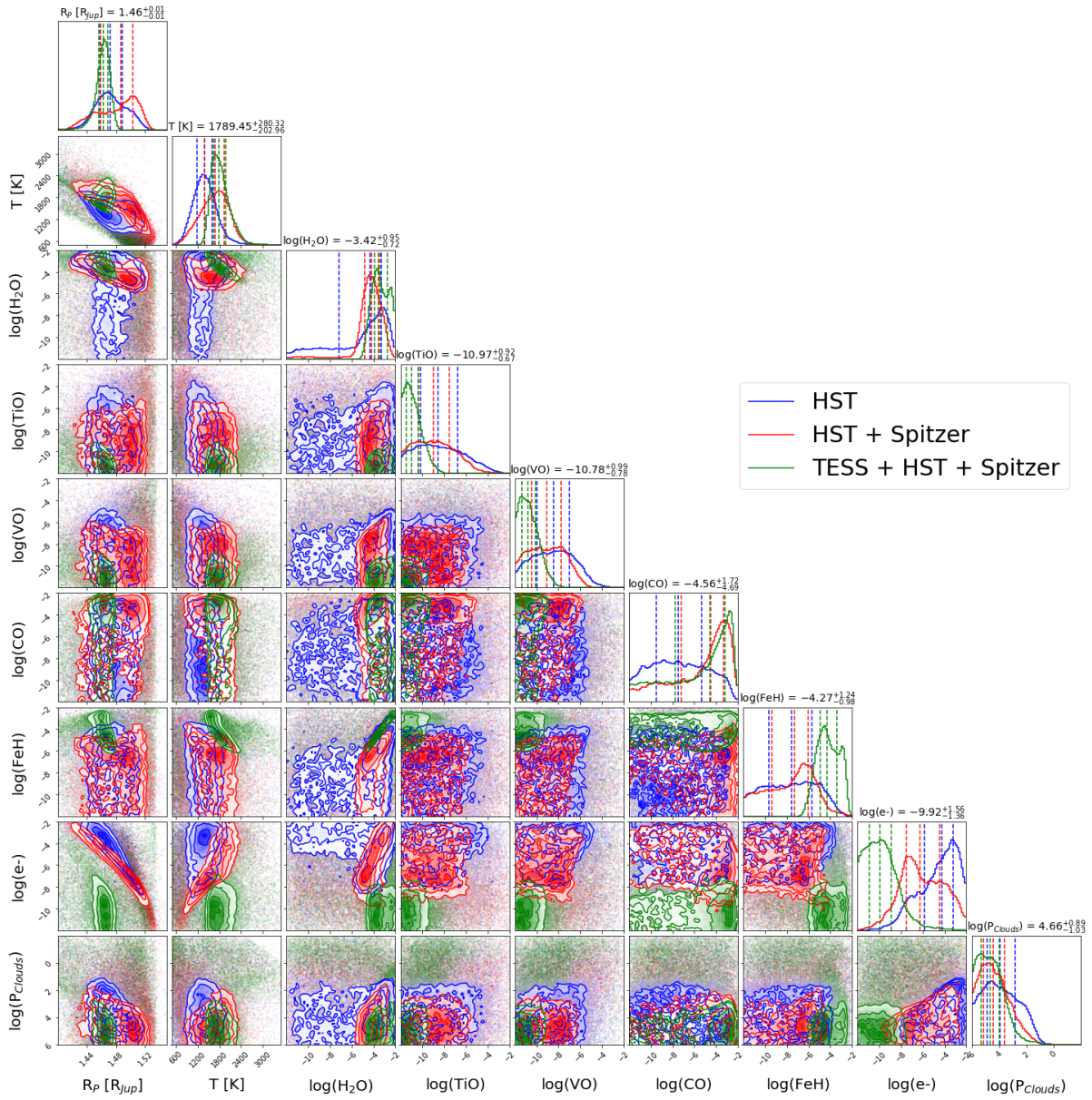


FIGURE 2.10 – Distributions postérieures de l'inversion de données atmosphérique du spectre en transmission de la planète Kelt-7 b pour différentes combinaisons d'observations.

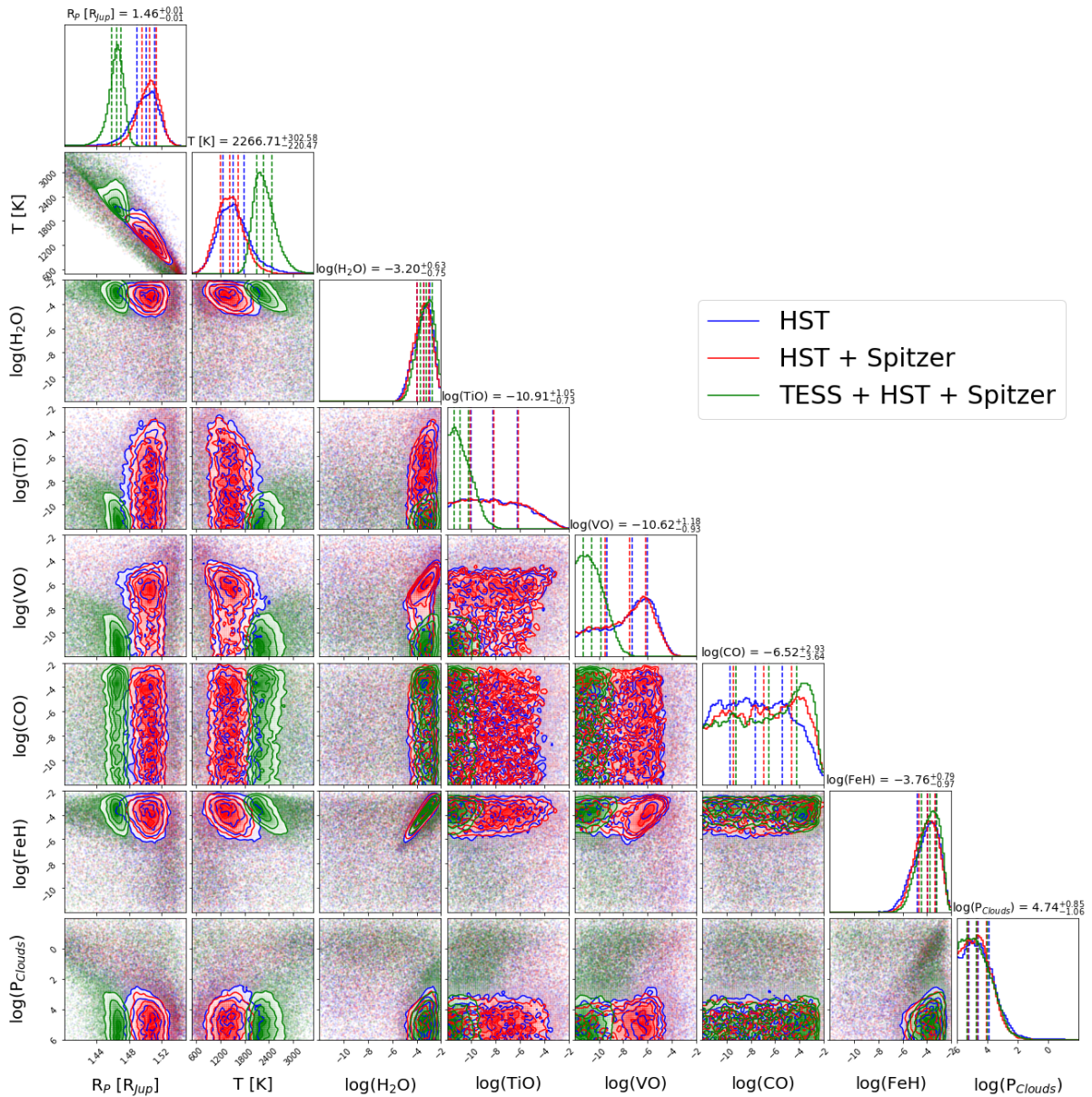


FIGURE 2.11 – Distributions postérieures de l’inversion de données atmosphérique du spectre en transmission de la planète Kelt-7 b pour différentes combinaisons d’observations, mais sans prendre en compte la source d’opacité H^- .

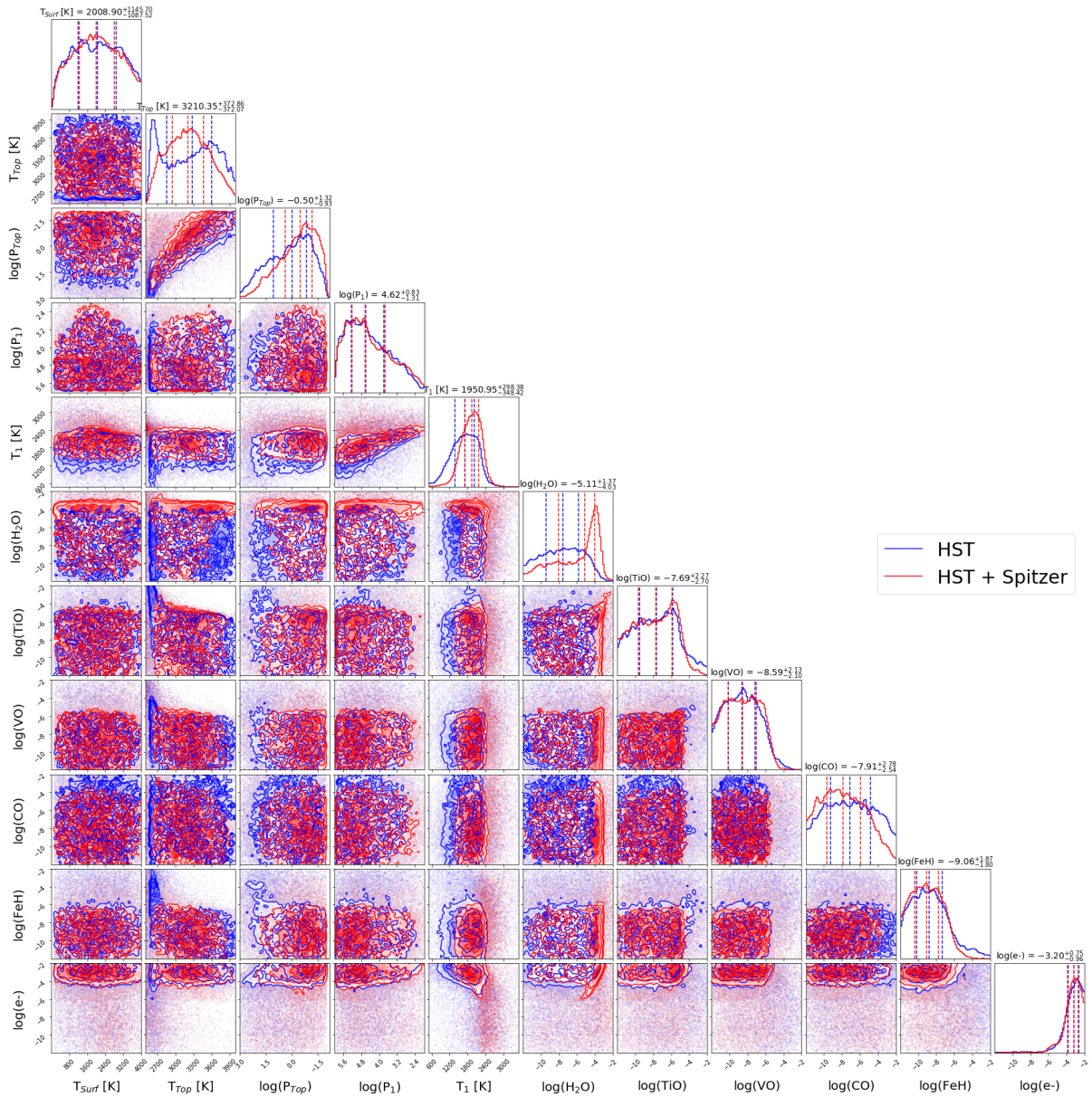


FIGURE 2.12 – Distributions postérieures de l'inversion de données atmosphérique du spectre en émission de la planète Kelt-7b avec et sans les données Spitzer (bleu et rouge respectivement). L'ajout de données Spitzer apporte peu de changements aux propriétés atmosphériques à l'exception notable de l'abondance en eau qui apparaît clairement avec les données Spitzer.

Les résidus calculés moins ceux observés, ainsi que les courbes de lumière TESS ajustées sont présentées à la Figure 2.13 tandis que les temps intermédiaires ajustés peuvent être trouvés dans le tableau 2.2. La période obtenue est de 0.84 s et 0.063 s plus courte que les périodes de Bieryla et al. (2015) et Garhart et al. (2020) respectivement. Le résidu de ~ 10 minutes des transits TESS des éphémérides de Bieryla et al. (2015) montre la nécessité de suivre régulièrement les planètes en transit. Au lancement d’Ariel fin 2028, environ 1400 orbites de Kelt-7 b se seront produites depuis le T_0 dérivé ici, et la différence des temps de transit prévus entre les éphémérides de ce travail et de Garhart et al. (2020) devrait être de 5 minutes environ.

2.4 L’atmosphère de Kelt-7 b

Grâce aux observations en éclipse primaire et secondaire, nous avons pu déduire des informations à la fois sur le côté jour de l’atmosphère (spectre en émission) et sur le terminateur voir même le côté nuit (spectre en transmission).

Le profil de température-pression du spectre en émission trouvés par *TauREx* est en très bon accord avec les simulations de *petitCODE*, puisque toutes deux montrent une inversion de température (voir Figure 2.14). La température inversée par le spectre en transmission est en revanche bien plus froide, indiquant que les régions sondées semblent se trouver au niveau des limbes voir du côté nuit de la planète. L’abondance en eau inversée lors de la transmission est conforme aux prévisions, bien que la limite supérieure d’émission de 1σ soit inférieure à ce qui est attendu. Pour TiO, VO et FeH, la limite supérieure de leur abondance est nettement supérieure à la quantité attendue de nos simulations *petitCODE*, ce qui suggère que les données HST-WFC3 ne sont pas suffisamment sensibles pour que nous puissions conclure sur leur présence ou leur absence.

La non-détection de VO et de TiO dans la région du terminateur entre en accord avec les prédictions de Spiegel et al. (2009b). Leurs travaux suggèrent que les planètes hautement irradiées similaires à Kelt-7 b verraient leurs TiO et VO précipiter dans des pièges froids et, par conséquent, ces molécules pourraient ne pas être détectées par des observations. Certains travaux ont apporté des preuves observationnelles de cette hypothèse notamment par une analyse du spectre en émission de la planète Kepler-13A b (Beatty et al. 2017). Pour surmonter ces effets, un grand mélange advectif et des températures plus élevées (supérieures à 1800 K) seraient nécessaires, conduisant à une grande abondance de VO dans la partie diurne de la planète. Or, notre analyse du spectre en émission de Kelt-7 b n’indique aucune détection de VO du côté jour de la planète, allant donc dans le sens d’une absence de VO dans l’atmosphère. Néanmoins, le doute pourrait être levé par de nouvelles observations présentant un meilleur rapport signal sur bruit et couvrant une plus large gamme de longueur d’onde telles que le JWST ou Ariel (voir Section 2.5.1).

Par ailleurs, notre analyse trouve potentiellement une grande dichotomie dans les températures jour/nuit avec inversion thermique du côté jour, ce qui indiquerait que les côtés jour et nuit de la planète sont mal couplés par des processus dynamiques à grande échelle (voir Section 1.2.4), empêchant ainsi VO et TiO d’atteindre l’hémisphère nocturne plus froid et de se condenser. Fortney et al. (2008a) ont postulé

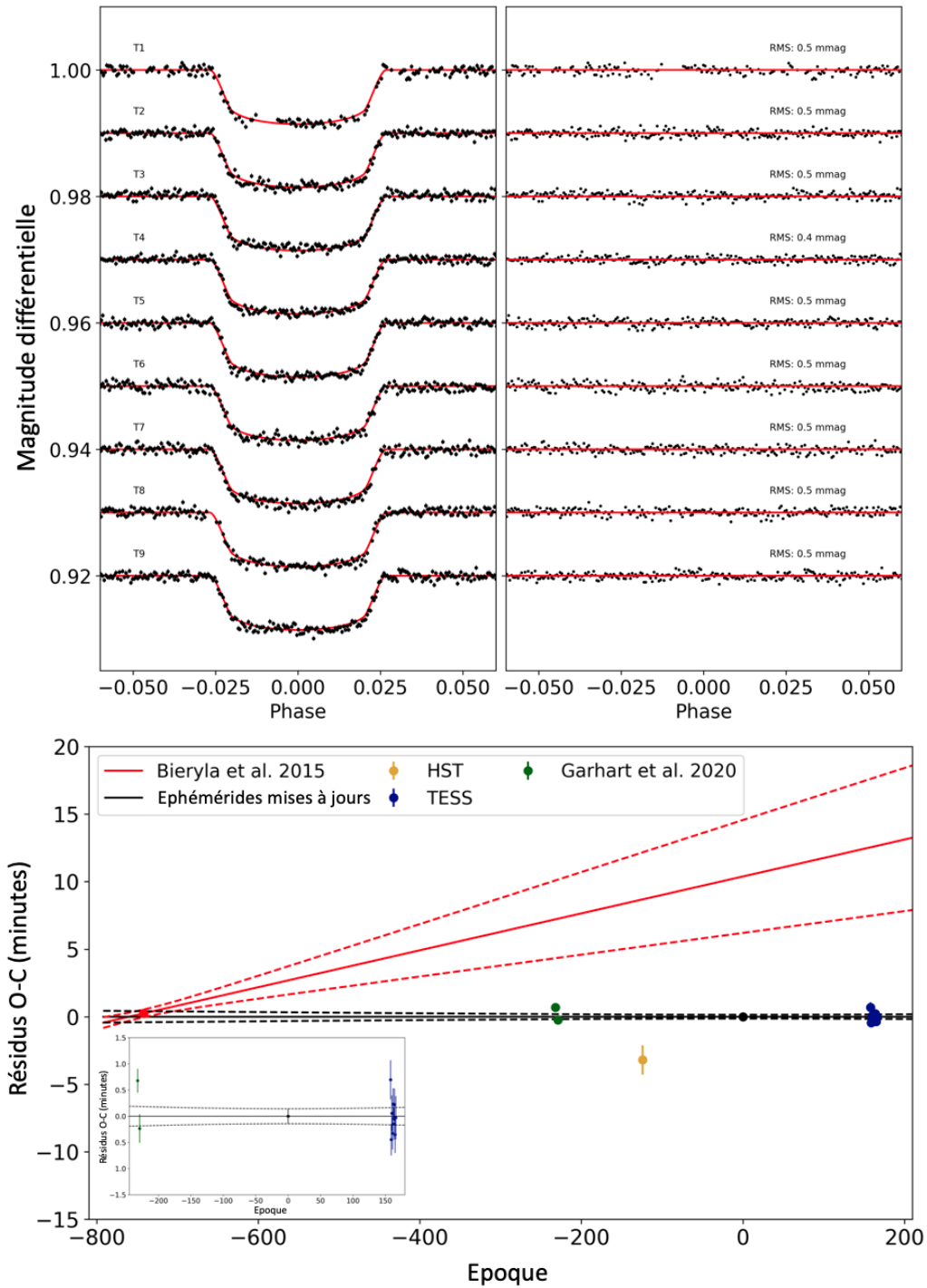


FIGURE 2.13 – En haut : observations TESS de Kelt-7 b. À gauche : données de transit (en noir) et meilleur ajustement (en rouge). À droite : résidus de l'ajustement. En bas : temps de transit observés moins temps de transit calculés (O-C) pour la planète Kelt-7 b. Les mesures de transit à mi-temps de cette étude sont indiquées en jaune (HST) et en bleu (TESS), tandis que la valeur de la littérature T_0 est en rouge. La ligne noire indique les nouvelles éphémérides obtenues par cette étude avec les incertitudes à $1-\sigma$ associées (lignes pointillées) et le point de donnée du tracé noir indiquant le T_0 mis à jour. A titre de comparaison, les éphémérides de la littérature précédente et leurs incertitudes à $1-\sigma$ sont indiquées en rouge. La figure insérée montre un agrandissement mettant en évidence la précision des ajustements à mi-temps de TESS.

que la présence d'absorbeurs optiques entraînerait et nécessiterait de grands contrastes de température jour-nuit, ce qui pourrait suggérer que TiO et VO sont présents mais simplement au-delà de la sensibilité des données actuelles.

En outre, bien que la température inversée par le spectre en transmission semble être trop basse pour être compatible avec la présence de VO dans l'atmosphère, nous verrons dans le chapitre 3 que des effets tridimensionnels sont attendus pour des planètes aussi chaudes et que la potentielle signature de VO détectée peut provenir du côté jour de la planète bien que la température trouvée par *TauREx* semble indiquer le contraire.

Il existe une autre planète comparable à Kelt-7 b (bien qu'un peu plus chaude), Wasp-121 b, dont le spectre en émission est similaire à Kelt-7 b et où la présence de TiO et VO du côté jour est très marquée (Evans et al. 2017, 2018; Parmentier et al. 2018; Mikal-Evans et al. 2019). Ils montrent que l'abondance en eau est potentiellement couverte par celle de TiO et VO. Il se trouve que notre analyse révèle une détection potentielle de VO dans le spectre en transmission, mais aucune détection de cette molécule ni d'aucune autre dans le spectre en émission.

Notons enfin que la présence de CO est clairement attendu dans une telle atmosphère mais une analyse avec des données HST seules ne peuvent conclure sur la présence ou l'absence de cette molécule dont les principales bandes d'absorption ne sont pas couvertes par WFC3. L'analyse des données complémentaires de Spitzer nous a en effet montré la détection de CO dans l'atmosphère de Kelt-7 b avec les données en transit et la présence de H₂O du côté jour pour les données en émission, bien qu'il faille rester prudent sur la combinaisons de données provenant de différents télescopes (voir 2.3).

2.5 Limites de cette analyse

2.5.1 Futures observations

Les observations de la planète Kelt-7 b avec le prisme G141 de l'instrument WFC3 de HST permettent d'obtenir de nombreuses informations sur la nature de son atmosphère. Il serait néanmoins utile, notamment pour confirmer (ou infirmer) la présence de VO et/ou de TiO dans cette atmosphère, de prévoir de nouvelles observations, en particulier à plus courte longueur d'onde. Ainsi, des observations HST à l'aide du prisme G102 de WFC3, couvrant la gamme 0.8-1.1 μ m, permettraient d'obtenir de meilleures contraintes sur la présence de ces absorbeurs. Comme il existe également des données de transmission STIS archivées pour Kelt-7 b, avec les primes G430L et G750L, cela fournirait une couverture continue de 0.3 à 1.6 μ m, ce qui permettrait de meilleures contraintes sur l'abondance de ces absorbeurs optiques. Aussi, il serait aussi utile de faire des observations d'éclipse supplémentaires avec WFC3 pour augmenter la couverture spectrale et/ou augmenter le rapport signal sur bruit, ce qui pourrait permettre de découvrir de nouvelles caractéristiques spectrales.

Par ailleurs, comme nous l'avons expliqué en Section 2.2, nous nous attendrions à trouver d'autres molécules dans ce type d'atmosphères très chaudes, telles que CO, K, Na mais aussi H- (Parmentier et al. 2018; Arcangeli et al. 2019). Or, il est nécessaire d'obtenir des observations sur des gammes de

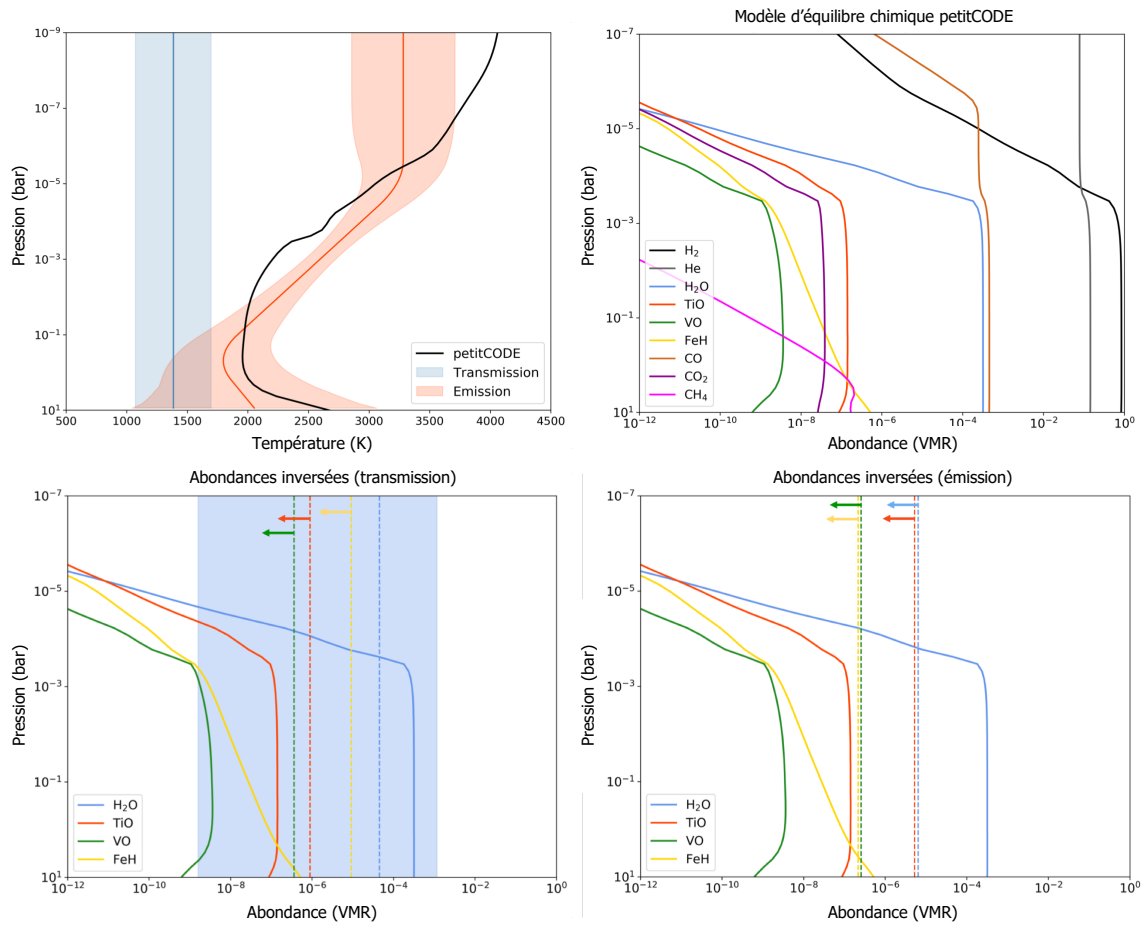


FIGURE 2.14 – Résultats du modèle auto-cohérent *petitCODE* pour Kelt-7 b ainsi que les résultats de *TauREx* sur les données WFC3. En haut à gauche : comparaison des profils de température-pression. Le modèle *petitCODE* (noir) présente une inversion de température à 1 mbar environ, en raison de l’absorption par TiO et VO, et correspond étroitement au profil inversé par *TauREx*. En haut à droite : abondances moléculaires pour la simulation *petitCODE*. Les fractions d’équilibres de la plupart des molécules restent à peu près constantes pour des pressions supérieures à 1 mbar, mais chutent rapidement à des pressions atmosphériques inférieures en raison de la dissociation thermique. La zone bleue indique l’abondance en H₂O inversée par *TauREx* en comptant les incertitudes. En bas à gauche : comparaison des abondances moléculaires contraintes par *TauREx* en transmission (lignes pointillées) à celles de la simulation *petitCODE* (lignes pleines). L’abondance de l’eau rentre à 1- σ de ce qui est prévu. En bas à droite : comparaison des limites supérieures placées sur les abondances moléculaires en émission avec celles de la simulation *petitCODE*. La limite supérieure de 1- σ sur l’abondance de l’eau est nettement inférieure à celle des simulations *petitCODE*. Tant en transmission qu’en émission, les limites supérieures de 1- σ sur TiO, VO et FeH sont bien au-dessus des abondances prévues, suggérant que les données ne sont pas suffisantes pour commenter sur leur présence ou leur absence.

longueurs d'onde plus large pour nous permettre de couvrir les bandes d'absorption assez spécifiques de ces molécules, qui se présentent en particulier dans le visible et le proche UV pour K et Na et dans l'infrarouge moyen pour CO (2 bandes d'absorption autour de $2.5 \mu\text{m}$ et $5 \mu\text{m}$).

C'est pour ces raisons que des futures observations par des missions comme le JWST (Greene et al. 2016), Twinkle (Edwards et al. 2018) ou Ariel (Tinetti et al. 2018) sont attendues puisqu'elles couvriront une large bande spectrale en plus de présenter un signal sur bruit fort, permettant de faire passer le domaine des exoplanètes de l'aire de la détection à l'aire de la caractérisation, donnant des informations précises sur les molécules présentes dans ces atmosphères, leur variation verticales et horizontales, les profils de températures, la détection et la caractérisation des nuages et des brumes.

La planète Kelt-7 b a d'ailleurs été identifiée comme une très bonne cible d'étude avec le télescope spatial Ariel que ce soit en transmission ou en émission (Edwards et al. 2019), comme l'indique la Figure 2.15 représentant des simulations JWST et Ariel qui mettent en avant la large gamme de longueurs d'onde couverte par ces futures missions. Précisons que les simulations d'observations de Kelt-7 b avec le JWST ont été faites par ExoWebb (Edwards et al. 2020).

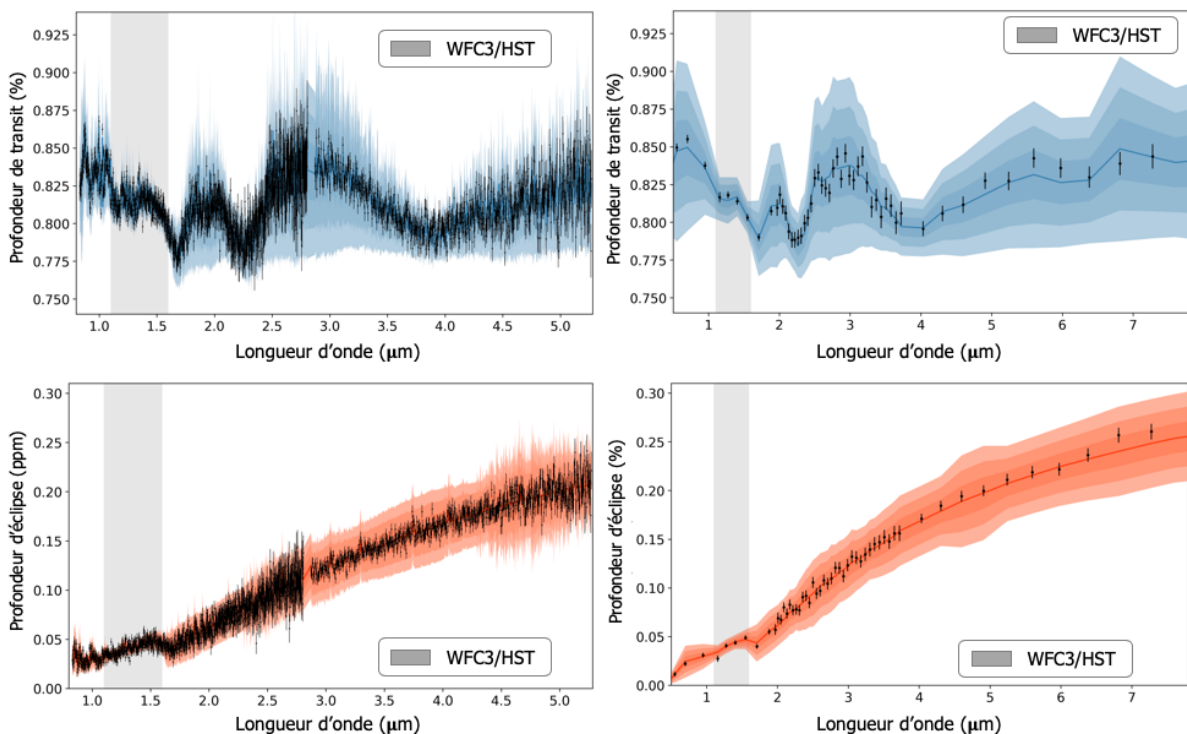


FIGURE 2.15 – Simulations d'observations JWST (gauche) et Ariel (droite) des meilleures solutions ajustées dans ces travaux. Le spectre en transmission est représenté en haut tandis que le spectre en émission est en bas. Pour Ariel, 2 observations ont été supposées alors que pour JWST nous avons modélisé une seule observation avec NIRISS GR700XD ainsi qu'une observation avec NIRSpec G395M.

2.5.2 Limites de HST

Le télescope spatial Hubble permet d'observer et d'analyser l'atmosphère de nombreuses exoplanètes, et même d'y détecter la présence de certaines molécules telles que H₂O, TiO, VO, K, Na. Néanmoins, ce télescope reste limité dans sa capacité d'analyser les atmosphères, pour plusieurs raisons.

Premièrement, HST ne couvre pas une gamme de longueur d'onde suffisante pour permettre une étude globale d'une atmosphère, rendant difficile la détection de certaines molécules. L'ensemble de ses instruments vont de 0.115 à 2.5 μm . Certaines molécules voient en effet leurs bandes d'absorption superposées à certaines longueurs d'onde mais séparées à d'autres, par conséquent, l'analyse de ces observations peut être dégénérée et il est donc impossible de connaître précisément la composition de l'atmosphère. Obtenir des observations sur une gamme de longueur d'onde plus grande permettrait alors de lever certaines dégénérescences.

2.5.3 Combinaison de jeux de données

La combinaison de données provenant de plusieurs instruments ou observatoires est devenue la norme dans le domaine de l'étude des atmosphères exoplanétaires comme moyen d'augmenter la couverture spectrale, cherchant à briser les dégénérescences qui se produisent lors de l'ajustement de données sur une plage de longueurs d'onde étroite (Sing et al. 2016), comme nous l'avons précédemment évoqué dans la Section 2.5.2. Cependant, une telle procédure peut être risquée en raison des incompatibilités potentielles entre les jeux de données. Premièrement, il a été démontré que l'utilisation de différents paramètres orbitaux (rapport des rayons et inclinaison) dans l'ajustement des données peut conduire à des décalages entre les jeux de données (Yip et al. 2019). Deuxièmement, le choix des coefficients assombrissement centre-bord aux limbes peut entraîner des décalages verticaux du spectre (Tsiaras et al. 2018), et donc fortement biaiser l'analyse d'un spectre dont les données combinées sont décalées. Troisièmement, la variabilité, l'activité ou les tâches stellaires peuvent également induire des décalages dans les spectres inversés (Bruno et al. 2020). Enfin, une correction imparfaite du bruit intrinsèque aux instruments, encore appelé bruit systématique des instruments, peut modifier la profondeur des courbes de lumière ajustée, générant à nouveau des décalages entre les jeux de données, rendant les profondeurs de transit ou d'éclipse incompatibles (Stevenson et al. 2014; Diamond-Lowe et al. 2014; Stevenson et al. 2014). Chacun de ces effets peut bien sûr affecter uniquement les données d'un seul télescope (HST par exemple) mais, dans ce cas, le décalage ne conduirait probablement qu'à de légers changements dans la température ou le rayon inversé. Lors de la combinaison de jeux de données, par exemple HST/WFC3 et Spitzer/IRAC, les décalages dans l'un d'entre eux, ou des décalages différents dans les deux, pourraient conduire à des abondances erronées. C'est d'ailleurs pour ces raisons que nous restons prudents sur nos résultats obtenus avec l'ajout du point de donnée TESS, dont le décalage peut changer significativement l'ensemble des paramètres inversés.

En transmission et en émission, les observations de Spitzer sont sensibles au CH₄ dans la bande à 3.6 μm et CO ou CO₂ dans la bande à 4.5 μm alors que les données WFC3 ne peuvent pas contraindre ces molécules, hormis le CH₄ avec sa bande à 1.4 μm mais qui est dégénérée avec celle de H₂O (Benneke

and Seager 2013). Ainsi, la détection ou la non-détection serait entièrement basée sur les deux bandes Spitzer par rapport aux données WFC3. Un décalage même faible de ces deux points provoquerait un changement important des abondances en CH₄, CO et CO₂ inversées. En émission, ces points Spitzer ont été utilisés comme preuve de la présence ou de l'absence d'une inversion thermique. Des différences dans la correction des erreurs systématiques des instruments ont conduit à des résultats divergents (par exemple HD 209458 b : Knutson et al. (2008); Diamond-Lowe et al. (2014)).

La mise en place de télescopes observant avec un unique instrument sur une large bande spectrale (JWST, Ariel) permettra de passer outre ces problèmes d'incompatibilités entre instruments/observatoires, et permettra d'augmenter considérablement la confiance dans les observations et leurs inversions. Par ailleurs, même lorsque le JWST ou Ariel utiliseront des instruments différents, le fait d'observer l'objet au même moment permettra de limiter fortement tous ces effets de décalage.

2.5.4 Biais intrinsèque au spectre

Il existe aussi une limite dans l'observation des spectres en transmission et en émission qui ne peut être résolu par une couverture en longueur d'onde plus grande, une résolution spectrale plus élevée ou une diminution des barres d'erreurs sur les données. Il s'agit d'une limite directement liée à la géométrie de l'observation, et à la structure tridimensionnelle de la planète. En effet, la résolution spatiale des télescopes actuels et des télescopes à venir ne permettra pas de résoudre spatialement les exoplanètes observées, impliquant que les spectres en transmission ou en émission que nous obtenons sont une sorte de moyenne de contributions provenant de différentes régions de l'atmosphère (pôles, limbes ouest et est, côté nuit et côté jour, etc).

Les caractéristiques du spectre déduit de ces observations (bandes d'absorption, CIA, diffusion, amplitude des bandes d'absorption, etc) vont alors rendre le spectre plus complexe à analyser puisque celui-ci contiendra un nombre important d'informations difficiles à dé-corréler les unes des autres. Concernant les observations en émission, il est clair que l'ensemble du côté jour de l'atmosphère va affecter le spectre puisque dans cette géométrie nous regardons l'ensemble de l'hémisphère de la planète, ne donnant ainsi des informations que sur le côté jour. En revanche, il est plus complexe de saisir d'où proviennent les contributions au spectre lors d'une observation en transit. L'idée la plus répandue, et qui fait sens, est que la quasi totalité des absorptions du spectre proviennent de la région du terminateur et de son environnement très proche, quelques degrés de latitude seulement autour de celui-ci. En effet, avec l'hypothèse d'une atmosphère sphérique et en prenant en compte le fait que la densité moléculaire décroisse exponentiellement avec l'altitude, la densité atmosphérique diminue fortement en s'écartant du terminateur lorsque l'on considère une observation en transit (voir la Figure 2.16) et donc la contribution des longitudes en amont et en aval du terminateur.

Malgré cette hypothèse, un problème demeure car comme nous l'avons vu en Section 1.2.4, les Jupiters chauds présentent souvent une dynamique atmosphérique intense, avec souvent une super-rotation équatoriale. Or, dans le cas d'un jet est-ouest, la région du terminateur va être affectée par un réchauffement du limbe est et un refroidissement du limbe ouest autour de l'équateur et jusqu'à des latitudes plus ou moins élevées selon la force de ce jet. Ainsi, les propriétés physico-chimiques (profil de température,

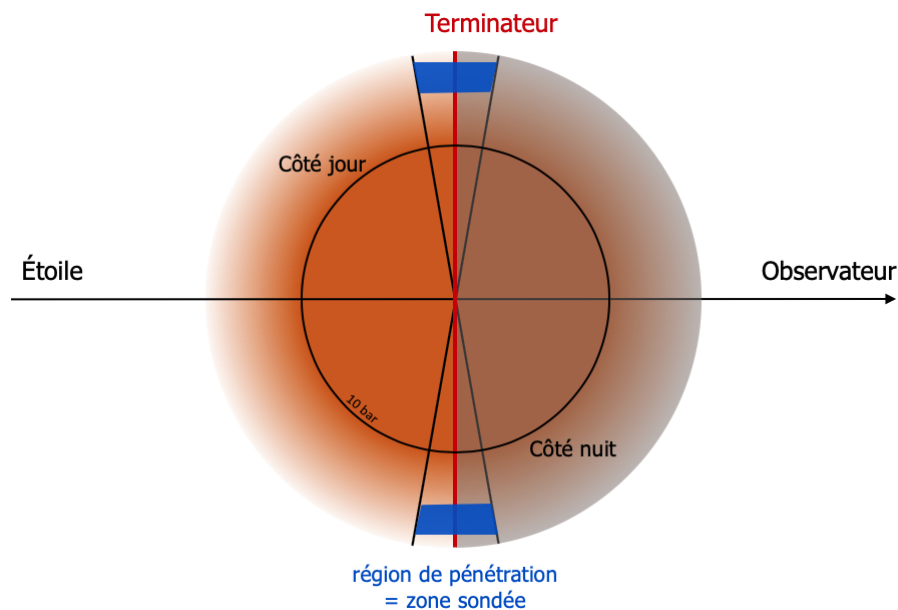


FIGURE 2.16 – Schéma représentant la géométrie d'une observation en transit (coupe équatoriale). La région de pénétration (en bleu) indique la zone où la profondeur optique τ vaut e^{-1} .

abondances moléculaires, etc) peuvent fortement varier d'un bout à l'autre des limbes et donc, même en considérant que seul le terminateur est sondé lors d'un transit, le spectre obtenu portera des informations complexes.

Le meilleur moyen pour résoudre cette complication serait de faire des observations avec une résolution spatiale suffisante pour résoudre la planète, ce qui est loin d'être envisageable pour le moment et sûrement pour quelques décennies encore. Cependant, [Ehrenreich et al. \(2020\)](#) ont montré qu'il est possible, par une analyse temporelle lors du transit, de résoudre le limbe est puis le limbe ouest de la planète Wasp-76 b. Une telle analyse permet donc de séparer les contributions des opacités du spectre provenant de deux régions bien définies de l'atmosphère.

Néanmoins, certaines de ces hypothèses deviennent erronées avec les atmosphères les plus chaudes, telles que celles des Jupiters ultra chauds. Ces planètes présentent une dichotomie jour-nuit très marquée, avec des gradients de températures jour-nuit pouvant dépasser les 2000 K. La différence d'échelle de hauteur entre ces deux hémisphères va alors être si grande que le côté jour de la planète va pouvoir contribuer significativement au spectre en transmission complexifiant les informations présentes dans celui-ci. Ces effets dus à la structure 3D des atmosphères est pour l'instant mal considéré dans les interprétations des analyses d'inversion de données 1D. Ces considérations géométriques vont limiter la pertinence des résultats des modèles d'inversion de données 1D.

Nous verrons plus en détails toutes ces considérations dans le chapitre 3, où nous allons désormais nous intéresser aux biais thermiques et de compositions induits par la structure tridimensionnelle des exo-atmosphères de planètes encore plus chaudes que celle étudiée ici, les Jupiters ultra chauds, lorsque nous les observons en transit.

λ [μm]	Bande [μm]	Profondeur de transit [%]	Profondeur d'éclipse [%]	Instrument
0.8	0.4	0.7961 ± 0.0018	-	TESS
1.12625	0.0219	0.8159 ± 0.0045	0.03737 ± 0.0045	HST WFC3
1.14775	0.0211	0.8134 ± 0.0045	0.03951 ± 0.0046	HST WFC3
1.16860	0.0206	0.8062 ± 0.0048	0.03669 ± 0.0045	HST WFC3
1.18880	0.0198	0.8152 ± 0.0048	0.03544 ± 0.0048	HST WFC3
1.20835	0.0193	0.8195 ± 0.0047	0.03876 ± 0.0041	HST WFC3
1.22750	0.0190	0.8181 ± 0.0043	0.03787 ± 0.0049	HST WFC3
1.24645	0.0189	0.8114 ± 0.0049	0.03865 ± 0.0043	HST WFC3
1.26550	0.0192	0.8172 ± 0.0054	0.03292 ± 0.0046	HST WFC3
1.28475	0.0193	0.8170 ± 0.0060	0.04363 ± 0.0043	HST WFC3
1.30380	0.0188	0.8130 ± 0.0055	0.04558 ± 0.0042	HST WFC3
1.32260	0.0188	0.8237 ± 0.0046	0.03523 ± 0.0044	HST WFC3
1.34145	0.0189	0.8163 ± 0.0050	0.03577 ± 0.0043	HST WFC3
1.36050	0.0192	0.8174 ± 0.0042	0.04638 ± 0.0044	HST WFC3
1.38005	0.0199	0.8117 ± 0.0043	0.04633 ± 0.0045	HST WFC3
1.40000	0.0200	0.8171 ± 0.0047	0.04750 ± 0.0038	HST WFC3
1.42015	0.0203	0.8191 ± 0.0047	0.04555 ± 0.0051	HST WFC3
1.44060	0.0206	0.8127 ± 0.0056	0.04515 ± 0.0046	HST WFC3
1.46150	0.0212	0.8179 ± 0.0050	0.04580 ± 0.0044	HST WFC3
1.48310	0.0220	0.8164 ± 0.0047	0.04480 ± 0.0046	HST WFC3
1.50530	0.0224	0.8006 ± 0.0048	0.05031 ± 0.0048	HST WFC3
1.52800	0.0230	0.8112 ± 0.0052	0.04825 ± 0.0048	HST WFC3
1.55155	0.0241	0.8052 ± 0.0052	0.04765 ± 0.0050	HST WFC3
1.57625	0.0253	0.7989 ± 0.0063	0.05397 ± 0.0052	HST WFC3
1.60210	0.0264	0.7872 ± 0.0057	0.04457 ± 0.0048	HST WFC3
1.62945	0.0283	0.7936 ± 0.0057	0.04332 ± 0.0051	HST WFC3
3.6	0.75	0.7925 ± 0.0062	0.1688 ± 0.0046	Spitzer IRAC*
4.5	1.015	0.8092 ± 0.0036	0.1896 ± 0.0057	Spitzer IRAC*

* Données prises de [Garhart et al. \(2020\)](#).

TABLE 2.3 – Données spectrales de Kelt-7 b utilisées dans cette étude.

Chapitre 3

Démêler les biais des modèles d'inversion de données

Sommaire

3.1	Mise en place du problème	57
3.1.1	Les Jupiters ultra chauds	57
3.1.2	Géométrie du problème	57
3.1.3	Dissociation thermique des molécules	58
3.1.4	Description de la méthode suivie	60
3.2	Modèles d'entrée : des cas simples jusqu'aux simulations GCM	68
3.2.1	Atmosphères 3D idéalisées avec un gradient jour-nuit	68
3.2.2	Modèle GCM 3D de l'atmosphère de Wasp-121 b	73
3.3	Spectres en transits 3D générés par <i>Pytmosph3R</i>	73
3.3.1	H ₂ constant dans l'atmosphère	74
3.3.2	H ₂ variable dans l'atmosphère	74
3.4	Résultats du modèle d'inversion de données <i>TauREx</i>	75
3.4.1	H ₂ et H ₂ O constant dans l'atmosphère	75
3.4.2	Dissociation thermique de H ₂ O avec H ₂ constant	78
3.4.3	Dissociation thermique de H ₂ et H ₂ O	81
3.4.4	Que retenir des biais mis en évidence ?	82
3.5	Comparaison avec les observations	83
3.5.1	Wasp-121 b	84
3.5.2	Wasp-33 b	86
3.6	Limites et perspectives	88

Les résultats, les analyses et les conclusions présentées dans ce chapitre ont fait l'objet d'une publication dans le journal *Astronomy and Astrophysics* (Pluriel et al. 2020). Par conséquent, ce chapitre va globalement suivre le même déroulé bien qu'un certain nombre de détails et de précisions y ont été ajoutés.

3.1 Mise en place du problème

3.1.1 Les Jupiters ultra chauds

Nous allons, tout au long de ce chapitre, nous intéresser à une catégorie de planète très particulière, les Jupiters Ultra Chauds. La description générale des Jupiters chauds faite en Section 1.2 s'applique globalement à ces exoplanètes, avec néanmoins quelques changements majeurs au niveau de la dynamique et de la chimie.

Bien qu'il n'existe pas encore un consensus de la communauté des exoplanètes sur la limite entre Jupiter chaud et Jupiter ultra chaud, plusieurs travaux ont montré que leurs caractéristiques atmosphériques se distinguent clairement (Arcangeli et al. 2018; Bell and Cowan 2018), notamment lorsque la température du côté jour de la planète dépasse les 2200 K (Parmentier et al. 2018). Ces atmosphères peuvent atteindre des températures allant jusqu'à 4600 K du côté jour, comparable à la photosphère d'étoile naine de type K, comme c'est le cas pour l'exoplanète Kelt-9 b (Gaudi et al. 2017).

La principale différence entre les Jupiters chauds et les Jupiters ultra chauds provient de l'inversion thermique de leurs stratosphères, qui est due à la présence de forts absorbants dans l'optique et le proche UV, tels que TiO et VO (Fortney et al. 2008b; Parmentier et al. 2015). Ces absorbants impliquent un dépôt important d'énergie du côté jour de la planète qui va chauffer fortement la stratosphère permettant alors d'atteindre des températures très élevées dans la haute atmosphère.

Ces températures extrêmes de l'hémisphère diurne ont pour effet d'augmenter considérablement l'échelle de hauteur de l'atmosphère du côté jour, impactant la circulation atmosphérique et créant alors une asymétrie des hémisphères jour-nuit. La structure 3D de ces atmosphères va alors affecter considérablement les spectres en transmission observés, diminuant fortement la robustesse des résultats des modèles d'inversion de données 1D.

3.1.2 Géométrie du problème

La forte dichotomie en température entre la face diurne et nocturne des Jupiters ultra chauds va créer une asymétrie de son atmosphère. L'échelle de hauteur d'une atmosphère, définissant la taille typique de l'atmosphère, et dépendant de l'altitude z , de la latitude θ et de la longitude ϕ , est donnée par :

$$H(\theta, \phi, z) = \frac{k_B T(\theta, \phi, z)}{\mu(\theta, \phi, z)g(z)} \quad (3.1)$$

où k_B est la constante de Boltzmann, T la température, μ la masse moléculaire moyenne et g la gravité, ces trois dernières dépendant de l'altitude. Or, la température dans ce type d'atmosphère peut varier

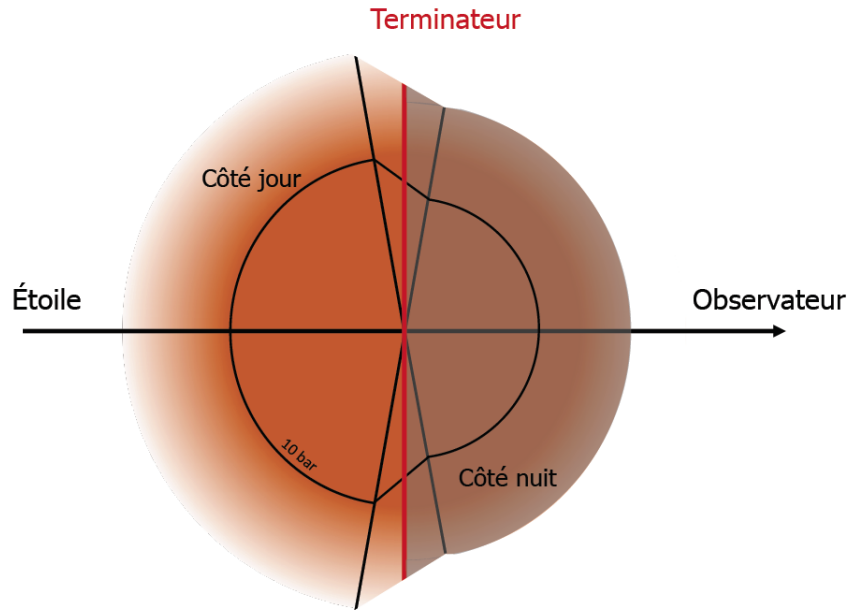


FIGURE 3.1 – Schéma de l’atmosphère d’un Jupiter ultra chaud dont le côté chaud est enflé par rapport au côté froid. Nous basons cette illustration à partir d’un modèle GCM de la planète Wasp-121 b (Parmentier et al. 2018).

très fortement selon la latitude, la longitude et l’altitude à laquelle on se trouve, de plusieurs milliers de Kelvin (Haynes et al. 2015 ; Sheppard et al. 2017 ; Evans et al. 2017 ; Kreidberg et al. 2018). Ces différences de températures couplées à la dissociation thermique de H_2 (voir Section 3.1.3) implique que l’échelle de hauteur de ce genre d’atmosphère peut alors varier jusqu’à un facteur 10 entre le côté jour et le côté nuit. Par conséquent, les Jupiters ultra chauds vont présenter un hémisphère jour enflé par rapport à un hémisphère nuit plus contracté comme le montre le schéma de la Figure 3.1.

Ainsi, les zones sondées lors d’observations en transit vont différer de celles des Jupiters chauds classiques, où l’on considère que seule la région proche du terminateur va être sondée. Le côté jour de la planète des Jupiters ultra chauds s’étend en effet bien plus et masque le côté nuit. Néanmoins, il serait imprudent de conclure que la zone sondée serait alors exclusivement du côté jour de la planète car ces atmosphères présentent également des hétérogénéités de composition moléculaire jour-nuit qui vont affecter le spectre en transmission.

3.1.3 Dissociation thermique des molécules

La composition chimique des atmosphères dépend de divers processus physique et chimique, impliquant parfois des variations fortes en abondances selon l’altitude, la latitude et/ou la longitude. Cette composition peut évoluer à cause de la photo-dissociation, détruisant des espèces, en recréant d’autres à différents endroits de l’atmosphère. Elle évolue aussi par du transport dynamique couplé à l’équilibre chimique, impliquant par exemple qu’une atmosphère sera dominée par du méthane à certains endroits puis par du monoxyde de carbone à d’autres, dû à l’équilibre chimique entre CH_4 et CO qui dépend de

la température. Il peut aussi arriver que des espèces condensent à certains endroits, se retrouvant dans ce qu'on appelle communément un piège froid, et ne soit donc plus présente dans l'atmosphère ou alors en quantité plus faible que celle attendue.

Dans les atmosphères les plus chaudes, les températures sont telles qu'un autre processus physique doit être pris en compte, la dissociation thermique des espèces, impactant alors la composition chimique de l'atmosphère en particulier du côté jour. Cette dissociation due aux collisions se produit à basse pression et haute température et va impliquer une diminution importante de l'abondance des espèces concernées, selon les équations thermochimiques suivantes (exemple pour H₂O et H₂, [Lodders and Fegley \(2002\)](#)) :



Il est possible d'approximer le rapport de mélange en volume A (VMR) du à la dissociation thermique par la relation suivante ([Parmentier et al. 2018](#)) :

$$\frac{1}{A} = \left(\frac{1}{A_0^{0.5}} + \frac{1}{A_d^{0.5}} \right)^2 \quad (3.4)$$

où A_0 et A_d sont respectivement l'abondance profonde dans les régions non affectées par la dissociations thermique et l'abondance dans les régions dominées par la dissociation.

A_d peut être approximé par la formule suivante :

$$\log_{10}(A_d) \simeq \alpha \log_{10}(P) + \frac{\beta}{T} + \gamma \quad (3.5)$$

avec P la pression, T la température et les coefficients α , β , γ valables pour une composition solaire, pour des pressions et des températures respectivement comprises entre 200 bar et 1 μ bar et 2000 K et 4000 K. La Figure 3.2 représente l'abondance en H₂O et en H₂ calculée à partir de ces équations.

Nous remarquons que la dissociation thermique dépend fortement de la température et de la pression. Plus la température est élevée et plus la pression est faible, plus la dissociation thermique se produit. Néanmoins, certaines molécules résistent mieux à cet effet thermique, comme c'est le cas pour le monoxyde de carbone CO. Cette molécule nécessite en effet des températures encore plus élevées pour se dissocier, en raison de sa liaison triple ([Lodders and Fegley 2002](#)). Ce type d'espèce sera très utile pour servir de référence dans les atmosphères où elles sont présentes et où des espèces se dissocient,

puisqu'elles vont demeurer présentes partout dans l'atmosphère, et notamment du côté jour enflé.

3.1.4 Description de la méthode suivie

Nous allons maintenant décrire la méthode utilisée afin de mettre en évidence et d'analyser les biais de composition atmosphérique dans les modèles d'inversion de données dus aux hétérogénéités chimiques.

Comme nous souhaitons étudier les biais intrinsèques au modèle d'inversion de données, nous voulions connaître en détails l'atmosphère à inverser afin de comprendre les divergences entre le modèle d'entrée et les sorties données par le modèle d'inversion. Par conséquent, au lieu de nous servir d'observations existantes, nous avons décidé d'utiliser des modèles de climats 3D allant du modèle 1D uniforme le plus simple jusqu'au modèle de climat globaux 3D (GCM), puis de générer des spectres en transmission à l'aide d'un modèle complètement 3D, *Pytmosph3R* (Caldas et al. 2019), pour enfin effectuer des inversions de données à l'aide du modèle *TauREx* (Waldmann et al. 2015), décrit dans le Chapitre 2. Cette méthode nous a alors permis d'étudier des observations simulées sur de larges bandes spectrales (de 0.6 à 10 μm), permettant d'anticiper les futures observations JWST et Ariel.

Wasp-121 b comme objet d'étude

Wasp-121 b, découverte en 2016 par le télescope WASP (Wide Angle Search for Planets) par Delrez et al. (2016), est située à environ 270 parsecs de notre système solaire. Son rayon mesure 1.865 fois celui de Jupiter, pour une masse 1.183 supérieure à Jupiter avec une température d'équilibre $\gtrsim 2400$ K permettant de ranger cette exoplanète dans la catégorie des Jupiters ultra chaud. Nous avons ainsi choisi de nous intéresser à Wasp-121 b comme objet de référence en tant que Jupiter ultra chaud.

Cet objet a depuis été largement étudié, notamment à l'aide d'observations HST en éclipse primaire et secondaire (Evans et al. 2017, 2018; Parmentier et al. 2018), d'observations par le télescope spatial TESS (Daylan et al. 2019) mais aussi à l'aide de simulations numériques GCM (Parmentier et al. 2018) impliquant alors une relative bonne connaissance de ce système planétaire et de l'atmosphère de cette planète. Plusieurs molécules ont été détectées dans son atmosphère, telles que H_2O , TiO , VO , SH (Evans et al. 2016, 2018) et Fe I (Gibson et al. 2020).

En outre, Wasp-121 b est une cible intéressante pour les futures observations avec le JWST ou Ariel, motivant plus encore l'étude de cette exoplanète comme objet de référence afin de démêler les biais des modèles d'inversion de données 1D. L'ensemble des caractéristiques connues à ce jour de l'exoplanète et de son étoile sont répertoriés dans la Table 3.1.

SPARC/MIT gcm

Comme nous l'avons expliqué plus tôt, nous avons besoin de simulations numériques de l'atmosphère de Wasp-121 b pour notre méthode d'analyse. Nous utilisons le modèle de circulation global (GCM) SPARC/MIT (Showman et al. 2009; Parmentier et al. 2018) pour simuler l'atmosphère du Jupi-

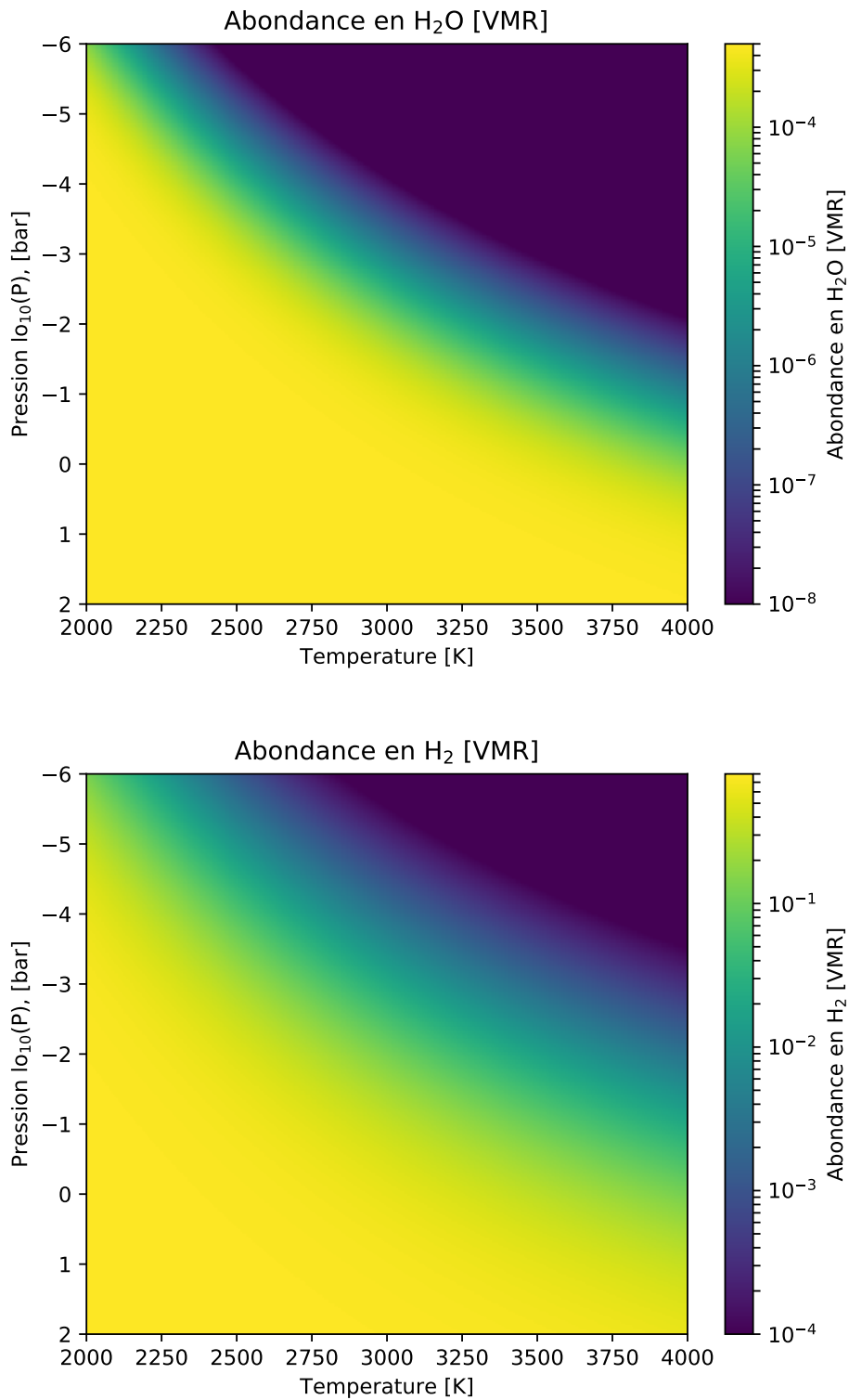


FIGURE 3.2 – Abondance en H₂O et en H₂ (rapport de mélange de volume) en fonction de la pression (bar) et de la température (K), pour une métallicité solaire. Attention, les échelles des barres de couleur sont différentes, car calquées sur l’abondance solaire de l’espèce.

Paramètres stellaires	
Type spectral	F6 V
Température effective [K]	6459^{+140}_{-140}
[Fe/H]	$0.13^{+0.09}_{-0.09}$
Gravité de surface [cgs]	$4.242^{+0.011}_{-0.012}$
Rayon [R_{\odot}]	$1.458^{+0.030}_{-0.030}$
Paramètres de la planète	
Période [jour]	$1.27492550^{+0.00000020}_{-0.00000025}$
Inclination [deg]	$87.6^{+0.6}_{-0.6}$
Masse [M_J]	$1.183^{+0.064}_{-0.062}$
Rayon [R_J]	$1.865^{+0.044}_{-0.044}$
Température d'équilibre [K]	2358^{+52}_{-52}
Référence	Delrez et al. (2016)

TABLE 3.1 – Paramètres de la planète Wasp-121 b et de son étoile.

ter ultra chaud Wasp-121 b. Nous précisons que tous les modèles que nous avons simulé dans ce chapitre se basent sur cette simulation GCM (voir Section 3.2).

Ce modèle résout les équations primitives sur une grille sphérique-cubique, calculant à la fois la physique et la dynamique de l'atmosphère et a déjà été appliqué avec succès à une large gamme de Jupiters chauds et de Jupiters ultra chauds ([Parmentier et al. 2013](#) ; [Kataria et al. 2015](#) ; [Parmentier et al. 2016](#) ; [Lewis et al. 2017](#) ; [Kreidberg et al. 2018](#) ; [Arcangeli et al. 2019](#)).

La pression dans notre modèle varie de 200 bar à 2 μ bar découpée en 53 couches. Nous utilisons une résolution de 128 cellules en longitude et 64 cellules en latitude. Le transfert radiatif est géré avec l'approximation à deux faisceaux ([Marley and McKay 1999](#)) avec des opacités traitées utilisant 8 coefficients de k-corrélées ([Goody and Yung 1989](#)) à travers chacun des 11 bins en longueur d'onde ([Kataria et al. 2013](#)).

Nous supposons l'équilibre chimique lorsque nous calculons les opacités, ce qui signifie que la dissociation thermique des espèces est prise en compte. Cependant, à des fins pratiques, nous supposons que le poids moléculaire moyen et la capacité thermique sont constants dans toute l'atmosphère. Le changement de poids moléculaire moyen est exploré a posteriori lors de la projection de la structure thermique GCM sur la grille de *Pytmosph3R* (voir la section suivante). Ce modèle ne prend pas en compte l'impact de la recombinaison de H_2 dans l'atmosphère, qui peut avoir un effet non négligeable sur la physique et la dynamique de celle-ci ([Tan and Komacek \(2019\)](#), voir Section 3.2.1).

Les Figures 3.3 et 3.4 montrent les cartes en températures et en abondance en H_2O générées par le GCM. On peut distinguer 3 méta-structures dans ces cartes :

1. Nous remarquons la présence d'un anneau quasi-isotherme de ~ 2500 K à partir de la pression à la surface et jusqu'à environ 100 mbar. Dans l'atmosphère profonde, l'échelle de temps caractéristique d'équilibre radiatif étant petite par rapport à l'échelle de temps dynamique, il en résulte que les variations d'insolation jour-nuit n'affectent pas cette zone, la rendant quasiment homogène en température.

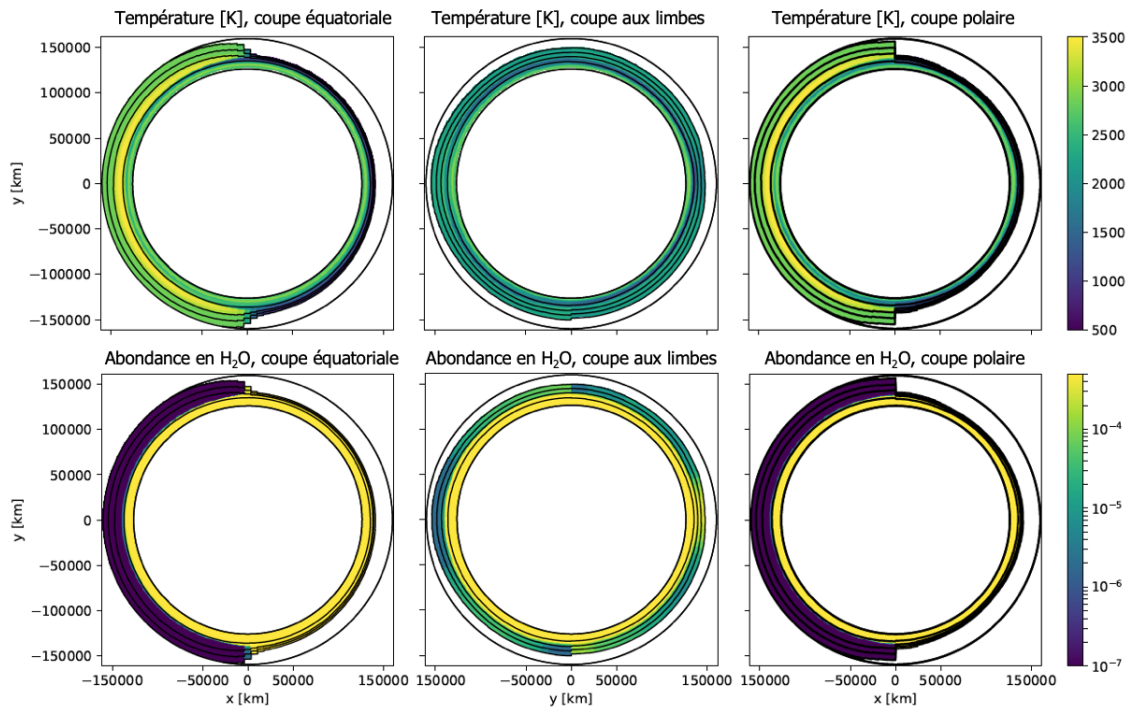


FIGURE 3.3 – Simulation GCM de Wasp-121 b sans prendre en compte la dissociation de H₂. Sont représentés la température en K (haut) et l'abondance en H₂O en VMR (bas) selon la coupe équatoriale (gauche), aux limbes (milieu) et polaire (droite). En partant du centre jusqu'à l'extérieur, les lignes noires indiquent respectivement les niveaux de pressions à $1.434 \cdot 10^7$, 10^3 , 1, 10^{-2} , et 10^{-4} Pa. Le rayon de la planète ainsi que celui de l'atmosphère sont tracés à l'échelle.

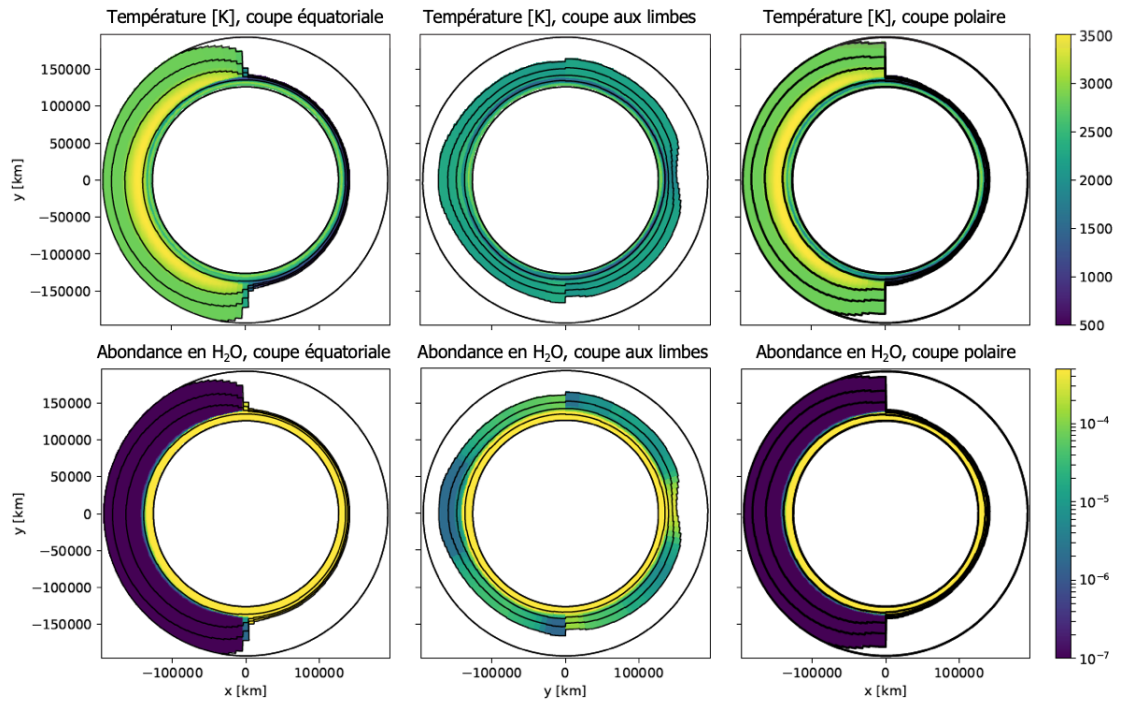


FIGURE 3.4 – Mêmes cartes que la Figure 3.3 mais en considérant ici la dissociation thermique de H₂.

2. Au-dessus de cet anneau du côté jour et pour toutes les latitudes, la température croît dans un premier temps jusqu'à environ 3500 K puis décroît avec l'altitude jusqu'à environ 2800 K (inversion thermique).
3. Le côté nuit est en contraste fort avec le côté jour, présentant des températures qui décroissent à partir du haut de l'anneau atteignant des températures entre 500 K et 1000 K à toutes les latitudes. La différence d'échelle de hauteur entre ces deux faces est alors très forte générant cette grande asymétrie et la forme "en champignon" de cette atmosphère.

Les Figures 3.3 et 3.4 montrent également que le terminateur est plutôt homogène (~ 2200 K quelle que soit l'altitude et la latitude) où les limbes est et ouest sont assez similaires, même si le limbe est, plus froid, présente une abondance en H_2O plus élevée. Il est clair que les températures atteintes dans ces planètes impliquent une mise à l'équilibre radiative et chimique rapide par rapport à la dynamique, d'où ces asymétries si prononcées.

Comme nous l'avons expliqué en Section 3.1.3, les températures élevées impliquent qu'une dissociation thermique des espèces se produit dans cette atmosphère, en outre nous supposons l'équilibre chimique, à savoir que l'abondance des espèces est liée instantanément à la température et la pression du point de grille considéré. Nous remarquons ainsi une absence totale de H_2O du côté jour de la planète, avec une abondance inférieure à 10^{-7} en VMR au-dessus de 20 mbar environ, tandis qu'elle présente une abondance solaire du côté nuit. Le terminateur, quasi-isotherme, met bien en évidence la dépendance en pression de la dissociation thermique puisque l'abondance en eau diminue avec l'altitude (voir Figure 3.2).

Génération des spectres en transmission avec *Pytmosph3R*

Nous utilisons le code *Pytmosph3R* comme décrit dans Caldas et al. (2019) pour simuler des observations en transit, à savoir des spectres en transmission, à partir des simulations de l'atmosphère de la planète que nous modélisons, en l'occurrence Wasp-121 b. Ces simulations d'atmosphères servant de données d'entrée à *Pytmosph3R* peuvent provenir de modèle GCM, comme de modèles plus simples. Ce code est un modèle 3D prenant en compte la structure 3D de l'atmosphère, il génère des cartes en transmittance à n'importe quelle longueur d'onde qu'il intègre spatialement ensuite pour obtenir *in fine* un spectre en transmission réaliste. Ce point est essentiel car notre but est d'analyser les biais des modèles d'inversion de données sur des observations actuelles et futures, il nous faut donc travailler avec des simulations de spectre en transmission 3D.

Ce code prend en compte des opacités moléculaires utilisant des sections efficaces monochromatiques calculées par ExoMol (Yurchenko et al. 2011 ; Tennyson and Yurchenko 2012 ; Barton et al. 2013 ; Yurchenko et al. 2014 ; Barton et al. 2014). Il est également possible d'utiliser des opacités calculées avec la méthode k-corrélés (Fu and Liou 1992) dont nous ne nous sommes pas servi afin de garder une compatibilité totale avec *TauREx* qui lui ne fonctionne qu'avec des sections efficaces. L'annexe B fournit un manuel d'utilisateur de la version 1.3 de *Pytmosph3R* ainsi que des "cas-tests" permettant de conserver

la reproductibilité des résultats obtenus¹. Une version 2.0 de *Pytmosph3R* est en cours d'écriture, nous y reviendrons plus en détails dans le chapitre 5.

Dans cette étude, nos simulations modélisent une atmosphère simplifiée de Wasp-121 b ne contenant que quatre espèces, H₂, He, H₂O et CO prenant également en compte l'opacité due aux collisions entre les molécules H₂-H₂ et H₂-He, aussi appelées continua, et la diffusion Rayleigh. Nous n'incluons pas les nuages, les molécules de TiO et de VO afin de nous concentrer sur les molécules précédentes.

Les abondances des espèces dans l'atmosphère sont calculées à partir de la température donnée par la simulation de l'atmosphère (GCM ou autre) et suivant ce qui a été fait dans [Parmentier et al. \(2018\)](#) en cas de dissociation thermique comme décrit dans la Section 3.1.3. Le poids moléculaire dérive alors de ces abondances. La gravité $g(z)$ et la hauteur de l'échelle atmosphérique $H(z)$ varient avec l'altitude z en partant de la surface planétaire, c'est-à-dire le rayon de la planète à une pression de 10 bars, comme décrit dans [Caldas et al. \(2019\)](#), et sont définis, respectivement, dans les équations (3.6) and (3.7) :

$$g(z) = g_0 \frac{1}{\left(1 + \frac{z}{R_p}\right)^2} \quad (3.6)$$

$$H(z) = \frac{kT(z)}{\mu(z)g(z)}. \quad (3.7)$$

où g_0 est la gravité de surface, R_p le rayon planétaire, T la température, et μ la masse moléculaire moyenne.

On définit le rapport de mélange en volume (VMR) comme de la façon suivante :

$$x_i = \frac{N_i}{\sum_j N_j}, \quad (3.8)$$

avec N_i la densité moléculaire en molécules par unité de volume. Nous supposons également que toutes les autres espèces sont présentes dans l'atmosphère sous forme de gaz traces, nous pouvons donc écrire la densité en nombre de l'hydrogène atomique comme suit :

$$N_H = 2(N_{H_2}^0 - N_{H_2}) \quad (3.9)$$

où $N_{H_2}^0$ est densité moléculaire en nombre lorsque la dissociation thermique ne se produit pas, à savoir dans l'atmosphère profonde.

Nous faisons tourner *Pytmosph3R* à la résolution $R=10000$, définie comme $R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda}$, dans une

1. La version 1.3 de *Pytmosph3R* n'ayant pas été rendu public car elle n'est pas assez souple dans son utilisation, mais la méthode et les équations utilisées sont présentés dans [Caldas et al. \(2019\)](#).

gamme de longueur d'onde de $0.6 \mu\text{m}$ à $10 \mu\text{m}$. Nous diminuons ensuite la résolution du spectre obtenu à $R=100$ avant de lancer le code d'inversion de données *TauREx*. Nous utilisons cette basse résolution pour plusieurs raisons :

1. Nous simulons des observations du JWST de 0.6 à $10 \mu\text{m}$ utilisant le mode basse résolution du prisme fournie par Near-Infrared Spectrograph (NIRSpec) et Mid Infra-Red Instrument (MIRI), deux instruments qui seront à bord de ce télescope spatial (Stevenson et al. 2016). Cela ne signifie pas qu'utiliser ce prisme est la meilleure stratégie d'observation pour une planète aussi brillante que Wasp-121 b, mais cela nous fournit un spectre uniformément échantillonné qui ne met pas arbitrairement plus de poids dans certaines régions spectrales lors de l'inversion de données.
2. Il n'y a que deux espèces absorbantes dans notre atmosphère (H_2O et CO) et nous n'avons pas besoin de résoudre des raies spécifiques, mais des caractéristiques larges dans des bandes spectrales assez étendues.
3. Nous avons aussi comparé le modèle *TauREx* dans le cas d'une atmosphère totalement homogène, à savoir même température et mêmes abondances partout, comme cela avait été fait dans Caldas et al. (2019), et nous avons remarqué que la résolution optimale en terme de précision nécessaire (à savoir de l'ordre du ppm des observations JWST) et de temps de calcul était optimal pour une résolution de l'ordre de $R=100$.

Dans l'ensemble de nos simulations (GCM ou non) nous utilisons les paramètres stellaire et planétaire de la Table 3.1. Dans les parties de l'atmosphère où H_2 ne se dissocie pas thermiquement, nous avons fixé le rapport $\frac{\text{He}}{\text{H}_2}$ à 0.25885 d'après la table 1 dans Parmentier et al. (2018). Ensuite nous implémentons le rapport de mélange moléculaire en hydrogène et en hélium en combinant les équations (3.8) et (3.9) où H_2 se dissocie.

Puisque le flux lumineux global est dominé par l'étoile, nous supposons que le bruit spectral est dominé par le bruit photonique stellaire, défini comme suit :

$$N_{\text{phot}} = \frac{\pi\tau\Delta t}{hc} \left(\frac{R_*D}{2d} \right)^2 \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} B(\lambda, T_*) \lambda d\lambda, \quad (3.10)$$

où λ_1 et λ_2 sont les limites en longueur d'onde du bin considéré, d est la distance à l'étoile (270 pc pour WASP-121), R_* et T_* sont respectivement le rayon stellaire et la température effective. Les paramètres D , τ , et Δt correspondent respectivement au diamètre du télescope, au débit du système, et au temps d'intégration, dont les valeurs ont été fixé pour le JWST selon Cowan et al. (2015).

En utilisant l'équation (3.10), l'incertitude varie de 10 ppm à 50 ppm entre 1 et $10 \mu\text{m}$, en supposant un seul transit Wasp-121 b. Étant donné que les incertitudes intrinsèques aux instruments, encore appelés bruit systématique, peuvent nous empêcher d'atteindre une précision de 10 ppm avec le JWST, nous avons supposé un bruit de fond de 30 ppm dans tout le domaine spectral (Greene et al. 2016) partout où le bruit de photons était inférieur à 30 ppm.

L'ensemble des paramètres des différentes structures atmosphériques 3D dont nous nous sommes servi pour générer les spectres en transmission avec *Pytmosph3R* sont répertoriés dans la Table 3.2. Un guide d'utilisateur de la version 3.0 de *Pytmosph3R* est présenté en annexe B où y sont aussi répertoriés les options utilisées pour les simulations de cette étude. Nous décrivons en détail les structures atmosphériques dans la Section 3.2.

Paramètres d'entrée	T [K] min-max	angle β	P_{bas} [Pa]	P_{haut} [Pa]	x_{CO} [log(VMR)]
Cas symétrique ∇^-T	1400-2800	20°	1.434×10^7	10^{-4}	-3.36
Cas symétrique ∇^+T	500-3500	10°	1.434×10^7	10^{-4}	-3.36
Cas GCM	493-3545	-	1.434×10^7	10^{-4}	-3.36

TABLE 3.2 – Paramètres utilisés dans les trois configurations de simulation de Wasp-121 b.

TauREx

Les spectres d'inversions de données ont été calculés à l'aide du code *TauREx* (Waldmann et al. 2015), (Waldmann et al. 2015). Pour plus de détails sur le fonctionnement de *TauREx*, voir la Section 2.1.2 du chapitre 2 où nous décrivons ce modèle.

Pour rappel, *TauREx* est un code d'inversion de données Bayésien utilisant les listes de raies produites par le consortium ExoMol (Yurchenko et al. 2011 ; Tennyson and Yurchenko 2012 ; Barton et al. 2013 ; Yurchenko et al. 2014 ; Barton et al. 2014), HITRAN (Rothman et al. 2009 ; Gordon et al. 2013) et HITEMP (Gordon et al. 2010). Ce modèle fait l'hypothèse d'atmosphères exoplanétaires planes-parallèles dont la distribution des éléments chimiques ainsi que le profil en pression sont unidimensionnels.

Concernant l'analyse faite dans ce chapitre, nous supposons que le rayon à la base du modèle de Wasp-121 b est celui correspondant à la pression atmosphérique à 10 bar. Nous simulons l'atmosphère de l'exoplanète en considérant qu'il s'agit d'une atmosphère dominée par le dihydrogène et l'hélium d'où un poids moléculaire moyen de 2.4 uma, où les molécules de CO et H₂O sont considérées présentes en tant que traces. Enfin nous supposons une pression atmosphérique comprise entre 10^6 et 10^{-4} Pa.

Une hypothèse importante est que *TauREx* ne prend pas en compte la dissociation thermique des espèces et suppose que les abondances moléculaires sont constantes avec la pression atmosphérique (voir Changeat et al. (2019) pour une discussion détaillée sur l'effet de cette hypothèse). Nous avons établi la plage pour les rapports de mélange de volume moléculaire de CO et H₂O entre 10^{-12} et 10^{-1} , ce qui nous permet d'explorer une large gamme de solutions. Même si nous n'ajoutons jamais de nuages dans notre simulation d'entrée, nous configurons la plage pour les nuages entre 10^{-12} et 10^{-1} pour permettre au code d'inversion d'avoir une liberté totale quant à la position d'éventuels nuages qu'il trouverait². Nous pensons également que cela simule mieux une situation réelle où les nuages seraient placés dans l'inversion de données sans connaissance préalable de leur position sur la planète réelle. La plage autorisée pour le rayon planétaire et la température atmosphérique (supposée verticalement

2. C'est aussi un moyen de vérifier la fiabilité de l'inversion de données.

constante) sont, respectivement, $1.3R_J - 4.0R_J$ et $400K - 3600K$, avec R_J le rayon de Jupiter. La plage de température est liée à la température minimale et maximale dans la simulation GCM de Wasp-121 b, comme indiqué dans la Table 3.2. Nous laissons donc une liberté maximale au code d'inversion pour explorer l'espace des paramètres. Puisque que nous simulons des observations JWST, nous établissons la plage de longueurs d'onde entre 0.6 et 10 μm . Pour les paramètres non inversés tels que les masses et le rayon stellaire, nous utilisons ceux décrits dans la Table 3.1.

Nous précisons que le code d'inversion de données *TauREx* n'est pas conçu pour prendre en compte la dissociation thermique de H_2 . En effet, en cas de dissociation thermique de H_2 , le rapport He/H_2 change en fonction de la pression et de la température impliquant que le poids moléculaire moyen de l'atmosphère peut également être inférieur à 2 uma, dans les régions où H_2 se dissocie en 2 atomes d'hydrogène. Afin d'être cohérent dans l'ensemble de nos simulations, nous avons utilisé le même fichier de configuration pour tous les spectres générés par le modèle *TauREx* et nous avons laissé le rapport He/H_2 constant. Ce faisant, nous pourrions estimer si une atmosphère où H_2 ne dissocie pas peut expliquer nos spectres d'entrées ou non. Nous y revenons dans la Section 3.4.3.

Bien que certaines de ces hypothèses puissent sembler trop simplistes au vu de la physique que nous envisageons dans les atmosphères réelles des Jupiters ultra chauds, nous pensons qu'il est important de comprendre comment ces hypothèses - couramment utilisées de nos jours - peuvent biaiser les conclusions d'une analyse d'inversion de données.

3.2 Modèles d'entrée : des cas simples jusqu'aux simulations GCM

Afin de comprendre et de caractériser les biais dus à la structure 3D atmosphérique de l'atmosphère de Wasp-121 b, nous avons décidé de commencer par modéliser un cas simple, faisant des hypothèses fortes, et d'ajouter de nouveaux niveaux de complexité à mesure que l'étude progresse. En utilisant cette approche, nous montrons comment distinguer les biais observés. Nous notons que nous avons utilisé la même composition atmosphérique dans toutes nos simulations, à savoir He, H_2 , H_2O et CO.

La validation du modèle *Pytmosph3R* avec *TauREx* a été effectuée par [Caldas et al. \(2019\)](#). Nous avons donc commencé par considérer la structure 3D d'une atmosphère de Wasp-121 b idéalisée. Dans les Figures 3.5 et 3.6 nous montrons les cartes de température 3D utilisées par *Pytmosph3R* pour calculer le spectre en transmission. Avec ces modèles, nous négligeons les effets verticaux, en utilisant des profils température-pression isothermes dans chaque cellule, et nous nous concentrons sur les effets de composition chimique. Enfin, nous avons simulé une structure atmosphérique 3D de Wasp-121 b en utilisant un GCM prenant alors en compte les effets verticaux et horizontaux.

3.2.1 Atmosphères 3D idéalisées avec un gradient jour-nuit

Effets du gradient en température jour-nuit

Nous avons en premier lieu créé une structure atmosphérique idéalisée de Wasp-121 b symétrique autour de la ligne de mire planète-observateur. Les principaux paramètres utiles pour simuler cette simple

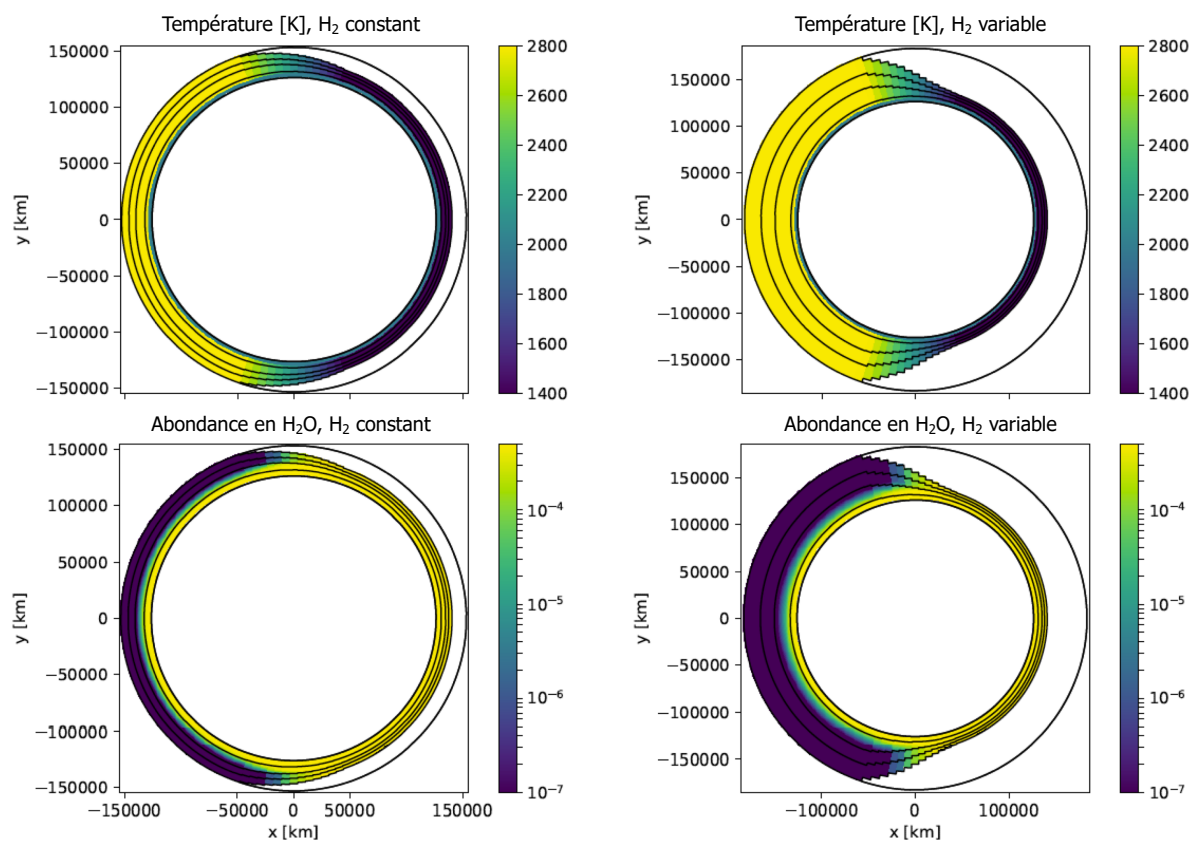


FIGURE 3.5 – Structure atmosphérique d'un modèle symétrique idéalisé de Wasp-121 b (∇T), supposant l'absence ou la présence de dissociation thermique de H_2 (gauche et droite respectivement). Nous montrons la carte en température (haut) et la carte d'abondance en H_2O (bas). Les températures vont de 1400 K à 2800 K, avec un angle de transition de 20° autour de la ligne du terminateur et un anneau à 2500 K à la pression $P=0.13$ bar à partir de la pression de surface. Le code couleur pour les cartes d'abondance d'eau indique la VMR de $5 \cdot 10^{-4}$ à 10^{-7} . En partant du centre jusqu'à l'extérieur, les lignes noires indiquent respectivement les niveaux de pressions à $1, 434 \cdot 10^7$, 10^3 , 1, 10^{-2} , et 10^{-4} Pa. Le rayon de la planète ainsi que celui de l'atmosphère sont tracés à l'échelle.

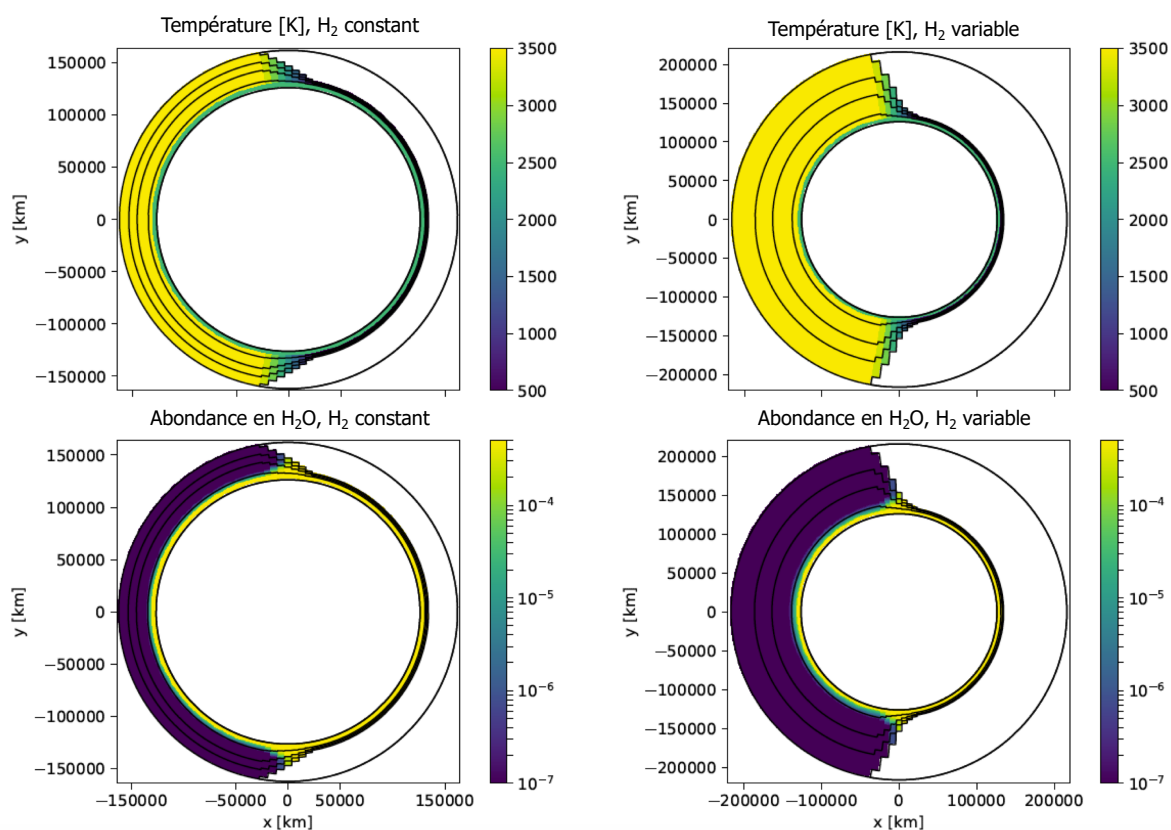


FIGURE 3.6 – Mêmes cartes que la Figure 3.5 mais pour le cas ∇^+T . Les températures vont ici de 500 K à 3500 K, avec un angle de transition de 10° autour de la ligne du terminateur et un anneau à 2500 K à la pression $P=0.13$ bar à partir de la pression de surface.

structure sont T_j , T_n et β représentant respectivement la température du côté jour, la température du côté nuit et l'angle d'ouverture. Les paramètres T_j et T_n sont liés respectivement au point sub-stellaire et anti-stellaire tandis que l'angle d'ouverture β décrit la manière dont la transition entre ces deux températures opère : plus cet angle est petit, plus la transition est brutale. Notre modèle est construit pour passer symétriquement du côté jour au côté nuit en utilisant une transition linéaire entre les deux. Afin d'éviter au maximum les effets dus aux gradients verticaux en température, chaque colonne de notre modèle suit un profil thermique isotherme au-dessus du niveau de pression correspondant à l'anneau isotherme à 0.13 bar. Cependant, dans cette partie de l'atmosphère, la température varie en fonction de l'angle d'élévation solaire local, α_* . Dans les parties les plus profondes du modèle, en accord avec les résultats du GCM pour Wasp-121 b (voir 3.2.2), la température est uniforme et égale à 2500 K. En résumé, pour une pression donnée et un angle d'élévation solaire local, la température est donnée par :

$$\left\{ \begin{array}{l} P > P_{\text{iso}} \\ P < P_{\text{iso}} \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} T = T_j \\ \left\{ \begin{array}{l} 2\alpha_* > \beta \\ \beta > 2\alpha_* > -\beta \\ 2\alpha_* < -\beta \end{array} \right. \begin{array}{l} T = T_j \\ T = T_n + (T_j - T_n) \frac{\alpha_* + \frac{\beta}{2}}{\beta} \\ T = T_n \end{array} \end{array} \right. \quad (3.11)$$

Afin de modéliser un cas idéalisé de Wasp-121 b, nous avons alors considéré les deux cas suivants :

1. Le modèle avec fort gradient thermique ($\nabla^+ T$), allant de 500 K au point anti-stellaire à 3500 K au point sub-stellaire avec un angle de transition $\beta = 10^\circ$. Il s'agit d'un cas censé représentatif du fort gradient jour-nuit de Wasp-121 b mais négligeant les hétérogénéités dans la direction verticales et le long des limbes. Le choix des températures est basé sur la simulation GCM de Wasp-121 b en considérant les extrema.
2. Le modèle avec gradient thermique plus faible ($\nabla^- T$), allant de 1400 K à 2800 K avec un angle d'ouverture $\beta = 20^\circ$. Ce modèle prend en considération les effets thermiques de la recombinaison du H_2 du côté nuit. Nous prévoyons que ce cas fournira une limite inférieure pour le biais réel causé par les différences de températures jour-nuit.

Les Figures 3.5 et 3.6 montrent les structures atmosphériques pour ces deux cas, tracé à l'échelle. Comme il s'agit de cas parfaitement symétriques, il n'y a aucune différence entre la coupe équatoriale et polaire et les limbes sont également symétriques. Comme nous pouvons le voir dans les deux cas, le côté jour fortement enflé par rapport au côté nuit contracté va créer un biais horizontal le long de la ligne de visée que nous cherchons à caractériser.

Les cas $\nabla^- T$ et $\nabla^+ T$ ont été choisis pour englober le véritable gradient jour-nuit présent dans Wasp-121 b (voir ci-dessous), tout en supprimant les effets dus aux différences le long des limbes (par exemple, le limbe est par rapport au limbe ouest, ou l'équateur par rapport aux pôles). Cela devrait nous permettre d'identifier l'effet spécifique de ces différences en comparant les résultats de l'inversion de données avec nos cas idéalisés et avec les résultats du GCM.

Si le cas $\nabla^+ T$ est une exagération du gradient jour-nuit couplé à une simplification de sa structure

(notamment verticale), le cas ∇^-T se rapproche plus de la simulation GCM. Ce cas a été créé en se basant sur les travaux de [Bell and Cowan \(2018\)](#) et [Tan and Komacek \(2019\)](#), qui montrent que les effets énergétiques de recombinaison du dihydrogène, réchauffant le côté nuit et refroidissant le côté jour, impliquant une forte réduction du gradient au travers des limbes. Comme cet effet n'est pas pris en compte dans la simulation GCM de Wasp-121 b que nous avons utilisé, nous souhaitons voir comment une telle structure thermique, avec un gradient jour-nuit réduit, pouvait affecter les effets de biais 3D attendus.

Effets sur la composition chimique dus à la dissociation de certaines molécules

Les températures extrêmes présentes dans les Jupiters ultra chauds autorisent la dissociation thermique de nombreuses espèces chimiques ([Lodders and Fegley 2002](#); [Visscher et al. 2006, 2010](#); [Marley et al. 2017](#)), créant ainsi des hétérogénéités chimiques au sein de leurs atmosphères. Dans ce travail, nous simulons des atmosphères contenant seulement He, H₂, H₂O et CO et nous ne prenons en compte que la dissociation thermique des H₂ et H₂O utilisant les équations fournies par ([Parmentier et al. 2018](#)), voir Section 3.1.3 pour plus de détails. Nous faisons l'hypothèse que H₂ se dissocie préférentiellement en hydrogène atomique, même si nous savons que de l'hydrogène anionique peut se former et absorber une partie non négligeable du rayonnement électromagnétique entre 0.6 et 10 μm ([Lenzuni et al. 1991](#); [Parmentier et al. 2018](#); [Arcangeli et al. 2018](#)). Néanmoins, nous n'avons pas inclus dans nos calculs la contribution d'absorption de l'hydrogène ionisé, d'une part car la version de *TauREx* que nous avons utilisé n'inclut pas cette source d'opacité, d'autre part car nous souhaitons diminuer le nombre de paramètres à inverser pour comprendre clairement l'origine des biais éventuels, sans potentielle dégénérescence. Aussi, nous considérons que le CO reste constant partout dans l'atmosphère dans toutes nos simulations, car cette molécule ne se dissocie pas dans ce régime de température (voir Section 3.1.3).

Dans la première série de simulations, nous avons pris en compte les modèles ∇^+T et ∇^-T en considérant la dissociation de l'eau seule (H₂ étant maintenu constant). Comme le montre la carte d'abondance de H₂O dans les Figures 3.5 et 3.6, il n'y a plus d'eau du côté jour de la planète à une pression inférieure à P_{iso} . La dissociation s'arrête autour du terminateur et, du côté nuit, la distribution en eau revient à une valeur constante égale à la valeur solaire.

Dans la deuxième série de simulations, nous avons pris en compte à la fois la dissociation de H₂ et de H₂O. Comme H₂ n'a pas de bandes d'absorption importantes dans la gamme de longueurs d'onde 0.6-10 μm , le principal effet de sa dissociation est la diminution du poids moléculaire moyen, provoquant une augmentation de l'échelle de hauteur de l'atmosphère. Elle affecte également les propriétés thermochimiques de l'atmosphère car l'hydrogène atomique se recombine dans l'hémisphère nocturne. Cette redistribution d'énergie chauffera ce côté nuit et refroidira le côté jour ([Bell and Cowan 2018](#); [Tan and Komacek 2019](#)). Un autre effet important est que sans H₂ dans l'atmosphère, les collisions induites par les deux collisions H₂ - H₂ et He- H₂ sont moins importantes. Comme le montre les Figures 3.5 et 3.6, la dissociation de H₂ augmente l'échelle de hauteur de l'atmosphère du côté du jour d'un facteur 1.5 et 2 dans les simulations ∇^-T et ∇^+T respectivement. On note que la température n'est pas assez élevée pour induire de la dissociation thermique de H₂ du côté nuit. Cela va accentuer encore la dichotomie

jour-nuit lorsque H_2 se dissocie. Par conséquent, CO devient l'espèce radiativement active dominante du côté jour puisque cette molécule ne se dissocie pas à ces températures.

3.2.2 Modèle GCM 3D de l'atmosphère de Wasp-121 b

Dans la dernière simulation, nous ajoutons à la fois les effets verticaux et azimutaux (le long des limbes) puisque nous modélisons Wasp-121 b en utilisant le modèle GCM SPARC/MITgcm (Parmentier et al. 2018) décrit dans Section 3.2.2. La composition chimique de l'atmosphère reste inchangée. Comme dans la Section 3.2.1, nous avons étudié quatre cas différents en considérant toutes les combinaisons possibles où H_2O et H_2 se dissocient thermiquement.

Les Figures 3.3 et 3.4 montrent les cartes de température et d'abondance en eau pour les simulations GCM, avec et sans dissociation de H_2 . Nous voyons que la structure thermique de l'atmosphère est plus complexe que celle des cas symétriques, même si les caractéristiques globales restent les mêmes. La modification la plus importante concerne le terminateur qui est maintenant asymétrique en raison des vents créés par la forte dichotomie de température entre les côtés jour et nuit (Showman et al. 2015). Ces jets équatoriaux réchauffent le côté est de l'atmosphère et refroidissent le côté ouest autour de l'équateur, ce qui implique moins de dissociation de l'eau à l'ouest en raison de la température plus froide. Néanmoins, les cartes d'abondance montrent qu'il y a encore de l'eau dissociée au terminateur qui pourrait permettre à la lumière de sonder plus profondément dans l'atmosphère du côté nuit de la planète. Nous pouvons aussi noter que lorsque la dissociation de H_2 est prise en compte, le comportement global de la structure 3D reste le même, mais comme le côté jour de l'atmosphère a une échelle de hauteur atmosphérique plus grande, celui-ci se trouve encore plus enflé.

Une mise en garde importante est que nous modélisons la dissociation de H_2 pour calculer le spectre en transit, mais cette dissociation n'est pas prise en compte dans le GCM lui-même. Si c'était le cas, cela devrait réduire le contraste jour-nuit ainsi que les champs de vents (Bell and Cowan 2018; Tan and Komacek 2019) impliquant par conséquent que nous ne sommes pas complètement auto-cohérent dans cette simulation.

3.3 Spectres en transits 3D générés par *Pytmosph3R*

Nous présentons maintenant les spectres en transmission générés par *Pytmopsh3R*, tous présentés dans la Figure 3.7. Pour chaque simulation atmosphérique (∇^-T , ∇^+T , GCM) nous avons générés trois spectres, correspondant à trois tests :

1. Un cas référent où aucune dissociation thermique n'est permise (courbes cyans de la Figure 3.7)
2. Un second test où seule l'eau peut dissocier, avec donc H_2 constant dans l'atmosphère (courbes bleues de la Figure 3.7)
3. Enfin, le cas le plus réaliste, où la dissociation thermique de H_2O et de H_2 est prise en compte (courbes bleues foncées de la Figure 3.7)

3.3.1 H₂ constant dans l'atmosphère

Nous remarquons que lorsque H₂O reste constant dans l'atmosphère, les bandes d'absorption du CO sont peu visibles car masquées par celles de H₂O, comme le souligne le spectre en transit où le CO est absent de l'atmosphère (courbe pointillée grise de la Figure 3.7) et cela dans toutes les simulations. Puisque les molécules de CO et de H₂O sont présentes partout, la lumière transmise sonde la même région pour les deux molécules, qui sont à une altitude élevée du côté jour de l'atmosphère. Dans ce cas, les caractéristiques spectrales sont similaires à celles d'un cas 1D. Précisons cependant qu'un spectre avec une plus haute résolution spectrale montrerait plus clairement les pics d'absorption du CO, qui sont ici moyennés par le passage à une plus faible résolution, en l'occurrence de R=10000 à R=100 ici.

En revanche, lorsque H₂O se dissocie (courbes bleues de la Figure 3.7), les bandes d'absorption dans le spectre deviennent plus faibles parce que l'eau à quasiment disparue du côté jour de la planète, du moins aux altitudes sondées. Alors, la lumière de l'étoile peut sonder des régions beaucoup plus profondes de l'atmosphère dans la gamme de longueurs d'onde où le CO n'absorbe pas, sondant donc une partie du côté nuit de la planète. Le CO n'étant pas dissocié du côté du jour, où l'échelle de hauteur est grande en raison de la température élevée, apparaît donc plus clairement. Ainsi, lors du transit, le spectre de transmission transporte des informations des deux côtés de l'atmosphère en fonction de la longueur d'onde observée.

L'allure des spectres en transmission peut également être comprise au regard des Figures 3.3, 3.4, 3.5, 3.6 où les cartes de l'atmosphère montrent le manque d'eau côté jour sauf pour une partie profonde de l'atmosphère (> 10 mbar). Puisque le CO ne se dissocie pas, il absorbe principalement du côté jour de l'atmosphère où la température élevée conduit à des bandes d'absorption bien plus fortes. Néanmoins, bien que ce comportement s'applique à toutes les simulations, il est clair que concernant le cas ∇^-T , les différences dues à la prise en compte de la dissociation de l'eau sont moins marquées contrairement au cas ∇^+T qui semble très similaire au modèle GCM. Nous voyons que dans le cas conservateur ∇^-T , de l'eau se maintient au niveau du terminateur s'étendant même un peu du côté jour. Les rayons lumineux sondent alors des bandes d'absorption de l'eau du côté jour, certes moins marquées à cause de la dissociation thermique mais suffisante pour atténuer l'effet observé dans les autres cas où l'eau y est plus fortement dissociée du côté jour.

3.3.2 H₂ variable dans l'atmosphère

Lorsque les deux molécules H₂O et H₂ peuvent se dissocier thermiquement, nous observons dans tous les cas étudiés une forte augmentation des bandes d'absorption du CO. Comme l'abondance de CO reste constante partout dans l'atmosphère, l'amplitude de ses bandes d'absorption devient plus importante en raison de l'augmentation de l'échelle de hauteur de l'atmosphère provoquée par la dissociation du H₂ (M = 2 uma) en hydrogène atomique (M = 1 uma) ayant principalement lieu du côté jour.

L'effet de la dissociation thermique de H₂ sur les bandes d'absorption de l'eau dans les spectres en transits est plus complexe. Dans la simulation GCM, le comportement de l'eau est quasiment le même que l'on considère la dissociation de H₂ ou non. Comme la dissociation de H₂ se produit principalement

du côté jour de l'atmosphère, tout comme la dissociation de H_2O (voir les Figures 3.3 et 3.4), la région sondée est la même dans les deux cas. En revanche, dans le cas ∇^-T , qui rappelons-le simule l'effet de la redistribution de l'énergie due à la recombinaison du dihydrogène du côté nuit, les bandes d'absorption de l'eau apparaissent plus fortes avec la dissociation de H_2 . Puisqu'il reste de l'eau du côté jour de la planète, l'augmentation de l'échelle de hauteur de l'atmosphère provoquée par la dissociation du H_2 va l'affecter également, d'où l'augmentation de l'amplitude des bandes d'absorption de l'eau.

3.4 Résultats du modèle d'inversion de données *TauREx*

La Figure 3.8 regroupe l'ensemble de toutes les solutions trouvées par *TauREx* dans tous les cas étudiés. Il apparaît que le modèle d'inversion de données est parvenu à converger pour chaque simulation à une solution unique. Cela signifie que le modèle a été suffisamment contraint pour éliminer des dégénérescences, à savoir d'éventuelles solutions statistiquement équivalentes entre elles.

Afin de faciliter la lecture de cette partie, l'annexe C regroupe les distributions postérieures ainsi que les contributions de chaque absorbant aux spectres de l'ensemble des 9 inversions de données effectuées.

3.4.1 H_2 et H_2O constant dans l'atmosphère

Les distributions postérieures des inversions de données sont présentées en haut de la Figure 3.9 et montrent des solutions bien contraintes avec de faibles barres d'erreurs. Nous nous concentrons ici sur la partie surlignée en rouge des graphiques de la Figure 3.8. Dans l'hypothèse où aucune dissociation thermique n'est considérée, *TauREx* parvient à retrouver à 2σ les abondances en H_2O et en CO introduites dans les modèles d'entrées, que ce soit pour les simulations ∇^+T , ∇^-T ou GCM. Ces simulations chimiquement homogènes sont similaires à ce qui fut fait dans les travaux de [Caldas et al. \(2019\)](#), c'est pourquoi nous nous attendions à retrouver des résultats cohérents avec leur étude. Pour mieux interpréter ces résultats, nous avons tracé le rapport d'abondances $[\text{CO}]/[\text{H}_2\text{O}]$ (Fig 3.8). Ce rapport nous permet de comprendre si la dissociation de l'eau affecte le spectre et dans quelle mesure. Le rapport $[\text{CO}]/[\text{H}_2\text{O}]$ est en effet constant dans toute l'atmosphère lorsque l'eau ne se dissocie pas, ce qui est trouvé ici par le modèle *TauREx* pour les 3 cas ∇^+T , ∇^-T et GCM³.

Les températures inversées suggèrent que la lumière sonde le côté jour de l'atmosphère. En effet, comme le montrent les cartes des Figures 3.3, 3.4, 3.5 et 3.6, l'atmosphère présente un côté jour enflé qui, dans une observation en transit, masque le côté nuit. La température inversée dans le cas ∇^+T est plus élevée que celle récupérée dans le cas ∇^-T , ce qui est attendu car les températures du jour sont plus élevées dans le cas ∇^+T . En utilisant en entrée le spectre calculé avec le GCM, *TauREx* trouve une température légèrement inférieure à celle trouvée dans les deux simulations symétriques. Étant donné que les simulations GCM ont été effectuées en supposant un profil température-pressure non isotherme, la structure de température du GCM est en effet plus complexe que celle des deux autres simulations.

3. Néanmoins, ce rapport diffère selon les régions de l'atmosphère si H_2O se dissocie. Il peut être solaire dans des régions de non-dissociation et s'en écarter là où la dissociation thermique se produit.

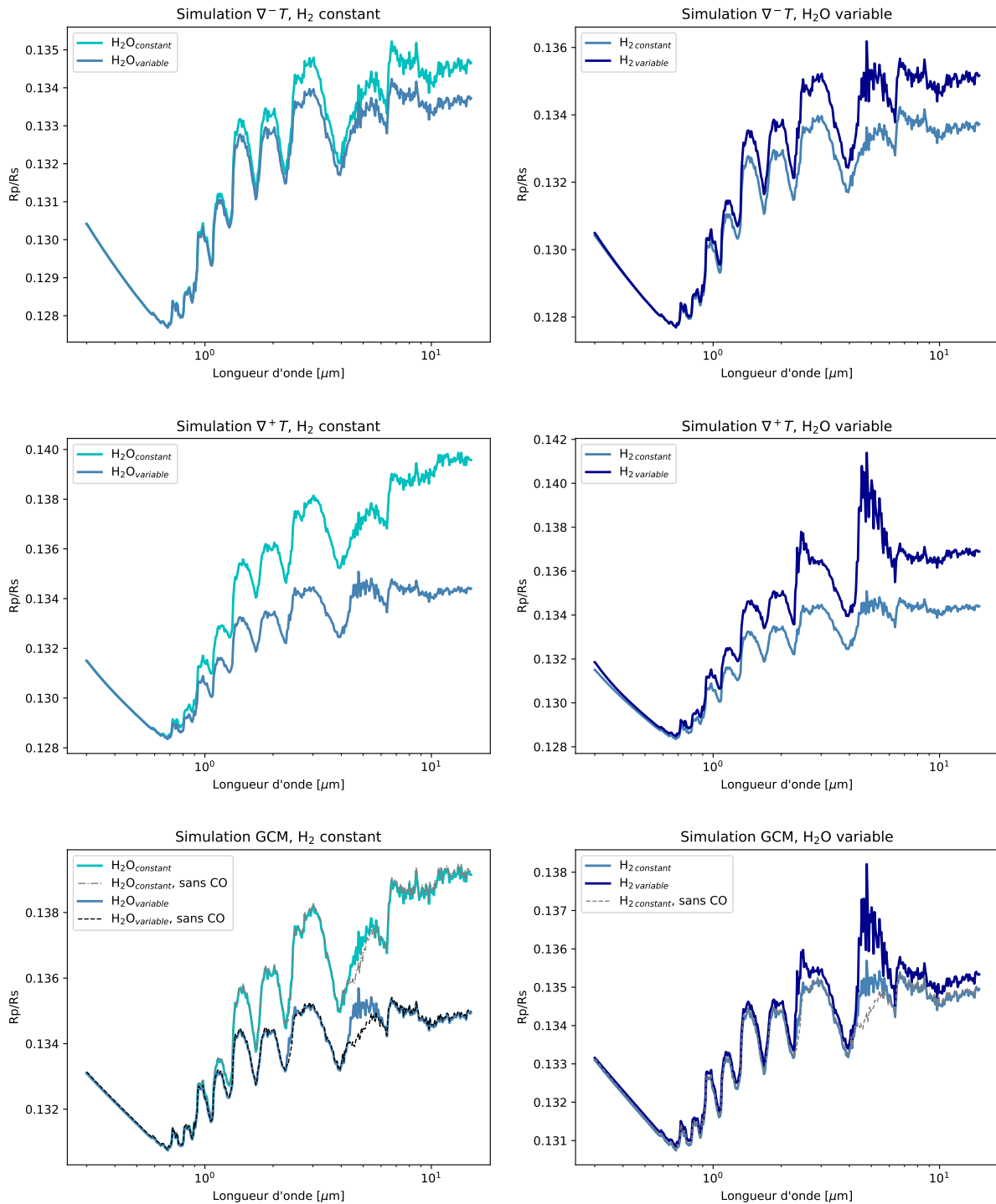


FIGURE 3.7 – Spectres en transmission pour les simulations $\nabla^{-}T$ (haut), $\nabla^{+}T$ (milieu) et GCM (bas) tracés à une résolution $R = 100$. Gauche : abondance en H_2 constante dans toute l'atmosphère. Lorsque la dissociation de l'eau est prise en compte (courbe bleu), les bandes d'absorption de l'eau deviennent moins profondes que lorsque nous supposons qu'il n'y a pas de dissociation de l'eau (courbe cyan). Droite : prise en compte de la dissociation de H_2 dans l'atmosphère. Lorsque la dissociation de H_2 est considérée (courbe bleu foncée), les bandes d'absorption de CO apparaissent encore plus clairement que lorsque nous négligeons la dissociation de H_2 (courbe bleu). Les courbes noires et grises correspondent aux spectres de transmission pour une atmosphère sans CO respectivement avec et sans dissociation de H_2O afin de mettre en évidence les bandes d'absorption de CO.

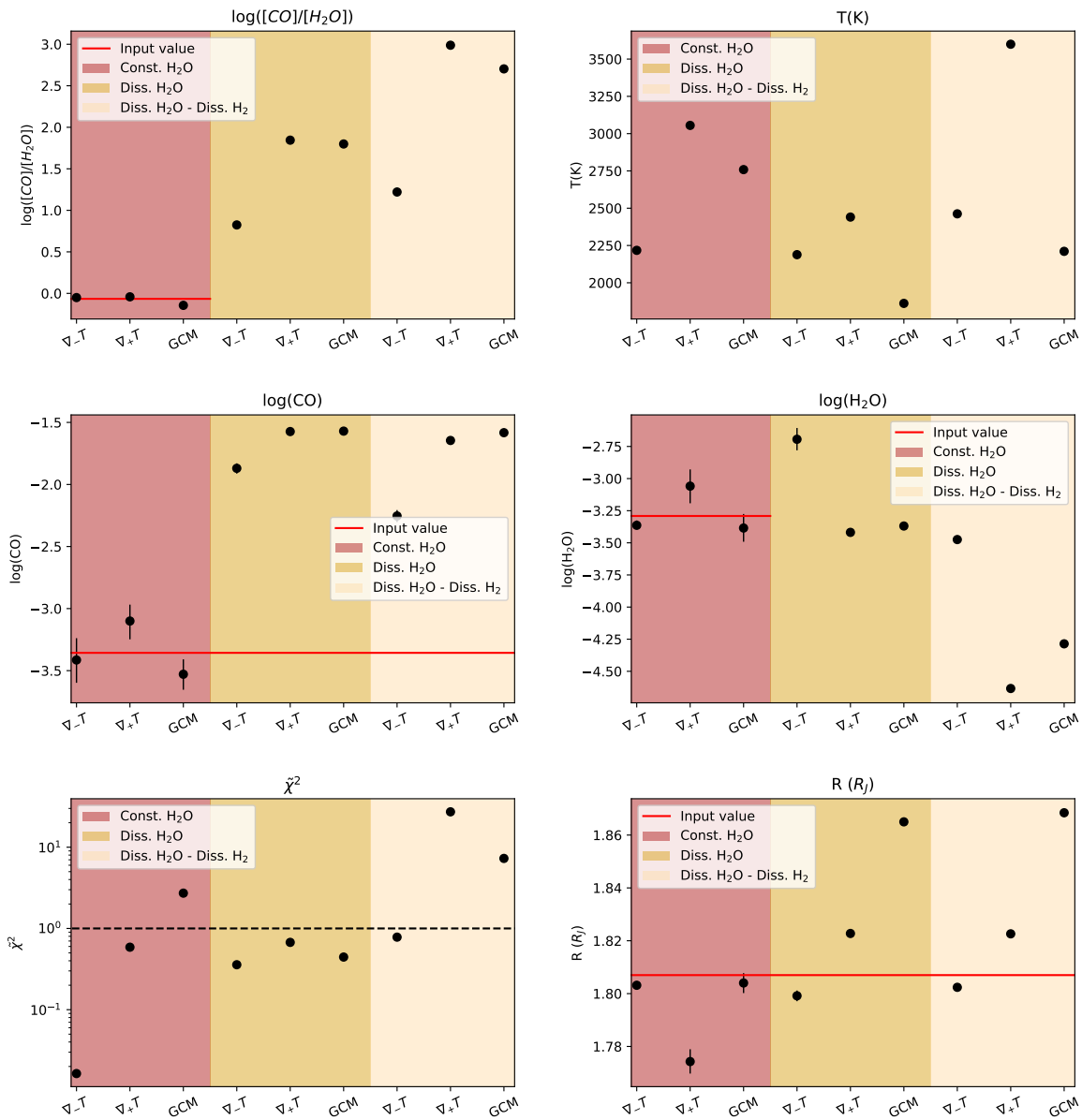


FIGURE 3.8 – Résumé des résultats du modèle d'inversion de données *TauREx* pour les simulations ∇^-T , ∇^+T et GCM. Nous avons représenté le rapport $[CO]/[H_2O]$ (en haut à gauche), la température (en haut à droite), les abondances logarithmiques du CO (milieu gauche) et de H_2O (milieu droite), le χ^2 (en bas à gauche) et le rayon planétaire (en bas à droite). Ces résultats ont été calculé avec un bruit de photon supposant un palier à 30ppms sur l'ensemble du domaine spectrale. La ligne rouge représente la valeur d'entrée de nos simulations et la ligne noire pointillée montre où $\tilde{\chi}^2=1$.

Malgré tout, ces résultats sont tous cohérents avec [Caldas et al. \(2019\)](#). Précisons cependant que le χ^2 calculé est beaucoup plus élevé pour le cas GCM que pour les cas symétriques ∇^+T et ∇^-T .

3.4.2 Dissociation thermique de H₂O avec H₂ constant

Lorsque la dissociation de l'eau est prise en compte, *TauREx* renvoie des solutions significativement différentes par rapport aux simulations chimiquement homogènes. Les distributions postérieures des inversions de données, présentées maintenant en bas de la Figure 3.9, montrent encore des solutions bien contraintes avec de faibles barres d'erreurs. Les résultats sont présentés dans les parties jaunes foncées des graphiques de la Figure 3.8.

Tout d'abord, toutes les températures inversées sont inférieures à celles trouvées dans les simulations à composition constante. Comme nous l'avons expliqué dans le chapitre 2 Section 2.1.2, *TauREx* est un modèle 1D qui n'inverse donc une seule température pour l'ensemble de l'atmosphère cherchant à minimiser l'erreur ($\tilde{\chi}^2$) entre le spectre en entrée et celui généré par *TauREx*. Rappelons qu'il est certes possible d'inverser 2 températures verticalement ([Changeat et al. 2019](#)), mais nous avons vu que les variations verticales (le long des limbes) sont faibles alors que les variations horizontales au travers de celles-ci sont extrêmes dans ce type d'atmosphère. La principale contrainte qui permet à *TauREx* d'inverser la température est l'amplitude des bandes spectrales, plus la température est élevée, plus l'amplitude de celles-ci est élevée. Or, les températures inversées ici sont plus basses parce que les caractéristiques des bandes d'absorption de l'eau proviennent d'une région plus froide de l'atmosphère. Dans le cas de la simulation GCM, la température inversée est même inférieure aux températures des limbes, suggérant que nous sondons le côté nuit de l'atmosphère.

Étant donné que la molécule de CO ne se dissocie pas, elle absorbe principalement du côté diurne, où les températures élevées conduisent à des amplitudes plus importantes des bandes d'absorption, comme expliqué dans la Section 3.3. Le spectre en transmission transporte alors des informations sur deux régions très différentes de l'atmosphère : les bandes d'absorption du CO sondent le côté jour, très chaud tandis que celles de l'eau sondent les limbes (∇^-T , ∇^+T) voir le côté nuit (GCM), bien plus froid. Or, puisque *TauREx* inverse la température correspondant à l'amplitude des bandes d'absorption de l'eau, dissociée thermiquement du côté jour, il trouve l'abondance en eau attendue à $3\text{-}\sigma$ mais surestime grandement l'abondance en CO afin d'ajuster au mieux le spectre. Par conséquent, le rapport $[\text{CO}]/[\text{H}_2\text{O}]$ est environ 100 fois plus élevé que prévu⁴. Nous notons que pour le cas conservateur ∇^-T le rapport $[\text{CO}]/[\text{H}_2\text{O}]$ est moins biaisé, environ 10 fois plus élevé que l'abondance solaire, en raison du plus petit contraste jour/nuit et de la transition plus lisse entre les deux côtés.

Pour quantifier la fiabilité des solutions données par *TauREx*, nous avons tracé les diagrammes de contribution d'absorption des solutions pour le cas GCM et les différences en ppm entre le spectre généré et le spectre inversé sur la Figure 3.10. Nous mettons en évidence ici dans quelles bandes de longueurs d'onde l'ajustement est bon ou non. En outre, le $\tilde{\chi}^2$ calculé qui est inférieur à 1 pour chaque simulation, montre un niveau de confiance statistique élevé des solutions données par *TauREx* (voir Figure 3.8).

4. Biaisé vis à vis du rapport solaire des abondances de H₂O et de CO attendu, valant environ 0.85.

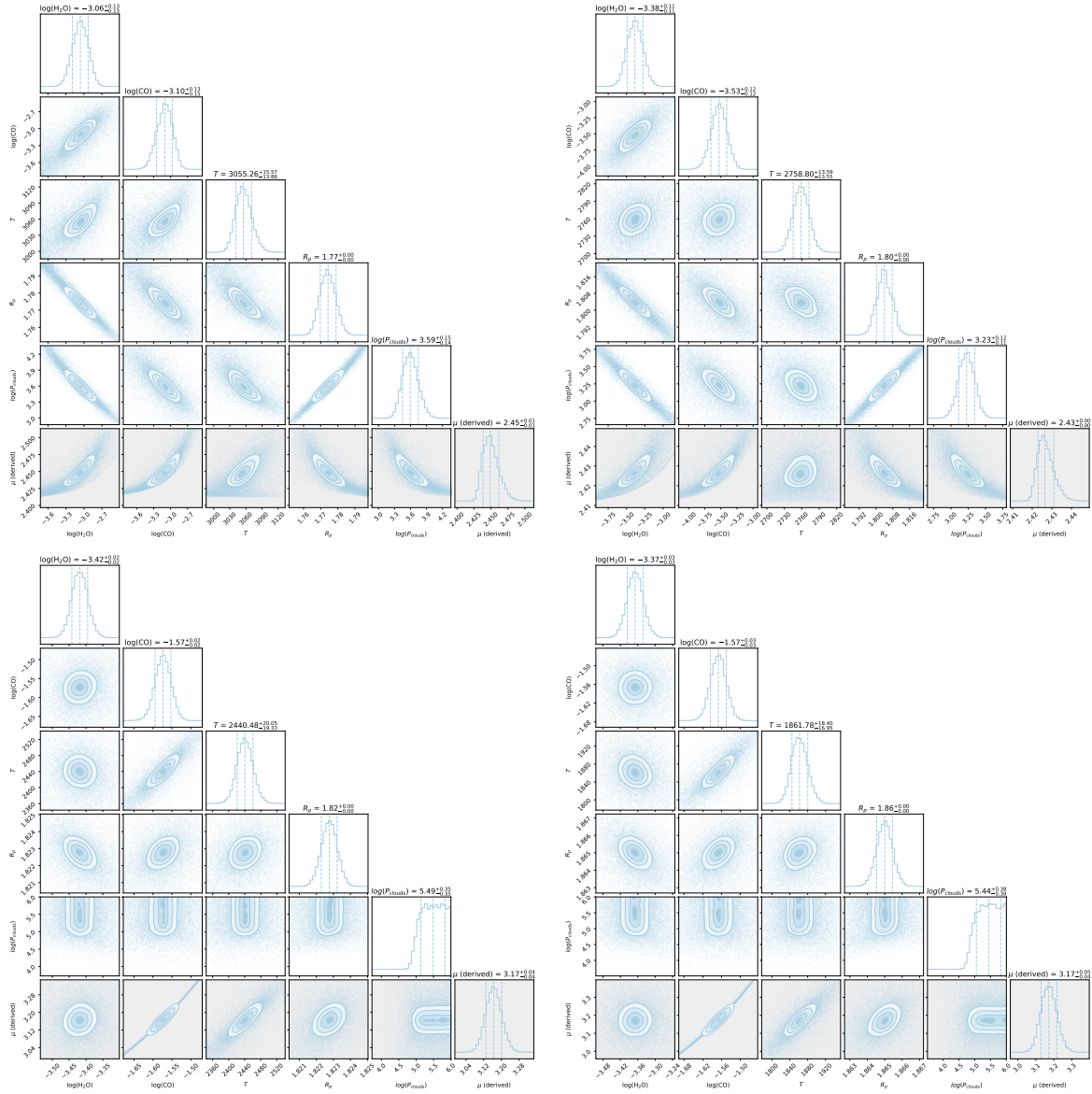


FIGURE 3.9 – Distributions postérieures de *TauREx* supposant une abondance constante en H_2 dans l’atmosphère. Sont présentés les simulations ∇^+T (gauche) et GCM (droite) faisant l’hypothèse, respectivement, d’une absence de dissociation de l’eau (haut) et de sa présence (bas). Les paramètres inversés par le modèle, au nombre de 5, sont les abondances en H_2O , CO ($\log_{10}[\text{VMR}]$), le niveau de pression des nuages en bar, la température en Kelvin ainsi que le rayon planétaire en rayon de Jupiter. Le poids moléculaire moyen de l’atmosphère est dérivé à partir de ces paramètres mais ne fait pas l’objet d’une inversion de données. Les distributions postérieures de l’ensemble des cas modélisés sont présentés dans l’annexe C.

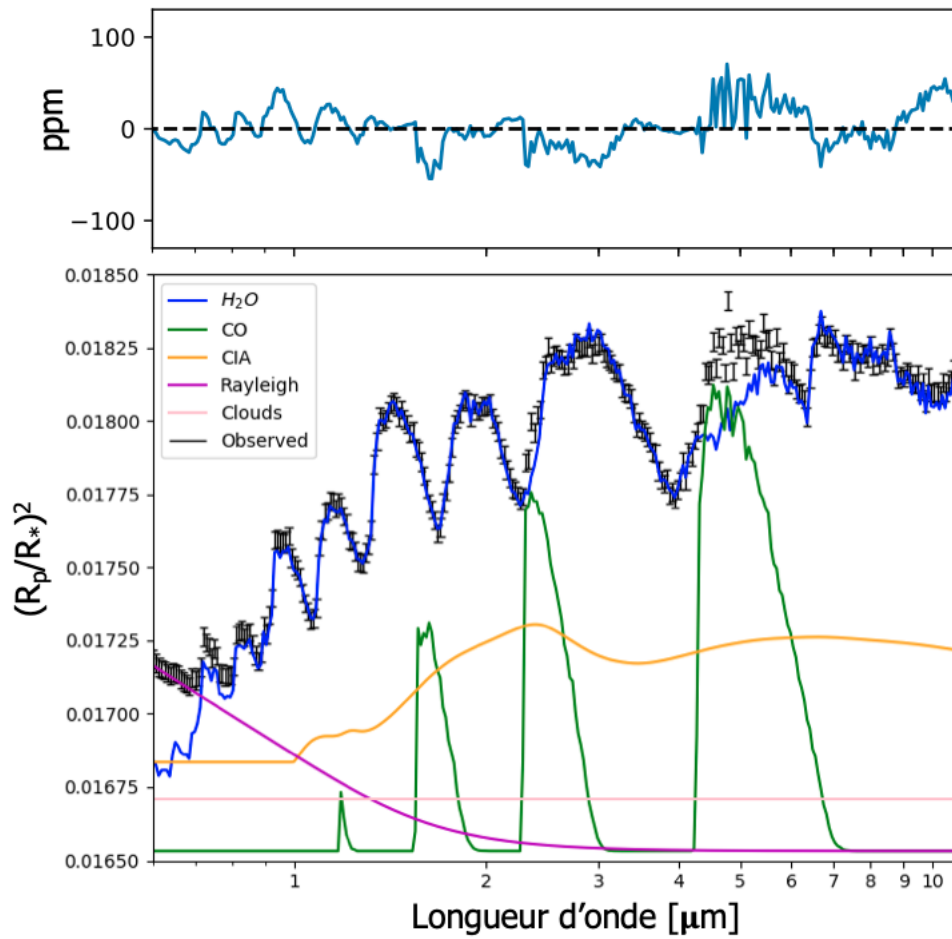


FIGURE 3.10 – Solution trouvée par *TauREx* dans le cas GCM supposant la dissociation de H_2O et H_2 constant. En bas : nous montrons la contribution au spectre en transmission inversé par *TauREx* de chaque composant, à savoir H_2O , CO, et le CIA. En haut : nous traçons la différence (en ppm) entre le spectre en entrée généré par *Pytmosph3R* et le meilleur ajustement obtenu par *TauREx*.

3.4.3 Dissociation thermique de H₂ et H₂O

Dans la Figure 3.8 nous donnons les valeurs de $\tilde{\chi}^2$ pour chaque simulation. Nous voyons que *TauREx* trouve une solution non dégénérée pour chaque simulation, bien qu'elles ne soient pas toutes valides, puisque le $\tilde{\chi}^2 \gg 1$ dans les cas ∇^+T et GCM. Dans les cas précédents où nous avons une composition constante dans toute l'atmosphère et dans le cas où seule l'eau se dissocie du côté jour, *TauREx* trouve une solution cohérente, même si elle ne converge pas nécessairement vers les paramètres d'entrée corrects. Au contraire, lorsque la dissociation de H₂ est prise en compte, *TauREx* ne trouve pas de solution appropriée pour expliquer le spectre en transmission. Comme le montre le graphique inférieur gauche de la Figure 3.8, les meilleurs $\tilde{\chi}^2$ réduits pour les modèles ∇^+T et GCM considérant la dissociation de H₂ sont respectivement autour de 30 et 8. Ainsi, un $\tilde{\chi}^2$ -test peut nous donner un signal possible qu'il se produit de la dissociation thermique de H₂ dans la planète observée. Cependant, *TauREx* parvient à trouver une solution statistiquement significative dans le cas ∇^-T , mais nous gardons à l'esprit que cette simulation est un choix conservateur. Nous pensons donc qu'une analyse d'observation JWST de Wasp-121 b par *TauREx* donnera des résultats compris entre les simulations ∇^-T et ∇^+T .

Nous notons que le modèle d'inversion de données *TauREx* n'est pas conçu pour prendre en compte la dissociation thermique de H₂. Lorsque la dissociation H₂ se produit, le rapport He/H₂ change en fonction de la pression et de la température. Le poids atmosphérique moyen peut également être inférieur à 2 uma dans les régions atmosphériques où H₂ se dissocie. Afin d'être cohérent avec l'ensemble des simulations, nous avons utilisé le même fichier de configuration pour toutes nos inversions avec *TauREx* et nous avons laissé constant le rapport He/H₂. Ce faisant, nous pourrions estimer si une atmosphère où la dissociation de H₂ ne se produit pas peut expliquer notre spectre observé ou non.

La dissociation de H₂ joue un rôle majeur sur les spectres et les résultats des extractions. Tous les résultats sont présentés dans la partie jaune clair de la Figure 3.8. Dans chaque simulation, le rapport [CO]/[H₂O] inversé est supérieur à celui calculé lorsque H₂ est constant. Comme l'abondance de CO reste constante partout, l'amplitude de ses bandes d'absorption est donc plus significative, comme expliqué dans la Section 3.3, et *TauREx* trouve le modèle le mieux adapté avec une faible abondance en H₂O et une abondance en CO élevée. Par conséquent, le rapport [CO]/[H₂O] augmente.

Dans l'analyse de la simulation GCM, la température inversée est un peu plus élevée que la température que nous trouvons lorsque H₂ ne se dissocie pas. Elle reste néanmoins suffisamment basse pour correspondre à la température du côté nuit de l'atmosphère. En effet, comme le montre la Figure 3.7, la dissociation de H₂ ne modifie que peu l'amplitude des bandes d'absorption de H₂O, car là où la dissociation thermique de H₂ se produit, celle de H₂O aussi (voir Figure 3.1.3). Ainsi, l'absorption de l'eau provient du côté nuit, plus froid, où la composition atmosphérique est dominée par H₂.

Pour les autres paramètres inversés, nous restons cohérents avec la solution trouvée lorsque H₂ demeure constant. Rappelons que la dissociation de H₂ affecte le spectre de transmission principalement de deux manières :

- Elle augmente la hauteur d'échelle du côté jour de l'atmosphère, ce qui implique des amplitudes plus fortes des bandes d'absorption pour les espèces qui sont présentes du côté jour, comme CO. Nous ne considérons cet effet que dans la simulation ∇^+T ;

- Elle affecte également de manière significative les propriétés thermochimiques de l'atmosphère en raison de la recombinaison de H_2 du côté nuit redistribuant l'énergie, chauffant le côté nuit et refroidissant le côté jour (Bell and Cowan 2018; Tan and Komacek 2019). Nous avons pris en compte ces deux effets dans la simulation ∇^-T .

La dissociation de H_2 entraîne également une diminution des collisions H_2-H_2 et $He-H_2$, donc une absorption des continua moins intense. Cependant, dans les simulations ∇^+T , *TauREx* ne parvient pas à converger vers une solution raisonnable. *TauREx* ne peut pas expliquer la distorsion des raies d'absorption en utilisant un modèle atmosphérique 1D et a tendance à augmenter la température bien au-dessus de la température d'équilibre de la planète, atteignant la limite supérieure de la gamme de température que nous avons choisi, soit 3600 K.

Lorsque H_2 et H_2O se dissocient thermiquement, il n'est alors pas possible de trouver un modèle atmosphérique 1D qui corresponde au spectre d'entrée quel que soit le cas étudié.

3.4.4 Que retenir des biais mis en évidence ?

Nos résultats montrent qu'un modèle 1D est toujours en mesure de trouver une solution statistiquement cohérente - sauf dans le cas où la dissociation de H_2 se produit - bien qu'il ne converge pas toujours vers la solution d'entrée correcte.

Caldas et al. (2019) ont montré que les contrastes de température jour-nuit conduisent à un biais dans les températures inversées (vers celle du côté jour) même lorsque la composition chimique est uniforme. Dans ce travail, nous étendons cela en montrant que lorsque nous prenons en compte la dissociation de H_2O , nous avons à la fois des biais de composition et de température.

Bien qu'un code d'inversion puisse utiliser un modèle atmosphérique 1D pour détecter la présence d'une espèce chimique particulière dans une atmosphère avec une structure 3D complexe, mesurer son abondance est plus difficile. Lorsque la température et la composition chimique varient à travers les limbes, l'inversion 1D ne peut pas trouver les abondances moléculaires correctes : les meilleurs paramètres d'ajustement peuvent être de plusieurs ordres de grandeur différents de ceux d'entrée, comme le montre la Figure 3.8.

Les rapports élémentaires (tels que C/O, C/N, etc.) sont des paramètres clés déterminant les processus chimiques se déroulant dans les atmosphères planétaires (Line et al. 2013; Oreshenko et al. 2017). À haute température, Madhusudhan (2012); Espinoza et al. (2017) ont montré que le rapport C/O joue un rôle majeur dans la chimie atmosphérique et les abondances non solaires pourraient expliquer les observations de 6 Jupiters chauds (XO-1b, CoRoT-2b, WASP-14b, WASP-19b, WASP-33 b et WASP-12b). Cependant, ces ratios élémentaires ne peuvent pas être mesurés directement, et nous devons compter sur la mesure de l'abondance de toutes les molécules portant les éléments considérés. Dans le cas des atmosphères chaudes dominées par l'hydrogène considérées ici, H_2O et CO sont les principaux vecteurs de carbone et d'oxygène, de sorte que le rapport $[CO]/[H_2O]$ devrait généralement fournir des contraintes raisonnables sur le rapport C/O. Notre étude montre que l'utilisation du rapport $[CO]/[H_2O]$ pour contraindre le rapport C/O lorsque la dissociation thermique se produit n'est pas du tout fiable, et

que le fait de trouver un rapport $[\text{CO}]/[\text{H}_2\text{O}] \gg 1$ doit être considéré comme un indice fort de la présence d'hétérogénéités chimiques au sein de l'atmosphère. Nous notons que le même diagnostic pourrait être appliqué à d'autres espèces telles que TiO ou VO en calculant le rapport $[\text{CO}]/[\text{TiO}]$ ou $[\text{CO}]/[\text{VO}]$ inversé par *TauREx*.

Le fait de retrouver des biais similaires entre le modèle GCM et les modèles plus idéalisés de Wasp-121 b où la température est constante verticalement et symétrique autour du point sub-stellaire révèle que, pour les Jupiters ultra chauds au moins, l'effet des hétérogénéités thermique et de composition au travers des limbes dominant à la fois sur les effets verticaux ainsi que sur ceux le long des limbes. A une configuration atmosphérique fixée, c'est-à-dire en présence ou non de dissociation de H_2 et/ou de H_2O , correspondant aux zones rouge, jaune foncé et jaune clair de la Figure 3.8, le rapport $[\text{CO}]/[\text{H}_2\text{O}]$ inversé pour les simulations ∇^+T , ∇^-T et GCM est presque le même. Ce résultat montre que les cas idéalisés parviennent à capter les informations essentielles et majeures de la simulation GCM. Le point le plus important est que le rapport $[\text{CO}]/[\text{H}_2\text{O}]$ inversé atteint sa valeur minimale lorsque la dissociation moléculaire ne se produit pas, puis augmente d'un facteur 10-100 lorsque H_2O seule se dissocie, et d'un facteur 25-1000 lorsque H_2 se dissocie également, quels que soient les détails de la structure verticale des contrastes thermiques équateur-pôle. Cette forte variation dans le rapport $[\text{CO}]/[\text{H}_2\text{O}]$ inversé est due à nos simulations idéalisées ∇^+T et ∇^-T qui représentent des cas extrêmes, encadrant donc les biais.

Une caractéristique générale de nos résultats est que, dans tous les cas étudiés, nous ne parvenons pas à converger vers l'ensemble des paramètres d'entrée. Lorsque nous étudions un spectre en transmission extrait d'une atmosphère 3D, le fait même de simuler un spectre avec un rapport signal sur bruit élevé ne nous permet pas de connaître la distribution chimique réelle des éléments avec un code d'inversion de données qui utilise une approximation atmosphérique 1D.

Un deuxième aspect est qu'avec un test $\tilde{\chi}^2$, il est possible de comprendre s'il existe un phénomène physique plus complexe dans l'atmosphère étudiée. Dans notre cas, nous voyons qu'un $\tilde{\chi}^2 > 1$ est dû à la présence d'une dissociation de H_2 dans notre atmosphère. De ce point de vue, un test du $\tilde{\chi}^2$ peut révéler s'il existe un phénomène physique important que nous ne considérons pas.

À noter qu'une limitation de notre étude concerne les composants chimiques de l'atmosphère. Nous ne considérons que deux espèces absorbantes, CO et H_2O , mais nous savons que d'autres espèces ont été détectées dans Wasp-121 b comme le TiO, le VO ou le FeH.

3.5 Comparaison avec les observations

Nous avons jusqu'à présent montré que les hétérogénéités chimiques et thermiques dans les atmosphères de planètes très chaudes vont créer des biais au sein même des spectres de transmission que les modèles d'inversions de données 1D seront incapables de démêler. Néanmoins nous avons effectué cette étude sur des simulations numériques, en générant des observations sur une gamme spectrale large, simulant des observations JWST. Mais qu'en est-il des observations réelles disponibles actuellement ? Existe-t-il des indices de ces structures 3D dans les données HST, Spitzer, etc ?

3.5.1 Wasp-121 b

Nous avons comparé le spectre en transmission de Wasp-121 b observé par l'instrument WFC3 de HST (Evans et al. 2016) avec deux spectres en transmission simulés :

1. Un modèle développé par Parmentier et al. (2018) qui extraient les colonnes au terminateur de leur simulation GCM de Wasp-121 b pour calculer le spectre de transmission négligeant donc les effets 3D sur le spectre.
2. Notre modèle de génération de spectre *Pytmosph3R*, utilisant un modèle de transfert radiatif plus complexe qui prend en compte la géométrie 3D de l'atmosphère, se basant sur leur simulation GCM.

Afin de pouvoir comparer les spectres entre eux, nous avons voulu simuler la même atmosphère de Wasp-121 b que celle décrite dans Parmentier et al. (2018), pour s'assurer que les différences observées puissent être associées uniquement à la prise en compte des effets 3D, c'est à dire à l'utilisation du modèle *Pytmosph3R*. Pour rappel, les paramètres de Wasp-121 b et de son étoile sont regroupés dans la Table 3.1. Ainsi, nous avons simulé une atmosphère comprenant He, H₂, H₂O, CO, TiO, VO, Na, K et H⁻ en utilisant l'ajustement analytique pour la dissociation thermique des espèces décrit dans Parmentier et al. (2018). Il ne manque que la molécule de FeH pour simuler une atmosphère identique à Parmentier et al. (2018), mais il apparaît que cette espèce contribuera moins dans cette partie du spectre car nous supposons une composition solaire. Les résultats de ces comparaisons sont montrés dans la Figure 3.11.

Afin d'ajuster les données HST/WFC3, Parmentier et al. (2018) suggèrent d'ajouter des nuages de CaTiO₃ dans l'atmosphère pour augmenter l'absorption à 1.25 μm et remplir la région où l'eau absorbe peu. En revanche, d'après notre analyse, nous montrons que le fait de considérer une structure 3D sans nuage peut expliquer de manière équivalente l'amplitude de l'eau dans la bande passante de WFC3 (ligne bleue épaisse) même si notre spectre ne correspond pas non plus parfaitement aux données. Les effets 3D peuvent en effet déformer la forme du spectre en transmission, la raison étant cependant bien différente. Au lieu de combler la fenêtre d'absorption à 1.25 μm, nous réduisons la force des bandes d'absorption de l'eau à 1.15 et à 1.4 μm due à l'élimination de l'eau du côté jour de l'atmosphère par thermo-dissociation (voir Section 3.3). La raison expliquant que les deux modèles peuvent avoir la même profondeur de transit observée à ces deux longueurs d'onde dans 3.11 est simplement dû au fait que le rayon à la base du modèle reste un paramètre libre nous permettant de décaler l'ensemble du spectre verticalement. Nous précisons qu'à l'exception de ce paramètre, il n'y a aucun ajustement des abondances ou de la structure thermique dans notre approche.

Nous avons ainsi montré qu'en raison de la dissociation de l'eau, les effets 3D n'étaient pas négligeables pour des atmosphères aussi chaudes que la planète Wasp-121 b, même si les nuages restent une hypothèse raisonnable pour ajuster les données. Ces résultats suggèrent que les hétérogénéités chimiques et thermiques 3D présentes dans les spectres de transmission et les nuages peuvent être combinées pour expliquer la réduction de la fenêtre d'absorption de l'eau. Cependant, cela dépend de l'altitude à laquelle les nuages se situent et où ils se trouvent dans l'atmosphère car même avec la présence de nuages, les rayons lumineux pourraient ne pas les sonder en raison de la structure 3D de l'atmosphère.

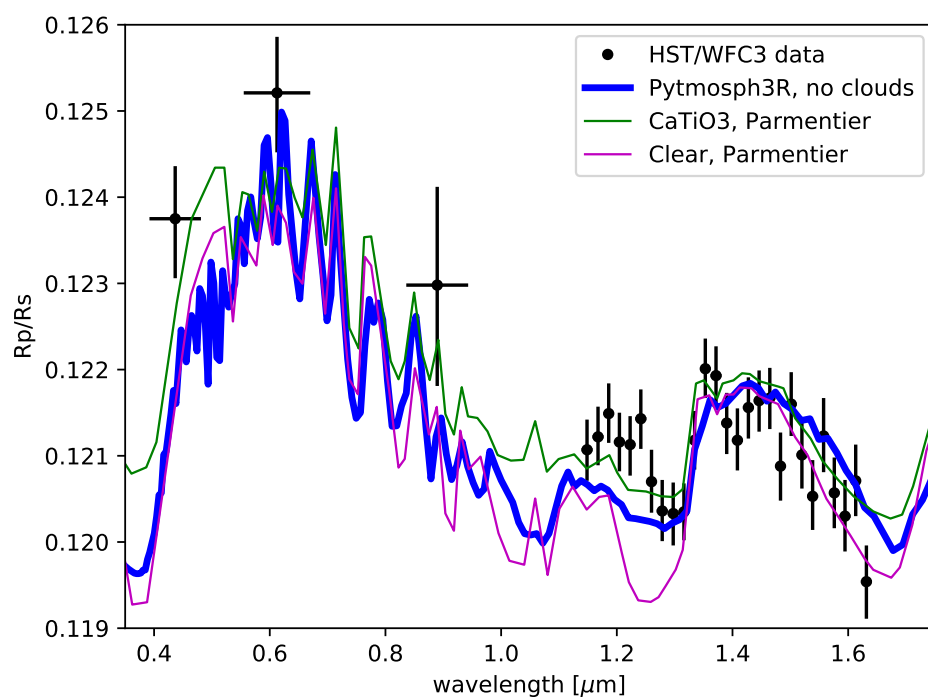


FIGURE 3.11 – Spectre en transmission de Wasp-121 b tracés à une résolution $R=100$ pour une atmosphère composée de He, H_2 , H_2O , CO, TiO, VO, Na, K et H^- en utilisant l’ajustement analytique pour la dissociation thermique des espèces décrit dans [Parmentier et al. \(2018\)](#) (Bleu). Nous avons comparé ce modèle avec des données HST/WFC3 extraites de [Evans et al. \(2016\)](#) (point noir) et avec deux modèles de [Parmentier et al. \(2018\)](#), le premier sans nuages (magenta) et le second avec des nuages de $CaTiO_3$ (vert).

Paramètres stellaires	
Étoile	Wasp-33
Type spectral	A5
Température effective [K]	7430^{+100}_{-100}
[Fe/H]	-
Masse [M_{\odot}]	$1.495^{+0.031}_{-0.031}$
Rayon [R_{\odot}]	$1.444^{+0.034}_{-0.034}$
Paramètres de la planète	
Planète	Wasp-33 b
Période [jour]	$1.219870^{+0.000001}_{-0.000001}$
Inclination [deg]	$86.63^{+0.03}_{-0.03}$
Masse [M_J]	$2.093^{+0.139}_{-0.139}$
Rayon [R_J]	$1.593^{+0.074}_{-0.074}$
Température d'équilibre [K]	2781^{+41}_{-41}
Référence	Chakrabarty and Sengupta (2019a)

TABLE 3.3 – Paramètres du Jupiter ultra chauds Wasp-33 b et de son étoile.

3.5.2 Wasp-33 b

Puisqu'il existe encore assez peu de données en transit sur des exoplanètes de type Jupiter ultra chaud, nous avons fait une demande d'observations au télescope spatial HST/WFC3 de Wasp-33 b⁵, une exoplanète dont la température d'équilibre est estimée à environ 2750 K ([Turner et al. 2016](#); [Chakrabarty and Sengupta 2019b](#)). Ces observations viendraient s'ajouter à l'analyse du spectre de Wasp-121 b, plus froide, dont nous avons déjà mis en évidence la présence observable d'effets 3D. Les paramètres de Wasp-33 b et de son étoile sont regroupés dans la Table 3.3.

Nous avons modélisé l'atmosphère de Wasp-33 b à l'aide du même modèle GCM utilisé pour modéliser Wasp-121 b (SPARC/MITgcm, [Showman et al. \(2009\)](#); [Parmentier et al. \(2018\)](#)) et nous obtenons les cartes en température et en abondance de H₂O de la Figure 3.12. Bien que nous remarquons alors une similarité entre les structures 3D de Wasp-121 b et Wasp-33 b (voir carte agrandies Figure 3.12), il apparait deux différences majeures :

- Wasp-33 b est plus chaude que Wasp-121 b, avec des températures maximales atteignant environ 3800 K, d'où l'absence de H₂O par dissociation thermique à des altitudes plus profondes.
- La masse de Wasp-33 b est bien plus élevée que celle de Wasp-121 b (respectivement $2.093 M_J$ et $1.183 M_J$), pour un rayon un peu plus faible (respectivement $1.593 R_J$ et $1.8 R_J$) impliquant alors une différence de gravité d'un facteur 2 environ entre les deux planètes.

Par conséquent, bien que plus chaude, l'atmosphère de Wasp-33 b se retrouve moins étendue du côté jour par rapport à Wasp-121 b.

Son atmosphère reste malgré tout suffisamment enflée pour s'attendre à observer des effets 3D dans le spectre en transmission, comme le montre la Figure 3.13 où nous avons simulé des observations de Wasp-33 b sur la gamme de longueur d'onde de HST/WFC3 faisant l'hypothèse ou non de la dissociation

5. Cette demande a malheureusement été rejetée, la pression sur les demandes d'observations HST étant très forte.

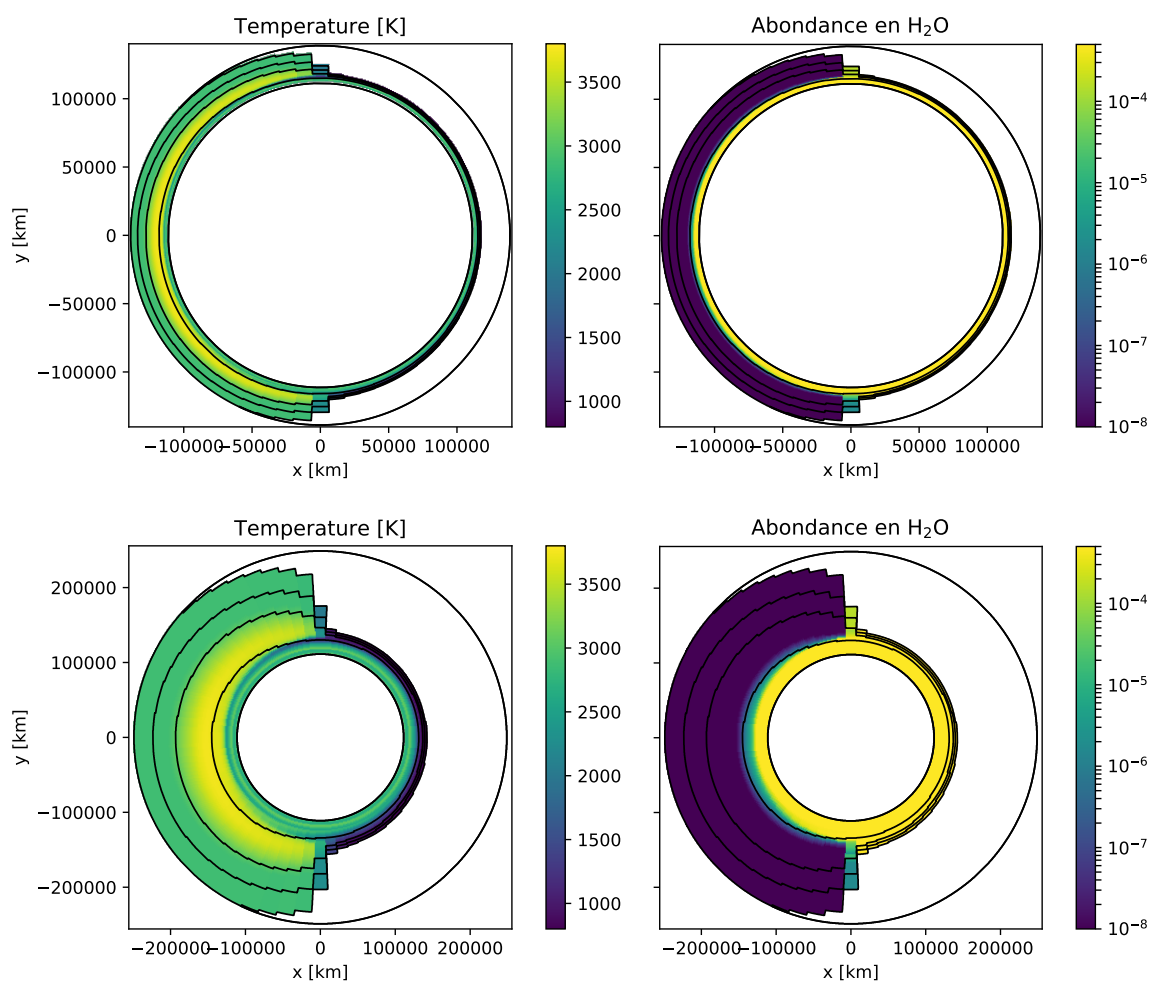


FIGURE 3.12 – Simulation GCM de Wasp-33 b prenant en compte la dissociation de H₂. Sont représentées la température (gauche) et l’abondance en H₂O (droite) selon la coupe équatoriale. Le code couleur pour les cartes d’abondance en H₂O indique le VMR de 5.10⁻⁴ à 10⁻⁸. En partant du centre jusqu’à l’extérieur, les lignes noires indiquent respectivement les niveaux de pressions à 1, 434.10⁷, 10³, 1, 10⁻², et 10⁻⁴ Pa. Le rayon de la planète ainsi que celui de l’atmosphère sont tracés à l’échelle (haut) et agrandis 5 fois (bas).

thermique de l'eau et du H_2 dans l'atmosphère. Suivant la même méthode d'analyse que l'étude présentée sur Wasp-121 b, nous avons inversé les données à l'aide du modèle *TauREx*. Les résultats présentés Figure 3.13 montrent que la dissociation thermique de l'eau affecte significativement l'allure du spectre pour donner des résultats différents par une analyse *TauREx*. La température inversée pour la simulation prenant en compte la dissociation thermique de l'eau correspond à des températures du côté nuit de la simulation GCM démontrant que notre technique sonde l'hémisphère nuit de la planète. Dans le cas d'une absence de dissociation thermique, où l'abondance en eau reste constante partout, c'est le côté jour qui domine le spectre à toutes les longueurs d'onde à cause de l'échelle de hauteur qui est plus grande. Cette comparaison démontre que la dissociation thermique des molécules d'eau nous permet de sonder directement la température du côté nuit de Wasp-33 b. En revanche la dissociation thermique de H_2 n'apporte aucune contrainte sur le spectre dans cette gamme de longueur d'onde car les résultats avec et sans dissociation de H_2 sont dégénérés. Précisons enfin que nous sondons une bande spectrale où l'eau reste le principal absorbant dans ce type d'atmosphère (en considérant ce que nous connaissons aujourd'hui de leur composition chimique), nous nous assurons alors d'une mesure probablement peu biaisée de l'abondance de l'eau.

3.6 Limites et perspectives

La structure 3D des atmosphères planétaires joue un rôle majeur sur l'allure des spectres en transmission, plus particulièrement pour les Jupiters ultra chauds. Ces planètes en rotation synchrone autour de leur étoile hôte possèdent un côté jour dilaté dû conjointement à des températures élevées et à la dissociation thermique des espèces qui augmentent la hauteur d'échelle de l'atmosphère du côté jour. Par conséquent, le spectre en transit est affecté par une large région étendue autour du terminateur, qui couvre à la fois le côté jour et le côté nuit de l'atmosphère.

La lumière de l'étoile sonde une région atmosphérique qui s'étend de manière significative au travers des limbes, en fonction de la composition chimique et de la longueur d'onde. Si la température n'est pas assez élevée pour dissocier certaines molécules, telles que CO, elles resteront partout dans l'atmosphère. Ainsi, l'amplitude de leurs bandes d'absorption dans le spectre en transmission sera plus importante car elles proviennent des régions chaudes du côté jour de l'atmosphère. Par ailleurs, les molécules qui se dissocient plus facilement, comme H_2O ou H_2 , ne seront présentes que du côté nuit de l'atmosphère, bien plus froid. Par conséquent, l'amplitude des bandes d'absorption de ces molécules dans le spectre en transit sera moins prononcée, car elles proviennent de régions plus froides du côté nuit de l'atmosphère. Un code d'inversion de données 1D, qui essaie d'adapter le spectre à une atmosphère isotherme, ne peut alors pas révéler les informations d'une distribution de température plus complexe et inversera en outre des abondances moléculaires biaisées. Nous démontrons notamment que les inversions de données 1D des Jupiters ultra chauds sont biaisées vers un rapport $[CO]/[H_2O]$ élevé, plus ce rapport est élevé, plus les hétérogénéités chimiques sont fortes. Par exemple, le code d'inversion de données *TauREx* trouve la température planétaire en fonction de la force des principales caractéristiques spectrales. Étant donné que l'amplitude des bandes d'absorption est assez grande en raison de la présence

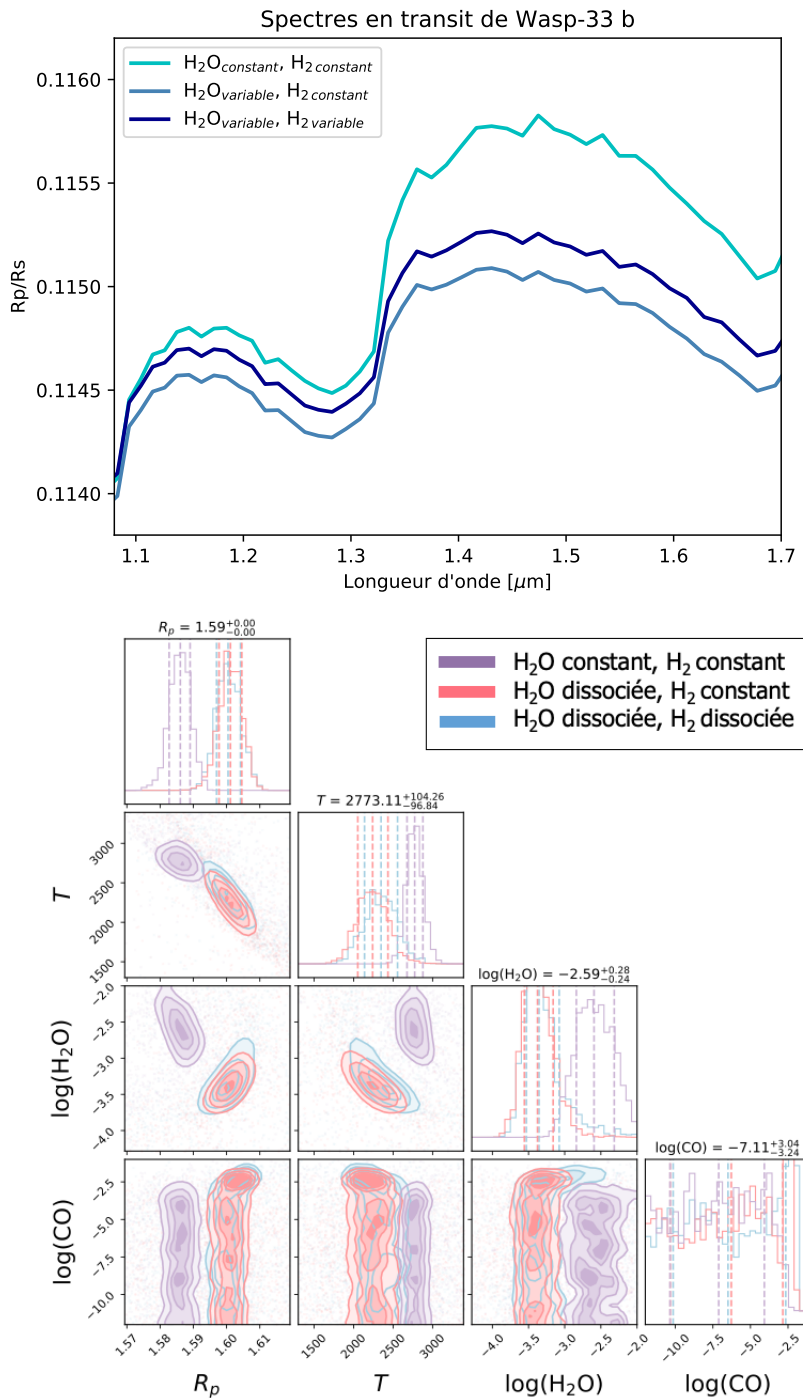


FIGURE 3.13 – Haut : Spectres en transmission de Wasp-33 b générés par *Pytmosph3R* pour une simulation sans dissociation thermique (cyan), considérant uniquement la dissociation de H₂O (bleu) et prenant en compte à la fois la dissociation de H₂O et H₂ (bleu foncé). L’atmosphère simulée est composée de H₂, He, H₂O et CO. Bas : Distributions postérieures obtenues à l’aide du code d’inversion de données *TauREx*. Nous supposons une atmosphère isotherme pour trois scénarii : un scénario de référence avec une abondance d’eau et de H₂ constante quelles que soient la pression et la température (bleu), le modèle prenant en compte la dissociation de H₂O uniquement (rouge) et enfin le modèle nominal ou H₂O et H₂ peuvent se dissocier (violet). Nous faisons varier 4 paramètres : les abondances en H₂O et CO, la température (K) et le rayon planétaire (R_p).

des molécules du côté jour, chaud, de la planète, il est naturel qu'un code d'inversion converge vers des températures plus chaudes. En revanche, en cas de dissociation thermique de H_2O , le seul gaz présent du côté jour est le CO. L'absorption de l'eau est alors due à l'eau présente du côté nuit et froid de la planète. Par conséquent, il est logique d'inverser une température plus basse dans le cas où l'eau se dissocie du côté jour.

Nous avons démontré qu'une structure atmosphérique tridimensionnelle induit des distorsions spectrales impossibles à expliquer avec un code d'inversion de données 1D. Nous démontrons également que les caractéristiques des bandes spectrales de l'eau peuvent être fortement réduites par la présence d'hétérogénéités moléculaires en raison d'un contraste de température jour/nuit important. Par exemple, nous montrons qu'une géométrie 3D peut expliquer certaines des caractéristiques observées dans la gamme de longueurs d'onde HST/WFC3 de Wasp-121 b, même en l'absence de brumes ou de nuages, seulement grâce à la dissociation thermique de l'eau du côté jour de l'atmosphère. Cependant, nos travaux n'excluent pas la présence de nuages dans les atmosphères des Jupiters ultra chauds, les effets 3D étant une contribution complémentaire pour combler les fenêtres d'absorption de l'eau dans les données. Ce basant sur ces résultats et sur notre étude complète des biais, nous montrons également que l'observation de Wasp-33 b à l'aide de HST/WFC3 nous permettrait d'accéder à des informations du côté nuit de son atmosphère, notamment la température et l'abondance en eau du côté nuit où la dissociation thermique n'a pas lieu. Grâce à nos résultats, nous pensons que Wasp-121 b et Wasp-33 b serait donc de bonnes cibles pour de futures observations.

Nous proposons que les effets structurels 3D soient dès à présent pris en compte lorsque nous étudions des Jupiters chauds et ultra chauds pour éviter des conclusions erronées. De plus, les futures missions spatiales telles que JWST (Beichman et al. 2014) et Ariel (Tinetti et al. 2018) vont sonder une très large gamme de longueurs d'onde (de 0.6 à 28 μm pour JWST) mettant en évidence des effets 3D dans d'autres parties du spectre n'ayant pas encore été observés à ce jour.

Après l'analyse d'une atmosphère exoplanétaire avec un outil d'inversion de données 1D, nous avons établi qu'un test χ^2 sur ces modèles 1D peut prévenir que d'éventuels effets 3D affectent le spectre, non pris en compte par le modèle 1D, tel que les effets induits par la structure tridimensionnelle de l'atmosphère exoplanétaire. Dans de tels cas, une approche à l'aide d'un code d'inversion 2D peut être justifiée même s'il reste à savoir si le spectre contient suffisamment d'informations pour contraindre réellement une telle approche 2D.

Enfin, il serait utile d'établir une borne à partir de laquelle ces biais peuvent se manifester dans les spectres en transmission, car si nous savons qu'ils sont présents dans les Jupiters ultra chauds, nous n'avons pas établi de limite basse à partir de laquelle ces effets peuvent être négligés. Étant donné que nous ne disposons pas encore des données d'observation pour une telle étude, nous suggérons de travailler à l'aide de modèles de climat GCM 3D. Il sera alors possible de modéliser des atmosphères allant des Jupiters ultra chauds jusqu'au Jupiters "tièdes" et de voir quand ces effets structurels 3D deviennent négligeables et dans quelles conditions.

Chapitre 4

Étude de la limite des impacts des effets tridimensionnels sur les modèles d'inversions 1D

Sommaire

4.1	Vers des Jupiters de moins en moins chauds	93
4.1.1	Objectifs de cette étude	93
4.1.2	Mise en place d'une expérience numérique	93
4.2	Simulations numériques GCM 3D	95
4.2.1	Modèles avec inversion thermique des profils T-P côté jour	95
4.2.2	Modèles avec profils T-P sans inversion thermique du côté jour	103
4.3	Inversion de données <i>TauREx</i>	107
4.3.1	Inversion de données isotherme	107
4.3.2	Inversion de données avec profil vertical	110
4.4	Bilan global des effets 3D sur les inversions de données 1D	116
4.4.1	Effets verticaux	116
4.4.2	Effets horizontaux le long des limbes	117
4.4.3	Effets horizontaux au travers des limbes	118

4.1 Vers des Jupiters de moins en moins chauds

4.1.1 Objectifs de cette étude

Nous avons établi dans le chapitre précédant que des biais importants sont mis en évidence dans les résultats des modèles d'inversions de données tel que *TauREx*, dus à de fortes hétérogénéités chimico-thermiques présentes au sein des atmosphères de Jupiters ultra chauds.

Il se trouve que la forte dichotomie jour-nuit opérant dans les atmosphères de Jupiters ultra chauds s'amenuise sur les planètes plus froides. En effet, comme nous l'avons expliqué en Section 1.2 du chapitre 2, les atmosphères de Jupiters chauds sont homogénéisées par la dynamique des vents et les ondes de gravité redistribuant ainsi l'énergie reçue du côté jour vers le côté nuit. Par ailleurs, la diminution de la température de l'atmosphère diminue aussi la quantité de molécules dissociées thermiquement, rendant ainsi plus faible les biais produits par ce phénomène physique.

L'objectif principal de ce chapitre est alors d'analyser l'évolution des biais mis en évidence auparavant, appliqués à des planètes de moins en moins chaudes, c'est à dire en partant des Jupiters ultra chauds jusqu'aux Jupiters chauds. En effet, il sera utile de connaître le régime de validité des modèles d'inversions 1D, et de savoir dans quelles mesures les paramètres inversés par ces modèles sont pertinents ou non. Une telle étude permettra donc d'établir à partir de quand les effets 3D commencent à devoir être pris en compte pour éviter de biaiser les résultats des modèles d'inversion de données.

En parallèle, l'analyse de l'évolution des biais 3D selon la température d'équilibre de la planète sera un moyen de dé-corréler et de hiérarchiser l'impact des effets verticaux, horizontaux le long des limbes (est-ouest) et horizontaux au travers des limbes (jour-nuit) sur les spectres en transmission. Nous avons démontré que les effets horizontaux jour-nuit au travers des limbes dominent l'allure des spectres en transmission des Jupiters ultra chauds, il sera donc intéressant de mettre en évidence la limite de cet effet lorsque l'on étudie des planètes moins chaudes.

Pour parvenir à ces objectifs, nous avons imaginé une expérience numérique à l'aide de simulations GCM 3D nous permettant de couvrir une gamme suffisamment large d'exoplanètes chaudes et ultra chaudes. Nous avons opté pour cette méthode expérimentale numérique car d'une part les données observationnelles actuelles ne sont pas suffisantes notamment en terme de couverture spectrale pour mener une étude concluante, et d'autre part parce qu'une expérience numérique permet de connaître et de contrôler avec précisions les données d'entrées et les sorties et donc d'établir plus clairement les liens de causes à effets des résultats obtenus.

4.1.2 Mise en place d'une expérience numérique

L'expérience numérique à laquelle nous avons pensée est relativement simple bien qu'elle se base sur des modèles numériques très sophistiqués. Nous avons obtenus des simulations numériques GCM 3D calculées pour des planètes dont la température d'équilibre va de 1000 K à 2100 K. Ces simulations numériques ont été calculés à l'aide du GCM SPARC/MIT, déjà présenté en Section 3.2.2 du chapitre 3. La pression dans notre modèle varie de 200 bar à 2 μ bar découpée en 53 couches. Nous utilisons une

résolution de 64 cellules en longitude et 32 cellules en latitude. Le transfert radiatif est géré avec l'approximation à deux faisceaux (Marley and McKay 1999) avec des opacités traitées utilisant 8 coefficients de k -corrélées (Goody and Yung 1989) à travers chacun des 11 bins en longueur d'onde (Kataria et al. 2013). Afin de pouvoir comparer au mieux toutes les simulations, elles ont été calculées avec les mêmes caractéristiques planétaires et stellaires, à savoir :

- $T_* = T_S$
- $R_* = R_S$
- $R_p = R_J$
- $M_p = 0.386 M_J$
- Gravité de surface : $g = 10 \text{ m.s}^{-2}$
- $\frac{H_e}{H_2} = 0.25885$
- Métallicité solaire

Ainsi, chaque simulation possède les mêmes caractéristiques globales, où seule la composition chimique et la température d'équilibre vont changer. Cela permet de mieux isoler les différents effets mis en évidence, et d'éviter les dégénérescences lors de l'interprétation des résultats.

Comme nous l'avons vu dans les précédents chapitres, la forte dichotomie jour–nuit présente au sein des Jupiters ultra chauds est due d'une part à l'insolation extrême reçue par ces atmosphères, mais surtout à la présence d'absorbants dans le proche UV–visible–IR tels que le TiO et le VO qui induisent un réchauffement de la stratosphère et donc une inversion thermique dans ces atmosphères. Cependant, nous avons aussi vu que ces molécules peuvent se retrouver piéger dans des pièges froids (Spiegel et al. 2009a), notamment pour les planètes moins chaudes, impliquant leur absence du côté jour de la planète. Par conséquent, s'il est raisonnable de simuler des inversions thermiques dans les atmosphères les plus chaudes, il est plus probable que ce type de profils ne prenne plus place dans les atmosphères de Jupiters plus froids. Nous avons ainsi décidé, dans un souci de cohérence des résultats, de simuler des planètes avec et sans TiO et VO dans le modèle GCM puisque c'est la présence de ces espèces dans l'atmosphère qui va déterminer la présence ou non d'une inversion thermique. Nous avons donc deux jeux de données de simulations, l'un présentant des planètes avec une inversion thermique et l'autre avec des planètes sans inversion thermique. Lorsque nous n'avons pas d'inversion thermique (absence de TiO et VO dans les modèles GCM) nous avons 12 simulations, pour des températures d'équilibre allant de 1000 K à 2100 K par pas de 100 K. Dans le cas avec inversion thermique (et donc avec présence de TiO et VO dans les modèles GCM) nous avons 8 simulations, pour des températures d'équilibre allant de 1400 K à 2100 K par pas de 100 K. La présence de TiO et de VO dans l'atmosphère nécessite en effet des températures élevées, sinon ces espèces sont condensées et non sous forme gazeuse, d'où des simulations commençant à partir d'une température d'équilibre de 1400 K.

Pour chaque simulation décrite ci-dessus, nous générons un spectre en transmission 3D avec *Pytmosph3R* (Caldas et al. 2019). Bien que certaines simulations GCM ont été générées à partir d'une atmosphère contenant du TiO et du VO (celles avec inversion thermique), nous faisons l'hypothèse d'une atmosphère uniquement composée de He, H₂, H₂O, et CO pour la génération des spectres en transmission. Il s'agit de la même hypothèse déjà formulée dans le chapitre 3, toujours afin d'isoler au mieux les causes des biais observés. Ensuite, nous utilisons le modèle d'inversion de données *TauREx* pour voir à

quel point un modèle 1D est fiable pour analyser de telles atmosphères. Contrairement à ce qui a été fait dans l'analyse de Wasp-121 b, nous montrerons les résultats d'inversions de données utilisant à la fois le mode isotherme mais aussi le mode "profil vertical" avec 4 points de températures/pressions inversés. En effet, ce mode "profil vertical" n'était pas concluant pour l'étude de Wasp-121 b où les hétérogénéités horizontales aux travers des limbes dominaient complètement le spectre par rapport aux variations verticales. En revanche, puisque nous étudions ici des planètes plus froides où les hétérogénéités de composition et de température diminuent, il est utile de vérifier à quel moment les variations verticales recommencent à être significatives sur l'allure du spectre. Précisons enfin que nous ne considérons pas de nuages ni dans les simulations GCM, ni dans la génération des spectres en transmission. Les nuages font néanmoins partis des paramètres inversés par le modèle *TauREx*, afin de briser d'éventuelles dégénérescences et de s'assurer que le modèle fonctionne correctement en n'inversant pas une couche nuageuse lorsque nous savons qu'elle n'existe pas.

4.2 Simulations numériques GCM 3D

Nous décrivons ici les cartes en température et en abondance de H₂O obtenues à partir de nos simulations GCM. Nous commencerons par voir les simulations les plus chaudes, avec inversion thermique, pour ensuite nous intéresser aux simulations les plus froides, sans inversion thermique.

4.2.1 Modèles avec inversion thermique des profils T-P côté jour

Les cartes obtenues à partir des simulations GCM avec inversion thermique dans l'hémisphère jour sont présentées en Figures 4.1, 4.2, 4.3 et 4.4. Pour l'ensemble des 8 simulations, nous utilisons deux atmosphères de même composition mais avec deux hypothèses de dissociation thermique différentes : la première avec H₂ constant et H₂O variable, et la seconde avec à la fois H₂ et H₂O variables.

Les coupes équatoriales représentant la température des atmosphères pour les 8 simulations avec inversion thermique sont présentées en Figure 4.1. Il apparaît clairement que la température globale des atmosphères augmente avec les températures d'équilibre croissantes, que ce soit dans l'hypothèse de H₂ constant ou variable. Ces augmentations de températures n'affectent cependant pas de façon équivalente chaque partie de l'atmosphère. De la même manière que la simulation GCM de Wasp-121 b, les cartes en températures de ces simulations présentent 3 parties assez bien distinctes : i) un anneau quasi-isotherme dans la basse atmosphère ; ii) du côté nuit et au-dessus de cet anneau, un profil en température décroissant et très froid ; iii) du côté jour et au-dessus de cet anneau, une inversion thermique d'où des températures du côté jour très élevées par rapport au reste de l'atmosphère.

La température de l'anneau quasi-isotherme augmente en moyenne linéairement avec les températures d'équilibres considérées, partant de 1300 K environ jusqu'à 2200 K environ. Cet anneau est aussi de plus en plus épais avec les planètes les plus froides, s'étendant jusqu'à 200 mbar environ pour la simulation $T_{eq}=2100$ K et jusqu'à environ 40 mbar pour la simulation $T_{eq}=1400$ K.

Du côté jour, l'évolution de la température selon la latitude et l'altitude est plus complexe. Nous

observons une évolution de la position de la région la plus chaude de l'atmosphère. Si celle-ci est alignée au point sub-stellaire pour les simulations les plus chaudes, il apparaît un décalage vers l'est de cette région avec les simulations les moins chaudes, allant jusqu'à 30° pour la simulation $T_{\text{eq}}=1400$ K. Cet effet bien connu (Knutson et al. 2007 ; Showman et al. 2008), apparaît lorsque l'échelle de temps dynamique d'une atmosphère devient plus petite que l'échelle de temps radiative. Dans ce cas, la dynamique des vents a le temps de transporter l'énergie avant que celle-ci ne puisse être radiativement à l'équilibre. Plus la dynamique des vents est intense (jets, présence d'une super-rotation) plus ce décalage entre le point sub-stellaire et la région la plus chaude est grand. Néanmoins, pour les planètes les plus irradiées, l'échelle de temps radiative devient plus courte que celle de la dynamique d'où un alignement entre point sub-stellaire et région la plus chaude (voir Section 1.2.2 du chapitre 1). Il existe alors une asymétrie entre l'est et l'ouest de l'atmosphère, qui s'étend bien au-delà du terminateur pour les simulations les plus froides. Cependant au regard de la Figure 4.2, qui montre les cartes en température du terminateur des simulations, l'asymétrie entre l'est et l'ouest de l'atmosphère reste présente pour toutes les simulations. La forte dichotomie en température jour–nuit des atmosphères les plus chaudes induit une dynamique des vents suffisamment efficace pour affecter le terminateur de ces planètes. Des différences de températures et donc d'échelles de hauteur sont clairement visible sur le terminateur de ces atmosphères. Néanmoins, ces asymétries disparaissent très rapidement en s'écartant du terminateur pour les planètes les plus chaudes.

Concernant l'évolution globale de la température du côté jour, elle augmente fortement en fonction de la température d'équilibre croissante, impliquant une augmentation importante de l'échelle de hauteur de cet hémisphère bien plus importante que celle de l'hémisphère nuit. Cela crée alors une asymétrie jour–nuit de plus en plus marquée pour les planètes de plus en plus chaudes. La température du côté nuit de chaque simulation reste en effet globalement très froide, et bien qu'elle augmente légèrement avec la température d'équilibre, son échelle de hauteur reste très petite en comparaison de celle du côté jour.

La différence entre les simulations supposant H_2 constant et celles prenant en compte le fait que H_2 se dissocie thermiquement ne concerne principalement que le côté jour de la planète. En effet la dissociation thermique de H_2 ne se produit que du côté jour pour les planètes les plus froides de ces simulations. Il commence même à affecter légèrement le terminateur et le début du côté nuit à partir des simulations à $T_{\text{eq}}=1700$ K, comme le montre les coupes aux limbes de la Figure 4.2. Par conséquent, le côté jour des atmosphères avec H_2 variable présente une échelle de hauteur plus grande tandis que le côté nuit reste le même d'où une dichotomie jour–nuit encore plus marquée dans ce cas. Nous verrons plus tard comment ces modifications dans les profils de températures vont affecter les spectres en transmission, et donc les inversions de données.

Nous présentons également le même type de cartes que précédemment, mais représentant l'abondance de H_2O en VMR. Cette molécule, dont l'abondance varie assez fortement selon les cas, joue un rôle central dans l'allure des spectres en transmission. D'après la Figure 4.3, il est clair que la dissociation de l'eau est extrêmement intense du côté jour de la planète pour les simulations les plus chaudes, et va s'amenuiser progressivement en allant vers les simulations les plus froides pour finir par ne quasiment plus être dissociée dans la simulation où $T_{\text{eq}}=1400$ K. Au fur et à mesure que la température d'équilibre

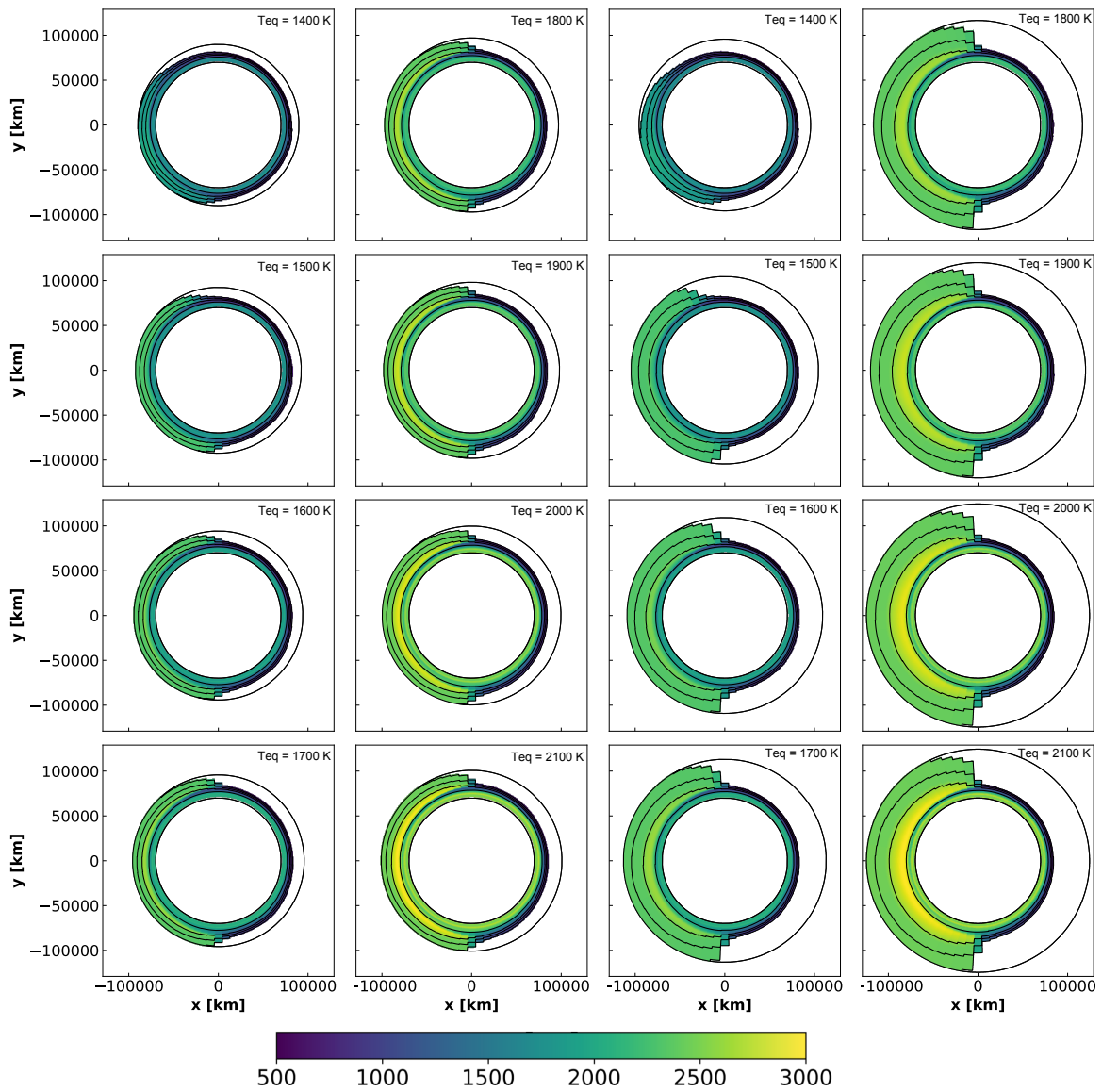


FIGURE 4.1 – Coupe équatoriale de la température [K] pour les 8 simulations GCM de Jupiters chauds présentant une inversion thermique du côté jour. La température d'équilibre de chaque simulation est précisée, elles vont ici de 1400 K à 2100 K. H₂ est supposé constant (moitié gauche) alors que sa dissociation thermique est prise en compte (moitié droite).

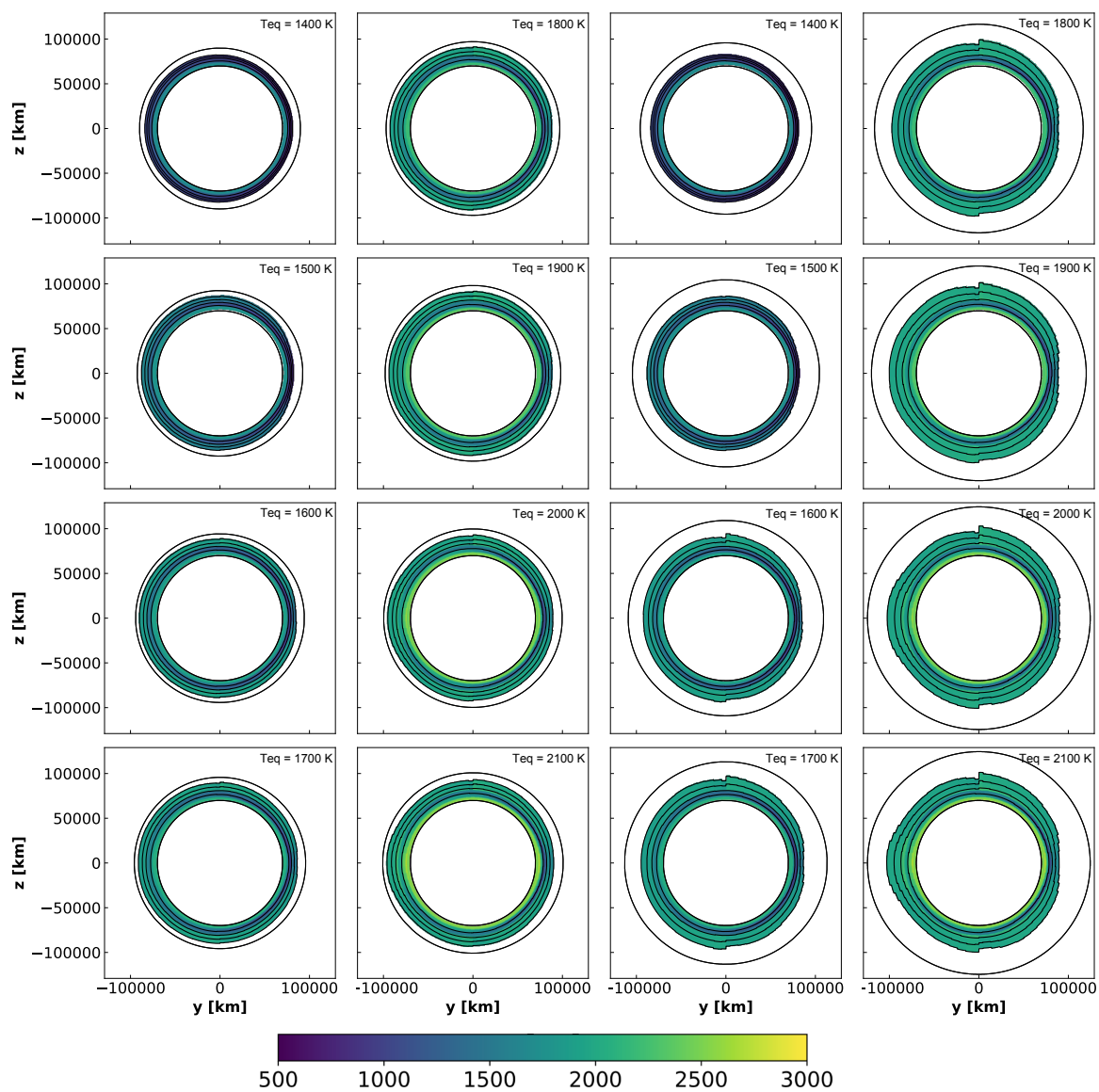


FIGURE 4.2 – Coupe aux limbes de la température [K] pour les 8 simulations GCM de Jupiters chauds présentant une inversion thermique du côté jour. La température d'équilibre de chaque simulation est précisée, elles vont ici de 1400 K à 2100 K. H₂ est supposé constant (moitié gauche) alors que sa dissociation thermique est prise en compte (moitié droite).

considérée refroidit, nous remarquons que la dissociation de H_2O affecte des régions de plus en plus basse pression et se produit de moins en moins efficacement. En effet, puisque la dissociation thermique dépend à la fois de la température et de la pression, il est logique d'observer ce comportement. Concernant l'abondance en H_2O au niveau du terminateur (voir Figure 4.4), elle reste proche de l'abondance solaire pour toutes les simulations. Seules les simulations les plus chaudes voient une légère diminution de l'abondance en H_2O pour les régions aux plus basses pressions, même si celle-ci reste supérieure à 10^{-4} . Comme nous l'avons expliqué pour les cartes en température, la dissociation de H_2 n'affecte principalement que le côté jour des atmosphères simulées. Ainsi, H_2O reste dissociée et présente aux mêmes endroits que lorsque H_2 ne dissocie pas. Seule l'échelle de hauteur, plus grande suite à la dissociation de H_2 , va changer entre les deux cas impliquant une hétérogénéité chimique plus marquée. En effet, puisque le CO ne se dissocie pas, il reste présent du côté jour de la planète mais à des altitudes bien plus élevées dans le cas où le H_2 se dissocie, d'où des bandes d'absorption plus fortes dans le spectre en transmission.

Spectre 3D pour les profils avec inversion thermique

La Figure 4.5 montre les spectres générés par *Pytmosph3R* à partir des simulations GCM 3D, sans dissociation de H_2 (en haut) et avec dissociation de H_2 (en bas). Les spectres en transmission sont tous décalés vers des rayons apparents plus grands pour les planètes de plus en plus chaudes. Ce décalage indique que nous sondons des altitudes de plus en plus élevées, signe d'une atmosphère plus étendue avec une échelle de hauteur plus grande. Dans le cas où H_2 reste constant, l'augmentation de l'échelle de hauteur est due au réchauffement global de l'atmosphère. En revanche, lorsque que H_2 se dissocie, la diminution du poids moléculaire moyen due à cette dissociation va s'ajouter à l'augmentation en température d'où un décalage plus important vers de plus hautes altitudes sondées.

Précisons que ce décalage n'est pas constant puisque les spectres ne sont pas superposables. L'amplitude des bandes d'absorption de H_2O augmente avec la température d'équilibre, indiquant également que nous sondons des températures plus élevées. Lorsque la dissociation de H_2 est prise en compte, ces amplitudes augmentent encore et d'autant plus que la simulation est chaude, car malgré la dissociation de H_2O du côté jour, l'augmentation de l'échelle de hauteur par dissociation de H_2 impacte le spectre. Par ailleurs, l'amplitude des bandes d'absorption du CO (à $2.3 \mu\text{m}$ et $4.5 \mu\text{m}$), qui reste assez faible pour les simulations les plus froides, apparaissent plus clairement pour les simulations les plus chaudes. En effet, puisque le CO reste présent partout dans l'atmosphère sans se dissocier, les bandes d'absorption sondées proviennent systématiquement du côté jour, plus chaud, et dont le gradient avec le côté nuit augmente en allant vers les planète les plus chaudes. Cela signifie que plus on simule une planète chaude, plus la différence entre la température sondée par les bandes d'absorption de H_2O et celles de CO est importante. Cet effet est d'autant plus flagrant lorsque H_2 se dissocie, comme le montre très clairement la Figure 4.5 (bas). Si les spectres pour $T_{eq}=1400 \text{ K}$ et $T_{eq}=1500 \text{ K}$ sont quasiment identiques avec et sans dissociation de H_2 , ils diffèrent de plusieurs centaines de ppm pour les bandes de CO dans les simulations les plus chaudes, comme le met en évidence la superposition des spectres en pointillés présents sur la Figure 4.5 en bas.

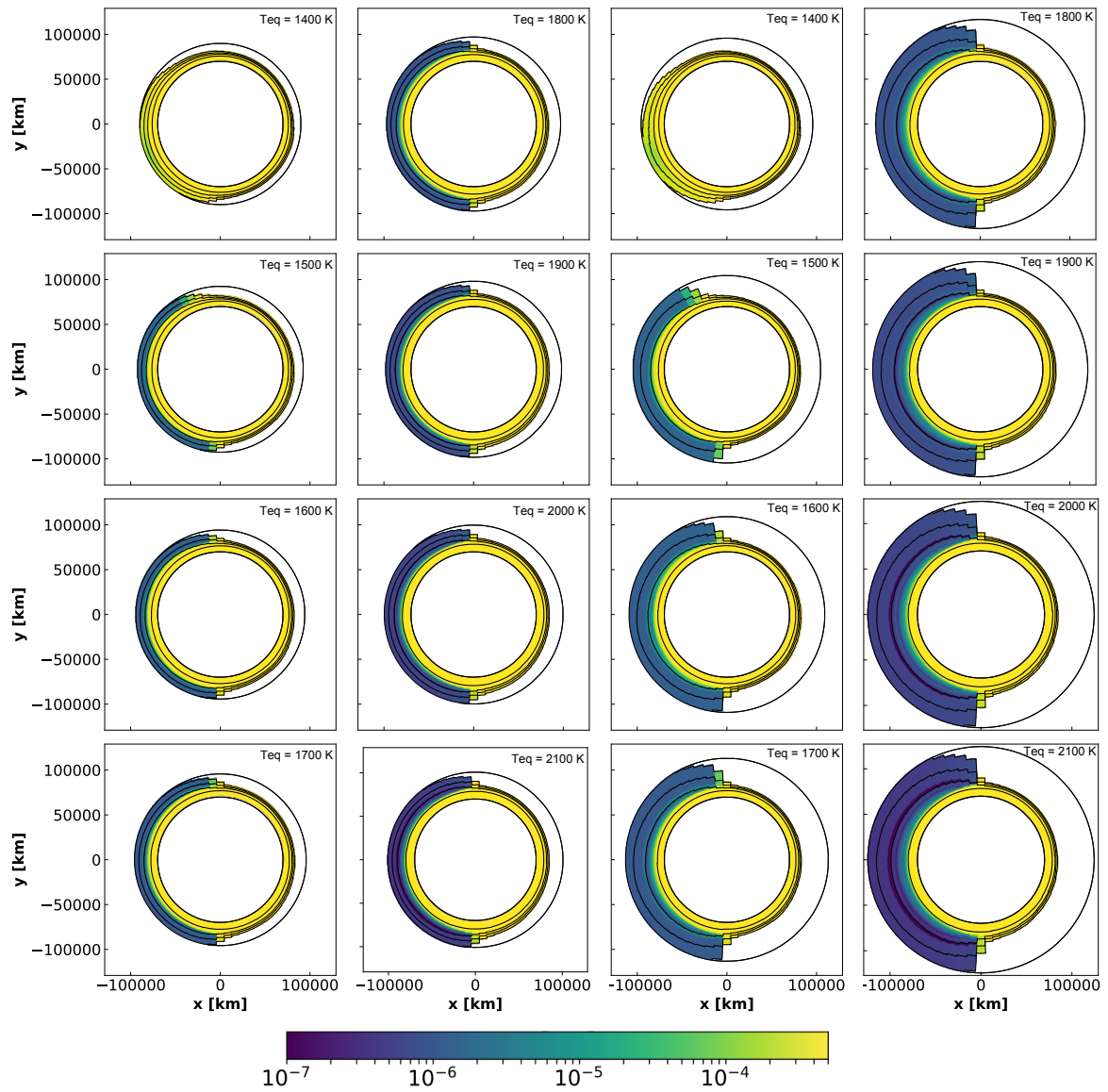


FIGURE 4.3 – Coupe équatoriale de l’abondance en eau [VMR] pour les 8 simulations GCM de Jupiters chauds présentant une inversion thermique du côté jour. La température d’équilibre de chaque simulation est précisée, elles vont ici de 1400 K à 2100 K. H₂ est supposé constant (moitié gauche) alors que sa dissociation thermique est prise en compte (moitié droite).

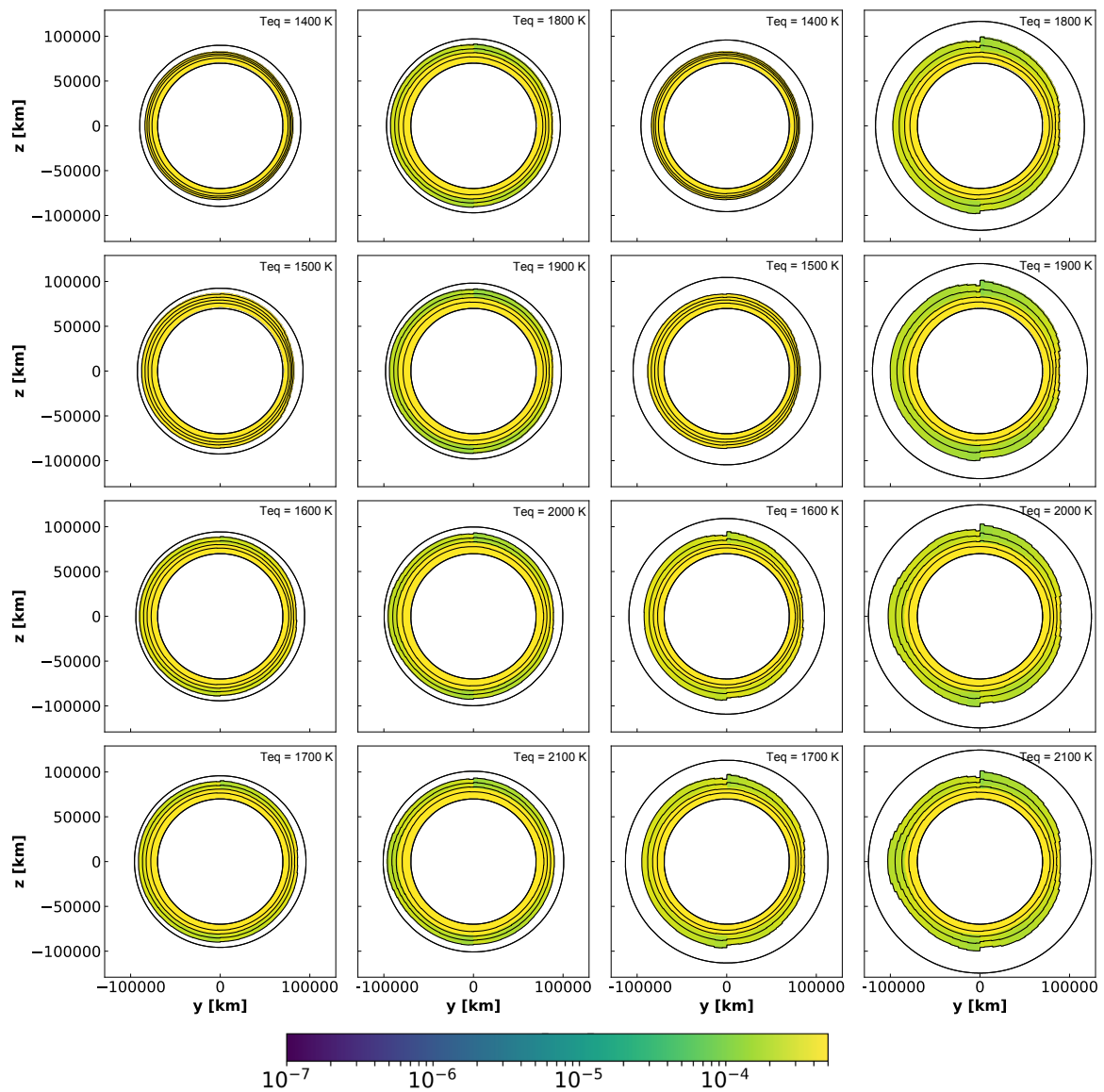


FIGURE 4.4 – Coupe aux limbes de l'abondance en eau [VMR] pour les 8 simulations GCM de Jupiters chauds présentant une inversion thermique du côté jour. La température d'équilibre de chaque simulation est précisée, elles vont ici de 1400 K à 2100 K. H_2 est supposé constant (moitié gauche) alors que sa dissociation thermique est prise en compte (moitié droite).

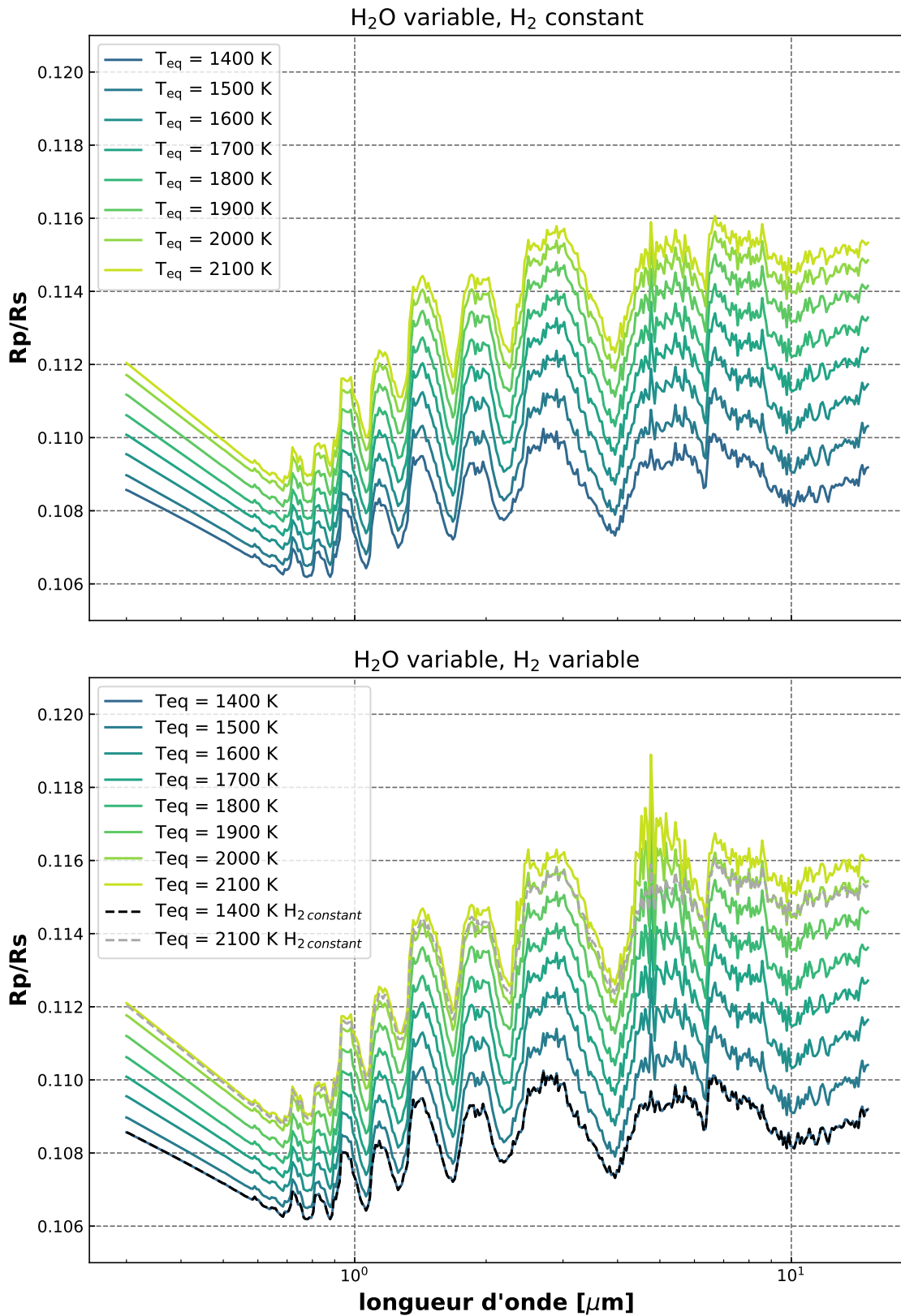


FIGURE 4.5 – Spectres en transmission des 8 simulations GCM allant de $T_{\text{eq}} = 1400 \text{ K}$ jusqu'à $T_{\text{eq}} = 2100 \text{ K}$ par pas de 100 K . Lorsque la dissociation de H_2 est considérée (bas), les bandes d'absorption de CO apparaissent encore plus clairement que lorsque nous négligeons la dissociation de H_2 (haut).

4.2.2 Modèles avec profils T-P sans inversion thermique du côté jour

Les cartes en température des simulations GCM générées sans TiO/VO dans leur atmosphère et donc sans inversion thermique sont présentées en Figure 4.6. Ces coupes équatoriales sont assez différentes des simulations précédentes. Tout d'abord, ces atmosphères sont beaucoup moins étendues, notamment du côté jour, car sans l'inversion thermique, les températures atteintes du côté jour sont bien plus froides, et donc l'échelle de hauteur de l'atmosphère est beaucoup plus petite. Ensuite, les atmosphères des simulations les plus froides sont assez homogènes, jusqu'à $T_{\text{eq}}=1400$ K, puis une hétérogénéité jour-nuit s'accroît vers les planètes les plus chaudes. D'ailleurs, le point le plus chaud de l'atmosphère, qui est aligné avec le point sub-stellaire pour les simulations les plus froides, se décale ensuite vers l'est jusqu'à atteindre environ 30° pour la simulation la plus chaude à $T_{\text{eq}}=2100$ K. Ici, le temps d'équilibre radiatif dans les atmosphères les plus chaudes est supérieur au temps d'équilibre d'advection, ce qui induit un décalage des régions les plus chaudes de l'atmosphère à l'est du point sub-stellaire. Cette situation est différente des simulations avec inversion thermique, où la température très élevée de la haute atmosphère du côté jour diminue considérablement l'échelle de temps radiatif qui devient inférieure à l'échelle de temps des processus advectifs.

Enfin, les profils température-pression sont presque systématiquement en-dessous de ceux nécessaires pour provoquer la dissociation thermique de H_2 ou de H_2O , d'où une homogénéité de composition chimique quasiment totale des atmosphères simulées, comme le montre la Figure 4.7. Cela est à peine visible au vu de l'échelle logarithmique de l'abondance de H_2O , mais seule la très haute atmosphère des deux simulations les plus chaudes permet une faible dissociation thermique de H_2O d'un facteur 2 environ. Cependant, les régions concernées ne peuvent être sondées car elles sont géométriquement trop éloignées des limbes. Pour cette étude, nous pouvons donc considérer ces atmosphères chimiquement homogènes.

Spectre 3D pour les profils sans inversion thermique

Les spectres générés par *Pytmosph3R* pour les 12 simulations sont présentés dans la Figure 4.8. Bien que la différence avec les spectres de la Figure 4.5 (haut) et ceux-là ne semble pas flagrante, elle existe. Si les spectres en transit pour les simulations les plus froides (de $T_{\text{eq}}=1000$ K à $T_{\text{eq}}=1500$ K) sont en effet très similaires, les bandes d'absorption du CO pour les spectres les plus chauds sont beaucoup moins marquées, comme couvertes par les bandes de H_2O . Le fait que H_2O ne se dissocie pas dans ces simulations sans inversion thermique implique que l'on sonde les bandes d'absorption de l'eau et du CO aux mêmes endroits, et donc aux mêmes températures. Par conséquent, les bandes de CO, bien que présentes, ne se distinguent pas aussi clairement que lorsque H_2O est dissocié et que le spectre sonde ces molécules à des températures différentes.

Le spectre de la simulation à $T_{\text{eq}}=2100$ K évolue différemment des autres spectres, puisqu'il est quasiment superposé au spectre de la simulation à $T_{\text{eq}}=2000$ K au-dessus de $1 \mu\text{m}$, puis tend à se superposer au spectre pour la simulation à $T_{\text{eq}}=1900$ K en-dessous de $1 \mu\text{m}$. Ce comportement pourrait être expliqué par la géométrie de l'atmosphère dans ce cas. Ici, l'atmosphère est fortement impactée par

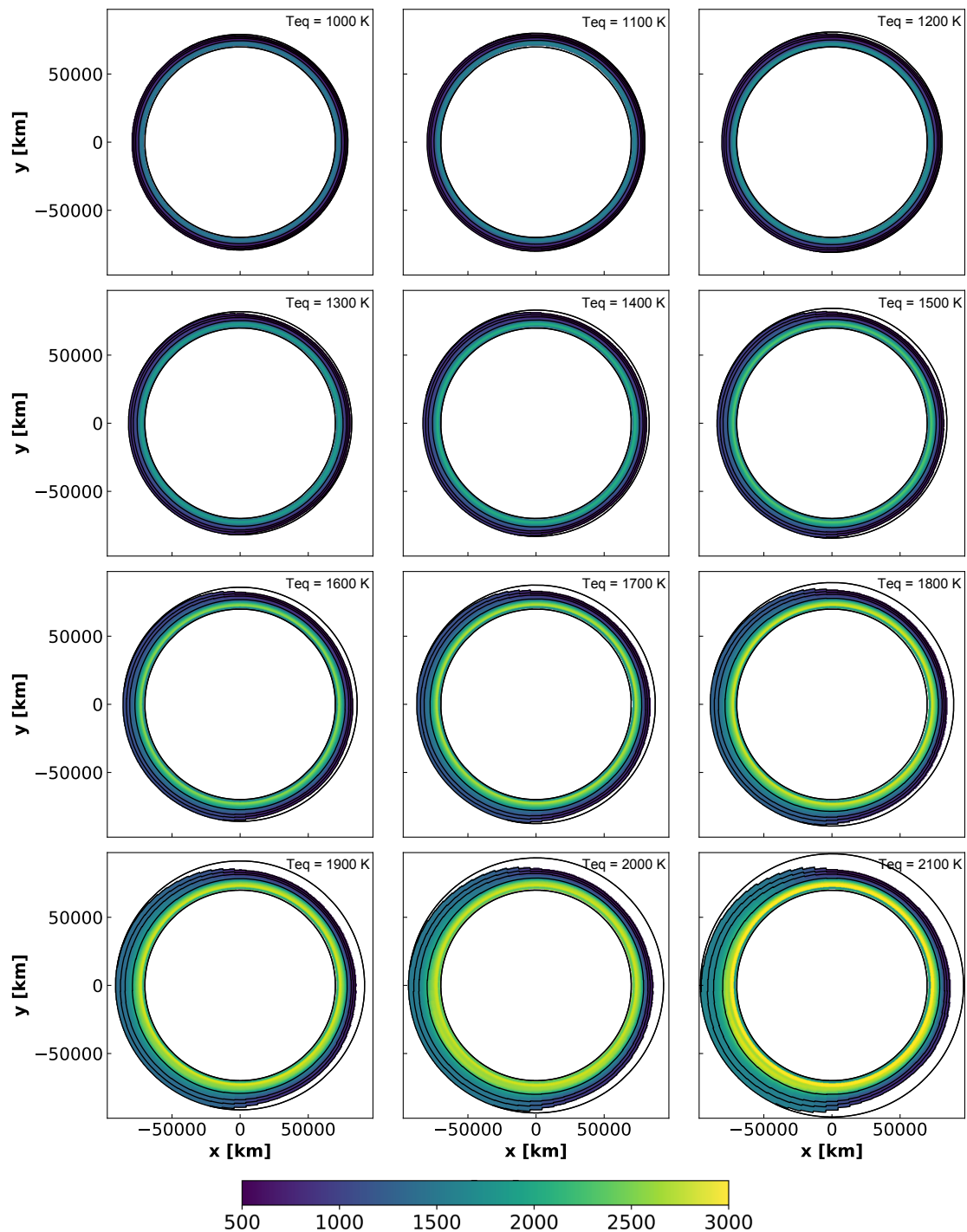


FIGURE 4.6 – Coupes équatoriales en température (en K) pour 12 simulations GCM de Jupiters chauds sans inversion thermique calculées respectivement de haut en bas et de gauche à droite pour $T_{eq} = 1000$ K jusqu'à $T_{eq} = 2100$ K par pas de 100 K. Sans TiO et VO dans le modèle GCM, aucune inversion thermique ne se produit dans la stratosphère impliquant une atmosphère bien moins étendue et plus froide aux altitudes élevées.

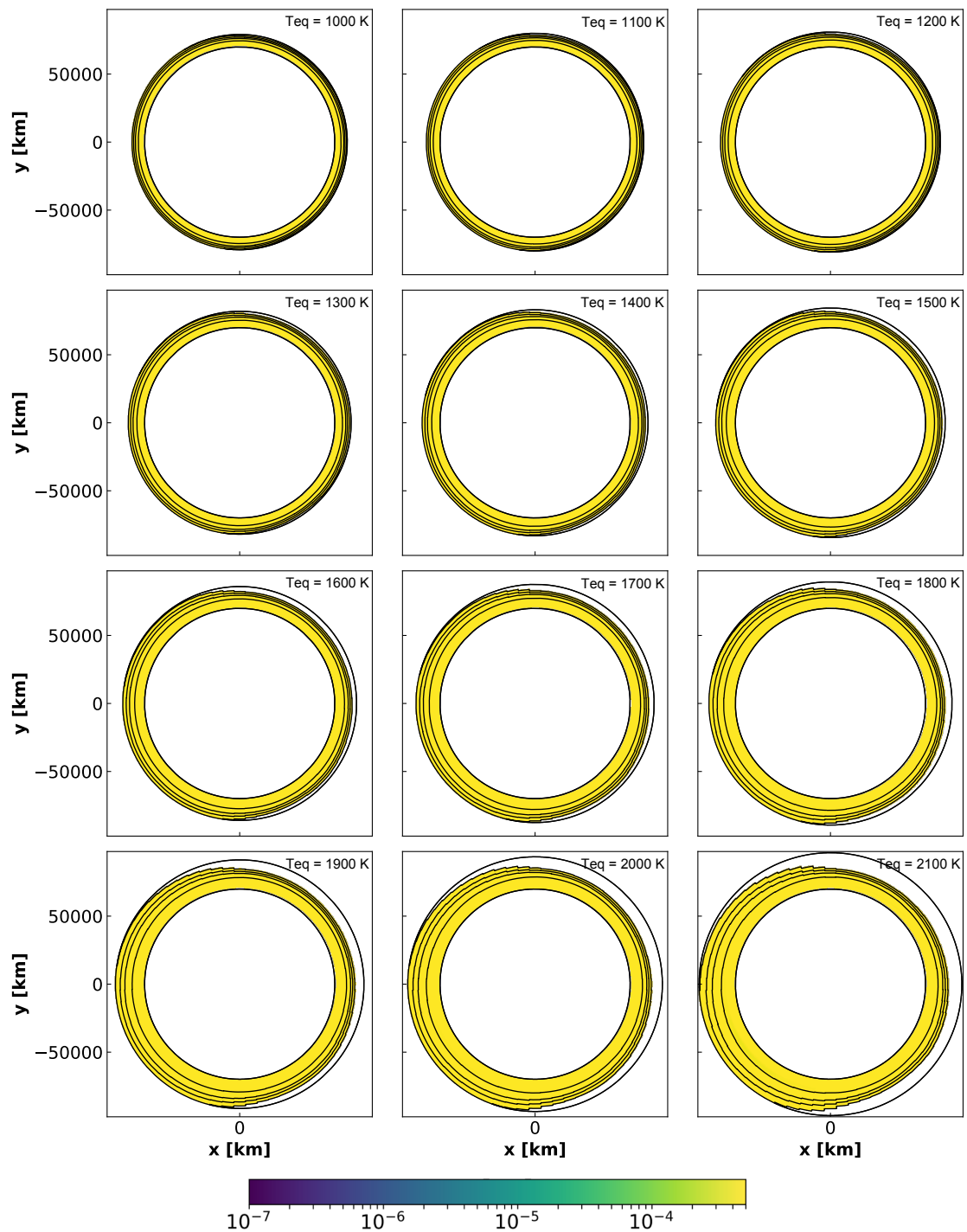


FIGURE 4.7 – Même figure que la Figure 4.6 représentant les abondances en eau [VMR]. Nous remarquons que sans inversion thermique une absence totale de dissociation thermique de l’eau est observée.

Simulations sans inversion thermique								
T_{eq} (K)	≤ 1400	1500	1600	1700	1800	1900	2000	2100
Γ (°)	~ 0	~ 2	~ 3	~ 5	~ 7	~ 10	~ 15	~ 30

TABLE 4.1 – Angle Γ (en degré) entre le point sub-stellaire et le point le plus chaud de l’atmosphère pour les simulations sans inversion thermique.

la dynamique d’où un fort décalage de la région la plus chaude avec le point sub-stellaire et une forte asymétrie est-ouest des limbés. En effet, l’atmosphère s’étend bien plus haut du côté est par rapport à l’ouest, d’où en moyenne un rapport rayon planétaire sur rayon stellaire plus faible. Cette tendance s’amorce déjà entre la simulation à $T_{eq}=1900$ K et celle à $T_{eq}=2000$ K, mais elle s’accroît ensuite pour la simulation à $T_{eq}=2100$ K car le décalage de l’atmosphère est plus intense ici comme le montre la Table 4.1 qui indique l’angle entre le point le plus chaud et le point sub-stellaire de chaque simulation.

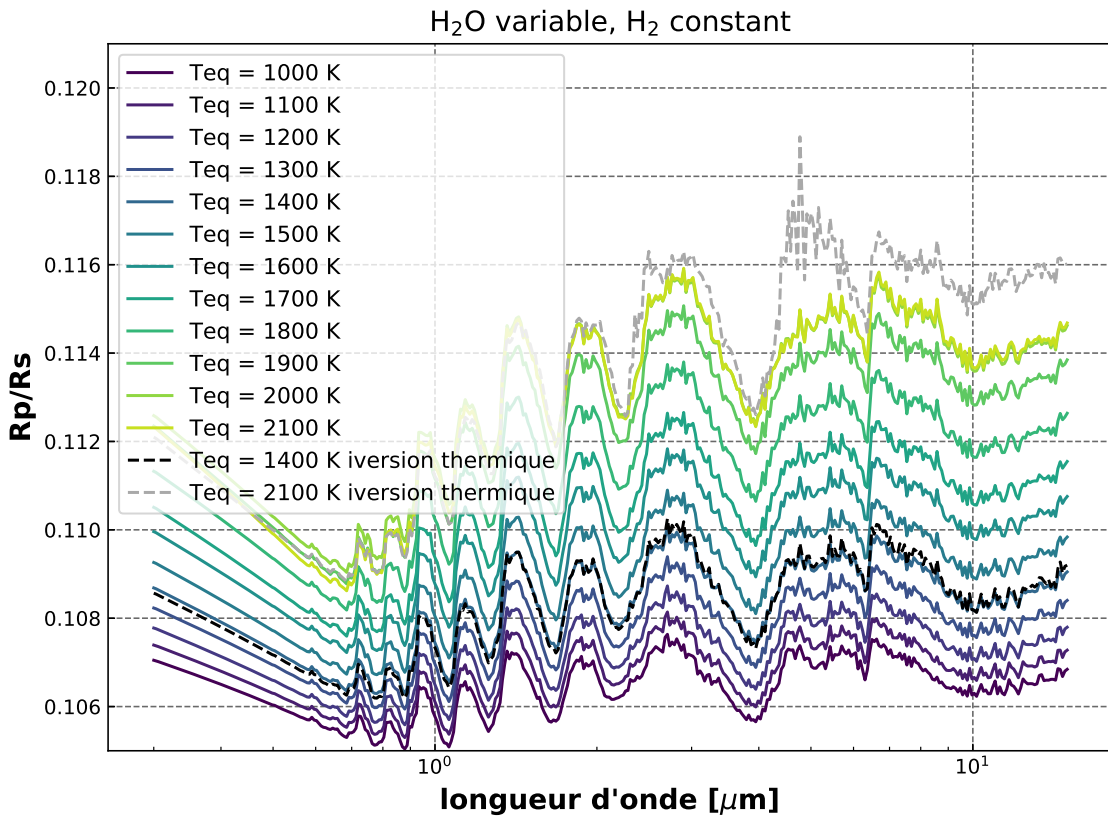


FIGURE 4.8 – Spectres en transmission des 12 simulations GCM sans inversion thermique, allant de $T_{eq} = 1000$ K jusqu’à $T_{eq} = 2100$ K par pas de 100 K. Sont superposés respectivement en pointillés noir et gris les spectres en transmission pour $T_{eq} = 1400$ K et $T_{eq} = 2100$ K, générés à partir d’une simulation avec inversion thermique.

4.3 Inversion de données *TauREx*

Nous avons effectué des inversions de données 1D à l'aide de *TauREx* sur l'ensemble des spectres en transmission décrits précédemment. Grâce à nos hypothèses sur la composition simplifiée des atmosphères étudiées avec seuls CO et H₂O comme absorbants, nous avons pu limiter le nombre de paramètres d'inversion, nous permettant d'une part de gagner en temps de calcul, et d'autre part d'isoler les biais observés. Pour chaque simulation, nous inversons alors 5 paramètres : le rayon de la planète, les abondances en H₂O et en CO, une couche nuageuse "grise" et enfin la température. Pour cette dernière, nous nous sommes servis de deux modes différents proposés par *TauREx* :

- Le mode *isothermal*, où une seule température est inversée pour l'ensemble de l'atmosphère. Il s'agit d'un mode que l'on peut qualifier de 0D car l'ensemble de l'atmosphère est homogène quelle que soit la latitude, la longitude et l'altitude. Ce type d'hypothèse est tout à fait pertinent si l'on considère sonder une région peu étendue de l'atmosphère observée, ce qui est majoritairement le cas pour les planètes pas trop chaudes.
- Le mode *npoint*, où nous inversons un profil de température paramétré par plusieurs points de températures et de pressions laissant une liberté maximale au modèle sur l'allure du profil inversé. Nous avons choisi durant nos tests des profils avec 4 points. Ce mode 1D vertical suppose une atmosphère homogène en latitude et en longitude mais avec une variation en altitude. Une telle hypothèse peut devenir nécessaire lorsqu'on imagine des variations verticales fortes au niveau des limbes.

Grâce à ces deux modes d'inversions sur la température, nous allons pouvoir établir à partir de quand les effets verticaux prennent de l'importance et dominent l'allure des spectres, et à l'inverse quand est-ce que les effets horizontaux, notamment au travers des limbes, dominent les spectres rendant caduc l'utilisation des inversions de données avec profils verticaux.

4.3.1 Inversion de données isotherme

Les résultats des inversions effectuées par *TauREx* sont regroupés dans la Figure 4.9. Nous y retrouvons la température, les abondances en H₂O et en CO, le rayon planétaire, mais aussi le rapport des abondances CO sur H₂O, indiquant l'écart à la métallicité solaire et le $\tilde{\chi}^2$ réduit, permettant d'établir la qualité de l'ajustement du spectre d'entrée par le modèle d'inversion. Nos spectres en transmission simulés par *Pytmosph3R* sont calculés avec une incertitude mais ne sont pas bruités (Caldas et al. 2019). Nous souhaitons ici ne pas ajouter un biais possible dû à ce bruit (Chiavassa et al. 2017) afin d'éviter des dégénérescences. Ainsi, dès que le $\tilde{\chi}^2$ est inférieur à 1, nous considérons l'inversion de données valide.

Dans toutes ces inversions, *TauREx* est parvenu à trouver un modèle d'ajustement fidèle aux spectres d'entrées puisque le plus haut $\tilde{\chi}^2$ trouvé est de 2, ce qui indique encore un ajustement correct du modèle. Le niveau de performance du modèle n'est cependant pas le même selon les simulations considérées. Dans le cas des simulations sans inversion thermique, le $\tilde{\chi}^2$ est inférieur à 1 montrant que *TauREx* trouve un ajustement valide dans son inversion des données. Même si nous observons une légère augmentation du $\tilde{\chi}^2$ pour les simulations les plus chaudes, nous restons en dessous de 1. Pour les simulations avec

inversion thermique sans dissociation de H_2 , les ajustements sont également valides car le $\tilde{\chi}^2$ est inférieur à 1. En revanche, le $\tilde{\chi}^2$ des inversions de données sur les simulations avec inversion thermique et dissociation de H_2 évolue différemment. Pour les simulations les plus froides, donc avec peu de dissociation thermique dans l'atmosphère (voir 4.3), le $\tilde{\chi}^2$ est inférieur à 1. Cela est cohérent avec les simulations sans inversion thermique où aucune dissociation thermique des espèces n'a lieu. En revanche, le $\tilde{\chi}^2$ augmente très clairement avec les températures d'équilibre croissantes, dépassant 1 pour les simulations les plus chaudes. Ce comportement indique que *TauREx* ne parvient pas à correctement prendre en compte la dissociation thermique de H_2 .

Les abondances inversées par *TauREx* ne sont en général pas correctes, quelles que soient les simulations. Si l'abondance en H_2O est globalement bien contrainte à $3\text{-}\sigma$ pour les simulations avec inversion thermique, elle ne l'est pas du tout pour les simulations sans inversion thermique. Les abondances en CO sont quant à elles mal contraintes dans tous les cas. Pour rappel, nous simulons des atmosphères avec des abondances solaires et dont le CO ne se dissocie pas. Par conséquent, nous nous attendons à inverser des abondances solaires de CO, et des abondances en H_2O inférieures ou égales (car H_2O peut se dissocier) à l'abondance solaire. Les simulations sans inversion thermique sont fortement biaisées, puisque le rapport $[CO]/[H_2O]$ inversé est globalement de 10, les abondances en H_2O et en CO inversées étant toujours au-dessus de l'abondance solaire. Ces résultats indiquent que *TauREx* n'est pas capable de donner des résultats cohérents sur ces simulations, car il parvient à trouver un ajustement très précis où $\tilde{\chi}^2 < 1$ tout en inversant des abondances erronées.

Pour les simulations avec inversion thermique, les résultats sont plus cohérents, notamment avec ce qui a été démontré dans le chapitre 3. Pour les simulations les plus froides, l'abondance en H_2O inversée est quasiment solaire. Elle s'écarte légèrement de l'abondance solaire pour les simulations les plus chaudes où H_2 peut se dissocier et reste en revanche toujours solaire à $1\text{-}\sigma$ dans le cas où H_2 reste constant. L'abondance en CO ne fait que diminuer avec les simulations les plus froides. Nous observons ainsi une diminution du rapport $[CO]/[H_2O]$ lorsque nous simulons des Jupiters de moins en moins chauds même si pour la simulation la plus froide, un biais d'un facteur 2 demeure sur le rapport $[CO]/[H_2O]$. Cette évolution indique que les modèles d'inversions 1D sont moins biaisés lorsqu'on les applique à des Jupiters moins chauds. Précisons aussi que les biais sont plus importants lorsque H_2 se dissocie. Ce comportement s'explique d'une part par le fait que la différence d'échelle de hauteur journalière s'amenuise plus on refroidit, donc la différence en altitude du CO sondé du côté jour par rapport au H_2O sondé du côté nuit diminue. D'autre part, la quantité de H_2O dissociée diminue également pour les planètes les plus froides, impliquant que nous sondons moins profondément et à des températures plus élevées, d'où une plus faible différence dans les spectres comme le montre la Figure 4.5.

Les températures inversées sont quant à elles assez cohérentes avec les simulations. Nous observons une diminution régulière de la température inversée avec la température d'équilibre de la planète pour les simulations sans inversion thermique ce qui est cohérent avec les cartes en températures des simulations GCM (voir Figure 4.6). Pour les simulations avec inversion thermique, la diminution de la température est régulière jusqu'à une rupture de pente à partir de $T_{eq} = 1500$ K. Ce comportement peut s'expliquer par l'allure des cartes en température de la Figure 4.1, où l'asymétrie est-ouest devient importante pour

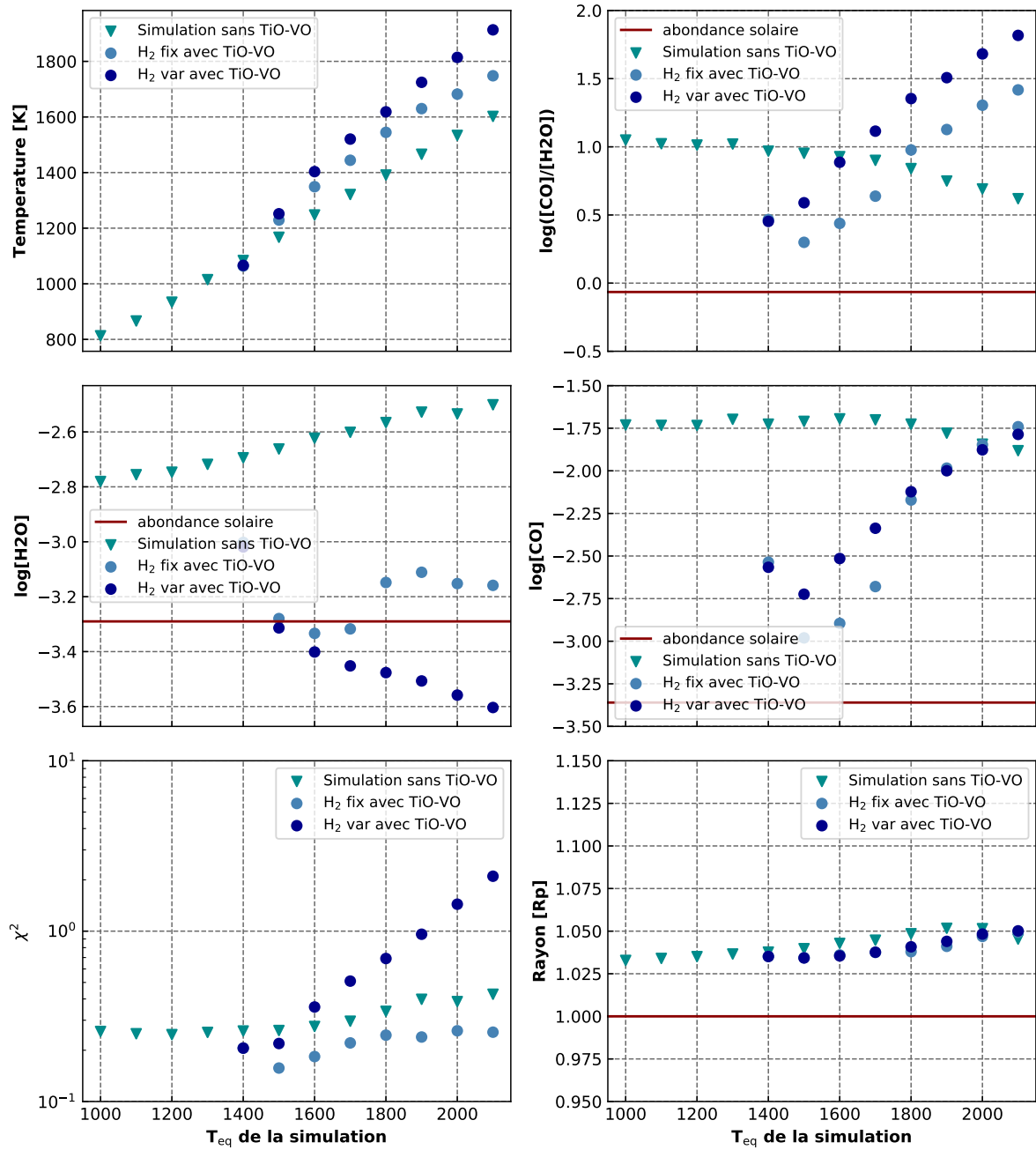


FIGURE 4.9 – Résumé des résultats du modèle d’inversion de données *TauREx* pour un profil inversé isotherme. Toutes les simulations y sont représentées : sans inversion thermique (cyan), avec inversion thermique supposant H₂ constant (bleu) et supposant H₂ variable (bleu foncé). Nous avons représenté le rapport [CO]/[H₂O] (en haut à gauche), la température (en haut à droite), les abondances logarithmiques du CO (milieu gauche) et de H₂O (milieu droite), le χ^2 (en bas à gauche) et le rayon planétaire (en bas à droite). Ces résultats ont été calculé avec un bruit de photon supposant un palier à 30 ppms sur l’ensemble du domaine spectral. La ligne rouge représente la valeur d’entrée de nos simulations et la ligne noire pointillée montre où $\chi^2 = 1$.

les cas les plus froids. Précisons que la température inversée est un peu élevée lorsque H_2 se dissocie thermiquement. *TauREx* cherche ici à ajuster au mieux les bandes d'absorption très marquées du CO, et le fait d'une part en augmentant l'abondance de l'espèce mais aussi la température inversée.

Le rayon inversé est quasiment constant pour toutes les simulations, assez proche du rayon en entrée des simulations. Il est donc difficile d'extraire beaucoup d'information de ce paramètre inversé qui ne semble pas ici jouer un rôle important dans l'amélioration des ajustements de *TauREx*.

4.3.2 Inversion de données avec profil vertical

Les résultats des inversions de données pour toutes les simulations GCM inversées dorénavant par un profil vertical non constant sont présentés en Figure 4.10 et 4.11.

Tout d'abord, les résultats des inversions sur les simulations GCM sans TiO-VO (et donc sans inversion thermique) sont totalement différents de ceux obtenus avec une inversion isotherme. Avec un profil vertical inversé, les abondances en H_2O et en CO, et donc le rapport $[CO]/[H_2O]$ inversés, sont dorénavant solaires à $1-\sigma$ près, quelle que soit la température d'équilibre concernée. Une très légère tendance à sur-estimer l'abondance en CO inversé semble se dessiner pour les simulations les plus chaudes, mais cela reste très faible. En comparant ces résultats avec les résultats de l'inversion isotherme, nous mettons en évidence le rôle des effets verticaux sur les spectres en transmission dans de telles atmosphères. En effet, comme le montrent les Figures 4.6 et 4.7, nous n'atteignons jamais des températures suffisantes pour dissocier des espèces telles que H_2O ou H_2 . Par conséquent, nous ne nous attendons pas à observer de fortes hétérogénéités de composition entre le côté jour et le côté nuit, et donc nous nous attendons à inverser des abondances solaires ici. Par ailleurs, les différences jour–nuit en température et donc en échelle de hauteur de l'atmosphère sont plus faibles que pour les simulations où une inversion thermique se produit, impliquant une faible variation de température au travers des limbes. En revanche, les variations de températures verticales sont bien suffisantes (plusieurs centaines de Kelvin comme le montre la Figure 4.12) pour affecter le spectre en transmission, d'où la bien meilleure inversion de données avec un profil vertical mise en évidence par le χ^2 inversé inférieur à 1, alors qu'il était bien supérieur pour les inversions de données isothermes.

La Figure 4.12 présente les profils en température de deux simulations GCM, $T_{eq} = 1400$ K et $T_{eq} = 2100$ K, d'une part pour toutes les latitudes des limbes est et ouest, permettant ainsi de mettre en évidence les variations de température le long des limbes, et d'autre part pour l'équateur à toutes les longitudes, permettant de voir la différence de température au travers des limbes. Les profils en température inversé par *TauREx* sont ajoutés sur ces graphes. A la vue de cette figure, nous comprenons que le profil en température inversé correspond plutôt à un profil au niveau de l'équateur, moyenné entre le limbe est et ouest. Il apparaît alors que les variations au travers et le long des limbes ne semblent pas dominer le spectre en transmission, mais bien les effets verticaux puisque les différences de températures verticales sont bien plus élevées que les différences de température maximale entre les différents profils en température aux différentes latitudes et longitudes sondées. C'est pour cette raison que l'inversion de données avec profil vertical donne des résultats avec un tel niveau de confiance. Il s'agit d'un résultat fort puisqu'il indique clairement que les hypothèses des modèles d'inversion 1D sont justifiées pour analyser

et interpréter les résultats obtenus sur des planètes pas trop chaudes. Bien entendu, il s'agit d'un modèle simplifié et nous pourrions tout à fait imaginer la présence d'une espèce d'un côté de l'atmosphère et pas de l'autre qui pourrait biaiser les résultats.

Ensuite, les résultats des inversions sur les simulations GCM avec TiO-VO (et donc avec inversion thermique) restent cohérents avec ceux obtenus avec une inversion de données isotherme, bien que des modifications importantes sont à relever. Premièrement, au regard de la Figure 4.10, nous observons toujours des rapports $[\text{CO}]/[\text{H}_2\text{O}]$ inversés biaisés, d'autant plus fort que la température d'équilibre est élevée, telle que déjà mis en évidence avec l'inversion de données isotherme. Les biais restent également plus importants dans le cas où H_2 se dissocie et plus ténus lorsque H_2 reste constant. Cependant, l'évolution des biais est dorénavant très différente : nous partons pour la simulation la plus froide d'un rapport $[\text{CO}]/[\text{H}_2\text{O}]$ inversé solaire tel que c'est le cas pour les simulations sans inversion thermique, puis nous observons une évolution rapide des biais avec la température d'équilibre jusqu'à $T_{\text{eq}} = 1700 \text{ K}$ lorsque H_2 se dissocie et $T_{\text{eq}} = 1500 \text{ K}$ lorsque H_2 reste constant. Ensuite, nous remarquons une rupture de pente avec une évolution des biais plus faible jusqu'aux simulations les plus chaudes. Précisons que cette évolution en deux temps est bien plus marquée pour les simulations où H_2 ne se dissocie pas. Cette rupture de pente déjà mise en évidence dans les températures inversées à la Figure 4.9 semble ici plus intense et affecte plus clairement les abondances inversées. A la vue des cartes en températures et en abondances en H_2O des Figures 4.1, 4.2, 4.3 et 4.4, nous comprenons que pour la simulation la plus froide le spectre est dominé par l'évolution verticale de la température, puisque la dissociation de H_2O et de H_2 reste très marginale, d'où un rapport $[\text{CO}]/[\text{H}_2\text{O}]$ inversé solaire. Ensuite, de $T_{\text{eq}} = 1500 \text{ K}$ jusqu'à $T_{\text{eq}} = 1700 \text{ K}$, l'asymétrie est-ouest de l'atmosphère combinée à de la dissociation thermique de plus en plus importante du côté jour implique une augmentation importante des biais en abondances inversées, preuve de la combinaison conjointe des effets horizontaux à la fois le long et aux travers des limbes. Enfin, à partir de $T_{\text{eq}} = 1700 \text{ K}$, bien que la dissociation thermique des espèces se produit de plus en plus fort, l'asymétrie est-ouest devient quasiment inexistante, expliquant la rupture de pente observée dans les rapports $[\text{CO}]/[\text{H}_2\text{O}]$ inversés. Pour ces simulations les plus chaudes, seuls les effets horizontaux au travers des limbes dominent les spectres en transmission.

Nous notons que, comme pour les résultats d'inversion isotherme, les abondances en H_2O inversées sont globalement solaires à $2\text{-}\sigma$ pour toutes les simulations et que ce sont les abondances en CO inversées qui sont fortement biaisées, de plus en plus avec les températures d'équilibre croissante. Le $\tilde{\chi}^2$ quant à lui est légèrement meilleur pour chaque simulation, même si son évolution reste similaire, à savoir que le $\tilde{\chi}^2$ est moins bon pour les simulations avec H_2 variable, et est de moins en moins bon avec les températures d'équilibre croissante, signe que *TauREx* parvient difficilement à trouver un bon ajustement lorsque les hétérogénéités jour-nuit sont trop fortes.

Concernant les profils en températures inversés, présentés Figure 4.11, ils sont assez similaires considérant ou non la dissociation de H_2 , à savoir que *TauREx* trouve qu'une inversion thermique pour chaque simulation permet d'obtenir le meilleur ajustement. Cependant, l'amplitude de cette inversion est bien plus grande dans le cas où la dissociation de H_2 est permise dans l'atmosphère. Afin d'estimer à quel endroit de l'atmosphère le profil en température de *TauREx* semble provenir, nous avons tracé à la

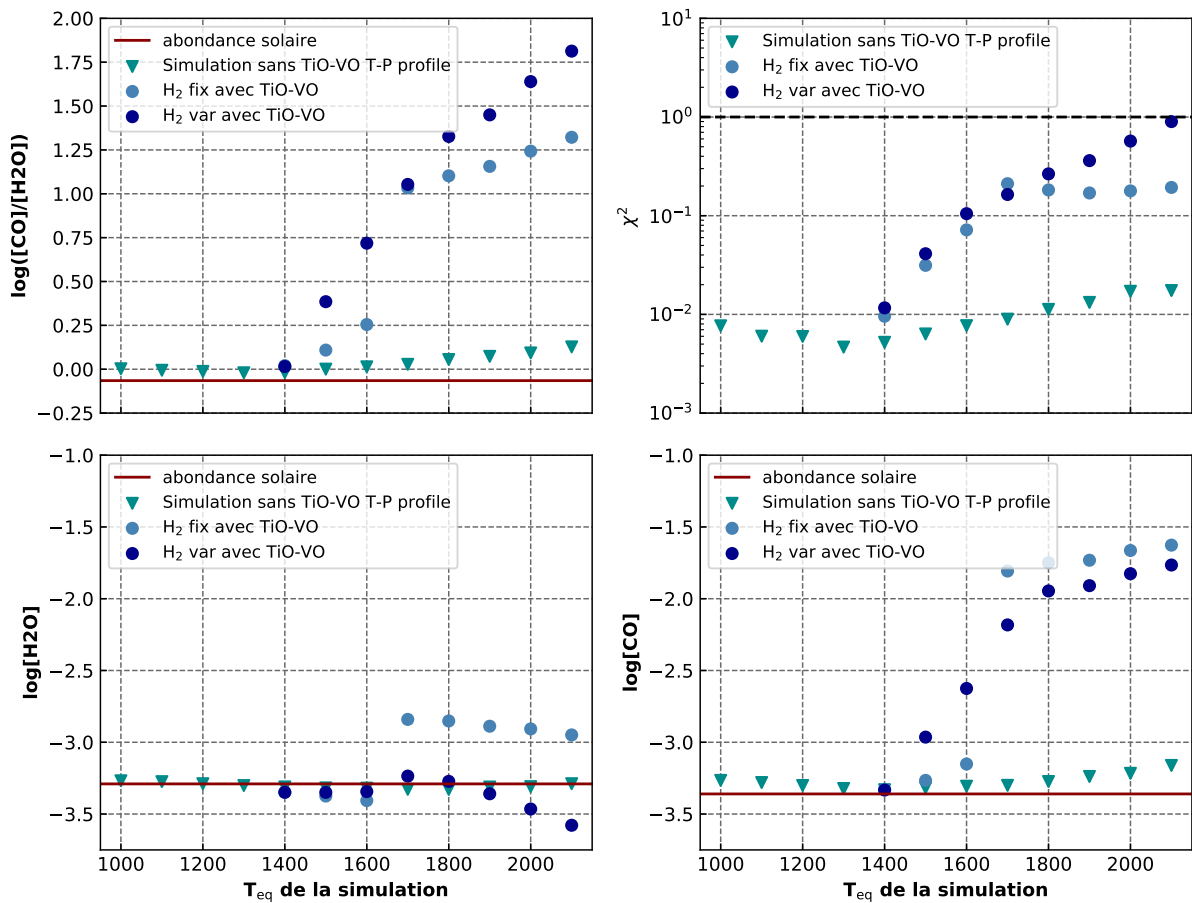


FIGURE 4.10 – Résumé des résultats du modèle d'inversion de données *TauREx* pour un profil inversé non isotherme. Toutes les simulations y sont représentées : sans inversion thermique (cyan), avec inversion thermique supposant H_2 constant (bleu) et supposant H_2 variable (bleu foncé). Nous avons représenté le rapport $[CO]/[H_2O]$ (en haut à gauche), le $\tilde{\chi}^2$ (en haut à droite), les abondances logarithmiques du CO (en bas à droite) et de H_2O (en bas à gauche). Ces résultats ont été calculés avec un bruit de photon supposant un palier à 30 ppms sur l'ensemble du domaine spectral. La ligne rouge représente la valeur d'entrée de nos simulations et la ligne noire pointillée montre où $\tilde{\chi}^2 = 1$.

Figure 4.13 les profils en températures de deux simulations GCM, $T_{eq} = 1400$ K et $T_{eq} = 2100$ K, d'une part pour toutes les latitudes des limbes est et ouest, permettant ainsi de mettre en évidence les variations de température le long des limbes, et d'autre part pour l'équateur à toutes les longitudes, permettant de voir la différence de température au travers des limbes avec les profils en températures inversés par *TauREx* ajoutés sur ces graphes. Le profil inversé pour la simulation la plus froide semble correspondre assez correctement à un profil au niveau des limbes moyennées est-ouest et au niveau de l'équateur. En revanche, pour la simulation la plus chaude, le profil inversé ne semble pas vraiment correspondre aux profils en température de la simulation GCM, quelle que soit la latitude ou la longitude. Dans ce cas, les hétérogénéités sont trop fortes pour qu'un simple profil vertical 1D parvienne à représenter la complexité de l'atmosphère d'une planète si chaude.

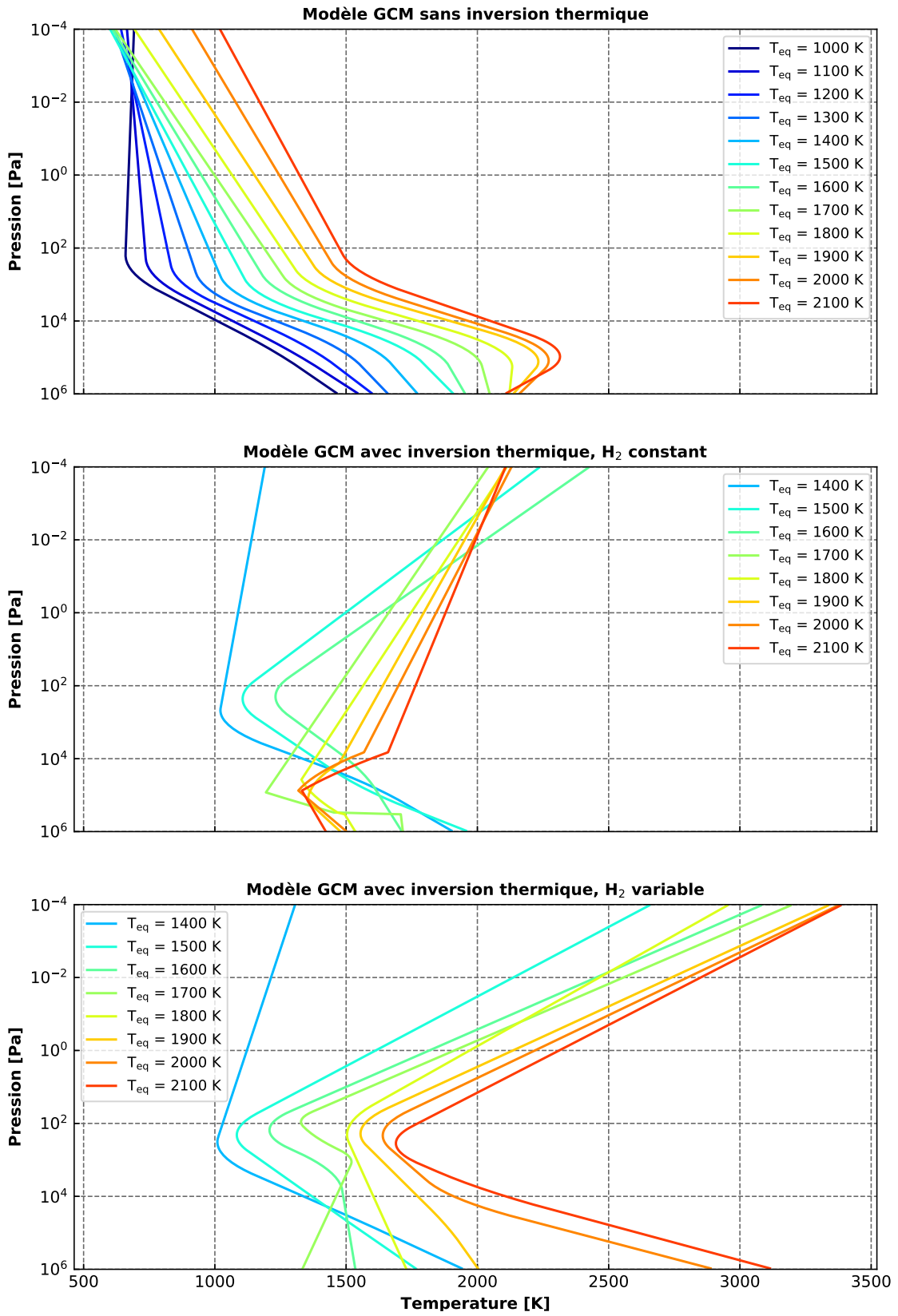


FIGURE 4.11 – Profils en température inversés par *TauREx* pour les simulations GCM sans inversion thermique (haut), avec inversion thermique et H₂ constant (milieu) et avec inversion thermique et H₂ variable (bas).

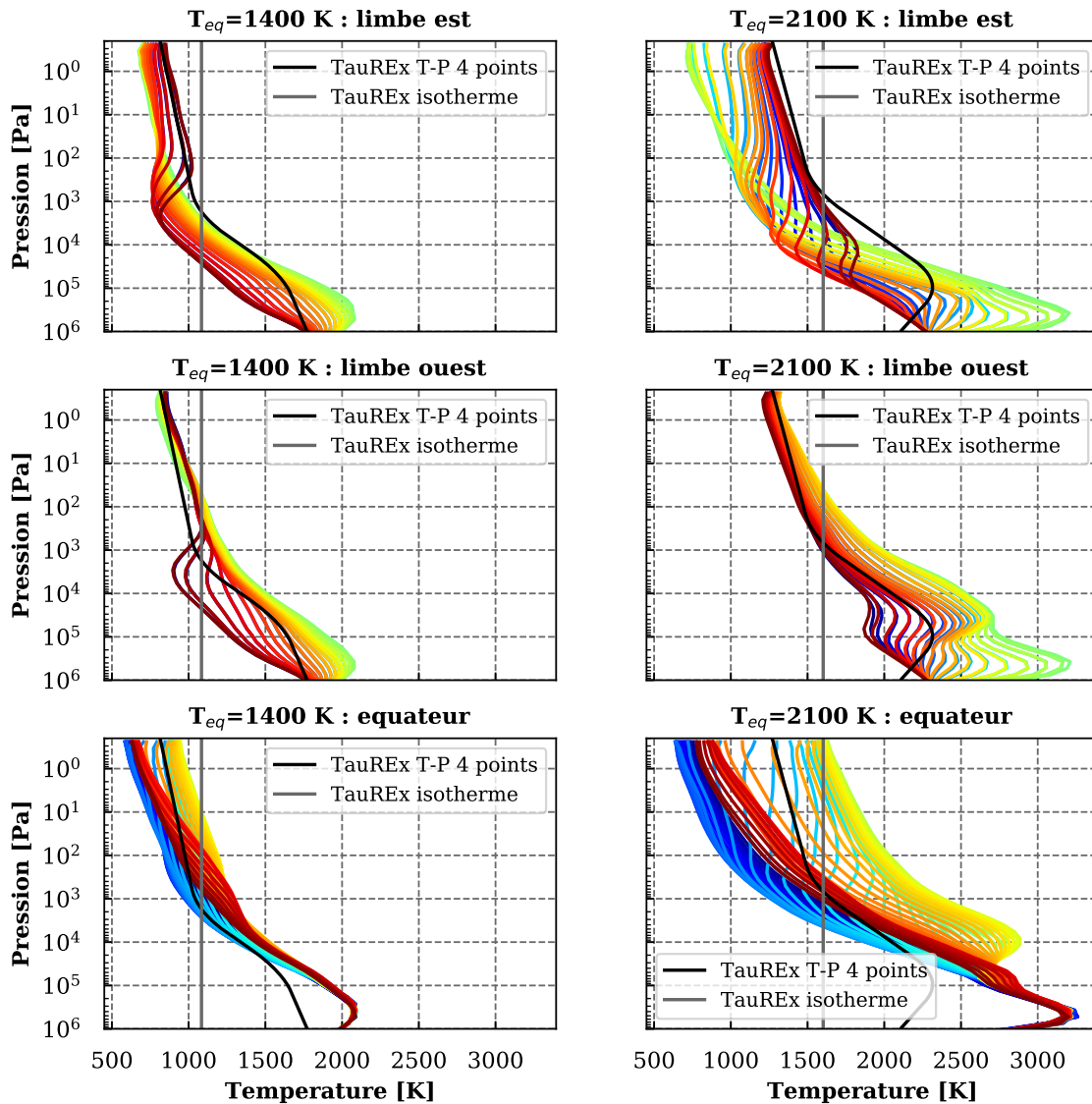


FIGURE 4.12 – Profils de température des modèles GCM sans TiO/VO pour $T_{eq} = 1400$ K (gauche) et $T_{eq} = 2100$ K (droite). De haut en bas, nous représentons le limbe est (longitude 90°) pour toutes les latitudes et le limbe ouest (longitude 170°) pour toutes les latitudes (dégradé de couleur du bleu vers le rouge, respectivement du pôle nord au pôle sud) puis l'équateur (latitude 0°) pour toutes les longitudes (dégradé de couleur du bleu vers le rouge, respectivement du limbe ouest jusqu'au limbe est). Nous représentons aussi le profil de température inversé par *TauREx* dans le cas isotherme (en gris) et dans le cas d'un profil vertical à 4 points (en noir).

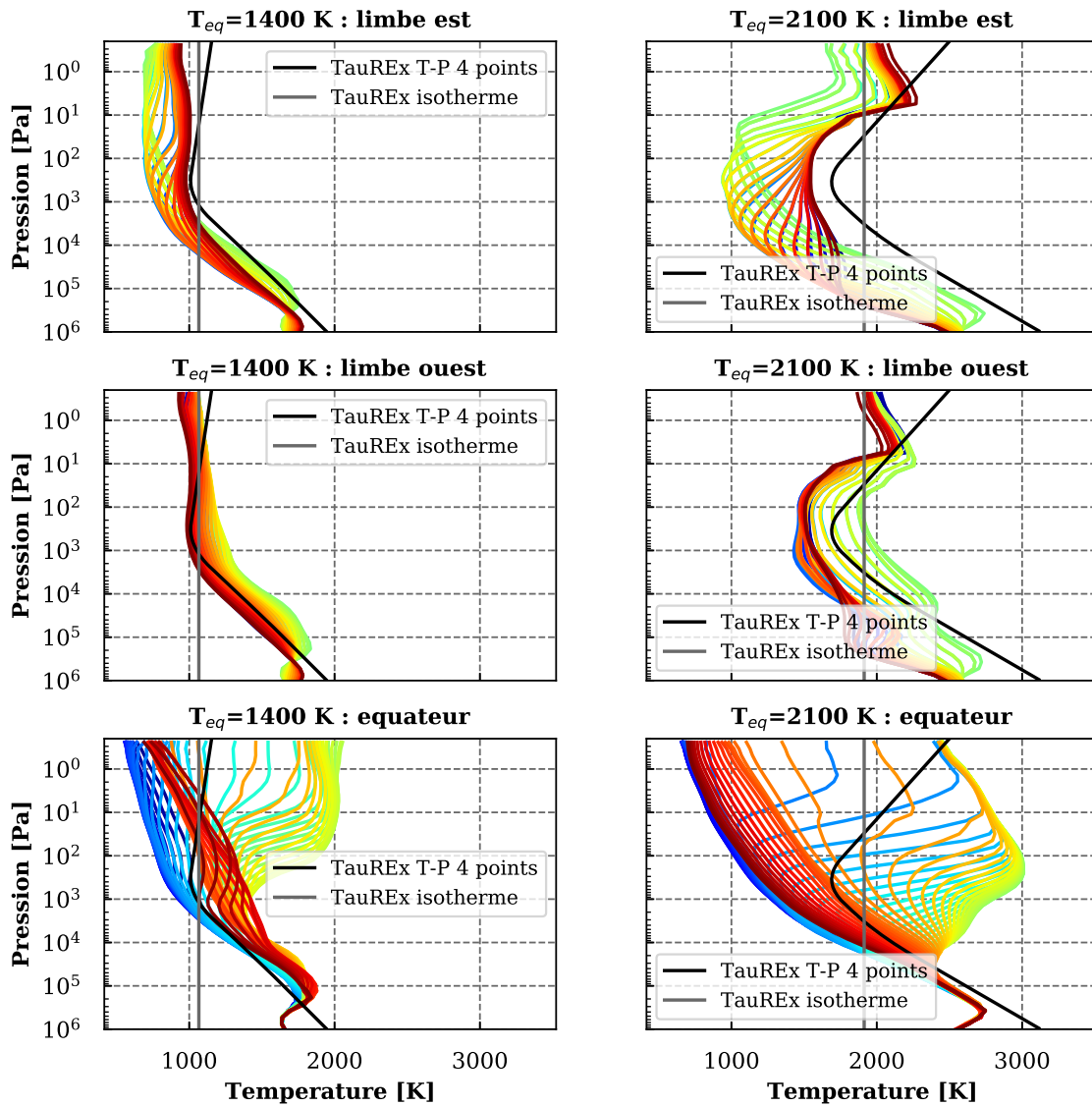


FIGURE 4.13 – Identique à la Figure 4.12 pour les simulations GCM avec inversion thermique et la dissociation thermique de H_2 prise en compte.

4.4 Bilan global des effets 3D sur les inversions de données 1D

La structure tri-dimensionnelle des atmosphères de Jupiters chauds et ultra chauds impacte fortement la spectroscopie en transmission et biaise les modèles d'inversions de données 1D utilisées pour analyser et interpréter les données d'observations. Ces spectres transportent en effet des informations provenant de diverses régions de l'atmosphère, et il est souvent difficile de les dé-corréler. Cette structure 3D implique des variations des propriétés physico-chimiques de l'atmosphère, à l'origine de l'allure du spectre, selon trois axes principaux : i) les variations en fonction de l'altitude que nous qualifions d'effets verticaux ; ii) les variations nord/sud/est/ouest que nous qualifions d'effets horizontaux le long des limbes ; iii) et les variations entre le côté jour et le côté nuit, que nous qualifions d'effets horizontaux au travers des limbes. C'est en hiérarchisant l'impact de ces trois contributions que nous sommes capables de dire dans quelle mesure les modèles d'inversions de données sont biaisés. Grâce à nos travaux, nous avons d'une part caractérisé quantitativement les biais observés, permettant ainsi une compréhension plus exhaustive des effets mis en jeu, et d'autre part nous avons mis en évidence les origines ainsi que les limites de ces biais.

4.4.1 Effets verticaux

Nous nous intéressons ici à l'impact des variations des propriétés physico-chimique avec l'altitude. Il s'agit de l'effet principalement considéré dans les études d'atmosphères puisque la plupart des études supposent que la zone sondée en transmission est un anneau fin autour du terminateur (Tinetti et al. 2007 ; Redfield et al. 2008 ; Tsiaras et al. 2018 ; Edwards et al. 2020 ; Pluriel et al. 2020). Les modèles d'inversions 1D sont capables de reproduire assez fidèlement les effets verticaux, étant donné qu'ils sont en mesure d'inverser des profils T-P verticaux. Par conséquent, lorsque le spectre en transmission est principalement affecté par les variations de températures avec l'altitude, des modèles tels que *TauREx* parviennent à ajuster avec précision le spectre et à en déduire les caractéristiques physiques et chimiques cohérentes avec la simulation en entrée.

Nous avons démontré cela avec les inversions de données sur les simulations sans inversion thermique. Pour rappel, dans ces cas, les atmosphères des planètes restent relativement homogènes et surtout ne présentent pas une très forte dichotomie jour–nuit, comme le montrent les Figures 4.6 et 4.7. Par conséquent, d'une part les régions sondées par les spectres en transmissions demeurent proche du terminateur, et d'autre part ce terminateur est assez homogène avec de faibles variations est–ouest. Ce sont alors les effets verticaux au niveau du terminateur qui dominent l'allure des spectres donnant lieu à des inversions de données pertinentes et précises lorsque l'on inverse un profil T-P (voir Figure 4.10). La Figure 4.12 montre également que la variation de température verticale est plus importante que celle le long des limbes, d'où la grande confiance du modèle d'inversion de données avec ses ajustements ($\chi^2 < 1$).

Les modèles d'inversions 1D restent donc adaptés pour étudier des atmosphères de Jupiters pas trop chauds, où les variations horizontales le long et au travers des limbes peuvent être négligées. Il faut malgré tout rester conscient que les résultats obtenus dans ce cas par les inversions de données

concernent principalement un anneau fin autour du terminateur. Pour déterminer les caractéristiques de l'ensemble de l'atmosphère, il reste donc nécessaire de comparer ces résultats à des simulations GCM qui modélisent la totalité de l'atmosphère.

Précisons enfin que lorsque nous étudions les simulations GCM où l'atmosphère présente une inversion thermique, les effets verticaux ne dominent rapidement plus l'allure des spectres qui deviennent dominés par les effets horizontaux. Les résultats des modèles d'inversions de données sont en effet fortement biaisés avec malgré un $\tilde{\chi}^2$ inférieur à 1, indiquant alors une défaillance du modèle 1D vertical pour expliquer le spectre observé puisque le modèle trouve un bon ajustement avec des abondances de CO erronées.

4.4.2 Effets horizontaux le long des limbes

Un second effet géométrique peut affecter l'allure des spectres en transmission, c'est lorsqu'il y a des différences le long des limbes et en particulier entre le limbe est et ouest. Cela se produit notamment lorsque de forts jets sont présents dans l'atmosphère ou que celle-ci est en super-rotation. Cela crée alors une asymétrie est-ouest avec des différences de températures parfois importantes qui affectent le spectre de manière non négligeable.

Ces effets sont mis en évidence avec les simulations GCM que nous avons étudiées et dont les profils thermiques sont présentés en Figures 4.12 et 4.13. Ces figures comparent les limbes ouest et est pour deux simulations, l'une plutôt froide avec une température d'équilibre de 1400 K et l'autre chaude avec une température d'équilibre de 2100 K et montrent que les limbes est sont en moyenne plus froids que les limbes ouest. Cette différence en température devient non négligeable pour les simulations avec inversion thermique pour les simulations jusqu'à $T_{eq} = 1700$ K puisque ces simulations présentent une asymétrie est-ouest comme le montrent les cartes en température de la Figure 4.1. Ainsi, l'évolution rapide des biais des rapports $[CO]/[H_2O]$ inversés de la Figure 4.10 avant la rupture de pente est due aux divergences est-ouest.

Plusieurs travaux ont étudié ces effets d'inhomogénéités est-ouest, que ce soit sur des simulations d'observations ou de réelles observations avec notamment [Line and Parmentier \(2016\)](#), qui montrent que la présence d'une couche nuageuse non-uniforme au niveau du terminateur peut affecter les interprétations des observations en transits. Des simulations GCM mettent également en évidence ces asymétries est-ouest au terminateur qui semblent être cohérentes avec les observations ([Showman et al. 2008](#)). [MacDonald et al. \(2020\)](#) ont également étudié les biais engendrés par ces différences est-ouest et ont démontré leur importance sur les résultats des modèles d'inversion de données. La prise en compte de cette hétérogénéité du terminateur leur a aussi permis d'expliquer des températures inversées anormalement froides pour les exoplanètes Wasp-17 b et Wasp-12 b.

Il serait possible de résoudre ce problème en augmentant la résolution temporelle entre le début et la fin du transit afin de parvenir à différencier au minimum deux spectres, l'un provenant du limbe est, l'autre du limbe ouest. Ainsi, nous nous retrouverions avec seules les différences verticales que les modèles 1D d'inversion de données savent résoudre. Un autre moyen peut permettre d'obtenir séparé-

ment les informations sur chaque limbe, à savoir en utilisant la courbe de phase. Si la courbe de phase contient les observations du début de transit et de fin de transit avec un échantillonnage suffisant, il est possible d'obtenir des spectres en transmission séparés pour le limbe est et le limbe ouest, et ainsi lever la dégénérescence portée par un spectre obtenu en milieu de transit sans pour autant avoir besoin d'une meilleure résolution spatiale. Il n'est cependant pas aisé d'obtenir de telles observations.

4.4.3 Effets horizontaux au travers des limbes

Nous regardons ici comment les variations physico-chimiques jour–nuit affectent le spectre en transmission. Ces effets horizontaux sont très souvent négligés puisque l'opacité diminue exponentiellement avec l'altitude et que la courbure de l'atmosphère sur l'axe étoile–observateur implique en général que la lumière parvenant à l'observateur ne sonde qu'un anneau fin autour du terminateur. Pour rappel, la Figure 2.16 du chapitre 2 met bien en évidence cette région de pénétration généralement considérée.

Néanmoins, nous avons vu que pour certains Jupiters très chauds, une dichotomie jour–nuit se dessine avec une atmosphère bien dilatée du côté jour de la planète qui va alors changer fortement la géométrie de ces atmosphères. La Figure 4.1 illustre parfaitement cette géométrie, où nous voyons clairement que l'hémisphère jour se trouve de plus en plus étendu en allant vers les planètes les plus chaudes impliquant donc que les régions sondées lors d'un transit s'élargissent du côté jour et ne sont plus un anneau fin autour du terminateur. Dans de telles planètes, les effets verticaux deviennent négligeables par rapport aux effets horizontaux puisque les variations de températures jour–nuit sont de l'ordre du millier de Kelvin quand les variations avec l'altitude sont de l'ordre de la centaine de Kelvin dans les régions sondées par le spectre. En outre, les divergences le long des limbes demeurent faibles pour les atmosphères les plus chaudes (voir Figure 4.2) d'où une domination des effets au travers des limbes dans ce cas.

Ces effets horizontaux vont alors être à l'origine d'importants biais dans les températures et les abondances inversées par les modèles d'inversions de données 1D qui ne sont pas capable de prendre en compte correctement les variations géométriques horizontales où l'inflation de l'atmosphère du côté jour de ces planètes masque le côté nuit. Ainsi, que ce soit en utilisant des inversions de données isothermes ou avec profil vertical, les modèles d'inversions ne parviennent pas à reproduire des atmosphères fidèles aux modèles GCM en entrée. Par ailleurs, et comme nous en avons discuté tout au long du chapitre 3 et 4, la dissociation thermique des espèces vient ajouter de la complexité à ces considérations géométriques, impliquant que le spectre en transmission sonde des zones très différentes selon la longueur d'onde observée.

L'impact de la dichotomie jour–nuit sur le spectre en transmission est donc très faible pour une majorité d'atmosphères, puisque pour la plupart d'entre elles la zone sondée ne peut pas mettre en évidence cet aspect. En revanche, lorsque nous étudions des atmosphères chaudes, il devient nécessaire de le considérer car cet effet peut devenir dominant dans les observations et donc mener à des interprétations erronées s'il n'est pas pris en compte. Notons qu'il existe un régime d'atmosphères où les trois effets décrits précédemment sont du même ordre de grandeur, rendant très complexe l'analyse de leurs spectres en transit.

Chapitre 5

Limites, Conclusions & Perspectives

Sommaire

5.1	Limites	121
5.1.1	GCM SPARC/MIT	121
5.1.2	<i>Pytmosph3R</i>	121
5.1.3	<i>TauREx</i>	122
5.2	Conclusions	124
5.3	Vers de nouveaux outils plus performants	125
5.3.1	<i>Pytmosph3R 2.0</i>	125
5.3.2	<i>TauREx 2D</i>	127

5.1 Limites

Les travaux de cette thèse nous ont permis de tester les limites des modèles d'inversion 1D en mettant en évidence des biais intrinsèques aux spectres en transmission que ces modèles ne peuvent démêler. En outre, nous avons quantifié l'évolution de ces biais pour une gamme de planètes allant des Jupiters chauds aux Jupiters ultra chauds et nous avons expliqué l'origine de ces biais. Cependant, la majeure partie de ce travail est basée sur des expériences numériques, combinant plusieurs modèles, faisant chacun un certain nombre d'hypothèses. Nous allons donc rappeler ces hypothèses et estimer leurs impacts pour garder un regard critique sur les conclusions obtenues.

5.1.1 GCM SPARC/MIT

Pour commencer, revenons sur le modèle de climat que nous utilisons pour modéliser l'atmosphère de Jupiters chauds typiques, le GCM SPARC/MIT (Showman et al. 2008). Pour les études menées au cours de cette thèse, nous nous sommes basés sur des modèles GCM générés tels que décrits par Parmentier et al. (2018). Les principales hypothèses de ce modèle y sont décrites, notamment le fait que nous modélisons une planète orbitant autour d'une étoile de type solaire avec l'hypothèse que la composition de l'atmosphère respecte aussi les abondances solaire (Lodders and Fegley 2002; Fortney et al. 2007). Il s'agit d'une hypothèse raisonnable car nous souhaitons rester général et modéliser des Jupiters chauds typiques. Le choix d'une étoile solaire est cohérent à la fois car nous connaissons des Jupiters chauds orbitant autour d'étoiles de ce type, et aussi car c'est un type d'étoile que nous connaissons bien et qui est donc plus facile à simuler au vu de nos connaissances actuelles. Le modèle suppose aussi la dissociation thermique des espèces, et notamment celle de H_2 qui se dissocie en H^- et en hydrogène atomique. Cependant, le GCM suppose que le poids moléculaire moyen, le coefficient adiabatique et capacité thermique spécifique qui sont respectivement fixés à $\mu = 2.3 \times m_H$, $C_p = 1.3 \times 10^4 J.kg^{-1}K^{-1}$ et $\gamma = 1 + 2/7$, faisant l'hypothèse d'une atmosphère dominée par H_2 , ce qui n'est plus valable avec la dissociation thermique des espèces. Le GCM ne prend également pas en considération la recombinaison de l'hydrogène atomique dans les zones plus froides et de plus hautes pressions qui est pourtant à l'origine d'une redistribution de l'énergie au sein de l'atmosphère comme le montrent Komacek and Showman (2016) et Tan and Komacek (2019). Cet effet d'ordre non négligeable peut modifier fortement la distribution en température dans l'atmosphère et implique un manque d'auto-cohérence du modèle. Les structures thermiques des atmosphères où H_2 se dissocie présentent donc une dichotomie jour–nuit potentiellement exagérée. Ces limites ne remettent donc pas en cause les conclusions qualitatives obtenues dans cette thèse, mais elles indiquent que les données quantitatives sont potentiellement sur-estimées présentant donc une limite haute des modèles d'inversion de données 1D.

5.1.2 *Pytmosph3R*

La principale hypothèse faite avec *Pytmosph3R* concerne la composition des atmosphères étudiées. Comme nous l'avons expliqué dans le chapitre 3, les simulations GCM, d'où nous extrayons les cartes en températures, sont générées à partir d'atmosphères ayant une composition chimique plus complète que

celle que nous modélisons pour obtenir les spectres en transmission. Par exemple, les simulations GCM où les cartes en température présentent une inversion thermique sont générées à partir d'une atmosphère composée de H_2 , He, CO, H_2O , TiO, VO et H^- tandis que nous considérons seulement des atmosphères composées de H_2 , He, CO et H_2O pour générer les spectres. Cela revient à ne se concentrer que sur une partie de la composition de l'atmosphère pour l'analyse d'inversion de données afin d'éviter des dégénérescences, mais cela crée aussi un manque d'auto-cohérence entre les modèles. Il serait alors plus cohérent de générer les spectres avec l'atmosphère complète et de voir l'impact sur l'inversion de donnée *TauREx*.

La pression du haut du modèle GCM s'arrête à 10^{-1} Pa. Or, nous savons que dans certaines atmosphères, des parties de plus basses pressions peuvent contribuer au spectre en transmission, comme le montre la Figure 5.1. Sur ces deux exemples, nous voyons clairement que certaines raies sondent des pressions plus basses que 10^{-1} Pa, bien que nous notons que dans le cas du Jupiter ultra chaud Wasp-121 b, quasiment aucune raie ne dépassent cette pression. Pour palier à ce problème, *Pytmosph3R* génère des atmosphères où la pression du toit vaut 10^{-4} Pa ce qui permet de couvrir une gamme suffisamment large de pression et de ne manquer aucune contribution moléculaire. Cependant, au vu de la pression du toit du GCM, *Pytmosph3R* doit effectuer une extrapolation pour combler jusqu'à 10^{-4} Pa. L'hypothèse faite ici est une extrapolation d'ordre zéro, où les températures du toit du GCM sont extrapolées de façon isotherme jusqu'au toit du modèle *Pytmosph3R* ainsi que les abondances des espèces. Cette hypothèse permet une forme de neutralité, ne supposant ni un refroidissement adiabatique ni un réchauffement radiatif avec une thermosphère. Néanmoins, l'hypothèse sur l'extrapolation des abondances des espèces néglige la diffusion moléculaire qui devient très grande à très basse pression et haute température notamment pour les espèces plus lourdes que H_2 ce qui va avoir tendance à surestimer légèrement l'opacité dans cette région.

5.1.3 *TauREx*

La principale limite du modèle d'inversion de données *TauREx* est qu'il s'agit d'un modèle 1D, ne permettant donc pas de prendre en compte la complexité 3D des atmosphères observées. Nous avons largement développé cette limite tout au long de la thèse, nous n'en discuterons donc pas plus ici. Le code *TauREx* est toujours en développement, par conséquent notre étude a aussi été limitée par ces aspects pratiques. Par exemple, la version 3 de *TauREx* (Al-Refaie et al. 2019) ne fut disponible qu'à partir de décembre 2019. Cette version est d'une part beaucoup plus rapide que la version 2 (environ 7 fois plus rapide), mais aussi plus complète. Par exemple, il est dorénavant possible d'inverser le H^- , ce qui aurait été très utile dans notre étude sur Wasp-121 b. Par ailleurs, la rapidité de la version actuelle permet des études plus approfondies puisque nous pouvons tester des inversions de données avec plus de paramètres (typiquement plus de molécules à inverser) et sur des gammes de longueurs d'onde plus grande sans que cela ne nécessite plus de ressources informatiques.

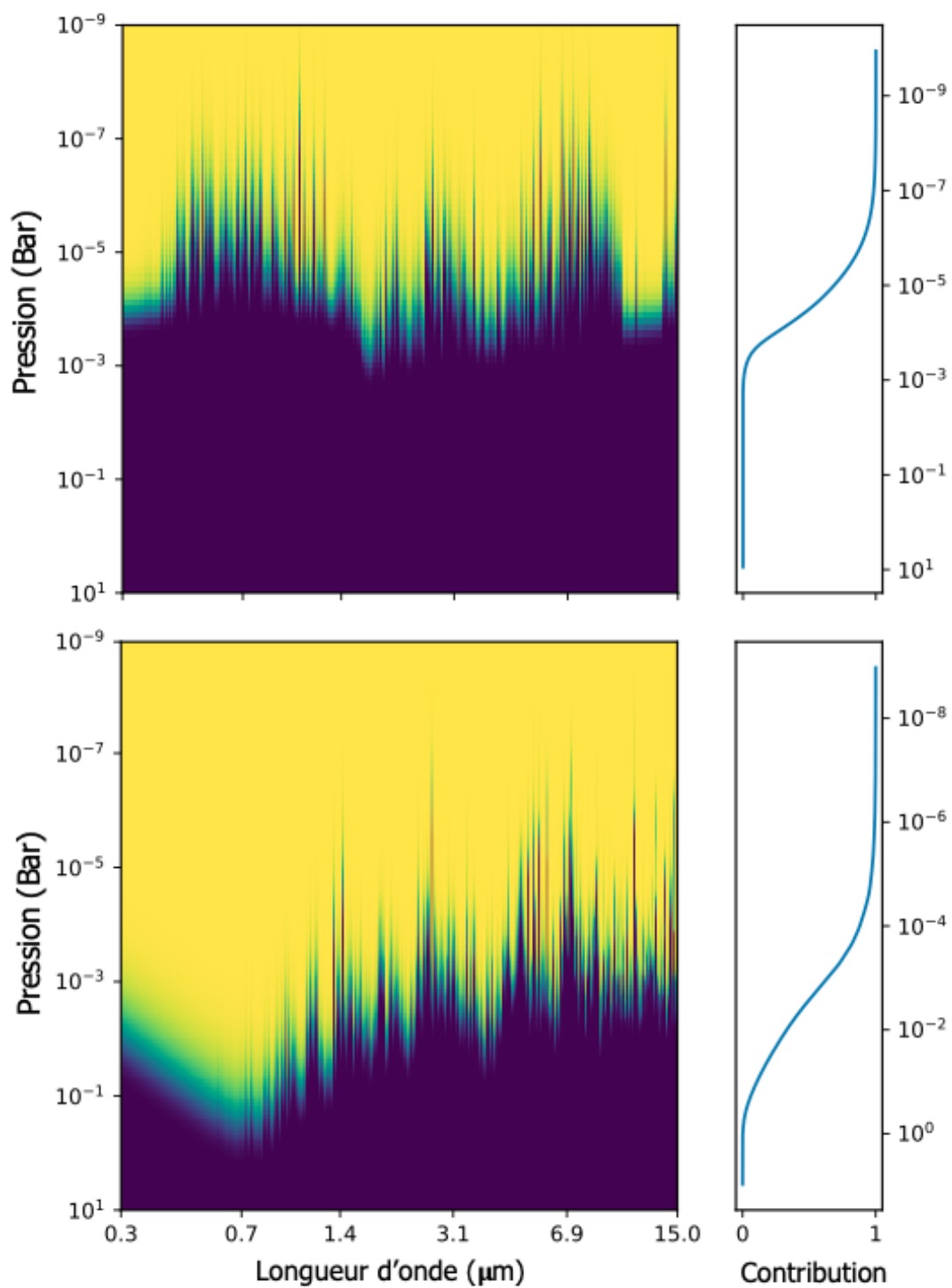


FIGURE 5.1 – Contribution des spectres en transmission de la planète Kelt-7 b (haut) et de la planète Wasp-121 b (bas). Il est clair que certaines raies sont présentes à des pressions inférieures à 10^{-1} Pa, bien que cela soit bien plus important pour Kelt-7 b que pour Wasp-121 b.

5.2 Conclusions

Malgré les limites décrites auparavant, les travaux présentés dans cette thèse ont permis une réelle avancée sur l'analyse des observations effectuées par les modèles d'inversion actuels, que ce soit sur des données observationnelles ou sur des simulations d'observations.

Nous nous sommes d'abord concentrés sur l'utilisation actuelle des modèles d'inversions 1D en analysant des données HST+Spitzer+TESS du Jupiter chaud Kelt-7 b. En effet, ces modèles sont couramment utilisés aujourd'hui pour analyser les atmosphères d'exoplanètes (Line et al. 2015; Samland et al. 2017; Sedaghati et al. 2017; Tsiaras et al. 2018), permettant aujourd'hui de détecter avec confiance un certain nombre de molécules au sein des atmosphères de Jupiters chauds. L'analyse des données HST, Spitzer et TESS de l'exoplanète Kelt-7 b conclue en effet à une détection de H₂O, de et de CO dans son atmosphère et permet d'établir un profil thermique du côté jour ainsi qu'une estimation de la température au niveau des limbes de la planète. En outre, le modèle d'inversion indique les abondances inversées, complétant l'analyse qualitative par une analyse quantitative. Néanmoins, il faut rester prudent sur ces informations car ces valeurs d'abondances sont obtenues en faisant un certain nombre d'hypothèses plus ou moins pertinentes selon les cas (voir Section 5.1), et les températures inversées peuvent aussi être biaisées par le modèle lui-même. Cette analyse nous permet donc d'obtenir des informations globales sur Kelt-7 b, donnant une première estimation du type d'atmosphère qu'elle possède, mais cette analyse ne peut être plus précise sans une meilleure compréhension du modèle d'inversion 1D et de ces limites.

Pour estimer la pertinence des modèles d'inversions 1D sur les atmosphères chaudes, nous avons décidé d'étudier un cas extrême, le Jupiter ultra chaud Wasp-121 b, afin de voir comment une inversion de données 1D d'une telle atmosphère est gérée. Ces travaux ont mis en évidence plusieurs points importants. D'abord, le code d'inversion ne parvient pas toujours à une convergence satisfaisante, d'où une confiance dans l'inversion de données parfois assez faible. Nous avons aussi établi que les résultats du modèle d'inversion 1D *TauREx* sont fortement biaisés, et que le code ne parvient pas à inverser les abondances attendues. Nous proposons des diagnostics d'interprétation des résultats afin d'estimer le taux de confiance dans le modèle et la probable implication d'effets 3D. Nous suggérons d'utiliser le rapport [CO]/[H₂O] inversé pour estimer la présence d'hétérogénéités chimiques dans l'atmosphère, un rapport [CO]/[H₂O] $\gg 1$ étant un indice fort. Nous proposons aussi un test- $\tilde{\chi}^2$ pour comprendre si des phénomènes physiques non pris en compte dans notre modèle opèrent au sein de l'atmosphère. En effet, si le $\tilde{\chi}^2$ est trop élevé, cela signifie que le modèle d'inversion ajuste mal le spectre ce qui peut indiquer par exemple la présence de dissociation chimique non prise en compte. Pour confirmer l'importance des effets tridimensionnels sur des données observationnelles, nous avons aussi comparé des données HST/WFC3 de Wasp-121 b avec un modèle simulé par *Pytmosph3R* qui nous a permis d'ajuster les données avec une atmosphère simulée relativement simple, sans nuages ou brumes. Ce résultat nous conforte dans l'idée que les effets géométriques ont un impact non négligeable sur les spectres en transmission.

Nous avons ensuite souhaité trouver la limite de validité des modèles d'inversion 1D afin de donner

à la communauté un cadre clair où nous estimons que ces modèles sont fiables, et où ils le sont moins. Nos travaux ont montré que l'origine des biais les plus importants provient des hétérogénéités physico-chimiques jour–nuit. Ces effets horizontaux au travers des limbes dominent les spectres en transmission des atmosphères les plus chaudes, à partir de planètes dont la température d'équilibre avoisine les 1400 K. Les biais observés peuvent aller jusqu'à un facteur 100 sur les abondances inversées. Nous avons aussi établi que des effets le long des limbes affectent les spectres en transit, de façon moins marquées mais malgré tout observables. Ces asymétries est–ouest contribuent elles aussi aux biais observés sur les abondances inversées, mais pas pour les atmosphères les plus chaudes. Nos simulations GCM montrent en effet une diminution des différences le long des limbes dans les cartes en température à partir de température d'équilibre de 1700 K. Ainsi, ces deux effets horizontaux sont présents pour les planètes dont la température d'équilibre est comprise environ entre 1400 K et 1700 K. Nos résultats concluent que pour les planètes plus froides, les effets verticaux dominent le spectre en transmission et donc qu'un modèle d'inversion 1D risque moins d'inverser des abondances erronées. Les diagnostics que nous recommandons, en particulier le test- $\tilde{\chi}^2$, peuvent aussi être utilisé pour les analyses d'atmosphères plus froides, leur interprétation physique sera en revanche probablement différente.

5.3 Vers de nouveaux outils plus performants

Nous avons vu tout au long de cette thèse d'une part les performances des modèles d'inversions de données actuels dans l'étude des atmosphères d'exoplanètes géantes chaudes, quelles informations ces modèles nous permettent d'obtenir et avec quel niveau de confiance, et d'autre part nous avons établi les limites de ces modèles et mis en évidence les biais qui les affectent.

Nous cherchons maintenant à améliorer le modèle de simulations des observations en transmission *Pytmosph3R* ainsi que le modèle d'inversion de donnée *TauREx* dans deux buts bien distincts : i) nous développons une version 2.0 de *Pytmosph3R* afin d'améliorer l'ergonomie et l'efficacité de ce modèle de simulation d'observation en transit; ii) nous créons une version 2D de *TauREx* pour permettre à ce modèle d'inversion de prendre en compte la dichotomie jour–nuit, cause majeure des biais observés dans les études de Jupiters ultra chauds.

5.3.1 *Pytmosph3R* 2.0

Le code *Pytmosph3R* a été conçu pour générer des observations en transmission prenant en compte la géométrie 3D des atmosphères, voir les détails dans (Caldas et al. 2019). La version actuelle de ce code, bien que performante au niveau de la précisions des calculs fournis, présente plusieurs défauts que nous souhaitons supprimer pour en faire un code plus simple d'utilisation, plus rapide et demandant moins de mémoire vive. Un manuel d'utilisation de la version 1.3 de ce code est décrite dans l'annexe B.

La version 1.3 de *Pytmosph3R* contient plusieurs limites, qu'elles soient au niveau de l'utilisation et de la diffusion du code, mais aussi au niveau de l'efficacité numérique (mémoire vive nécessaire, temps de calcul). Par ailleurs, *Pytmosph3R* 1.3 est entièrement écrit en *Python 2*, version de python qui n'est

plus mise à jour dorénavant. Dans un soucis de compatibilité et pour faciliter son utilisation et ses mises à jour, nous avons donc écrit la version 2.0 de *Pytmosph3R* en *Python 3*.

En premier lieu, l'enregistrement des données en entrée nécessaires au fonctionnement du code n'est pas optimal. La manière dont le code gère ces données, et en particulier les données spectroscopiques, n'est pas généralisé, et il est très souvent nécessaire à l'utilisateur de générer lui-même les scripts afin de transformer ces données pour les rendre lisible par le code. En outre, les unités ne sont pas harmonisées au sein du code, et il faut donc veiller à ne pas faire d'erreur à ce niveau au risque de fausser complètement les résultats. Une fonction "*record*" existe, mais celle-ci ne permet l'ajout que d'un certain type de données spécifiques.

Nous avons résolu ce problème en changeant complètement la manière dont les données sont implémentées dans *Pytmosph3R*. Pour les données spectroscopiques, nous utilisons désormais *exo-k*¹, un code créé pour gérer les opacités radiatives de diverses sources. Cette librairie permet notamment de convertir facilement des tables de section efficaces (monochromatiques ou en k-corrélés) d'un format à un autre et d'utiliser ces dernières pour calculer rapidement les propriétés radiatives d'un mélange de gaz donné. Grâce à *exo-k*, nous pouvons donc facilement ajouter les données d'entrées dans *Pytmosph3R* 2.0, que ce soit en section efficaces ou en k-corrélés, deux modes de fonctionnement présents dans *Pytmosph3R* (voir annexe B). Le fait d'utiliser *exo-k* résout également les problèmes de compatibilité d'unités puisque ce code est prévu pour veiller à l'homogénéité des unités. En outre, la version 2.0 de *Pytmosph3R* contiendra des tests automatiques pour vérifier d'éventuelles incompatibilités entre les données des modèles atmosphériques et les données spectroscopiques utilisées par *exo-k*.

En second lieu, la version actuelle de *Pytmosph3R* utilise une quantité de mémoire vive importante, ce qui pose parfois des problèmes sur certaines simulations à haute résolution notamment. En outre, sur ce même type de simulation, le temps de calcul est parfois important. Dans la nouvelle version de *Pytmosph3R* que nous développons, nous allons modifier la manière dont sont enregistrées les sorties afin de ne générer qu'un seul fichier de sortie, une bibliothèque HDF5. Ce type de format à l'avantage d'être optimiser en python et permet de libérer une quantité importante de mémoire lors des sauvegardes de données. En outre, et bien que comme dans la version 1.3 les calculs sur les données spectroscopiques occupent le plus de mémoire et de temps de calcul, l'utilisation du code *exo-k* permettra une efficacité plus grande et une optimisation à la fois du temps de calcul et de la mémoire vive utilisée.

Enfin, un certain nombre d'options proposées par *Pytmosph3R* 1.3 sont trop spécifiques et ne sont pas suffisamment utilisées pour justifier de les proposer au public puisque cela peut créer de la confusion dans le fichier de paramètres voir des erreurs s'il y a incohérences entre des paramètres incompatibles. Nous avons donc retravaillés sur les options les plus nécessaires, tout en faisant en sorte de clarifier l'utilisation du fichier de paramètres afin d'éviter les conflits car nous cherchons à faire une version la plus simple possible pour les utilisateurs.

1. http://perso.astrophys.u-bordeaux.fr/~jleconte/exo_k-doc/index.html

5.3.2 *TauREx* 2D

La version actuelle de *TauREx* détaillée dans [Al-Refaie et al. \(2019\)](#) permet une analyse 1D verticale des atmosphères, donnant alors un profil thermique inversé et une abondance homogène dans tout l'atmosphère. Une option permet d'inverser une paramétrisation en deux couches et donc d'obtenir deux abondances ([Changeat et al. 2019](#)), mais cela reste vertical. Ils ont aussi développé une version "1.5D" pour étudier les spectres en émission qui devrait permettre en partie de résoudre certains problèmes pointés dans ce manuscrit ([Changeat and Al-Refaie 2020](#)), mais nous souhaitons ici créer un modèle 2D en transmission.

Or, nos travaux ont montré que le principal vecteur de biais dans l'étude des Jupiters ultra Chauds vient de la dichotomie jour–nuit et donc de variations horizontales dans l'axe de l'observateur très fortes. Nous avons alors eu l'idée de développer une nouvelle version de *TauREx*, où la pression et la température sont autorisées à dépendre d'un angle α menant alors à un modèle de transfert radiatif 2D horizontal sur l'axe étoile–observateur. Ce modèle repose sur le calcul de profils 2D associés à une section horizontale de l'atmosphère telle que présentée à la Figure 5.2, qui est ensuite généralisé pour le reste de la planète. Notre intention est de se baser sur

les connaissances apportées par les simulations GCM et la mise en évidence par nos travaux des biais jour–nuit sur les Jupiters chauds pour créer un modèle d'inversion de données capable d'inverser un modèle horizontal simple sur l'axe étoile–observateur qui pourra ajuster les dichotomies jour–nuit présentes dans ces atmosphères. Par conséquent, nous allons créer un système de coordonnées 2D sur la section de la Figure 5.2 basé sur l'angle α et l'altitude z , comme illustré dans la Figure 5.3.

La température et la pression sont donc définies comme des profils 2D basés sur les coordonnées (θ, z) . Pour initialiser ces profils, la pression P , la température T , l'altitude z , la gravité g et le coefficient d'atténuation μ sont définis sur une grille 2D préliminaire basée sur l'angle et les niveaux de pression, noté (θ, P_p) . Le profil de pression est défini avec une pression minimum (en haut) et maximum (à la surface), p_{min} et p_{max} respectivement, et décomposé en niveaux n_L . La pression dans chaque couche est choisie comme étant la moyenne entre la pression de deux niveaux dans l'espace logarithmique. Cela ne change pas dans une couche, quelle que soit la valeur de l'angle α . La température est définie dans

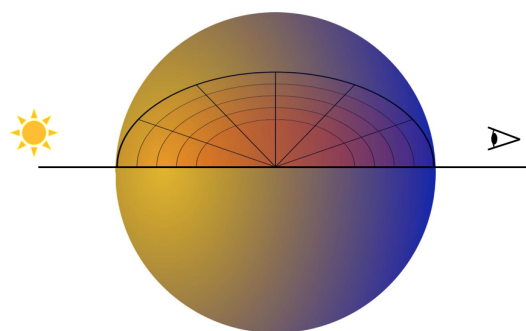


FIGURE 5.2 – Schéma de la section d'une atmosphère le long de la direction des rayons de lumière depuis l'étoile (située à gauche) jusqu'à l'observateur (situé à droite).

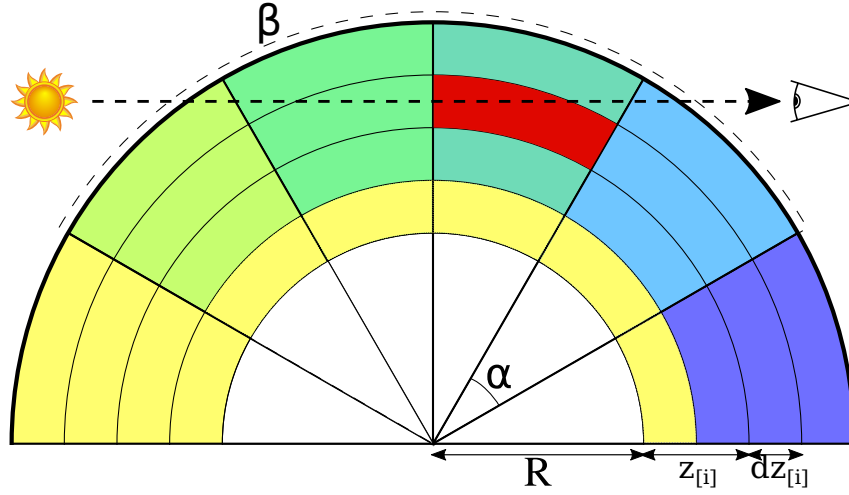


FIGURE 5.3 – Système de coordonnées 2D de type polaire de la section représentée à la Figure 5.2. La coordonnée angulaire est définie par le nombre de coupes n_{coupes} de la section. L'angle α est implémenté en degrés tel que $\alpha = 180/n_{slices}$. L'angle β , fixé par l'utilisateur, définit la partie de l'atmosphère comprise entre le côté jour et le côté nuit (la température évolue progressivement dans cette partie). R correspond au rayon de la planète (généralement à 10 bar). Le profil d'altitude z est calculé en utilisant le profil de pression du côté jour de la planète, et dz est la différence entre l'altitude d'une couche et la suivante. Un rayon de lumière traversant l'atmosphère, par d'exemple dans la partie de couleur rouge, correspondant à la couche i , associée à une altitude de base de z_i (ici, $i = 3$), et la tranche j , est associée à un angle de $j \times \alpha$ (ici $j = 3$).

l'équation 5.1, suite à une transition linéaire entre $-\beta$ et β telle que proposée dans Caldas et al. (2019) :

$$\left\{ \begin{array}{l} P > P_{iso} \quad T = T_j \\ P < P_{iso} \quad \left\{ \begin{array}{l} 2\alpha_* > \beta \quad T = T_j \\ \beta > 2\alpha_* > -\beta \quad T = T_n + (T_j - T_n) \frac{\alpha_* + \beta}{\beta} \\ 2\alpha_* < -\beta \quad T = T_n \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (5.1)$$

L'angle α^* représente l'angle d'élévation solaire local, T_j et T_n sont respectivement la température du côté jour et du côté nuit, P_{iso} est la pression en-dessous de laquelle l'atmosphère est supposée homogène. Il s'agit ainsi de la même équation que celle utilisée pour les simulations idéalisées du chapitre 3 car cela permet de modéliser simplement et efficacement une dichotomie jour–nuit qui prend place dans les atmosphère de Jupiters ultra chauds.

Une fois que les chemins des rayons et leurs longueurs ont été calculés, le calcul de la profondeur optique peut être effectué à l'aide de $\Delta\ell$, qui contient également les coordonnées du chemin dans le repère 2D (θ, z) sur lequel la pression et la température sont basées. Par conséquent, la profondeur optique à une longueur d'onde λ peut être décomposée pour chaque couche i comme telle :

$$\tau_\lambda(i) = \sum_{\alpha \in \alpha_\ell[i], r \in z_\ell[i], d\ell \in \Delta\ell[i]} \frac{P[\alpha, r]}{k_B T[\alpha, r]} \left(\sum_m \chi_m[\alpha, r] \sigma_{m, \lambda} \right) d\ell \quad (5.2)$$

où P est la pression, k_B la constante de Boltzmann, T la température, σ_m la section efficace de l'espèce m et $\chi_{m,\lambda}[\alpha, r]$ le rapport de mélange de la même espèce à la coordonnée (α, r) dans le système (θ, z) .

Un tel modèle 2D devrait donc nous permettre d'inverser des abondances plus cohérentes et donc de démêler les biais jusqu'alors inversés par les modèles 1D. Ce serait une avancée majeure dans le domaine puisque nous pourrions augmenter significativement la confiance dans l'interprétation des modèles inversés tout en conservant un temps de calcul raisonnable rendant possible une analyse de nombreuses exoplanètes. Par ailleurs, nous allons coupler ce modèle de transfert radiatif à un modèle chimique, en l'occurrence *FastChem* (Stock et al. 2018), qui permet de modéliser les abondances des espèces chimiques à l'équilibre, augmentant alors encore la confiance dans l'inversion de données qui sera obtenue par *TauREx*. Précisons que d'autres équipes travaillent aussi sur ce type de modèle d'inversion de données 2D (Feng et al. 2020), ce qui confirme que résoudre ces problématiques de biais géométriques est un enjeu essentiel pour appréhender correctement les observations futures.

Appendix A

Liste des publications

A.1 Publications avec relecture par les pairs

- **W. Pluriel**, E. Marcq, M. Turbet, "Modeling the albedo of Earth-like magma ocean planets with H₂O-CO₂ atmospheres", *Icarus* 317, January 2019
- **W. Pluriel**, T. Zingales, J. Leconte, "Strong biases in retrieved atmospheric composition caused by day-night chemical heterogeneities", *Astronomy and Astrophysics*, 636, A66, April 2020
- B. Edwards, Q. Changeat, R. Baeyens, A. Tsiraras, A. Al-Refaie, J. Taylor, K. H. Yip, M. F. Bieger, D. Blain, A. Gressier, G. Guilluy, A. Y.Jaziri, F. Kiefer, D. Modirrousta-Galian, M. Morvan, L. Mugnai, **W. Pluriel**, M. Poveda, N. Skaf, N. Whiteford, S. Wright, T. Zingales, B. Charnay, P. Drossart, J. Leconte, O. Venot, I. Waldmann, J-P. Beaulieu, "ARES I : WASP-76 b, A Tale of Two HST Spectra", *Astronomical Journal*, 160, July 2020
- N. Skaf, M. F. Bieger, B. Edwards, Q. Changeat, M. Morvan, F. Kiefer, D. Blain, T. Zingales, M. Poveda, A. Al-Refaie, R. Baeyens, A. Gressier, G. Guilluy, A. Y.Jaziri, F. Kiefer, D. Modirrousta-Galian, M. Morvan, L. Mugnai, **W. Pluriel**, N. Whiteford, S. Wright, B. Charnay, P. Drossart, J. Leconte, A. Tsiraras, O. Venot, I. Waldmann, J-P. Beaulieu, "ARES II : Characterising the Hot Jupiters WASP-127 b, WASP-79 b and WASP-62 b with HST", *Astronomical Journal*, 160, September 2020
- **W. Pluriel**, N. Whiteford, B. Edwards, Q. Changeat, K. H. Yip, R. Baeyens, A. Al-Refaie, M. F. Bieger, D. Blain, A. Gressier, G. Guilluy, A. Y.Jaziri, F. Kiefer, D. Modirrousta-Galian, M. Morvan, L. Mugnai, M. Poveda, N. Skaf, S. Wright, T. Zingales, B. Charnay, P. Drossart, J. Leconte, A. Tsiraras, O. Venot, I. Waldmann, J-P. Beaulieu, "ARES III : Unveiling the Two Faces of KELT-7 b with HST WFC3", *Astronomical Journal*, 160, September 2020
- G. Guilluy, A. Gressier, S. Wright, A. Santerne, A. Jaziri, B. Edwards, Q. Changeat, D. Modirrousta-Galian, N. Skaf, A. Al-Refaie, R. Baeyens, M. Bieger, D. Blain, F. Kiefer, M. Morvan, L. Mugnai, **W. Pluriel**, M. Poveda, T. Zingales, N. Whiteford, K. Yip, B. Charnay, J. Leconte, P. Drossart, A. Sozzetti, E. Marcq, A. Tsiraras, O. Venot, I. Waldmann, and J-P. Beaulieu, "ARES IV : Probing the atmospheres of the two warm small planets HD 106315 c et HD

3167 c with the HST/WFC3 camera", *Astronomical Journal*, accepted

A.2 Présentations données dans des conférences

- **W. Pluriel**, J. Leconte, T. Zingales, "The impact of the 3D structure of exo-atmospheres on transmission spectra", *Consortium meeting Ariel*, October 2020. **Oral.**
- **W. Pluriel**, N. Whiteford, B. Edwards, Q. Changeat, K. H. Yip, R. Baeyens, "ARES III : Unraveling the two faces of Kelt-7 b with HST/WFC3", *Consortium meeting Ariel*, October 2020. **Oral.**
- **W. Pluriel**, J. Leconte, T. Zingales, "How transmission spectroscopy is affected by the 3D structure of ultra hot Jupiter atmospheres", *Exosystème I*, January 2020. **Oral.**
- **W. Pluriel**, J. Leconte, T. Zingales, V. Parmentier, I. Waldmann, A. Caldas, "Unravelling the biases of transmission spectroscopy due to the three-dimensional structure of exo-atmospheres", *EPSC-DPS Joint Meeting 2019* EPSC-DPS2019-810, September 2019. **Oral.**
- **W. Pluriel**, J. Leconte, T. Zingales, V. Parmentier, A. Caldas, I. Waldmann, F. Selsis, "Unravelling the biases of transmission spectroscopy due to the three-dimensional structure of exo-atmospheres", *EXOCLIMES V*, August 2019
- A. Salvador, H. Massol, A. Davaille, E. Marcq, P. Sarda, E. Chassefiere, **W. Pluriel**, "Early Evolution of Super-Earths : From Magma Ocean to Temperate Surface Conditions", *AGU Fall Meeting Abstracts* P42A-07, December 2018
- **W. Pluriel**, E. Marcq, M. Turbet, F. Forget, A. Salvador, "Modeling the albedo of magma ocean planets", *European Planetary Science Congress* EPSC2017-171, September 2017. **Oral.**

Appendix B

Manuel d'utilisation de Pytmosph3R 1.3

PYTMOSPHER-1.3 USER MANUAL

Author: William Pluriel (CNRS/LAB/Univ. Bordeaux)

Pytmosph3R 1.3 is a code designed to compute transmission spectra based on 3D atmospheric simulations taking into account the 3D structure of atmospheres, see Caldas et al. 2019 for all the details.

The aims of this manual are the following:

- To provide a manual allowing anyone to run Pytmosph3R 1.3 without errors.
- To show several concrete use of Pytmosph3R 1.3 with the different option available.

```
[1]: import numpy as np
import scipy.integrate as integrate
import matplotlib.pyplot as plt
import mpld3
import pickle
```

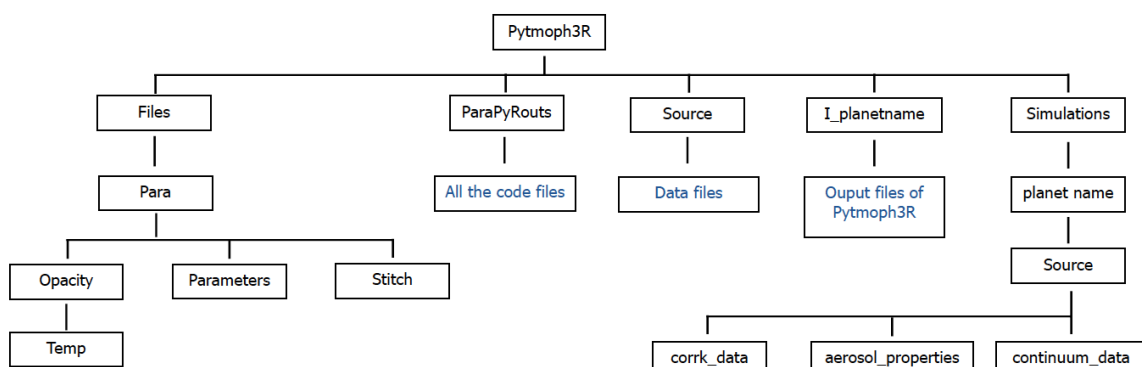
1.1 Documentation

1.1.1 Architecture

We recommend to use the current architecture shown in the following figure.

```
[2]: from IPython.display import Image
Image("/home/pluriel/support_pytmosph3r/fig-user-manual/architecture_pytmopsh3R.png")
```

[2]:



1.1.2 Source repository

The `Source` repository contains all the file required to do the calculation of the transmission spectrum.

There are several mandatory files required to run `Pytmosph3R 1.3`:

- In any case, `Source` repository must contains:
 - `P_comp_planetname.npy`: Pressure grid of the composition data in **Pa**.
 - `T_comp_nameplanet.npy`: Temperature grid of the composition data in Kelvin.
 - `x_species_comp_planetname.npy`: Abundances of the species according to the pressure and the temperature (`T_comp`, `P_comp`) [**‘number of species’**, **‘pressure grid’**, **‘temperature grid’**]
- When `Kcorr = False`: i.e. run in line by line
 - `bande_sample_bin10.npy`: all the bands of the line by line data from the smaller to the higher in cm^{-1} . Note that the ‘bin10’ part can be modified depending of the data used.
 - `P_sample_bin10.npy`: Pressure grid of the cross section data. Be careful, the pressure must be in **log10** and in **mbar**.
 - `T_sample_bin10.npy`: Temperature grid of the cross section data in Kelvin.
 - `crosssection_bin10.npy`: This file contains all the absorption data at the temperature and pressure grid of the data (`P_sample_bin10`, `T_sample_bin10`). Shape of the file: [**‘number of species’**, **‘pressure grid’**, **‘temperature grid’**, **‘number of line by line bands’**].
- When `Kcorr = True`: i.e. run in correlated-k
 - `bande_sample_IR.npy`: all the bands for the correlated-k data, from the smaller to the higher in cm^{-1} . Note that the ‘IR’ part refers to ‘InfraRed’, meaning that the bands correspond to infrared wave-numbers.
 - `P_sample.npy`: Pressure grid of the correlated-k data in **mbar**.
 - `T_sample.npy`: Temperature grid of the correlated-k data in Kelvin.
 - `k_corr_planetname_IR.npy`: This file contains all the absorption data at the temperature and pressure grid of the correlated-k data (`P_sample`, `T_sample`, `gauss_sample`). Shape of the file: [**‘temperature grid’**, **‘pressure grid’**, **‘Q grid’**, **‘correlated-k bands’**, **‘gauss grid’**].

1.1.3 Control file `Scriptpara.py`

The main file of `Pytmosph3R 1.3` is `ScriptPara.py`. This is the control file, e.g. all the options of different simulations must be choose here.

There is 5 major repository which structure `Pytmosph3R`:

- The code source are in the repository `ParaPyRouts`.
- The data mandatory are put in `Source` which is done using the record option in the `Scriptpara.py`.
- As explain in introduction, `Pytmosph3R 1.3` uses 3D simulations of atmosphere as input, and those data are row in the `Simulations` repository. Here are continua data, the properties of the aerosols and correlated-k data.
- The output spectra and the transmission maps data are saved in `I-planetname`.
- The temporary files are in `Files`.

Description of the current options

There is a lot of options in this file, but many of them can be kept in the default option to do standard run. We will focus here on the main options mandatory to make standard runs.

Pytmosph3R 1.3 can run using line by line data or correlated-k data as long as you provide the data. In any case, you have to indicate in `n-species-cross` all the species you have in your data, even those you will not use for your simulation.

- Simulation using line by line data:
 - `dim_bande` = “number of bands in your data”
 - `dim_gauss` = “number of gauss points”. Even if you run the code in line by line you have to put a number here.
 - `Kcorr` = False
- Simulation using correlated-k data:
 - `dim_bande` = “number of bands in your correlated-k data”
 - `dim-gauss` = “number of gauss points”
 - `Kcorr` = True

Then, you have several options concerning the calculation and the computation of the transmission spectrum. The following options are about the calculation of the absorption by Pytmosph3R 1.3.

- `Convert` = True
 - This option can be put at ‘False’ if already done before. It will launch the `convertator` fonction which will do the interpolation between the cross sections.
- `Molecul` = True
 - Do the molecular absorption calculation.
- `Cont` = True
 - Do the calculation due to the collisions induced absorption (CIA).
- `Scatt` = True
 - Do the Rayleigh scattering absorption calculation.
- `Cl` = True
 - Do the calculation of clouds absorption (Mie scattering).
- `Optimal` = True
 - Optimal interpolation described in Waldmann et al. 2015. If False, do a logarithmic interpolation.
- `TimeSelec` = True
 - If we want to study a particular time of the GCM simulation. If false, make a time series.

The following options concern the final spectrum. According to the chosen option, the transmission spectrum will or will not take into account specific absorption.

- `Molecular` = True
 - Take into account the molecular absorption in the spectrum.
- `Continuum` = True
 - Take into account the collision induced absorption (CIA) in the spectrum.

- Scattering = True
 - Take into account the scattering absorption in the spectrum.
- Clouds = True
 - Take into account the absorption due to the clouds in the spectrum.
- Single = “no”
 - Isolate a cloud species: ‘no’ use all clouds. Else, use the name of the cloud species
- Rupt = False
 - Default False. If the atmosphere is truncated.

Physical and chemical properties

Here we will detail the mandatory information for a standard run.

If there is a `diagfi` containing all the information needed, all will be read in it. If some information are missing, it has to be manually fill in the `Scriptpara.py`.

- Proprieties de l’etoile hote
 - $R_s = 1.458 * R_S$; radius of the star in sun radius (R_S)
 - $T_s = 6460.$; temperature of the star
 - $d_{al} = 100.*9.461e+15$; distance of the star, using to compute the noise.
 - `error = np.array([1.e-5])`; initialize error. Will not be used if the noise is computed with a blackbody.
- Proprieties de l’atmosphere
 - Careful: Add the species in the same order as in your data
 - Indicate all the species contained in the data in the “`n_species`”
 - Only the species which absorb must be added in “`n-species-active`” following the same order.
 - The non-absorber species must be added first, such as He, H₂ or H, then the active species.

For instance, if there is He, H₂, H₂O and CO in the considered atmosphere, write:

- `n_species = np.array(['H2', 'He', 'H2O', 'CO'])`
- `n_species_active = np.array(['H2O', 'CO'])`

The extra molecules must be added in the order of the data to be sure that the code read them correctly. Concerning the new non-absorber specie in the simulation, check that this specie exist in the `pyconstant` file. Otherwise, create this specie in this file in the variable ‘`M_n_mole`’ and add its molecular weight in g/mol in the variable ‘`M_mole`’. Then, add this specie in the `Scriptpara.py` and put the Boolean option ‘`IsoComp = False`’ in the ratio function.

Clouds option

Pytmosph3R 1.3 can generate transmission spectra taking into account the presence of clouds.

- When you add clouds in your atmosphere, fill the parameters as following:
 - `c_species = np.array([molecule of the cloud]);` default name: `np.array(['h2o-ice'])`
 - `c_species_name = np.array([molecule of the cloud]);` default name: `np.array(['H2O'])`
 - `c_species_file = np.array([spectral band]);` default: `np.array(['iceir-n50'])`
 - * For this last parameter, it must be added in increasing order of wavelength.
- Then you add the physical parameter of the clouds such as the effective radius of the aerosol and the ??
 - `rho_p = np.array([917.]);` default value.
 - `r-eff = np.array([0.5e-6]);` default value.
- Put the following options:
 - `Cloud = True`
 - `Cl = True`

If there is several optical properties files to cover various wavelength, put them both in `c_species_file` and put the option “continuous = True”.

- If your simulation is cloudless, just let an empty array in the following parameters:
 - `c_species = np.array([])`
 - `c_species_name = np.array([])`
 - `c_species_file = np.array([])`
- Put the following options:
 - `Cloud = False`
 - `Cl = False`

Tracer option

This option must be used when you have tracer(s) in your atmosphere, such as water for instance.

- Simulation with tracers:
 - `self.parameters = np.array(['T', 'p', 'Q'])`
 - `compo_type = np.array(['tracer_other'])`
 - `m_species = np.array(['molecule_trace in capital letter'])`
 - * example : `m_species = np.array(['H2O'])`. That's the species of the tracer gas in your atmosphere.
 - `m_file = np.array(['molecule_trace in tiny letter'])`
 - * example : `m_file = np.array(['h2o'])`. That's the name of the tracer in the *diagfi* file.
 - `Tracer = True`
- Simulation without tracers:
 - `self.parameters = np.array(['T', 'p'])`
 - `compo_type = np.array(['composition'])`

- m_species = np.array([])
- m_file = np.array([])
- Tracer = False

1.1.4 Simulation generator `diagfi.py`

`diagfi.py` is designed for two different aims: * To add a `diagfi` file in the Simulation repository. This simulation can be based on a Global Circulation Model (GCM) but that's also possible to create a synthetic simulation. * To write the composition file of the the atmopshere into the source of `Pytmosph3R 1.3`.

Options available in `diagfi.py`

- GCM = True
 - If the run is based on GCM simulation, must be set to False if not.
- Limb = ' '
 - Copy the longitude (for all latitude) just before or after the limbies at the limbies, respectively 'hot', 'cold'. If empty (""), nothing append.
- Sym_case = False
 - If True, it creates a symetric atmosphere with isothermal structure in altitude.
- Isoring = False
 - If True, create a isothermal annulus in the atmosphere from the surface to a given pressure (`p_iso`).
- Dissociation = True
 - If true, H₂O dissociation occurs, else H₂O is constant everywhere in the atmosphere.
- Hdiss = True
 - If True, H₂ dissociation is taken into account, else H₂ remains constant everywhere.
- TiO_VO = False
 - If True, add TiO and VO in the composition.
- Hm = False
 - If True, H- opacity taken into account (Band-Free & Free-Free)
- Plot = False
 - If True, plot the abundances of t according the pressure and the temperature

Writing the simulation

- In any case, specify those parameters:
 - `index_dim` = 52; number of altitude layers in the simulation
 - `lat_dim` = 65; number of latitude layers in the simulation
 - `lon_dim` = 129; number of longitude layers in the simulation
 - `Q_dim` = 1; To fill when there is a tracer in the simulation
 - `R_J` = 6.9911e+7; Jupiter radius in m

- $M_J = 1.898e+27$; Jupiter mass in kg
- $R_p = 1.807 * R_J$; Radius of the planet in the simulation (in Jupiter radius)
- $M_p = 1.183 * M_J$; Mass of the planet in the simulation (in Jupiter mass)
- $G = 6.67408e-11$; Gravity constant (USI)
- $g_0 = G * M_p / (R_p ** 2)$; Gravity at the surface
- $M = 2.3e-3$; Mean molecular weight (in kg/m3)
- For symmetric simulations, you have to specify:
 - $T_{day} = np.array([3300.])$; day side temperature in Kelvin
 - $T_{night} = np.array([500.])$; night side temperature in Kelvin
 - $p_{iso} = np.array([1e4])$; pressure level in Pascal below which the temperature is that of the isothermal annulus
 - $T_{iso} = np.array([2500.])$; isothermal annulus temperature in Kelvin
- For homogeneous case with 2 layers:
 - $T_{up} = np.array([3300.])$; temperature of the upper layer in Kelvin
 - $T_{down} = np.array([2500.])$; temperature of the bottom layer in Kelvin
 - $p_{iso} = np.array([1e4])$; pressure level in Pascal separating T_{up} and T_{down} temperature

Writing the composition file

Here, only specify the pressure and the temperature grid of the composition file.

- T (in kelvin) and p sorted from low to high pressure (in bar).

1.2 Reference runs

1.2.1 Cloud option

- Figure 1 shows the contribution of clouds in the code. It depends of course on the type of clouds implemented.
- The code is able to separate the different contribution as it shown in Figure 1.
- other option used: see `/data2/pluriel/Pytmosph3R-1.3/PyLibRouts/T1b_para.py`
- output: `/data2/pluriel/Pytmosph3R-1.3/I_T1b/`

1.2.2 Line by line vs correlated-k

- Figure 2 shows the transmission spectrum calculated with two different method, using line by line cross-section data and correlated-k data. The correlated-k method is usually faster because the number of calculation needed is lower.
- other option used: see `/data2/pluriel/Pytmosph3R-1.3/PyLibRouts/Wasp121b_para.py`
- output: `/data2/pluriel/Pytmosph3R-1.3/I_wasp121b_gcm/`

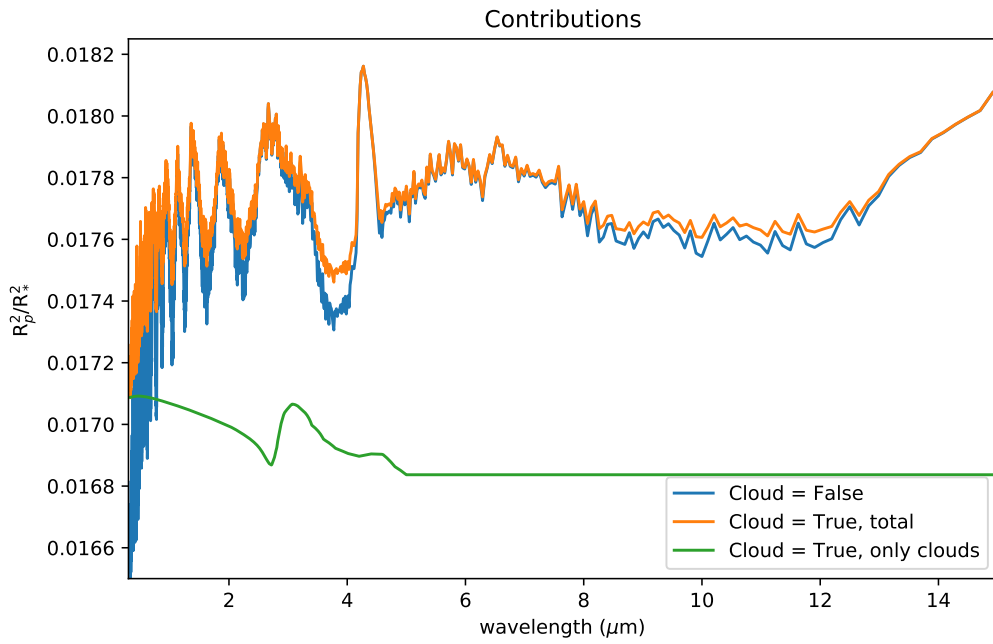


Fig. 1: Contribution plot of a transmission spectrum. The full contribution is shown in orange, the molecular contribution in blue and the cloud contribution in green.

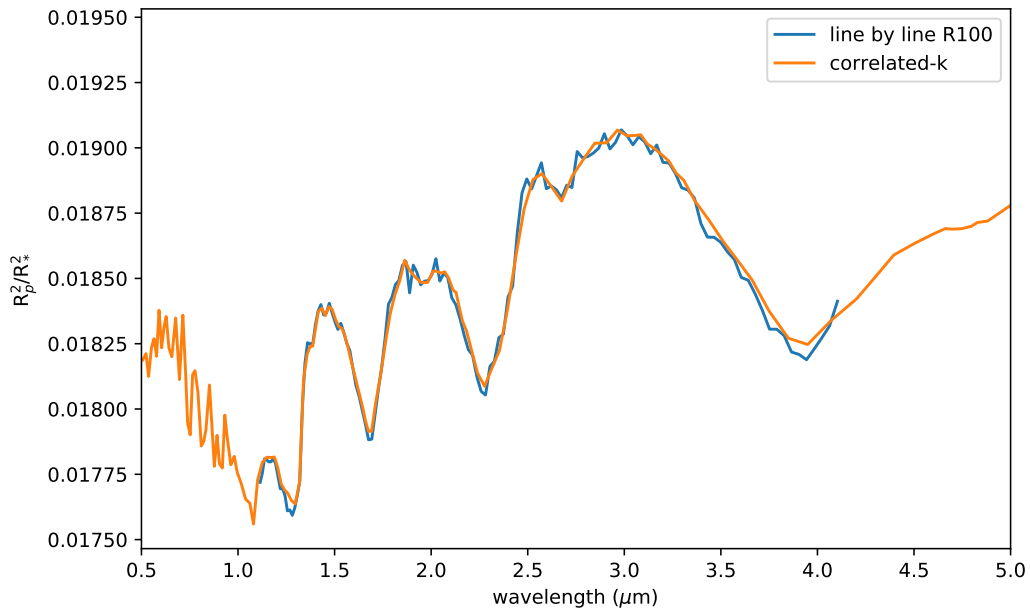


Fig. 2: Transmission spectrum calculated using line by line cross section (blue) and correlated-k method (orange).

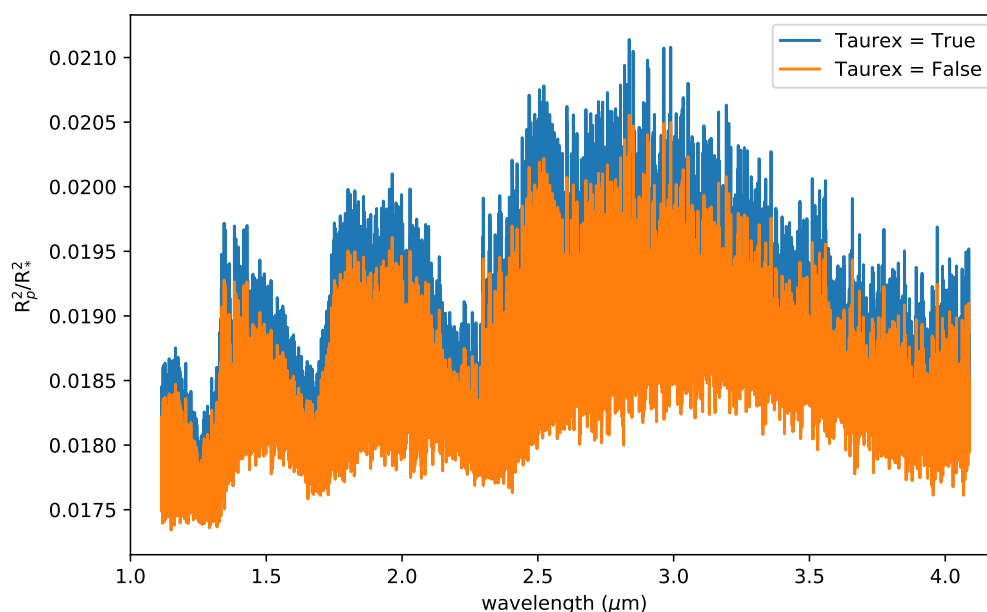


Fig. 3: Transmission spectrum calculated using 2 different ways to compute the gravity.

1.2.3 Taurex option

That is a specific option created to fit the forward model of TauREx, a 1D retrieval code.

- Figure 3 shows the transmission spectrum calculated with 2 different ways to compute the altitude. When Taurex option is set to 'True', the altitude is calculated taken into account the gravity of the last layer, but without evolution of the gravity in the current layer. If it sat to "False" the evolution of the gravity into the layer is taken into account.
- other option used: see /data2/pluriel/Pytmosph3R-1.3/PyLibRouts/Wasp121b_para.py
- output: /data2/pluriel/Pytmosph3R-1.3/I_wasp121b_gcm/

1.3 diagfi.py options

1.3.1 Dissociation option

That is a specific option created to take into account thermal dissociation of species based on Parmentier et al. (2018). An illustration of the dissociation option is shown in Fig 4.

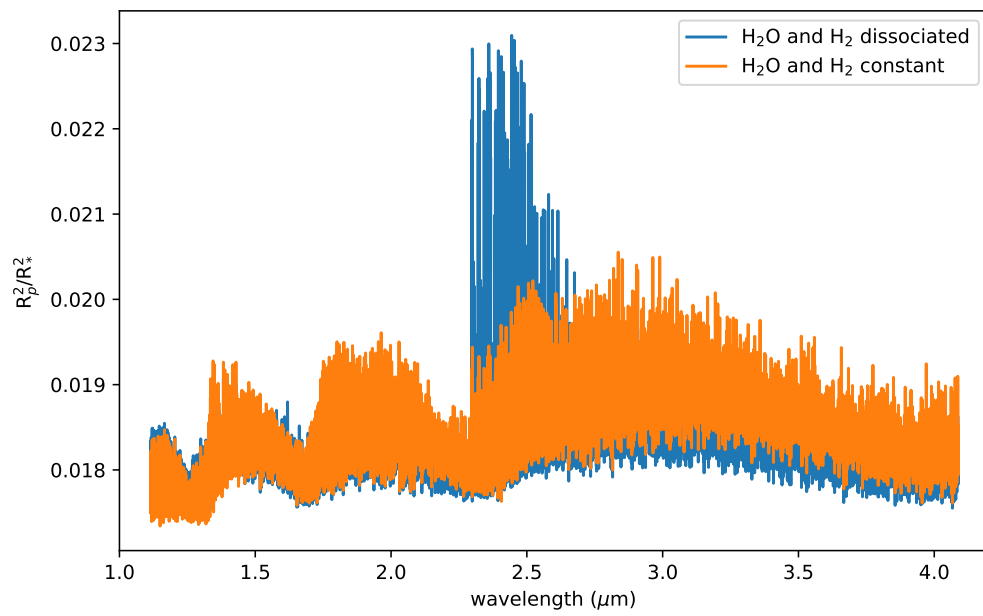


Fig. 4: Transmission spectrum calculated for H₂O and H₂ constant in the atmosphere (orange) then for H₂O and H₂ variable in the atmosphere (blue).

Appendix C

Complément de résultats des inversions de données sur les simulations de Jupiters ultra chauds

Dans le chapitre 3 nous avons simulé des atmosphères de Jupiters ultra chauds pour 3 cas distincts ; deux d'entre eux sont symétriques ∇^+T et ∇^-T , respectivement créés pour simuler un cas extrême et un cas conservateur, et le dernier prenant en compte une bien plus grande complexité car basée sur une simulation GCM. Nous avons ensuite généré des simulations d'observations à l'aide de *Pytmosph3R* en considérant des atmosphères où H_2O et H_2 sont soit constants, soit variables, en plus d'une troisième hypothèse où seul H_2O est variable. Au total, cela représente 9 spectres en transmission qui ont été inversés par *TauREx*. Les distributions postérieures avec les contributions des absorbants aux spectres sont présentés ci-après.

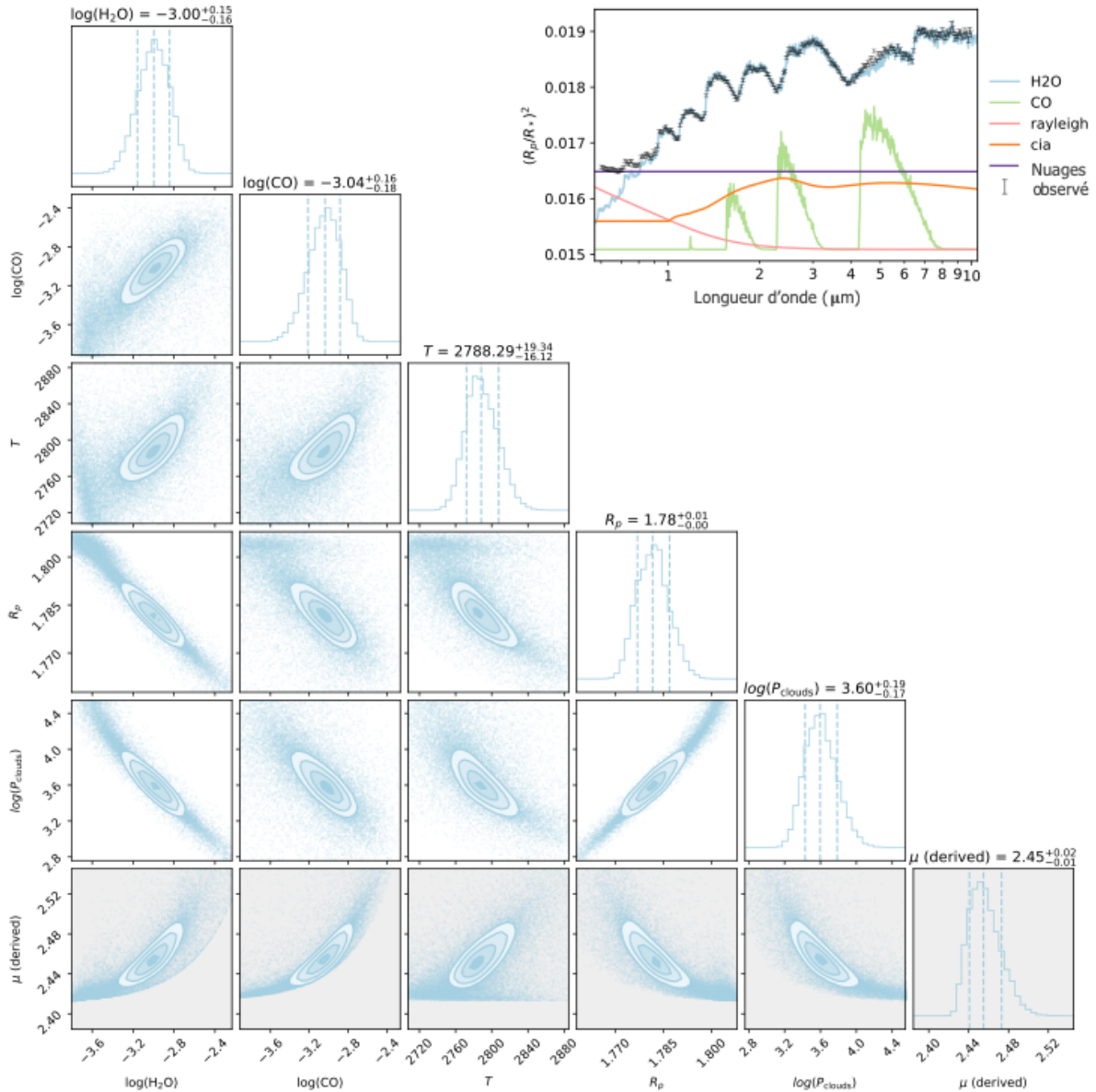


FIGURE C.1 – Distributions postérieures de l’inversion de données atmosphériques du spectre en transmission simulé dans le cas ∇^{-T} ainsi que les contributions de chaque absorbant au spectre inversé (en haut à gauche) dans l’hypothèse où ni H_2O ni H_2 ne se dissocient thermiquement. Les paramètres inversés sont le rayon de la planète [R_p], la température [K], les abondances en H_2O et CO [$\log(\text{VMR})$] et la pression des nuages [bar]. Le poids moléculaire moyen de l’atmosphère est dérivé à partir de ces paramètres mais ne fait pas l’objet d’une inversion de données.

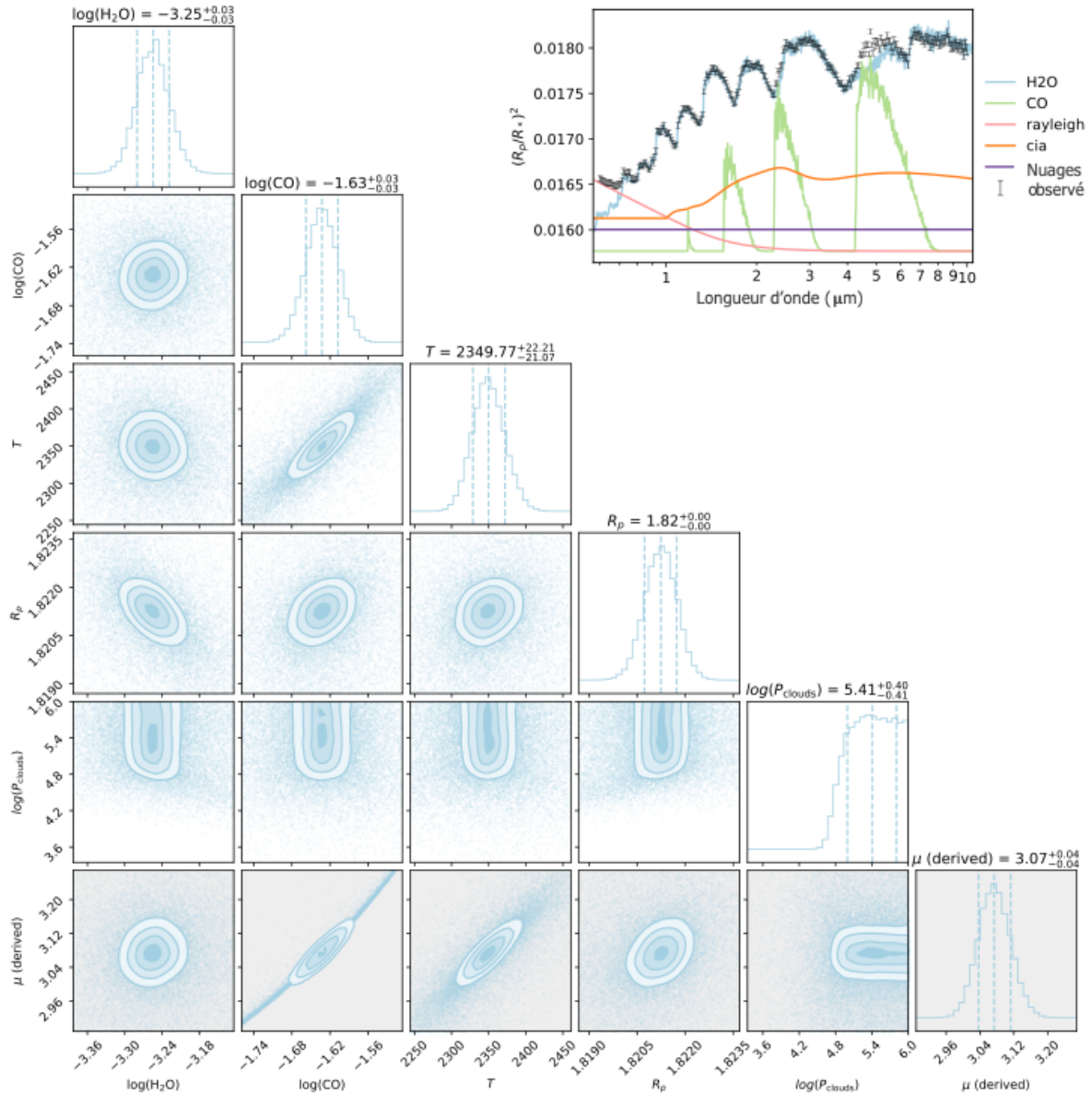


FIGURE C.2 – Même graphique que la Figure C.1 en considérant ici que H_2O peut se dissocier thermiquement, H_2 restant constant.

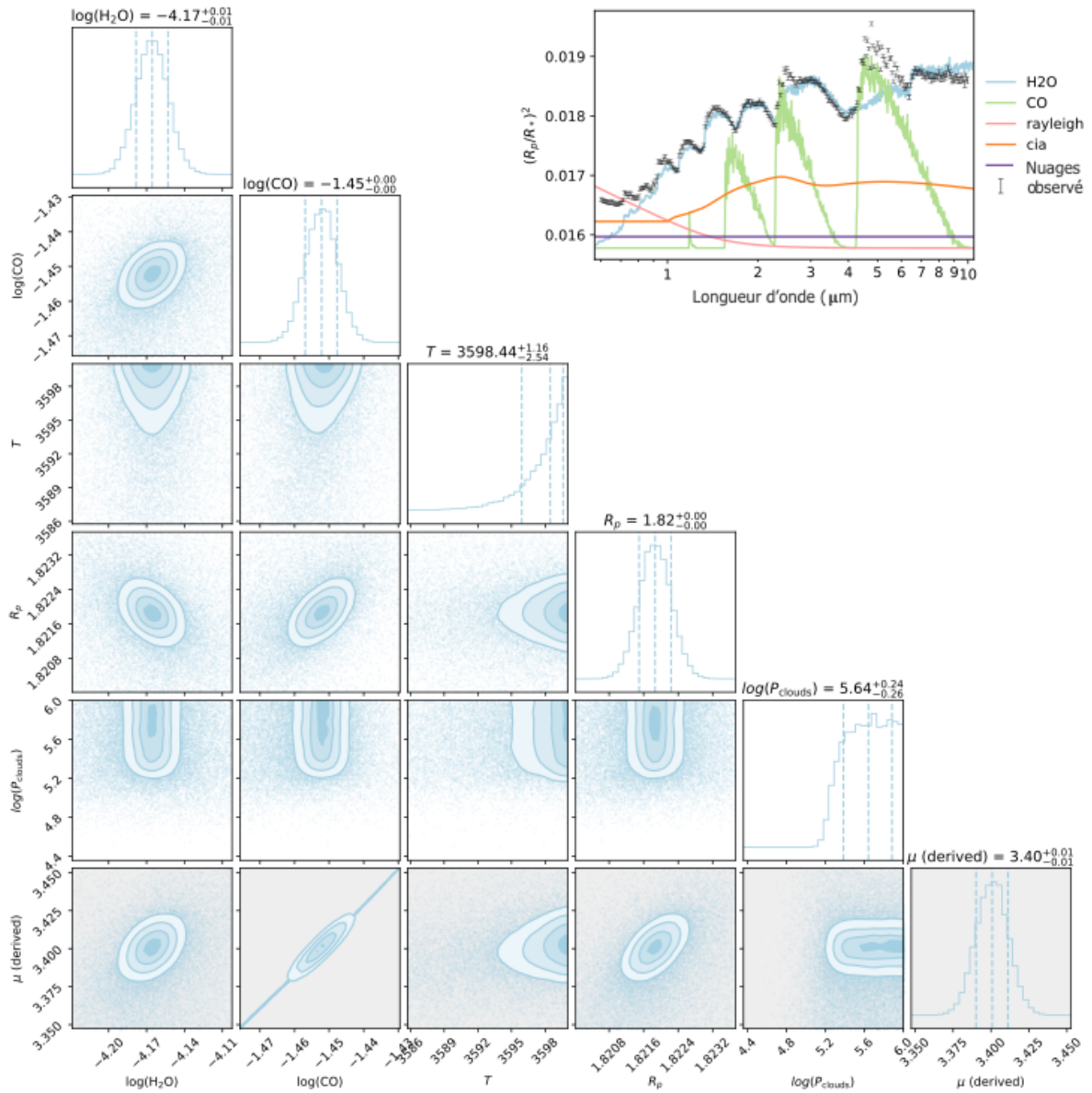


FIGURE C.3 – Même graphique que la Figure C.1 en considérant ici que H₂O et H₂ peuvent se dissocier thermiquement.

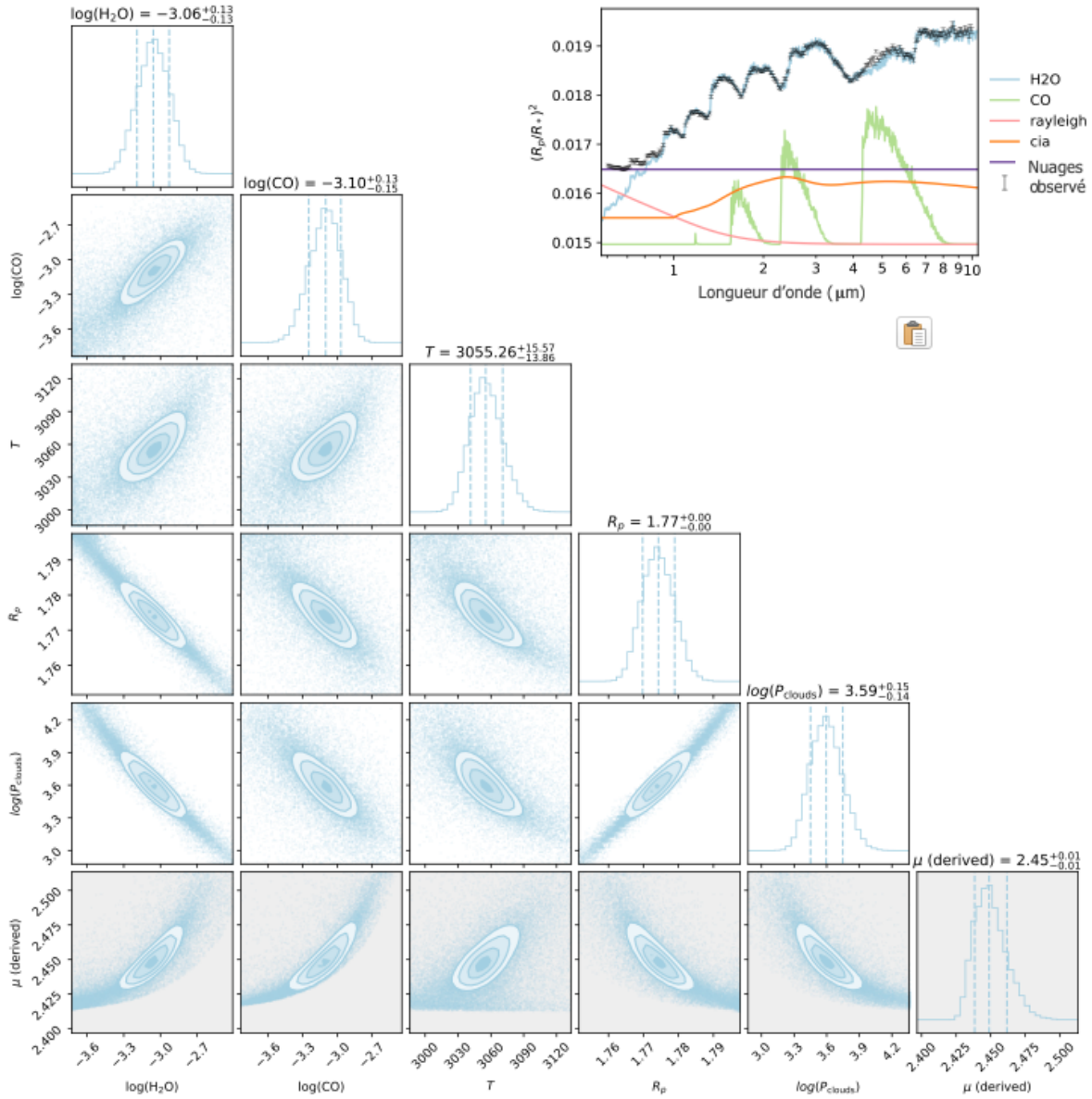


FIGURE C.4 – Distributions postérieures de l’inversion de données atmosphériques du spectre en transmission simulé dans le cas ∇^+T ainsi que les contributions de chaque absorbant au spectre inversé (en haut à gauche) dans l’hypothèse où H₂O et H₂ sont constants. Les paramètres inversés sont le rayon de la planète [R_p], la température [K], les abondances en H₂O et CO [$\log(\text{VMR})$] et la pression des nuages [bar]. Le poids moléculaire moyen de l’atmosphère est dérivé à partir de ces paramètres mais ne fait pas l’objet d’une inversion de données.

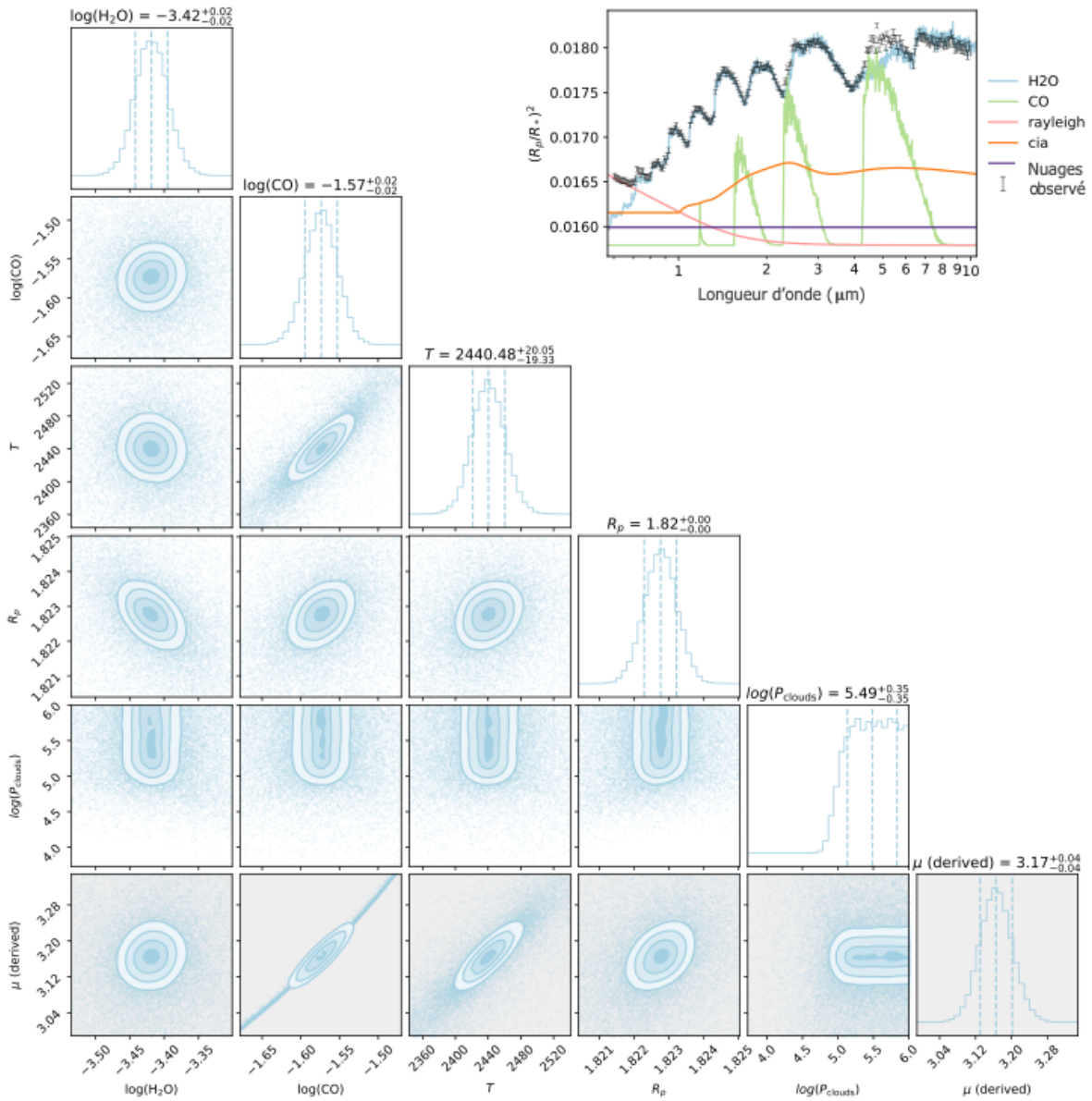


FIGURE C.5 – Môme graphique que la Figure C.4 en considérant ici que H₂O peut se dissocier thermiquement, H₂ restant constant.

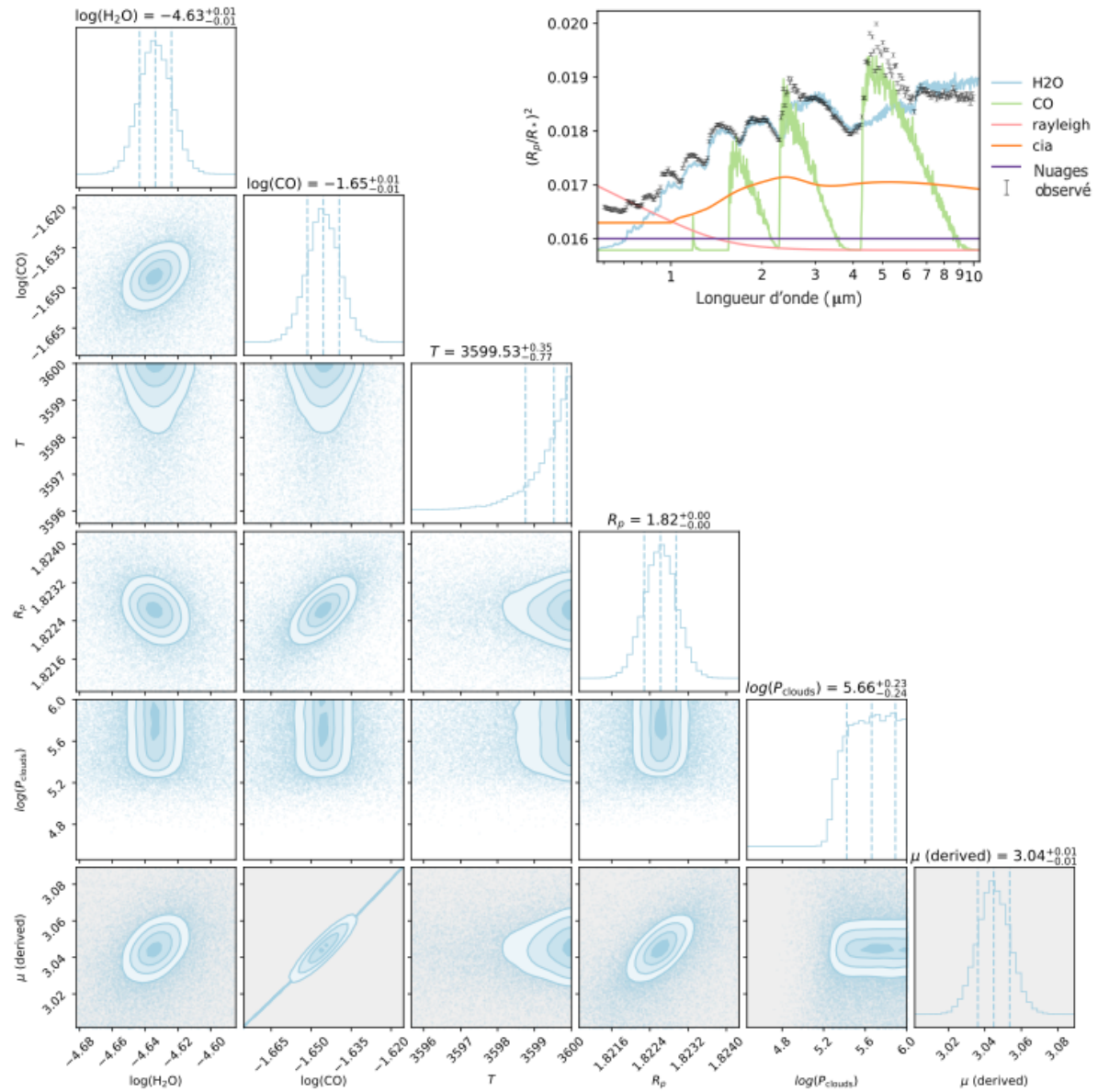


FIGURE C.6 – Même graphique que la Figure C.4 en considérant ici que H₂O et H₂ peuvent se dissocier thermiquement.

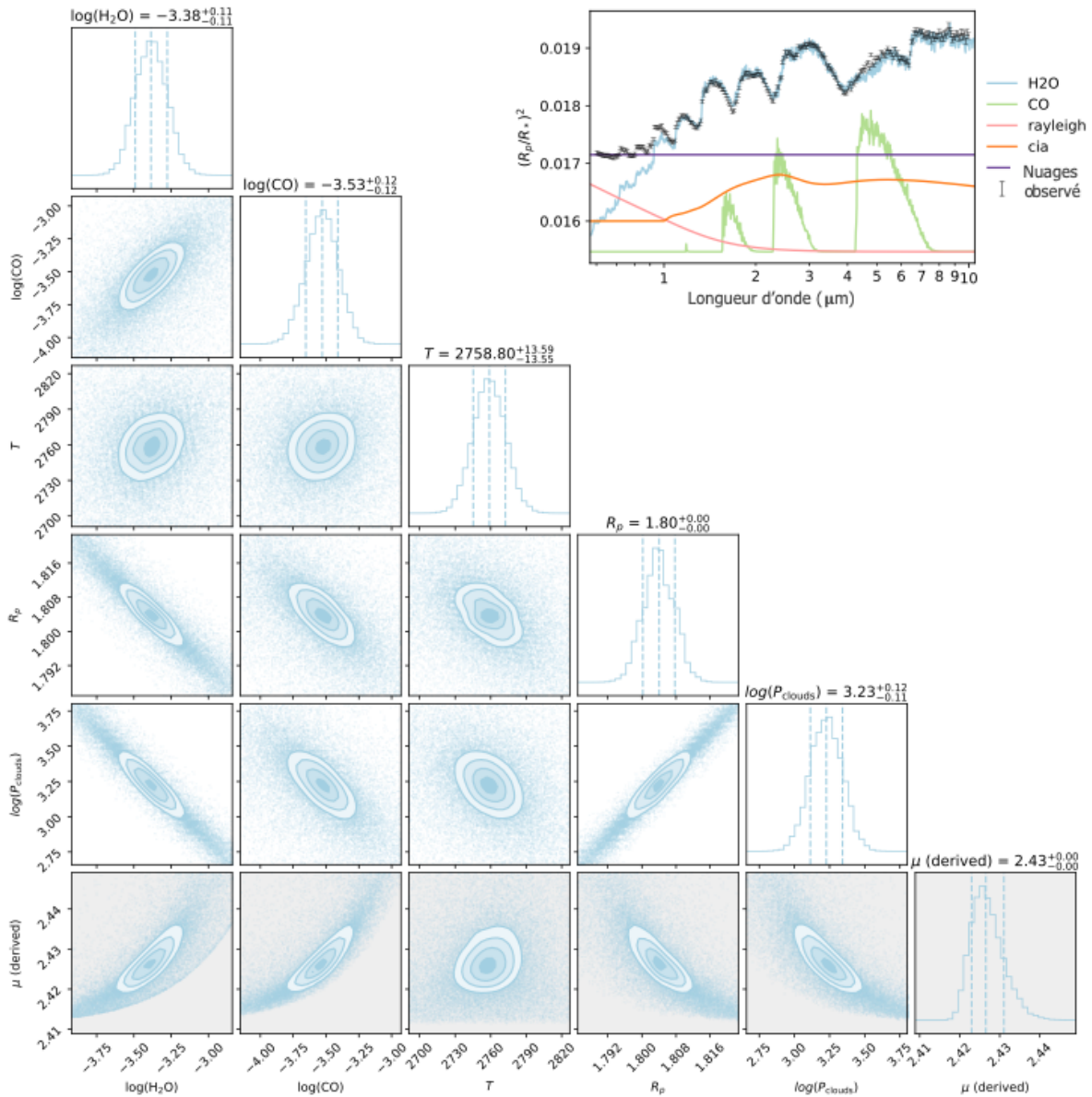


FIGURE C.7 – Distributions postérieures de l'inversion de données atmosphériques du spectre en transmission simulé dans le cas GCM ainsi que les contributions de chaque absorbant au spectre inversé (en haut à gauche) dans l'hypothèse où H₂O et H₂ sont constants. Les paramètres inversés sont le rayon de la planète [R_p], la température [K], les abondances en H₂O et CO [$\log(\text{VMR})$] et la pression des nuages [bar]. Le poids moléculaire moyen de l'atmosphère est dérivé à partir de ces paramètres mais ne fait pas l'objet d'une inversion de données.

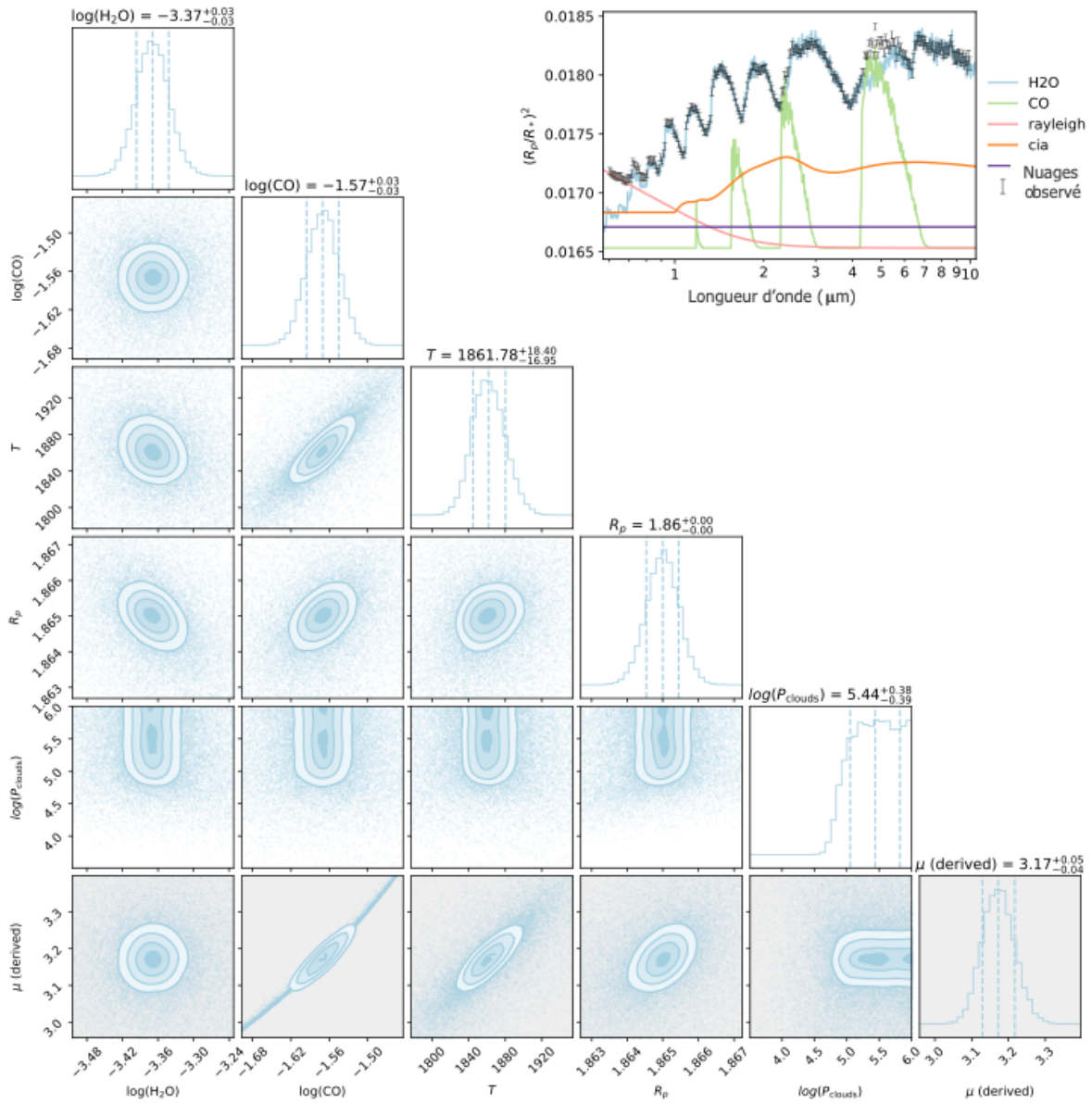


FIGURE C.8 – Même graphique que la Figure C.7 en considérant ici que H₂O peut se dissocier thermiquement, H₂ restant constant.

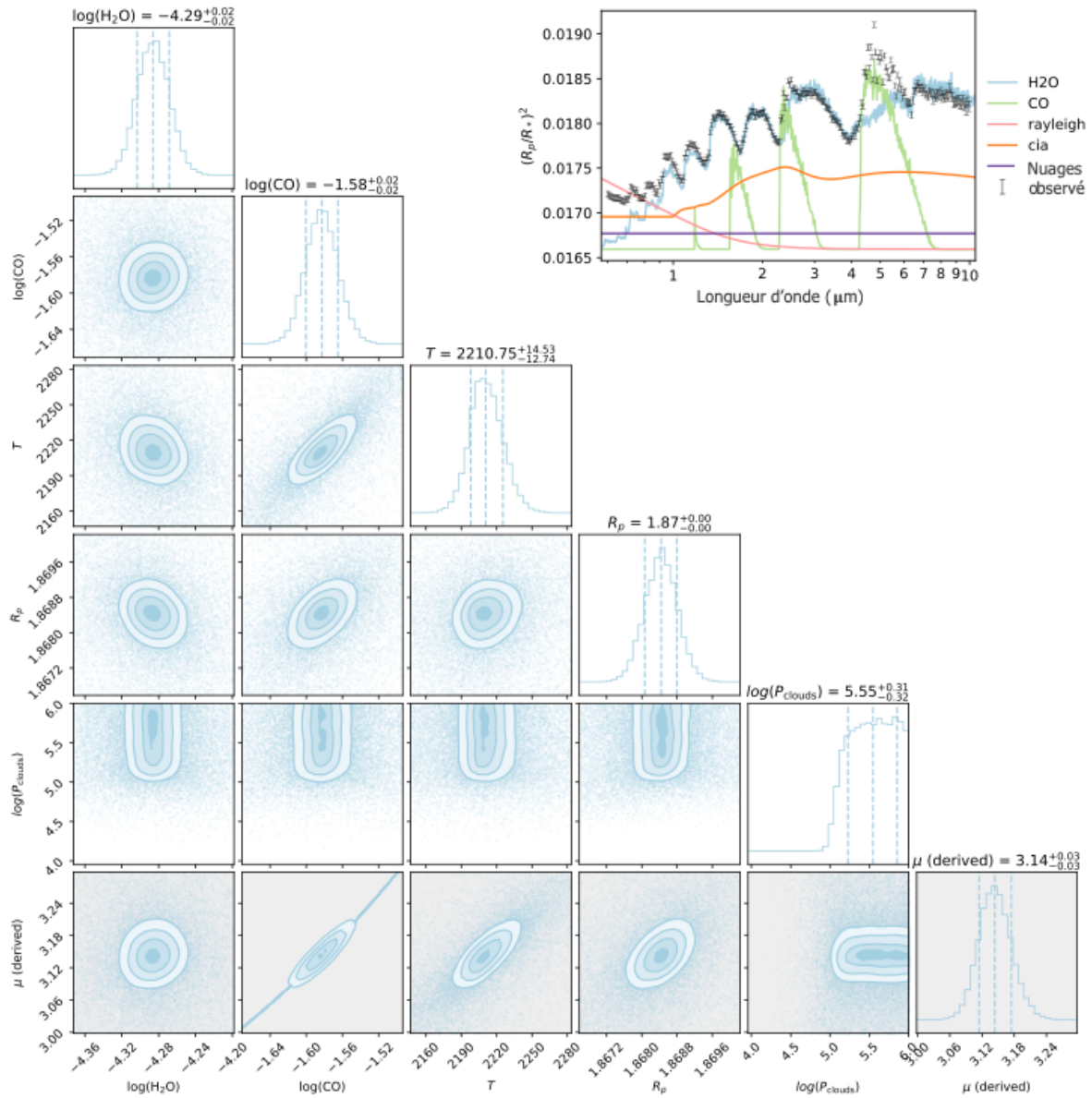


FIGURE C.9 – Même graphique que la Figure C.7 en considérant ici que H₂O et H₂ peuvent se dissocier thermiquement.

Bibliographie

- Agúndez, M., V. Parmentier, O. Venot, F. Hersant, and F. Selsis (2014, April). Pseudo 2D chemical model of hot-Jupiter atmospheres : application to HD 209458b and HD 189733b. *564*, A73.
- Al-Refaie, A. F., Q. Changeat, I. P. Waldmann, and G. Tinetti (2019, December). TauREx III : A fast, dynamic and extendable framework for retrievals. *arXiv e-prints*, arXiv :1912.07759.
- Arcangeli, J., J.-M. Désert, M. R. Line, J. L. Bean, V. Parmentier, K. B. Stevenson, L. Kreidberg, J. J. Fortney, M. Mansfield, and A. P. Showman (2018, mar). H-opacity and water dissociation in the dayside atmosphere of the very hot gas giant WASP-18b. *The Astrophysical Journal* *855*(2), L30.
- Arcangeli, J., J.-M. Désert, V. Parmentier, K. B. Stevenson, J. L. Bean, M. R. Line, L. Kreidberg, J. J. Fortney, and A. P. Showman (2019, May). Climate of an ultra hot Jupiter. Spectroscopic phase curve of WASP-18b with HST/WFC3. *625*, A136.
- Barton, E. J., C. Chiu, S. Golpayegani, S. N. Yurchenko, J. Tennyson, D. J. Frohman, and P. F. Bernath (2014, August). Exomol molecular line lists v : the ro-vibrational spectra of nacl and kcl. *442*, 1821–1829.
- Barton, E. J., S. N. Yurchenko, and J. Tennyson (2013, September). Exomol line lists - ii. the ro-vibrational spectrum of sio. *434*, 1469–1475.
- Beatty, T. G., N. Madhusudhan, A. Tsiaras, M. Zhao, R. L. Gilliland, H. A. Knutson, A. Shporer, and J. T. Wright (2017, Oct). Evidence for Atmospheric Cold-trap Processes in the Noninverted Emission Spectrum of Kepler-13Ab Using HST/WFC3. *154*(4), 158.
- Beichman, C., B. Benneke, and H. e. a. Knutson (2014, December). Observations of transiting exoplanets with the james webb space telescope (jwst). *126*, 1134.
- Bell, T. J. and N. B. Cowan (2018, Apr). Increased Heat Transport in Ultra-hot Jupiter Atmospheres through H₂ Dissociation and Recombination. *857*(2), L20.
- Bell, T. J. and N. B. Cowan (2018, apr). Increased heat transport in ultra-hot jupiter atmospheres through h₂dissociation and recombination. *The Astrophysical Journal* *857*(2), L20.
- Benneke, B. and S. Seager (2013, December). How to Distinguish between Cloudy Mini-Neptunes and Water/Volatile-dominated Super-Earths. *778*(2), 153.

- Bieryla, A., K. Collins, T. G. Beatty, J. Eastman, R. J. Siverd, J. Pepper, B. S. Gaudi, K. G. Stassun, C. Cañas, D. W. Latham, L. A. Buchhave, R. Sanchis-Ojeda, J. N. Winn, E. L. N. Jensen, J. F. Kielkopf, K. K. McLeod, J. Gregorio, K. D. Colón, R. Street, R. Ross, M. Penny, S. N. Mellon, T. E. Oberst, B. J. Fulton, J. Wang, P. Berlind, M. L. Calkins, G. A. Esquerdo, D. L. DePoy, A. Gould, J. Marshall, R. Pogge, M. Trueblood, and P. Trueblood (2015, July). KELT-7b : A Hot Jupiter Transiting a Bright $V = 8.54$ Rapidly Rotating F-star. *150*(1), 12.
- Bruno, G., N. K. Lewis, M. K. Alam, M. López-Morales, J. K. Barstow, H. R. Wakeford, D. K. Sing, G. W. Henry, G. E. Ballester, V. Bourrier, L. A. Buchhave, O. Cohen, T. Mikal-Evans, A. García Muñoz, P. Lavvas, and J. Sanz-Forcada (2020, February). WASP-52b. The effect of star-spot correction on atmospheric retrievals. *491*(4), 5361–5375.
- Caldas, A., J. Leconte, and F. e. a. Selsis (2019, March). Effects of a fully 3d atmospheric structure on exoplanet transmission spectra : retrieval biases due to day-night temperature gradients. *623*, A161.
- Casasayas-Barris, N., E. Pallé, G. Nowak, F. Yan, L. Nortmann, and F. Murgas (2017, December). Detection of sodium in the atmosphere of WASP-69b. *608*, A135.
- Chakrabarty, A. and S. Sengupta (2019a, July). Precise Photometric Transit Follow-up Observations of Five Close-in Exoplanets : Update on Their Physical Properties. *158*(1), 39.
- Chakrabarty, A. and S. Sengupta (2019b, July). Precise Photometric Transit Follow-up Observations of Five Close-in Exoplanets : Update on Their Physical Properties. *158*(1), 39.
- Changeat, Q. and A. Al-Refaie (2020, August). TauREx3 PhaseCurve : A 1.5D Model for Phase-curve Description. *898*(2), 155.
- Changeat, Q., B. Edwards, I. P. Waldmann, and G. Tinetti (2019, nov). Toward a more complex description of chemical profiles in exoplanet retrievals : A two-layer parameterization. *The Astrophysical Journal* *886*(1), 39.
- Charbonneau, D., L. E. Allen, S. T. Megeath, G. Torres, R. Alonso, T. M. Brown, R. L. Gilliland, D. W. Latham, G. Mandushev, F. T. O’Donovan, and A. Sozzetti (2005, jun). Detection of thermal emission from an extrasolar planet. *The Astrophysical Journal* *626*(1), 523–529.
- 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. *597*, A94.
- Claret, A. (2000, Nov). A new non-linear limb-darkening law for LTE stellar atmosphere models. Calculations for $-5.0 \leq \log[M/H] \leq +1$, $2000 \text{ K} \leq T_{eff} \leq 50000 \text{ K}$ at several surface gravities. *363*, 1081–1190.
- 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, Mar). Characterizing Transiting Planet Atmospheres through 2025. *127*(949), 311.

- Cox, A. N. (2000). *Allen's astrophysical quantities*.
- Daylan, T., M. N. Günther, T. Mikal-Evans, D. K. Sing, I. Wong, A. Shporer, I. Crossfield, P. Niraula, J. de Wit, D. D. B. Koll, V. Parmentier, T. Fetherolf, S. R. Kane, G. R. Ricker, R. Vandersek, S. Seager, J. N. Winn, J. M. Jenkins, D. A. Caldwell, D. Charbonneau, C. E. Henze, M. Paegert, S. Rinehart, M. Rose, L. Sha, E. Quintana, and J. N. Villaseñor (2019, September). TESS observations of the WASP-121 b phase curve. *arXiv e-prints*, arXiv :1909.03000.
- de Kok, R. J., M. Brogi, I. A. G. Snellen, J. Birkby, S. Albrecht, and E. J. W. de Mooij (2013, June). Detection of carbon monoxide in the high-resolution day-side spectrum of the exoplanet HD 189733b. *554*, A82.
- Delrez, L., A. Santerne, and J.-M. e. a. Almenara (2016, June). Wasp-121 b : a hot jupiter close to tidal disruption transiting an active f star. *458*, 4025–4043.
- Deming, D., S. Seager, L. J. Richardson, and J. Harrington (2005). Infrared radiation from an extrasolar planet. *Nature* *434*(7034), 740–743.
- Deming, D., A. Wilkins, P. McCullough, A. Burrows, J. J. Fortney, E. Agol, I. Dobbs-Dixon, N. Madhusudhan, N. Crouzet, J.-M. Desert, R. L. Gilliland, K. Haynes, H. A. Knutson, M. Line, Z. Magic, A. M. Mandell, S. Ranjan, D. Charbonneau, M. Clampin, S. Seager, and A. P. Showman (2013, September). Infrared Transmission Spectroscopy of the Exoplanets HD 209458b and XO-1b Using the Wide Field Camera-3 on the Hubble Space Telescope. *774*(2), 95.
- Diamond-Lowe, H., K. B. Stevenson, J. L. Bean, M. R. Line, and J. J. Fortney (2014, November). New Analysis Indicates No Thermal Inversion in the Atmosphere of HD 209458b. *796*(1), 66.
- Edwards, B., A. Al-Refaie, P. Lagage, and R. Gastaud (2020). ExoWebb : A JWST Radiometric Simulator. *in prep*.
- Edwards, B., Q. Changeat, R. Baeyens, A. Tsiaras, A. Al-Refaie, J. Taylor, K. H. Yip, M. F. Bieger, D. Blain, A. Gressier, G. Guilluy, A. Y. Jaziri, F. Kiefer, D. Modirrousta-Galian, M. Morvan, L. V. Mugnai, W. Pluriel, M. Poveda, N. Skaf, N. Whiteford, S. Wright, T. Zingales, B. Charnay, P. Drossart, J. Lecante, O. Venot, I. Waldmann, and J.-P. Beaulieu (2020, July). ARES I : WASP-76 b, A Tale of Two HST Spectra. *160*(1), 8.
- Edwards, B., Q. Changeat, K. H. Yip, A. Tsiaras, J. Taylor, B. Akhtar, J. AlDaghir, P. Bhattarai, T. Bhudia, A. Chapagai, M. Huang, D. Kabir, V. Khag, S. Khaliq, K. Khatri, J. Kneth, M. Kothari, I. Najmuddin, L. Panchalingam, M. Patel, L. Premachandran, A. Qayyum, P. Rana, Z. Shaikh, S. Syed, H. Theti, M. Zaidani, M. Saraf, D. de Mijolla, H. Caines, A. Kokori, M. Rocchetto, M. Mallonn, M. Bachschmidt, J. M. Bosch, M. Bretton, P. Chatelain, M. Deldem, R. D. Sisto, P. Evans, E. Fernández-Lajús, P. Guerra, F. G. Horta, W. Kang, T. Kim, A. Leroy, F. Lomo, J. L. de Haro, V.-P. Hentunen, Y. Jongen, D. Molina, R. Montaigut, R. Naves, M. Raetz, T. Sauer, A. Watkins, A. Wünsche, M. Zibar, W. Dunn, M. Tessenyi, G. Savini, G. Tinetti, and J. Tennyson (2020, May). Original Research By Young Twinkle Students (ORBYTS) : Ephemeris Refinement of Transiting Exoplanets. .

- Edwards, B., L. Mugnai, G. Tinetti, E. Pascale, and S. Sarkar (2019, Jun). An Updated Study of Potential Targets for Ariel. *157(6)*, 242.
- Edwards, B., M. Rice, T. Zingales, M. Tessenyi, I. Waldmann, G. Tinetti, E. Pascale, G. Savini, and S. Sarkar (2018, Dec). Exoplanet spectroscopy and photometry with the twinkle space telescope. *Experimental Astronomy* 47(1-2), 29–63.
- Ehrenreich, D., C. Lovis, R. Allart, M. Rosa Zapatero Osorio, F. Pepe, S. Cristiani, R. Rebolo, N. C. Santos, F. Borsa, O. Demangeon, X. Dumusque, J. I. González Hernández, N. Casasayas-Barris, D. Ségransan, S. Sousa, M. Abreu, V. Adibekyan, M. Affolter, C. Allende Prieto, Y. Alibert, M. Aliverti, D. Alves, M. Amate, G. Avila, V. Baldini, T. Bandy, W. Benz, A. Bianco, É. Bolmont, F. Bouchy, V. Bourrier, C. Broeg, A. Cabral, G. Calderone, E. Pallé, H. M. Cegla, R. Cirami, J. M. P. Coelho, P. Conconi, I. Coretti, C. Cumani, G. Cupani, H. Dekker, B. Delabre, S. Deiries, V. D’Odorico, P. Di Marcantonio, P. Figueira, A. Fragoso, L. Genolet, M. Genoni, R. Génova Santos, N. Hara, I. Hughes, O. Iwert, F. Kerber, J. Knudstrup, M. Land oni, B. Lavie, J.-L. Lizon, M. Lendl, G. Lo Curto, C. Maire, A. Manescau, C. J. A. P. Martins, D. Mégevand , A. Mehner, G. Micela, A. Modigliani, P. Molaro, M. Monteiro, M. Monteiro, M. Moschetti, E. Müller, N. Nunes, L. Oggioni, A. Oliveira, G. Pariani, L. Pasquini, E. Poretti, J. L. Rasilla, E. Redaelli, M. Riva, S. Santana Tschudi, P. Santin, P. Santos, A. Segovia Milla, J. V. Seidel, D. Sosnowska, A. Sozzetti, P. Spanò, A. Suárez Mascareño, H. Taberner, F. Tenegi, S. Udry, A. Zanutta, and F. Zerbi (2020, March). Nightside condensation of iron in an ultra-hot giant exoplanet. *arXiv e-prints*, arXiv :2003.05528.
- Espinoza, N., J. J. Fortney, Y. Miguel, D. Thorngren, and R. Murray-Clay (2017, mar). Metal enrichment leads to low atmospheric c/o ratios in transiting giant exoplanets. *The Astrophysical Journal* 838(1), L9.
- Espinoza, N. and A. Jordán (2015, June). Limb darkening and exoplanets : testing stellar model atmospheres and identifying biases in transit parameters. *450(2)*, 1879–1899.
- Evans, T. M., D. K. Sing, J. M. Goyal, N. Nikolov, M. S. Marley, K. Zahnle, G. W. Henry, J. K. Barstow, M. K. Alam, J. Sanz-Forcada, and et al. (2018, Nov). An optical transmission spectrum for the ultra-hot jupiter wasp-121b measured with the hubble space telescope. *The Astronomical Journal* 156(6), 283.
- Evans, T. M., D. K. Sing, and T. e. a. Kataria (2017, August). An ultrahot gas-giant exoplanet with a stratosphere. *548*, 58–61.
- Evans, T. M., D. K. Sing, and H. R. e. a. Wakeford (2016, May). Detection of h₂O and evidence for tio/vo in an ultra-hot exoplanet atmosphere. *822*, L4.
- Feng, Y. K., M. R. Line, and J. J. Fortney (2020, September). 2D Retrieval Frameworks for Hot Jupiter Phase Curves. *160(3)*, 137.

- Feng, Y. K., M. R. Line, J. J. Fortney, K. B. Stevenson, J. Bean, L. Kreidberg, and V. Parmentier (2016, September). The Impact of Non-uniform Thermal Structure on the Interpretation of Exoplanet Emission Spectra. *829(1)*, 52.
- Feroz, F., J. R. Gair, M. P. Hobson, and E. K. Porter (2009, oct). Use of the MULTINEST algorithm for gravitational wave data analysis. *Classical and Quantum Gravity* *26(21)*, 215003.
- Feroz, F. and M. P. Hobson (2008, 01). Multimodal nested sampling : an efficient and robust alternative to Markov Chain Monte Carlo methods for astronomical data analyses. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* *384(2)*, 449–463.
- Feroz, F., M. P. Hobson, E. Cameron, and A. N. Pettitt (2019, November). Importance Nested Sampling and the MultiNest Algorithm. *The Open Journal of Astrophysics* *2(1)*, 10.
- Fortney, J. J., K. Lodders, M. S. Marley, and R. S. Freedman (2008a, May). A Unified Theory for the Atmospheres of the Hot and Very Hot Jupiters : Two Classes of Irradiated Atmospheres. *678(2)*, 1419–1435.
- Fortney, J. J., K. Lodders, M. S. Marley, and R. S. Freedman (2008b, May). A Unified Theory for the Atmospheres of the Hot and Very Hot Jupiters : Two Classes of Irradiated Atmospheres. *678(2)*, 1419–1435.
- Fortney, J. J., M. S. Marley, and J. W. Barnes (2007, apr). Planetary radii across five orders of magnitude in mass and stellar insolation : Application to transits. *The Astrophysical Journal* *659(2)*, 1661–1672.
- Fressin, F., G. Torres, D. Charbonneau, S. T. Bryson, J. Christiansen, C. D. Dressing, J. M. Jenkins, L. M. Walkowicz, and N. M. Batalha (2013, April). The False Positive Rate of Kepler and the Occurrence of Planets. *766(2)*, 81.
- Fu, Q. 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.
- Gandhi, S., N. Madhusudhan, and A. Mandell (2020, apr). H- and dissociation in ultra-hot jupiters : A retrieval case study of WASP-18b. *The Astronomical Journal* *159(5)*, 232.
- Garhart, E., D. Deming, A. Mandell, H. A. Knutson, N. Wallack, A. Burrows, J. J. Fortney, C. Hood, C. Seay, D. K. Sing, B. Benneke, J. D. Fraine, T. Kataria, N. Lewis, N. Madhusudhan, P. McCullough, K. B. Stevenson, and H. Wakeford (2020, April). Statistical Characterization of Hot Jupiter Atmospheres Using Spitzer’s Secondary Eclipses. *159(4)*, 137.
- Gaudi, B. S., K. G. Stassun, K. A. Collins, T. G. Beatty, G. Zhou, D. W. Latham, A. Bieryla, J. D. Eastman, R. J. Siverd, J. R. Crepp, E. J. Gonzales, D. J. Stevens, L. A. Buchhave, J. Pepper, M. C. Johnson, K. D. Colon, E. L. N. Jensen, J. E. Rodriguez, V. Bozza, S. C. Novati, G. D’Ago, M. T. Dumont, T. Ellis, C. Gaillard, H. Jang-Condell, D. H. Kasper, A. Fukui, J. Gregorio, A. Ito, J. F. Kielkopf, M. Manner, K. Matt, N. Narita, T. E. Oberst, P. A. Reed, G. Scarpetta, D. C. Stephens,

- R. R. Yeigh, R. Zambelli, B. J. Fulton, A. W. Howard, D. J. James, M. Penny, D. Bayliss, I. A. Curtis, D. L. Depoy, G. A. Esquerdo, A. Gould, M. D. Joneer, R. B. Kuhn, J. Labadie-Bartz, M. B. Lund, J. L. Marshall, K. K. McLeod, R. W. Pogge, H. Relles, C. Stockdale, T. G. Tan, M. Trueblood, and P. Trueblood (2017, June). A giant planet undergoing extreme-ultraviolet irradiation by its hot massive-star host. *546(7659)*, 514–518.
- Gibson, N. P., S. Merritt, S. K. Nugroho, P. E. Cubillos, E. J. W. de Mooij, T. Mikal-Evans, L. Fossati, J. Lothringer, N. Nikolov, D. K. Sing, J. J. Spake, C. A. Watson, and J. Wilson (2020, 01). Detection of Fe I in the atmosphere of the ultra-hot Jupiter WASP-121b, and a new likelihood-based approach for Doppler-resolved spectroscopy. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 493(2), 2215–2228.
- Gillon, M., A. H. M. J. Triaud, B.-O. Demory, E. Jehin, E. Agol, K. M. Deck, S. M. Lederer, J. de Wit, A. Burdanov, J. G. Ingalls, E. Bolmont, J. Leconte, S. N. Raymond, F. Selsis, M. Turbet, K. Barkaoui, A. Burgasser, M. R. Burleigh, S. J. Carey, A. Chaushev, C. M. Copperwheat, L. Delrez, C. S. Fernandes, D. L. Holdsworth, E. J. Kotze, V. Van Grootel, Y. Almleaky, Z. Benkhaldoun, P. Magain, and D. Queloz (2017, February). Seven temperate terrestrial planets around the nearby ultracool dwarf star TRAPPIST-1. *542(7642)*, 456–460.
- Gillon, M., Lanotte, A. A., Barman, T., Miller, N., Demory, B.-O., Deleuil, M., Montalbán, J., Bouchy, F., Collier Cameron, A., Deeg, H. J., Fortney, J. J., Fridlund, M., Harrington, J., Magain, P., Moutou, C., Queloz, D., Rauer, H., Rouan, D., and Schneider, J. (2010). The thermal emission of the young and massive planet corot-2b at 4.5 and 8 μm . *A&A* 511, A3.
- Goody, R. M. and Y. L. Yung (1989). *Atmospheric radiation : theoretical basis*.
- Gordon, I. E., S. Kassi, A. Campargue, and G. C. Toon (2010, June). Electric quadrupole transitions in the $a^1\Delta_g x^3\Sigma_g^-$ band of oxygen : a case study. In *65th International Symposium On Molecular Spectroscopy*, pp. WF03.
- Gordon, I. E., L. S. Rothman, and G. Li (2013, June). Hitran2012 and remote sensing of planetary atmospheres. In *68th International Symposium on Molecular Spectroscopy*, pp. ERE03.
- Greene, T. P., M. R. Line, C. Montero, J. J. Fortney, J. Lustig-Yaeger, and K. Luther (2016, jan). CHARACTERIZING TRANSITING EXOPLANET ATMOSPHERES WITH JWST. *The Astrophysical Journal* 817(1), 17.
- Grillmair, C. J., A. Burrows, D. Charbonneau, L. Armus, J. Stauffer, V. Meadows, J. van Cleve, K. von Braun, and D. Levine (2008, December). Strong water absorption in the dayside emission spectrum of the planet HD189733b. *456(7223)*, 767–769.
- Guerlet, S., A. Spiga, M. Sylvestre, M. Indurain, T. Fouchet, J. Leconte, E. Millour, R. Wordsworth, M. Capderou, B. Bézard, and F. Forget (2014, August). Global climate modeling of Saturn’s atmosphere. Part I : Evaluation of the radiative transfer model. 238, 110–124.

- Guillot, T. (2010, September). On the radiative equilibrium of irradiated planetary atmospheres. *520*, A27.
- Guillot, T., A. Burrows, W. B. Hubbard, J. I. Lunine, and D. Saumon (1996, March). Giant Planets at Small Orbital Distances. *459*, L35.
- Guillot, T. and R. Hueso (2006, March). The composition of Jupiter : sign of a (relatively) late formation in a chemically evolved protosolar disc. *367*(1), L47–L51.
- Guillot, T., Y. Miguel, B. Militzer, W. B. Hubbard, Y. Kaspi, E. Galanti, H. Cao, R. Helled, S. M. Wahl, L. Iess, W. M. Folkner, D. J. Stevenson, J. I. Lunine, D. R. Reese, A. Biekman, M. Parisi, D. Durante, J. E. P. Connerney, S. M. Levin, and S. J. Bolton (2018, March). A suppression of differential rotation in Jupiter’s deep interior. *555*(7695), 227–230.
- Guillot, T. and A. P. Showman (2002, April). Evolution of “51 Pegasus b-like” planets. *385*, 156–165.
- Haynes, K., A. M. Mandell, N. Madhusudhan, D. Deming, and H. Knutson (2015, Jun). Spectroscopic Evidence for a Temperature Inversion in the Dayside Atmosphere of Hot Jupiter WASP-33b. *806*(2), 146.
- Howard, A. W., G. W. Marcy, S. T. Bryson, J. M. Jenkins, J. F. Rowe, N. M. Batalha, W. J. Borucki, D. G. Koch, E. W. Dunham, I. Gautier, Thomas N., J. Van Cleve, W. D. Cochran, D. W. Latham, J. J. Lissauer, G. Torres, T. M. Brown, R. L. Gilliland, L. A. Buchhave, D. A. Caldwell, J. Christensen-Dalsgaard, D. Ciardi, F. Fressin, M. R. Haas, S. B. Howell, H. Kjeldsen, S. Seager, L. Rogers, D. D. Sasselov, J. H. Steffen, G. S. Basri, D. Charbonneau, J. Christiansen, B. Clarke, A. Dupree, D. C. Fabrycky, D. A. Fischer, E. B. Ford, J. J. Fortney, J. Tarter, F. R. Girouard, M. J. Holman, J. A. Johnson, T. C. Klaus, P. Machalek, A. V. Moorhead, R. C. Morehead, D. Ragozzine, P. Tenenbaum, J. D. Twicken, S. N. Quinn, H. Isaacson, A. Shporer, P. W. Lucas, L. M. Walkowicz, W. F. Welsh, A. Boss, E. Devore, A. Gould, J. C. Smith, R. L. Morris, A. Prsa, T. D. Morton, M. Still, S. E. Thompson, F. Mullally, M. Endl, and P. J. MacQueen (2012, August). Planet Occurrence within 0.25 AU of Solar-type Stars from Kepler. *201*(2), 15.
- Iro, N., B. Bézard, and T. Guillot (2005, June). A time-dependent radiative model of HD 209458b. *436*(2), 719–727.
- Irwin, P., N. Teanby, R. Kok, L. Fletcher, C. Howett, C. Tsang, C. Wilson, S. Calcutt, C. Nixon, and P. Parrish (2008, 04). The nemesis planetary atmosphere radiative transfer and retrieval tool. *Journal of Quantitative Spectroscopy Radiative Transfer* *109*, 1136–1150.
- Karman, T., I. E. Gordon, A. van der Avoird, Y. I. Baranov, C. Boulet, B. J. Drouin, G. C. Groenenboom, M. Gustafsson, J.-M. Hartmann, R. L. Kurucz, L. S. Rothman, K. Sun, K. Sung, R. Thalman, H. Tran, E. H. Wishnow, R. Wordsworth, A. A. Vigin, R. Volkamer, and W. J. van der Zande (2019). Update of the hitran collision-induced absorption section. *Icarus* *328*, 160 – 175.

- Kass, R. E. and A. E. Raftery (1995). Bayes factors. *Journal of the American Statistical Association* 90(430), 773–795.
- 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. *801*, 86.
- Kataria, T., A. P. Showman, N. K. Lewis, J. J. Fortney, M. S. Marley, and R. S. Freedman (2013, April). Three-dimensional Atmospheric Circulation of Hot Jupiters on Highly Eccentric Orbits. *767*, 76.
- Knutson, H. A., D. Charbonneau, L. E. Allen, A. Burrows, and S. T. Megeath (2008, January). The 3.6–8.0 μm Broadband Emission Spectrum of HD 209458b : Evidence for an Atmospheric Temperature Inversion. *673*(1), 526–531.
- Knutson, H. A., D. Charbonneau, L. E. Allen, J. J. Fortney, E. Agol, N. B. Cowan, A. P. Showman, C. S. Cooper, and S. T. Megeath (2007, May). A map of the day-night contrast of the extrasolar planet HD 189733b. *447*(7141), 183–186.
- Knutson, H. A., N. Lewis, J. J. Fortney, A. Burrows, A. P. Showman, N. B. Cowan, E. Agol, S. Aigrain, D. Charbonneau, D. Deming, J.-M. Désert, G. W. Henry, J. Langton, and G. Laughlin (2012, jun). 3.6 AND 4.5 μm PHASE CURVES AND EVIDENCE FOR NON-EQUILIBRIUM CHEMISTRY IN THE ATMOSPHERE OF EXTRASOLAR PLANET HD 189733b. *The Astrophysical Journal* 754(1), 22.
- Komacek, T. D. and A. P. Showman (2016, April). Atmospheric Circulation of Hot Jupiters : Dayside-Nightside Temperature Differences. *821*(1), 16.
- 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. *505*(7481), 69–72.
- Kreidberg, L., M. R. Line, V. Parmentier, K. B. Stevenson, T. Louden, M. Bonnefoy, J. K. Faherty, G. W. Henry, M. H. Williamson, and K. Stassun (2018, Jul). Global Climate and Atmospheric Composition of the Ultra-hot Jupiter WASP-103b from HST and Spitzer Phase Curve Observations. *156*(1), 17.
- 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, jun). Global climate and atmospheric composition of the ultra-hot jupiter WASP-103b from HST and Spitzer Phase curve observations. *The Astronomical Journal* 156(1), 17.
- Kurucz, R. L. (1970, February). Atlas : a Computer Program for Calculating Model Stellar Atmospheres. *SAO Special Report* 309.
- Lenzuni, P., D. F. Chernoff, and E. E. Salpeter (1991, June). Rosseland and planck mean opacities of a zero-metallicity gas. *76*, 759–801.

- Lewis, N. K., V. Parmentier, T. Kataria, J. de Wit, A. P. Showman, J. J. Fortney, and M. S. Marley (2017, June). Atmospheric Circulation and Cloud Evolution on the Highly Eccentric Extrasolar Planet HD 80606b. *ArXiv e-prints* : 1706.00466.
- Line, M. R. and V. Parmentier (2016, March). The influence of nonuniform cloud cover on transit transmission spectra. *820*, 78.
- Line, M. R., J. Teske, B. Burningham, J. J. Fortney, and M. S. Marley (2015, July). Uniform Atmospheric Retrieval Analysis of Ultracool Dwarfs. I. Characterizing Benchmarks, Gl 570D and HD 3651B. *807(2)*, 183.
- Line, M. R., A. S. Wolf, and X. e. a. Zhang (2013, October). A systematic retrieval analysis of secondary eclipse spectra. i. a comparison of atmospheric retrieval techniques. *775*, 137.
- Lodders, K. and B. Fegley (2002, February). Atmospheric chemistry in giant planets, brown dwarfs, and low-mass dwarf stars. i. carbon, nitrogen, and oxygen. *155*, 393–424.
- MacDonald, R. J., J. M. Goyal, and N. K. Lewis (2020, April). Why Is it So Cold in Here ? Explaining the Cold Temperatures Retrieved from Transmission Spectra of Exoplanet Atmospheres. *893(2)*, L43.
- Madhusudhan, N. (2012, sep). C/O RATIO AS a DIMENSION FOR CHARACTERIZING EXOPLANETARY ATMOSPHERES. *The Astrophysical Journal* 758(1), 36.
- Marley, M. S. and C. P. McKay (1999, April). Thermal Structure of Uranus' Atmosphere. *138*, 268–286.
- Marley, M. S., D. Saumon, and J. J. e. a. Fortney (2017, June). Sonora : A new generation model atmosphere grid for brown dwarfs and young extrasolar giant planets. In *American Astronomical Society Meeting Abstracts #230*, Volume 230 of *American Astronomical Society Meeting Abstracts*, pp. 315.07.
- Mayor, M. and D. Queloz (1995, November). A Jupiter-mass companion to a solar-type star. *378(6555)*, 355–359.
- Mikal-Evans, T., D. K. Sing, J. M. Goyal, B. Drummond, A. L. Carter, G. W. Henry, H. R. Wakeford, N. K. Lewis, M. S. Marley, P. Tremblin, and et al. (2019, Jun). An emission spectrum for wasp-121b measured across the 0.8–1.1m wavelength range using the hubble space telescope. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 488(2), 2222–2234.
- Mikal-Evans, T., D. K. Sing, T. Kataria, H. R. Wakeford, N. J. Mayne, N. K. Lewis, J. K. Barstow, and J. J. Spake (2020, May). Confirmation of water emission in the dayside spectrum of the ultrahot Jupiter WASP-121b. *arXiv e-prints*, arXiv :2005.09631.
- Min, M., C. W. Ormel, K. Chubb, C. Helling, and Y. Kawashima (2020, June). The ARCiS framework for Exoplanet Atmospheres : Modelling Philosophy and Retrieval. *arXiv e-prints*, arXiv :2006.12821.
- Mollière, P., R. van Boekel, J. Bouwman, T. Henning, P. O. Lagage, and M. Min (2017, Apr). Observing transiting planets with JWST. Prime targets and their synthetic spectral observations. *600*, A10.

- Mollière, P., R. van Boekel, C. Dullemond, T. Henning, and C. Mordasini (2015, Nov). Model Atmospheres of Irradiated Exoplanets : The Influence of Stellar Parameters, Metallicity, and the C/O Ratio. *813*(1), 47.
- Morello, G., A. Claret, M. Martin-Lagarde, C. Cossou, A. Tsiaras, and P. O. Lagage (2020, February). The ExoTETHyS Package : Tools for Exoplanetary Transits around Host Stars. *159*(2), 75.
- Moses, J. I., M. R. Line, and C. e. a. Visscher (2013, November). Compositional diversity in the atmospheres of hot neptunes, with application to gj 436b. *777*, 34.
- 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, jul). DISEQUILIBRIUM CARBON, OXYGEN, AND NITROGEN CHEMISTRY IN THE ATMOSPHERES OF HD 189733b AND HD 209458b. *The Astrophysical Journal* *737*(1), 15.
- Nugroho, S. K., H. Kawahara, K. Masuda, T. Hirano, T. Kotani, and A. Tajitsu (2017, December). High-resolution Spectroscopic Detection of TiO and a Stratosphere in the Day-side of WASP-33b. *154*(6), 221.
- Oreshenko, M., B. Lavie, and S. L. e. a. Grimm (2017, September). Retrieval analysis of the emission spectrum of wasp-12b : Sensitivity of outcomes to prior assumptions and implications for formation history. *847*, L3.
- Parmentier, V. and I. J. M. Crossfield (2018). *Exoplanet Phase Curves : Observations and Theory*, pp. 116.
- Parmentier, V., J. J. Fortney, and A. P. e. a. Showman (2016, September). Transitions in the cloud composition of hot jupiters. *828*, 22.
- Parmentier, V., T. Guillot, J. J. Fortney, and M. S. Marley (2015, February). A non-grey analytical model for irradiated atmospheres. II. Analytical vs. numerical solutions. *574*, A35.
- Parmentier, V., M. R. Line, and J. L. e. a. Bean (2018, September). From thermal dissociation to condensation in the atmospheres of ultra hot jupiters : Wasp-121b in context. *617*, A110.
- Parmentier, V., A. P. Showman, and Y. Lian (2013, October). 3D mixing in hot Jupiters atmospheres. I. Application to the day/night cold trap in HD 209458b. *558*, A91.
- Pluriel, W., N. Whiteford, B. Edwards, Q. Changeat, K. H. Yip, R. Baeyens, A. Al-Refaie, M. Fabienne Bieger, D. Blain, A. Gressier, G. Guilluy, A. Yassin Jaziri, F. Kiefer, D. Modirrousta-Galian, M. Morvan, L. V. Mugnai, M. Poveda, N. Skaf, T. Zingales, S. Wright, B. Charnay, P. Drossart, J. Leconte, A. Tsiaras, O. Venot, I. Waldmann, and J.-P. Beaulieu (2020, September). ARES. III. Unveiling the Two Faces of KELT-7 b with HST WFC3. *160*(3), 112.
- Pluriel, W., T. Zingales, J. Leconte, and V. Parmentier (2020, April). Strong biases in retrieved atmospheric composition caused by day-night chemical heterogeneities. *636*, A66.

- Redfield, S., M. Endl, W. D. Cochran, and L. Koesterke (2008, January). Sodium Absorption from the Exoplanetary Atmosphere of HD 189733b Detected in the Optical Transmission Spectrum. *673*(1), L87.
- Ribas, I., M. D. Gregg, T. S. Boyajian, and E. Bolmont (2017). The full spectral radiative properties of proxima centauri. *A&A 603*, A58.
- Ricker, G. R., J. N. Winn, R. Vanderspek, D. W. Latham, G. Á. Bakos, J. L. Bean, Z. K. Berta-Thompson, T. M. Brown, L. Buchhave, N. R. Butler, R. P. Butler, W. J. Chaplin, D. Charbonneau, J. Christensen-Dalsgaard, M. Clampin, D. Deming, J. Doty, N. De Lee, C. Dressing, E. W. Dunham, M. Endl, F. Fres-sin, J. Ge, T. Henning, M. J. Holman, A. W. Howard, S. Ida, J. Jenkins, G. Jernigan, J. A. Johnson, L. Kaltenegger, N. Kawai, H. Kjeldsen, G. Laughlin, A. M. Levine, D. Lin, J. J. Lissauer, P. Mac-Queen, G. Marcy, P. R. McCullough, T. D. Morton, N. Narita, M. Paegert, E. Palle, F. Pepe, J. Pepper, A. Quirrenbach, S. A. Rinehart, D. Sasselov, B. Sato, S. Seager, A. Sozzetti, K. G. Stassun, P. Sullivan, A. Szentgyorgyi, G. Torres, S. Udry, and J. Villaseñor (2014, August). Transiting Exoplanet Survey Satellite (TESS). In *Space Telescopes and Instrumentation 2014 : Optical, Infrared, and Millimeter Wave*, Volume 9143 of *Proceedings of the SPIE*, pp. 914320.
- Rothman, L. S., I. E. Gordon, and A. e. a. Barbe (2009, June). The hitran 2008 molecular spectroscopic database. *110*, 533–572.
- Samland, M., P. Mollière, M. Bonnefoy, A. L. Maire, F. Cantalloube, A. C. Cheetham, D. Mesa, R. Grat-ton, B. A. Biller, Z. Wahhaj, J. Bouwman, W. Brandner, D. Melnick, J. Carson, M. Janson, T. Hen-ning, D. Homeier, C. Mordasini, M. Langlois, S. P. Quanz, R. van Boekel, A. Zurlo, J. E. Schlieder, H. Avenhaus, J. L. Beuzit, A. Boccaletti, M. Bonavita, G. Chauvin, R. Claudi, M. Cudel, S. Desi-dera, M. Feldt, T. Fusco, R. Galicher, T. G. Kopytova, A. M. Lagrange, H. Le Coroller, P. Martinez, O. Moeller-Nilsson, D. Mouillet, L. M. Mugnier, C. Perrot, A. Sevin, E. Sissa, A. Vigan, and L. Weber (2017, July). Spectral and atmospheric characterization of 51 Eridani b using VLT/SPHERE. *603*, A57.
- Sarkis, P., T. Henning, M. Kürster, T. Trifonov, M. Zechmeister, L. Tal-Or, G. Anglada-Escudé, A. P. Hatzes, M. Lafarga, S. Dreizler, I. Ribas, J. A. Caballero, A. Reiners, M. Mallonn, J. C. Morales, A. Kaminski, J. Aceituno, P. J. Amado, V. J. S. Béjar, H.-J. Hagen, S. Jeffers, A. Quirrenbach, R. Laun-hardt, C. Marvin, and D. Montes (2018, may). The CARMENES search for exoplanets around m dwarfs : A low-mass planet in the temperate zone of the nearby k2-18. *The Astronomical Jour-nal 155*(6), 257.
- Seager, S. and D. Deming (2010). Exoplanet atmospheres. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics 48*(1), 631–672.
- Sedaghati, E., H. M. J. Boffin, R. J. MacDonald, S. Gandhi, N. Madhusudhan, N. P. Gibson, M. Oshagh, A. Claret, and H. Rauer (2017, September). Detection of titanium oxide in the atmosphere of a hot Jupiter. *549*(7671), 238–241.

- Sheppard, K. B., A. M. Mandell, and P. e. a. Tamburo (2017, December). Evidence for a dayside thermal inversion and high metallicity for the hot jupiter wasp-18b. *850*, L32.
- Showman, A. P., C. S. Cooper, J. J. Fortney, and M. S. Marley (2008, July). Atmospheric Circulation of Hot Jupiters : Three-dimensional Circulation Models of HD 209458b and HD 189733b with Simplified Forcing. *682*(1), 559–576.
- Showman, A. P., J. J. Fortney, Y. Lian, M. S. Marley, R. S. Freedman, H. A. Knutson, and D. Charbonneau (2009, July). Atmospheric Circulation of Hot Jupiters : Coupled Radiative-Dynamical General Circulation Model Simulations of HD 189733b and HD 209458b. *699*, 564–584.
- Showman, A. P., N. K. Lewis, and J. J. Fortney (2015, March). 3d atmospheric circulation of warm and hot jupiters. *801*, 95.
- Showman, A. P., K. Menou, and J. Y. K. Cho (2008). *Atmospheric Circulation of Hot Jupiters : A Review of Current Understanding*, Volume 398 of *Astronomical Society of the Pacific Conference Series*, pp. 419.
- Showman, A. P., R. D. Wordsworth, T. M. Merlis, and Y. Kaspi (2013). *Atmospheric Circulation of Terrestrial Exoplanets*, pp. 277.
- Sing, D. K., J. J. Fortney, and N. e. a. Nikolov (2016, January). A continuum from clear to cloudy hot-jupiter exoplanets without primordial water depletion. *529*, 59–62.
- Spiegel, D. S., K. Silverio, and A. Burrows (2009a, Jun). Can tio explain thermal inversions in the upper atmospheres of irradiated giant planets ? *The Astrophysical Journal* *699*(2), 1487–1500.
- Spiegel, D. S., K. Silverio, and A. Burrows (2009b, Jun). Can tio explain thermal inversions in the upper atmospheres of irradiated giant planets ? *The Astrophysical Journal* *699*(2), 1487–1500.
- Stevenson, K. B., J. L. Bean, D. Fabrycky, and L. Kreidberg (2014, nov). AHUBBLE SPACE TELESCOPESEARCH FOR a SUB-EARTH-SIZED EXOPLANET IN THE GJ 436 SYSTEM. *The Astrophysical Journal* *796*(1), 32.
- Stevenson, K. B., J. L. Bean, A. Seifahrt, J.-M. Désert, N. Madhusudhan, M. Bergmann, L. Kreidberg, and D. Homeier (2014, may). TRANSMISSION SPECTROSCOPY OF THE HOT JUPITER WASP-12b FROM 0.7 TO 5 m. *The Astronomical Journal* *147*(6), 161.
- Stevenson, K. B., N. K. Lewis, and e. a. Jacob L. Bean (2016, jun). Transiting exoplanet studies and community targets forJWSTs early release science program. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* *128*(967), 094401.
- Stock, J. W., D. Kitzmann, A. B. C. Patzer, and E. Sedlmayr (2018, September). FastChem : A computer program for efficient complex chemical equilibrium calculations in the neutral/ionized gas phase with applications to stellar and planetary atmospheres. *479*(1), 865–874.

- Swain, M. R., G. Vasisht, and G. Tinetti (2008). The presence of methane in the atmosphere of an extrasolar planet. *Nature* 452(7185), 329–331.
- Tan, X. and T. D. Komacek (2019, Oct). The Atmospheric Circulation of Ultra-hot Jupiters. *arXiv e-prints*, arXiv :1910.01622.
- Tennyson, J. and S. N. Yurchenko (2012, September). Exomol : molecular line lists for exoplanet and other atmospheres. 425, 21–33.
- Tinetti, G., P. Drossart, P. Eccleston, P. Hartogh, A. Heske, J. Leconte, G. Micela, M. Ollivier, G. Pilbratt, L. Puig, D. Turrini, B. Vandenbussche, P. Wolkenberg, and J.-P. Beaulieu (2018, Nov). A chemical survey of exoplanets with ARIEL. *Experimental Astronomy* 46(1), 135–209.
- Tinetti, G., P. Drossart, and P. e. a. Eccleston (2018, November). A chemical survey of exoplanets with ariel. *Experimental Astronomy* 46, 135–209.
- Tinetti, G., A. Vidal-Madjar, M.-C. Liang, J.-P. Beaulieu, Y. Yung, S. Carey, R. J. Barber, J. Tennyson, I. Ribas, N. Allard, G. E. Ballester, D. K. Sing, and F. Selsis (2007, July). Water vapour in the atmosphere of a transiting extrasolar planet. 448(7150), 169–171.
- Tsiaras, A., I. P. Waldmann, M. Rocchetto, R. Varley, G. Morello, M. Damiano, and G. Tinetti (2016, dec). A NEW APPROACH TO ANALYZING HST SPATIAL SCANS : THE TRANSMISSION SPECTRUM OF HD 209458 b. *The Astrophysical Journal* 832(2), 202.
- 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, mar). A population study of gaseous exoplanets. *The Astronomical Journal* 155(4), 156.
- Turbet, M. (2018). *Habitabilité des planètes avec un modèle numérique de climat. Application aux planètes extrasolaires et à Mars primitif*. Ph. D. thesis. Thèse de doctorat dirigée par Forget, François Astrophysique Sorbonne université 2018.
- Turner, J. D., K. A. Pearson, L. I. Biddle, B. M. Smart, R. T. Zellem, J. K. Teske, K. K. Hardegree-Ullman, C. C. Griffith, R. M. Leiter, I. T. Cates, M. N. Nieberding, C.-T. W. Smith, R. M. Thompson, R. Hofmann, M. P. Berube, C. H. Nguyen, L. C. Small, B. C. Guvenen, L. Richardson, A. McGraw, B. Raphael, B. E. Crawford, A. N. Robertson, R. Tomblason, T. M. Carleton, A. P. M. Towner, A. M. Walker-LaFollette, J. R. Hume, Z. T. Watson, C. K. Jones, M. J. Lichtenberger, S. R. Hoglund, K. L. Cook, C. A. Crossen, C. R. Jorgensen, J. M. Romine, A. R. Thompson, C. F. Villegas, A. A. Wilson, B. Sanford, J. M. Taylor, and T. N. Henz (2016, June). Ground-based near-UV observations of 15 transiting exoplanets : constraints on their atmospheres and no evidence for asymmetrical transits. 459(1), 789–819.
- Vallis, G. K. (2017). *Shallow Water Systems* (2 ed.), pp. 105–142. Cambridge University Press.
- Visscher, C., K. Lodders, and B. Fegley, Jr. (2006, September). Atmospheric chemistry in giant planets, brown dwarfs, and low-mass dwarf stars. ii. sulfur and phosphorus. 648, 1181–1195.

- Visser, C., K. Lodders, and B. Fegley, Jr. (2010, June). Atmospheric chemistry in giant planets, brown dwarfs, and low-mass dwarf stars. iii. iron, magnesium, and silicon. *716*, 1060–1075.
- Visser, C. and J. I. Moses (2011, September). Quenching of Carbon Monoxide and Methane in the Atmospheres of Cool Brown Dwarfs and Hot Jupiters. *738*(1), 72.
- Waldmann, I. P., M. Rocchetto, G. Tinetti, E. J. Barton, S. N. Yurchenko, and J. Tennyson (2015, Nov). Tau-REx II : Retrieval of Emission Spectra. *813*(1), 13.
- Waldmann, I. P., G. Tinetti, M. Rocchetto, E. J. Barton, S. N. Yurchenko, and J. Tennyson (2015, Apr). Tau-REx I : A Next Generation Retrieval Code for Exoplanetary Atmospheres. *802*(2), 107.
- Wright, J. T., G. W. Marcy, A. W. Howard, J. A. Johnson, T. D. Morton, and D. A. Fischer (2012, July). The Frequency of Hot Jupiters Orbiting nearby Solar-type Stars. *753*(2), 160.
- Yip, K. H., I. P. Waldmann, A. Tsiaras, and G. Tinetti (2019, March). Integrating light-curve and atmospheric modelling of transiting exoplanets. *arXiv e-prints*, arXiv :1811.04686.
- Yurchenko, S. N., R. J. Barber, and J. Tennyson (2011, May). A variationally computed line list for hot nh_3 . *413*, 1828–1834.
- Yurchenko, S. N., J. Tennyson, and J. e. a. Bailey (2014, July). Spectrum of hot methane in astronomical objects using a comprehensive computed line list. *Proceedings of the National Academy of Science 111*, 9379–9383.
- Zhou, Y., D. Apai, B. W. P. Lew, and G. Schneider (2017, June). A Physical Model-based Correction for Charge Traps in the Hubble Space Telescope’s Wide Field Camera 3 Near-IR Detector and Its Applications to Transiting Exoplanets and Brown Dwarfs. *153*(6), 243.