



HAL
open science

L'atmosphère des exoplanètes avec le James Webb Space Telescope

Achrène Dyrek

► **To cite this version:**

Achrène Dyrek. L'atmosphère des exoplanètes avec le James Webb Space Telescope. Instrumentation et méthodes pour l'astrophysique [astro-ph.IM]. Université Paris Cité, 2023. Français. NNT : 2023UNIP7096 . tel-04552597

HAL Id: tel-04552597

<https://theses.hal.science/tel-04552597>

Submitted on 19 Apr 2024

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.



ED 560 – PHYSIQUE DE L'UNIVERS
CEA SACLAY – UMR AIM – LDE3

L'atmosphère des exoplanètes avec le James Webb Space Telescope

Achrène Dyrek

Septembre 2023

Vue d'artiste de la super-Neptune WASP-107b
© LUCA School of Arts, Belgique

THÈSE DE DOCTORAT DE PHYSIQUE DE L'UNIVERS

présentée pour obtenir le grade de

Docteur d'Université Paris Cité

par

ACHRÈNE DYREK

L'atmosphère des exoplanètes avec le James Webb Space Telescope

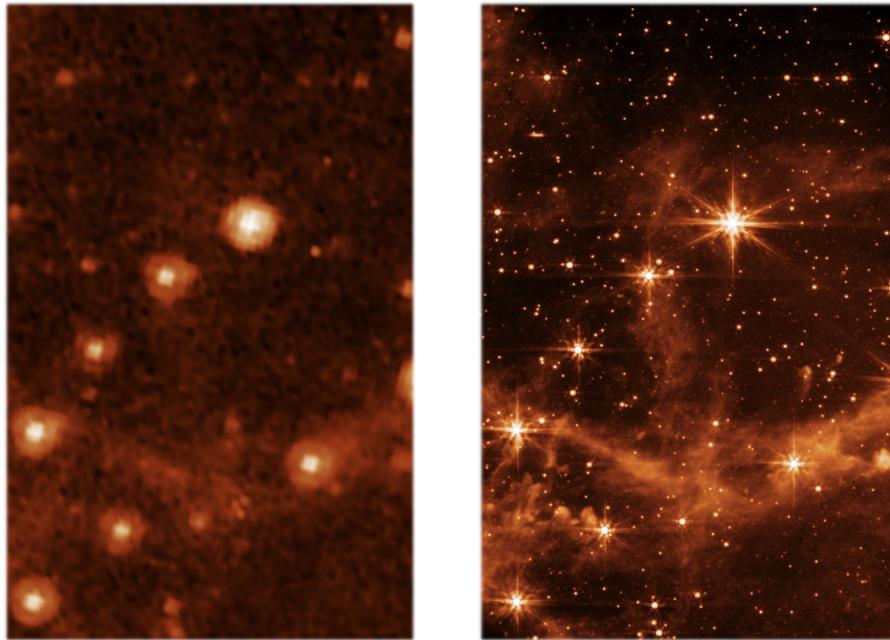
Thèse dirigée par PIERRE-OLIVIER LAGAGE

Présentée et soutenue publiquement le 29 septembre 2023

Devant un jury composé de :

PR. SÉBASTIEN CHARNOZ, Professeur des Universités, *Université Paris Cité* PRÉSIDENT DU JURY
DR. PIERRE-OLIVIER LAGAGE, Directeur de recherche CEA, *CEA* DIRECTEUR DE THÈSE
PR. MAGALI DELEUIL, Professeure des Universités, *LAM* RAPPOTRICE
DR. STÉPHANE MAZEVET, Physicien, Directeur Observatoire des Sciences de l'Univers, *OCA* RAPPORTEUR
DR. SARAH KENDREW, Group Leader, *STScI* EXAMINATRICE
PR. GIOVANNA TINETTI, Full Professor, *UCL* EXAMINATRICE

*À ma famille,
À ma grand-mère Annie,
À mon arrière-grand-père Bédros,
À Edouard, à Léon*



Comparaison entre *Spitzer* IRAC à $8 \mu\text{m}$ à gauche et JWST MIRI à $7.7 \mu\text{m}$, à droite. Crédit : NASA.

Résumés

L'atmosphère des exoplanètes avec le James Webb Space Telescope

Ma thèse est consacrée à l'étude des atmosphères d'exoplanètes avec le télescope spatial James Webb Space Telescope (JWST). L'étude et la caractérisation d'atmosphères d'exoplanètes représente aujourd'hui un enjeu majeur au sein de la communauté scientifique et au-delà, puisqu'il s'agit de mettre en perspective tous ces mondes découverts au cours des trois dernières décennies et notre propre Système solaire, seul hôte connu de la vie à ce jour. La première partie de ce manuscrit est consacrée à une introduction qui présente l'état de l'art de notre connaissance des atmosphères d'exoplanètes en termes de composition atomique et moléculaire, de structure et de dynamique. Cette introduction se concentre sur l'étude des exoplanètes dites transitantes (lorsque la planète passe devant ou derrière son étoile dans l'axe de visée des télescopes) et fournit une description de cette méthode observationnelle ainsi que des défis associés. La deuxième partie de ce manuscrit s'intéresse à l'élaboration de simulations d'observations d'atmosphères d'exoplanètes à l'aide du Mid-InfraRed Instrument (MIRI) du JWST (à l'époque encore en attente de son lancement) et de son spectromètre basse résolution (LRS). Mon objectif principal est la conception d'un outil de simulation complet et robuste qui permette à la communauté de valider les méthodes de réduction de données et de prédire les détections moléculaires (Dyrek, Ducrot et al., 2023; Morello, Dyrek et al., 2022). La troisième partie de ce manuscrit est dédiée à l'étude des performances en vol du LRS de MIRI après le lancement du JWST, le jour de Noël 2021. En effet, l'arrivée des premières données du JWST marque le début d'une étape cruciale de ma thèse. En particulier, je m'appuie sur le premier transit exoplanétaire observé par MIRI, celui de la Super-Terre L168-9b, choisie comme cible pour l'étude des performances. À partir de ces données, je me suis concentrée sur l'identification de variations instrumentales infimes qui pourraient porter atteinte à la stabilité temporelle des observations. De fait, je discute des axes d'améliorations des méthodes de réduction de données dans le cadre de l'étude d'exoplanètes en transit (Dyrek, Ducrot et al., 2023). La dernière partie de ce manuscrit est consacrée à l'analyse scientifique des courbes de lumières photométriques et spectroscopiques d'atmosphères d'exoplanètes, des géantes gazeuses aux rocheuses tempérées. Je présente mes travaux collaboratifs dans le cadre du Temps Garanti d'Observation (GTO) et de l'Early Release Science (ERS) du JWST pour lesquels j'ai mené la réduction et l'analyse des données. En particulier, je m'intéresse à la super-Neptune WASP-107b dont l'analyse de données a conduit notamment à la première détection de dioxyde de soufre (SO_2) en infrarouge moyen et à la première détection de nuages de silicates (Dyrek, Min et al., 2023). Enfin, je présente la première détection de l'émission thermique d'une exoplanète rocheuse et tempérée, TRAPPIST-1b, pour laquelle nous avons contraint la température de brillance qui indique l'absence d'une atmosphère dense (Greene, Bell et al., 2023). Le chapitre final est dédié à l'ensemble des perspectives ouvertes par la révolution observationnelle du JWST et de la future mission dédiée aux exoplanètes : Ariel.

Mots clés : Exoplanète, Atmosphère, Infrarouge, Instrumentation, Réduction et traitement de données, Géantes gazeuses, Rocheuses tempérées

Exoplanet atmospheres with the James Webb Space Telescope

My thesis is devoted to the characterisation of exoplanet atmospheres with the newly-operating James Webb Space Telescope (JWST). Our understanding of exoplanet atmospheres is being revolutionised by the observational capabilities of such an observatory. The scientific outcomes will reach our scientific community and the general public, putting into perspective our knowledge of our own Solar System, the only system that is known to host life. The first part of this manuscript is devoted to an introduction that includes a state-of-the-art review of exoplanet atmospheres characterisation in terms of atomic and molecular composition, structure and dynamics. In this introduction, we focus on transiting exoplanets (when the planet passes in front of or behind its host star in the telescope's line of sight). We provide a description of this observational method and key results that have been obtained over the past two decades. The second part of this manuscript focuses on the molecular composition predictions with the JWST Mid-InfraRed Instrument (MIRI) and its Low-Resolution Spectrometer (LRS) that is meant to carry out atmospheric spectroscopy in an uncharted wavelength range. Here, we present realistic simulations of transiting exoplanets I developed during my thesis, with the MIRI LRS instrument that include various instrumental systematics likely to alter the atmospheric features we are meant to detect in our data (Dyrek, Ducrot et al., 2023; Morello, Dyrek et al., 2022). Our main objective is to design a comprehensive simulation tool that enables the community to build robust data reduction methods and to predict molecular detections. The third part of this manuscript is dedicated to the characterisation of the in-flight post-commissioning performances of the MIRI LRS. This work is based on the first exoplanetary transit observed with MIRI of the Super-Earth L168-9b, chosen to be a calibration target. My work focuses on identifying in-flight instrumental systematics that undermine observations' stability and more generally, the study of transiting exoplanets (Dyrek, Ducrot et al., 2023). The final part of this manuscript is devoted to the scientific analysis of photometric and spectroscopic observations of both gas giants and temperate rocky exoplanet atmospheres. Here, I present my contribution on data reduction and analysis to the collaborative work we conducted as part of the Guaranteed Time Observation (GTO) and the Early Release Science (ERS) consortia. In particular, our work on the super-Neptune WASP-107b led to the first mid-infrared detection of sulphur dioxide (SO₂) and silicate clouds (Dyrek, Min et al., 2023). In addition, we conducted the first detection of the thermal emission of the rocky temperate exoplanet TRAPPIST-1b. In this work, we have constrained its brightness temperature, revealing key insights in the presence or not of an atmosphere (Greene, Bell et al., 2023). The final chapter of my thesis is dedicated to the prospects offered by JWST and the future Ariel mission, as these two telescopes will provide game-changing observations over the next decades.

Key-words : Exoplanet, Atmosphere, Infrared, Instrumentation, Data reduction and analysis, Giant gaseous planets, Temperate rocky planets

Remerciements

Je remercie chaleureusement Magali Deleuil et Stéphane Mazevet pour avoir accepté d'être rapportrice et rapporteur de ce manuscrit. Je remercie également Sébastien Charnoz d'avoir présidé le jury de soutenance et Sarah Kendrew ainsi que Giovanna Tinetti d'avoir été examinatrices de cette thèse.

Je souhaite également remercier mon directeur à qui je dois en grande partie la réussite de cette thèse. Merci Pierre-Olivier de m'avoir donné l'opportunité de travailler à tes côtés, de m'avoir transmis ta connaissance et ton savoir, d'avoir soutenu mes initiatives et ma volonté, même dans les moments difficiles. Merci pour les précieux moments de discussions et d'échanges qui m'ont permis de forger mon âme de chercheuse et d'appréhender les multiples facettes de notre métier. Je te remercie surtout de m'avoir accordé la liberté de m'exprimer, de me déployer et de prendre mes propres décisions de recherche. J'espère que nous continuerons à travailler ensemble encore pendant de longues années.

Merci Stéphane et merci Rafa pour votre présence et votre bienveillance. Je vous dois beaucoup (à part les chocolats, finalement, je ne les ai pas mangés). Votre aide m'a été précieuse et je vous en suis très reconnaissante. Stéphane, tu es le parrain dont tout thésard a besoin. Mille fois merci d'avoir joué tour à tour le rôle de directeur de laboratoire, de directeur de recherche, de collègue et de confident. Rafa et Savita, j'espère que nous pourrons prendre une pause sur la terrasse de l'IAC, entre les palmiers, avec un café con leche. Merci également à Marc de m'avoir accompagnée tout au long de la thèse. Ton suivi m'a été d'une aide précieuse.

Je remercie les membres de mon laboratoire, le LDE₃, pour leurs conseils, leur bienveillance et leur présence. Merci à vous, Sacha, Rafa, Stéphane, Antonio, Antoine, Barbara, Adam, Alexandre, Valeria, Maxime, Louis, Camille, Leïla, Hachem, Elsa, Clémence, Maël, Victor, Rui, Florian, Quentin, Aurélie, Jérémy, Lisa, Marine et Sylvain.

Merci également à mon équipe d'avoir fait partie de mon monde pendant ces trois années. J'ai adoré apprendre de vous, discuter avec vous sur un nombre incalculable de sujets. Merci à toi René pour tes conseils, ton aide, ton savoir (qui tend drastiquement vers l'infini). Si je deviens chercheuse, je te promets d'arrêter de chercher sous les lampadaires, mais d'utiliser une lampe-torche (ou du moins d'allumer une bougie?), pour commencer à chercher dans l'obscurité. Merci à toi Alain pour tes mille propositions de relecture, de vérifications et pour ces heures à essayer de faire fonctionner les serveurs! Merci à toi Christophe pour ta bienveillance continue, pour m'avoir aidée autant d'un point de vue technique qu'humain. J'ai hâte que nous concevions des simulations révolutionnaires pour Ariel. Merci Michel d'avoir été un pilier pendant ces trois années. Merci de m'avoir enseigné le métier de chercheur(se) à travers ton propre parcours et tes expériences, merci de m'avoir confortée dans mon envie de travailler au CEA. J'ai beaucoup appris de toi. Merci à toi, Patrice, pour toutes nos conversations et pour ton soutien inconditionnel. J'espère que nous poursuivrons nos discussions pendant de longues années encore. Merci à vous Rémi, Sofia et David, vous avez été un petit rayon de soleil pendant deux mois. J'ai été très heureuse de travailler avec vous. Je vous souhaite le meilleur pour la suite. J'espère que nous aurons l'occasion de travailler à nouveau ensemble.

Merci à toi Sylvain, mon acolyte du CEA, pour ta présence quotidienne. Pêle-mêle, merci pour les cafés, les

REMERCIEMENTS

conversations (Slack s'en souvient encore), les nombreux memes de qualité, la détection d'exoplanètes indétectables en vitesses radiales (tout va bien), les discussions de géopolitique, les discussions entre Paris et Bordeaux (ou Paris-province, si je puis me permettre). Juste merci, merci pour le soutien à toutes épreuves.

Une pensée pour toi Elsa, merci de m'avoir apporté ta connaissance et de m'avoir transmis ton amour pour la recherche. Ta volonté et ton dynamisme (à toute épreuve) ont été un exemple. Merci pour les nombreuses heures passées à m'aider, à me motiver et à me pousser. Grâce à toi j'ai pu élargir mon horizon de recherche et l'étendre à l'internationale. La suite s'annonce bien!

Merci David pour nos conversations. J'espère que tu trouveras les réponses aux questions que ce sacré James Webb ne cesse de soulever. J'espère que tu pourras percer le mystère de ces premières galaxies. De mon côté, je n'ai toujours pas reçu de signaux venant d'aliens. Mais j'attends patiemment. Enfin, j'espère que tu as troqué ton tiroir de bonbons pour un tiroir de pommes. N'oublions pas que sans celles-ci, Newton n'aurait pas prouvé l'existence de la gravitation. Ça nous aurait bien embêtés pour la suite. J'espère que nous pourrions poursuivre nos conversations.

Merci à vous, les doctorants et les doctorantes, je vous souhaite le meilleur pour la suite. Hâte de venir vous voir à vos soutenances. Une pensée pour Leila, Adnan, Hugo, Ewan, Clara, Nicolas, Timothée, Tristan, Julia, Valentin, Gavin, Maxime, Fabian, Jack, Felipe, François, Anne-Cécile, Paul et Wenjin.

Merci aux équipes du rez-de-chaussée de m'avoir accueillie à bras ouvert (même si l'instrumentation ne représente que 50 % de mon travail, ne m'en voulez pas). J'ai adoré vous rencontrer, discuter avec vous et même partager vos bureaux, digne SBF que je suis (comme dirait Louis). Enfin, merci à tous les membres du département. Mes trois années ont été riches en rencontres, en discussions et en apprentissage.

Grazie mille Giuseppe. You played a huge role in the success of my thesis. Thank you for sharing your expertise with me, for teaching me and introducing me to the tough world of data reduction. Well, now that JWST is here, things seem a bit easier (Spitzer was a hell of a mess). More than that, thank you for sharing your place and home with me (thank you Monika too!) and for being such a supportive friend. Our collaboration is far from being over.

Merci Quentin pour le temps que tu as consacré à relire mes proposals (entre autres), à les corriger et à me conseiller. Merci d'avoir été toujours positif et de m'avoir aidée à prendre confiance en moi en tant que chercheuse.

Thank you, Sarah, for giving me the opportunity to work with you and for always being supportive. Our collaboration is precious to me and I hope we will carry on working together during the upcoming years. Thank you for your help regarding the fellowships and prizes I applied to, for your valuable letters that enabled me to actually get them and for your kind support all along my thesis.

Thank you, Billy, for supporting me during my thesis, for helping me with my proposals, for your many ideas and suggestions all the time. Thank you for telling me that I could make it. At some point, I wouldn't have believed it. Also, a special mention to our travels all around the world. I really hope that you are well settled now.

Merci Thibault pour ton aide précieuse, la soutenance aurait été (un peu) différente sans tes conseils et les heures de répétition. La prochaine fois, je ferai en sorte de ne pas tout condenser en une même journée (promis).

Ces quelques lignes pour toi Mathilde, ma partenaire de thèse, de voyages et d'ambition commune. Merci pour ces heures de travail (je pèse mes mots), de discussions à refaire le monde, à penser la recherche, à imaginer un futur plus équitable et inclusif, où il ferait bon de vivre et de travailler, à construire nos carrières, et j'en passe. Tu es une personne passionnante et plus que talentueuse, je te souhaite le meilleur.

Merci à vous, Lucas et Christian, pour avoir égayé mes années de thèse! Merci pour les heures de débat Christian, je suis sûre que nous aurions pu faire de grandes découvertes à cinq heures du matin. Merci à toi, Lucas, surtout pour ton bureau (non, je plaisante, merci pour le tableau aussi). Trêve de plaisanteries, merci à vous pour avoir été des amis présents, dans le soutien, drôles et affectueux. J'espère que nous continuerons sur cette lancée encore longtemps. Merci au LESIA, ma deuxième maison et en particulier à Nicolas, avec qui j'ai passé des heures à rédiger ma thèse, à partager mes craintes et mes doutes. Bon courage pour la suite!

Merci à vous, l'équipe de la Guyane vers les étoiles, vous avez changé le cours de ma thèse. Merci à Raphaël, Lester, Daniel, Alain, Lise, Marion, Miguel, Nicolas, Nour, Andrew et Boris pour ces moments uniques. Merci en

particulier à toi Raphaël, pour ta bienveillance et ton honnêteté.

Je remercie les membres de la Société Française de Physique pour m'avoir reçue et m'avoir donné l'opportunité de présenter mes travaux, ainsi que la Croix Bleue des Arméniens de France pour m'avoir aidée et fait confiance.

Merci à vous, Tim et Nico. J'ai adoré grandir avec vous pendant ces trois années. Des catacombes à l'Ardèche, j'ai découvert vos mondes et je suis ravie d'en faire partie aujourd'hui. J'ai hâte que vous finissiez vos thèses, que l'on puisse partir faire les quatre cents coups ensemble (Diana, tu es bien évidemment associée au projet). Merci pour le soutien, l'amour, la compassion, la gentillesse, la bienveillance et ta tête avec une chapka, Tim. J'aurais bien mis la photo mais je crois que ce n'est pas de circonstances. Nico, si tu pensais être épargné avec ta photo sur un vélo 3-5 ans un peu trop petit pour toi, tu as tort (si si, tu vois de quoi je parle). J'ai failli la mettre aussi. J'allais vous dire que vous alliez me manquer mais pas besoin, on se voit au labo. Love. Et si, vous me manquerez quand je partirai, mais je préfère ne pas y penser.

Un petit mot pour toi Diana, le petit coup de coeur de ma thèse, tu es une personne géniale et toujours positive, j'espère qu'on va continuer à étendre très sérieusement notre collaboration (de soirée).

Je savais que tu allais le chercher et parcourir les trois pages pour trouver ton nom. Je t'avais promis que tu y serais, alors voilà : Merci Gio, pour ta bonne humeur constante et ton calme à toute épreuve. Merci pour les heures de discussion pour me remettre sur pied quand ça n'allait pas, pour me dire tous les jours que je pouvais y arriver et pour la quantité astronomique de blagues (à peu près) drôles pour me changer les idées. Je sais au fond que ça ne t'a pas coûté mais je doute que tu saches à quel point ça m'a aidé. Ça va me couter cher en pintes cette affaire mais ça valait le coup (j'espère que tu apprécies la blague). À la nôtre!

Merci à vous mes ami(e)s, Mélissa, Lou, Nastya, Léna, Céleste, Florian, Chloé, Florent, Manon, Jean-Baptiste (c'est bien la première fois que j'écris ton prénom en entier), Kévin, Fériel, Aurélien, Antoine, Charles (Carlos), Alexis, P-L, Quentin, Clément, Yohann, Mathis, Paul, Simon, Hugo et Maxime d'avoir toujours été présents à mes côtés.

Merci à vous Claude pour vos encouragements à m'engager dans cette voie et à y persévérer, j'espère pour de nombreuses années encore.

Cette thèse, je ne l'aurais jamais entreprise ni menée à bien sans ma famille. Merci Alidze et Aram pour avoir été un pilier dans ma vie, je vous souhaite de mener à bien les nombreux projets que vous entreprendrez. Vous aurez toujours mon soutien, comme j'ai pu avoir le vôtre, tout au long de mes études, de ma thèse et de ma vie en général. Merci papa pour tes conseils et ta présence pendant les durs mois de rédaction. Merci mamig, d'avoir été ma confidente et mon amie, de m'avoir accompagnée quotidiennement et d'avoir toujours soutenu chacune de mes décisions. Merci mama pour avoir été un exemple de réussite, de m'avoir encouragée et d'avoir cru en ma capacité à devenir chercheuse. Merci pour toutes les discussions que nous avons eues, des plus simples aux plus complexes, dans le travail et dans tous les autres domaines de ma vie, merci pour tout. Merci medz hayrig pour la justesse avec laquelle tu m'as soutenue, encouragée et écoutée. Merci mona et tonton de m'avoir accueillie à bras ouverts dans les moments difficiles, et les très bons moments aussi (mona, rendez-vous à 18h!).

Enfin, je remercie toutes les personnes, de près ou de loin, qui m'ont accompagnée dans cette thèse pour que je puisse la mener à bien. J'ai une pensée en particulier pour ma grand-mère Annie, pour mon arrière-grand-père Bédros, pour Lévon et pour Edouard. Je suis sûre que vous auriez été heureux et heureuse de savoir que je suis allée au bout. Cette thèse est un peu la vôtre, aussi.

Enfin, merci à toi James!

Table des matières

1	Les atmosphères d'exoplanètes, une introduction générale	23
1.1	La détection par méthode des transits	25
1.1.1	Introduction	25
1.1.2	L'orbite Képlérienne	29
1.1.3	La probabilité de détection	32
1.1.4	Les paramètres observables	34
1.1.5	Les propriétés orbitales	36
1.2	La caractérisation : étude des atmosphères, les observations avant le JWST	38
1.2.1	La spectroscopie de transit et d'éclipse	39
1.2.2	L'étude de la courbe de phase	42
1.2.3	Déterminer la composition moléculaire et la structure des atmosphères : état de l'art et limitations	44
1.3	La nécessité d'observatoires spatiaux en infrarouge moyen : l'apport des missions JWST et Ariel	56
1.3.1	Le James Webb Space Telescope	57
1.3.2	La mission Ariel	58
1.3.3	De la difficulté de l'observation	59
1.4	Problématique de la thèse	61
1.4.1	De l'instrumentation à l'interprétation scientifique des observations	62
1.4.2	Organisation du manuscrit	62
2	Préparer l'arrivée des données JWST, l'apport des simulations	64
2.1	Introduction	66
2.2	Le spectro-imageur infrarouge MIRIm	67
2.2.1	Le plan focal	68
2.2.2	Le spectromètre basse résolution ou LRS	69
2.2.3	L'architecture du détecteur	70
2.2.4	Le mode de lecture du détecteur	70
2.2.5	Les effets détecteur à prendre en compte	72
2.3	L'enjeu de la stabilité : les effets de persistance	75
2.3.1	La nature des effets de persistance	77
2.3.2	Inférer des modèles de persistance à partir de tests au sol	78
2.4	La chaîne de simulation	81

2.4.1	Structure du pipeline de simulation	83
2.4.2	Le principe de la conversion des photons en signal électronique	83
2.4.3	Les outils utilisés	87
2.4.4	Le package MIRISim-TSO	89
2.5	Des simulations pour préparer l'arrivée des données : résultats et applications	90
2.5.1	Images spectrales et courbes de lumière	91
2.5.2	Le spectre atmosphérique	93
2.5.3	Évaluation des performances de la chaîne de simulation	93
2.5.4	Applications des simulations	96
2.6	Conclusion et perspectives	100
3	Les premières données : méthodes de réduction et analyse instrumentale	105
3.1	Introduction	107
3.2	Réduire et analyser les données LRS : méthodes et outils	108
3.2.1	Corriger des effets détecteur et convertir les rampes en pentes	109
3.2.2	Soustraire le fond observationnel, diviser par le champ plat et calibrer	111
3.2.3	Extraire les spectres 1D et les courbes de lumière spectrales	113
3.2.4	Ajuster un modèle de transit et de systématiques instrumentales sur les données	116
3.3	Premières données de transit exoplanétaire avec le MIRI LRS	122
3.3.1	La cible L168-9b : réduction des données	123
3.3.2	Évaluer les performances du MIRI LRS	124
3.4	Les simulations comme référence	128
3.4.1	L'adaptation des simulations à la calibration en vol	128
3.4.2	Simuler la spectroscopie de transit de la cible L168-9b : comparaison aux données	129
3.4.3	Analyse du rapport bruit-sur-signal	130
3.4.4	Des simulations pour préparer les futurs cycles d'observation	135
3.5	Étude des effets de persistance	141
3.5.1	Établir l'allure des effets de persistance	141
3.5.2	La télémétrie de JWST, un accès à l'historique de l'instrument	142
3.5.3	Étendre l'analyse à l'ensemble des cibles MIRI LRS : l'outil MIRIPersistence	143
3.6	Conclusion et perspectives	144
4	De la composition des atmosphères : l'analyse scientifique des données JWST	166
4.1	Introduction	168
4.2	De la composition moléculaire de la super-Neptune WASP-107b	169
4.2.1	Le spectre en infrarouge moyen : réduction et analyse des données	169
4.2.2	Déterminer la composition moléculaire à partir des données : le rôle du <i>free retrieval</i>	171
4.2.3	L'interprétation des résultats par des modèles atmosphériques	174
4.2.4	WASP-39b, un second exemple de détection de SO ₂ par le MIRI LRS	178
4.3	L'émission thermique de la rocheuse tempérée TRAPPIST-1b	179
4.3.1	La détection de l'éclipse de TRAPPIST-1b : réduction et analyse de données	181
4.3.2	Mesurer la température côté jour de TRAPPIST-1b	182
4.3.3	Contraindre la présence ou non d'une atmosphère	184
4.4	La courbe de phase de la super-Terre GJ1214b	186
4.4.1	Analyse des données et ajustement de modèles de transit et de courbe de phase	187
4.4.2	Inférer l'albédo de Bond de la planète	188

4.5	Conclusion et perspectives	189
5	Conclusion et perspectives	252
5.1	Conclusion	254
5.2	Travaux annexes : un pipeline <i>data-driven</i> pour analyser les données <i>Spitzer</i>	255
5.2.1	Le principe de la séparation de sources à l'aveugle	256
5.2.2	L'analyse en composantes indépendantes	258
5.2.3	Ajuster des données à partir d'un modèle de bruit	258
5.2.4	Une méthode de réduction envisageable pour les futures données Ariel?	259
5.3	Travaux annexes : courbes de phase d'exoplanètes non-transitantes	261
5.3.1	La possible détection d'une exoplanète non-transitante	261
5.3.2	Le suivi en vitesses radiales avec HARPS-N	262
5.3.3	Inférer le rayon planétaire par modélisation de courbes de phase	262
5.4	Perspectives	263
5.4.1	Approfondir l'analyse des performances instrumentales de MIRI	263
5.4.2	De la photochimie dans les atmosphères d'exoplanète	266
5.4.3	Des rocheuses tempérées aux <i>lava worlds</i>	267
5.4.4	Exoplanétologie comparative : la mission Ariel	268
A	Des simulations pour préparer l'arrivée des données	270
B	Publications	275
	Références	304

Table des figures

1.1	Évolution du nombre de planètes de notre Système solaire au cours des siècles.	26
1.2	Distribution des exoplanètes confirmées (en mars 2023)	28
1.3	Observation du transit de la planète HD-209458b	29
1.4	Géométrie de l'orbite elliptique décrite à partir de l'anomalie vraie f	30
1.5	Géométrie de l'orbite elliptique au trois dimensions par rapport à un plan de référence	32
1.6	Probabilité de détection d'un transit	34
1.7	Définition du paramètre d'impact dans le cas des orbites circulaires	35
1.8	Courbe de lumière d'une exoplanète et paramètres observables lors d'un transit	37
1.9	Représentation de l'atmosphère d'une exoplanète en orbite autour de son étoile	39
1.10	Sources de rayonnement du système étoile-planète	41
1.11	Courbe de lumière photométrique de l'exoplanète HD 189733b observée par <i>Spitzer</i> /IRAC à $3.6 \mu\text{m}$	43
1.12	Spectres en transmission d'un ensemble de Jupiter chaudes combinant les données HST et <i>Spitzer</i>	46
1.13	Émissions thermiques côté jour de 13 Jupiter chaudes observées avec l'instrument WFC3 du HST en spectroscopie d'éclipse	51
1.14	Simulations hydrodynamiques haute résolution d'une Jupiter chaude	52
1.15	Effet de l'assombrissement centre-bord de l'étoile	54
1.16	Signatures spectrales en infrarouge moyen	56
1.17	Présentation du JWST	57
1.18	Gammes de longueur d'onde couvertes par les observatoires HST, <i>Spitzer</i> et JWST	58
1.19	Présentation de la mission Ariel	59
1.20	Données photométriques de HD 189733b obtenues avec <i>Spitzer</i>	61
1.21	Courbe de lumière blanche des données spectroscopiques HST de la cible WASP-121b	61
1.22	Les trois principaux axes de recherche	62
2.1	Définition d'un spectroscopie selon le Professeur Calys	67
2.2	Modèle de test de MIRIm et modèle de vol du détecteur	68
2.3	Plan focal de MIRIm	69
2.4	Architecture d'un détecteur photoconducteur Si :As	71
2.5	Mode de lecture non-destructive <i>FASTRI</i> du détecteur du spectro-imageur MIRIm	72
2.6	Illustration des différentes non-linéarités de la rampe.	76
2.7	Exemples d'effets de persistance obtenus par tests au sol au JPL	78
2.8	Critère de convergence pour établir le temps d'attente avec le début d'une observation	80

TABLE DES FIGURES

2.9	Estimation du temps d'attente avant le début d'une observation pour les effets de persistance	82
2.10	Structure haut niveau des simulations pour le LRS et l'imageur de MIRIm	84
2.11	Création d'un spectre à partir d'une source ponctuelle	85
2.12	Échantillonnage de la PSF selon le critère de Shannon	85
2.13	Outils de la chaîne de simulation	87
2.14	Résultats de simulation des étapes ExoNoodle et MIRISim appliquées à la planète WASP-8ob	92
2.15	Courbes de lumières en sortie des simulations de WASP-8ob.	94
2.16	Spectre atmosphérique de WASP-8ob en sortie des simulations.	95
2.17	Distribution des résidus de l'ajustement du modèle sur les simulations de WASP-8ob	96
2.18	Temps de calcul numérique des outils utilisés dans les simulations	97
2.19	Courbe de phase des simulations de WASP-43b	99
2.20	Simulations photométriques de TRAPPIST-1b avec l'imageur de MIRI à 12.8 μm	100
2.21	Prédiction de la détectabilité de l'éclipse de TRAPPIST-1b par simulations	101
3.1	Dernières images du JWST par une caméra embarquée dans le lanceur Ariane V	107
3.2	Ensemble des fonctions de l'étape 1 du pipeline <code>jwst</code>	110
3.3	Première étape de la réduction des données par le pipeline <code>jwst</code>	111
3.4	Deuxième étape de la réduction des données par le pipeline <code>jwst</code>	112
3.5	Extraction spectrale 1D à partir d'une image spectrale	113
3.6	Carte 2D de la série temporelle de spectres des simulations de WASP-8ob	115
3.7	Schéma de l'algorithme de Metropolis-Hastings	118
3.8	Projection 2D de la matrice de covariance de la distribution <i>a posteriori</i> de l'ajustement des simulations de WASP-8ob	121
3.9	Exemple de données brutes du LRS de la cible L168-9b	124
3.10	Courbe de lumière globale des données L168-9b	125
3.11	Courbe de lumière blanche des données L168-9b	125
3.12	Spectre en transmission de L168-9b	126
3.13	Variances d'Allan pour les 9 premiers canaux des données L168-9b	127
3.14	Comparaison des simulations et des données de la cible L168-9b	131
3.15	Estimation du bruit-sur-signal pour les données et les simulations de L168-9b	132
3.16	Extraction du spectre 1D des données L168-9b	133
3.17	Estimation du bruit-sur-signal des données et simulations de la cible L168-9b	134
3.18	Estimation du bruit-sur-signal des données et simulations de la cible L168-9b après activation de l'étape RSCD	135
3.19	Exemple de rampes des données L168-9b réduites à l'aide du pipeline <code>jwst</code>	136
3.20	Statut des frames pour 4 intégrations de la cible L168-9b pour l'ensemble des pixels de la trace	137
3.21	Spectres en transmission de la simulation de deux scénarios atmosphériques pour la cible L168-9b	138
3.22	Comparaison des simulations et données de la cible WASP-43b	139
3.23	Détectabilité de l'éclipse de la super-Terre AU Mic b à partir de 7 μm	140
3.24	Exemple d'effets de persistance observée dans les données de la cible L168-9b	142
3.25	Téléométrie de MIRI pendant les 48 heures précédant l'observation de L168-9b	143
3.26	Les effets de persistance de l'observation de la cible WASP-43b	145
4.1	Courbe de lumière blanche de la cible WASP-107b	170
4.2	Spectre en transmission de la cible WASP-107b	171
4.3	Méthodologie du <i>retrieval</i> atmosphérique	172

4.4	Ajustement des modèles atmosphériques aux spectres de transmission JWST MIRI et HST STIS de WASP-107b	173
4.5	Prédiction des abondances de SO ₂ avec et sans photochimie	176
4.6	Schéma décrivant la photochimie du soufre en haute atmosphère.	177
4.7	Impact de la température intrinsèque et du rapport C/O sur les abondances prédites de SO ₂ et de CH ₄ dans l'atmosphère de WASP1-07b.	178
4.8	Spectre en transmission de la planète WASP-39b observée avec le MIRI LRS	179
4.9	Variance d'Allan des résidus de l'ajustement de la courbe de lumière blanche de WASP-39b	180
4.10	Première image de TRAPPIST-1 obtenue par MIRI à 15 μm	182
4.11	5 courbes de lumière de TRAPPIST-1b obtenue avec l'imageur de MIRI à 15 μm	183
4.12	Combinaison des 5 courbes de lumière de TRAPPIST-1b obtenue avec l'imageur de MIRI à 15 μm	184
4.13	Flux mesuré de TRAPPIST-1b obtenu avec l'imageur de MIRI à 15 μm.	186
4.14	Courbe de phase en lumière blanche de GJ 1214b observée avec le MIRI LRS	189
5.1	Courbe de lumière photométrique <i>Spitzer</i> de WASP-18b	256
5.2	Exemple d'un subarray des données <i>Spitzer</i> WASP-18b	257
5.3	Le problème de la <i>soirée cocktail</i>	258
5.4	Meilleur modèle après ajustement des données <i>Spitzer</i> de la cible WASP-18b	259
5.5	Projection 2D de la matrice de covariance de la distribution <i>a posteriori</i> de l'ajustement des données <i>Spitzer</i> de la cible WASP-18b	260
5.6	Courbe de lumière de la cible WASP-18b extraite à l'aide d'un modèle bruité	261
5.7	Spectre de puissance et courbe de lumière de la cible KIC 9139163 issus des données <i>Kepler</i>	262
5.8	Observations en vitesses radiales de la cible KIC 9139163	263
5.9	Modèle iso-amplitude de la modulation photométrique de la cible KIC 9139163	264
5.10	Exemples de spectres obtenus après analyse des données WASP-39b pour différentes méthodes de correction des non-linéarités des rampes.	265
5.11	Profondeur d'éclipse de TRAPPIST-1b en infrarouge moyen pour différentes compositions de roches à la surface	268

Liste des acronymes et abréviations

- ACS** *Advanced Camera for Suveys*
- AIRS** *ARIEL InfraRed Spectrometer*
- APT** *Astronomer's Proposal Tool*
- Ariel** *Atmospheric Remote-Sensing Infrared Exoplanet Large-survey*
- BMJD_TDB** *Barycentric Modified Julian Date Temps Dynamique Barycentrique*
- CHEOPS** *Characterising Exoplanets Satellite*
- CDP** *Calibration Data Product*
- CEA** *Commissariat à l'Énergie Atomique et aux énergies alternatives*
- CNES** *Centre National d'Études Spatiales*
- CoRoT** *Convection, Rotation et Transits planétaires*
- CRDS** *Calibration Reference Data System*
- CSA** *Canadian Space Agency*
- CSG** *Centre Spatial Guyanais*
- DDT** *Director's Discretionary Time*
- DN** *Digital Number*
- ELT** *Extremely Large Telescope*
- ERS** *Early Release Science*
- ESA** *European Space Agency*
- ETC** *Exposure Time Calculator*
- FGS** *Fine Guiding Sensor*
- FORS₂** *Focal Reducer/low dispersion Spectrograph 2*
- FWHM** *Full Width at Half Maximum*

GCM	<i>Global Climate Model</i>
GO	<i>General Observer</i>
GPI	<i>Gemini Planet Imager</i>
GTO	<i>Guaranteed Time Observations</i>
HARPS-N	<i>High Accuracy Radial velocity Planet Searcher for the Northern hemisphere</i>
HGA	<i>High Gain Antenna</i>
HMC	<i>Hamiltonian Monte Carlo</i>
HST	<i>Hubble Space Telescope</i>
HWO	<i>Habitable Worlds Observatory</i>
IA	<i>Intelligence artificielle</i>
IAU	<i>International Astronomical Union</i>
IRAC	<i>Infrared Array Camera</i>
JPL	<i>Jet Propulsion Laboratory</i>
JWST	<i>James Webb Space Telescope</i>
LRS	<i>Low-Resolution Spectrometer</i>
mas	milliseconde d'arc (marsec)
MCMC	<i>Markov-Chain Monte Carlo</i>
M-H	<i>Metropolis-Hastings algorithm</i>
MIRI	<i>Mid-Infrared Instrument</i>
MIRIm	<i>Mid-Infrared Imager</i>
MRS	<i>Mid-Resolution Spectrometer</i>
NASA	<i>National Aeronautics and Space Administration</i>
NICMOS	<i>Near Infrared Camera and Multi-Object Spectrometer</i>
NIRCam	<i>Near-Infrared Camera</i>
NIRISS	<i>Near-Infrared Imager and Slitless Spectrograph</i>
NIRSpec	<i>Near-Infrared Spectrograph</i>
NSR	<i>Noise-to-signal ratio</i>
pc	parsecs
PCE	<i>Photon Conversion Efficiency</i>
PDR	<i>Preliminary Design Review</i>
PI	<i>Principal Investigator</i>

PID *Program Identification*
ppm *partie par million*
PSF *Point Spread Function*
RMS *Root Mean Square*
RSCD *Reset Switch Charge Decay*
SNR *Signal-to-noise ratio*
STIS *Space Telescope Imaging Spectrograph*
STScI *Space Telescope Science Institute*
TA *Target Acquisition*
TESS *Transiting Exoplanet Survey Satellite*
TNG *Telescopio Nazionale Galileo*
TSO *Times Series Observation*
UA *Unité Astronomique*
VLT *Very Large Telescope*
WFC3 *Wide Field Camera 3*
4QPM *Four Quadrant Phase Mask*

CHAPITRE I

Les atmosphères d'exoplanètes, une introduction générale

Sommaire

1.1	La détection par méthode des transits	25
1.1.1	Introduction	25
1.1.2	L'orbite Képlérienne	29
1.1.3	La probabilité de détection	32
1.1.4	Les paramètres observables	34
1.1.5	Les propriétés orbitales	36
1.2	La caractérisation : étude des atmosphères, les observations avant le JWST	38
1.2.1	La spectroscopie de transit et d'éclipse	39
1.2.2	L'étude de la courbe de phase	42
1.2.3	Déterminer la composition moléculaire et la structure des atmosphères : état de l'art et limitations	44
1.3	La nécessité d'observatoires spatiaux en infrarouge moyen : l'apport des missions JWST et Ariel	56
1.3.1	Le James Webb Space Telescope	57
1.3.2	La mission Ariel	58
1.3.3	De la difficulté de l'observation	59
1.4	Problématique de la thèse	61
1.4.1	De l'instrumentation à l'interprétation scientifique des observations	62
1.4.2	Organisation du manuscrit	62

“Je commence à ignorer les interviews qui se poursuivent et je guette l'écran. Nous venons de passer la barre des deux minutes. Soudain, les portes s'ouvrent. Tout le monde se rue à l'extérieur, chaque rangée sortant par une porte différente. Nous nous retrouvons dehors, sur une terrasse à niveau. Un énorme projecteur placé derrière nous nous aveugle et crée une pollution lumineuse désagréable. Les indications de vol émises depuis la salle deviennent inaudibles. Je me demande combien de temps s'est écoulé entre l'annonce des deux minutes et ma sortie à l'extérieur. Je suis confuse, nous sommes aveuglés et nous ne savons pas dans quelle direction regarder. Nous sortons les téléphones sans savoir quoi en faire. Soudain, le projecteur s'éteint. Une voix surgit des hauts parleurs. Nous sommes enfin dans l'obscurité et les indications orales sont claires. Je suis rassurée. La voix commence le décompte : 10, 9, 8, 7, 6... 3. Une lueur rouge apparaît à l'horizon. Nous devinons instantanément la direction dans laquelle il faut regarder et orientons les téléphones. Je filme mais sans y prêter attention. Mes yeux sont rivés sur le spectacle. À 3 secondes nous apercevons un flash lumineux, il s'agit de l'allumage des boosters. À partir de maintenant, plus aucun retour en arrière n'est possible. L'ordinateur de bord du lanceur a initié la séquence de lancement et a ordonné l'allumage des boosters, juste après celui de l'étage principal. ...2, 1. Une énorme lumière blanche déchire le ciel, à l'horizon. Comme un Soleil qui se lèverait à minuit. Une tâche diffuse commence à monter très lentement. Je me demande si mon téléphone va résoudre la fusée. La tâche se réduit et devient un point ou plutôt une traînée correspondant à la combustion des ergols. Le spectacle est magnifique, même la voix dans le haut parleur nous le dit. Cela réveille en nous le sentiment de notre humanité. Nous sommes tous d'accord, même cette voix, normalement si formelle. La fusée s'élève et traverse une fine couche de nuages qui diffuse sa lumière. La luminosité augmente instantanément dans le ciel. C'est comme une explosion de beauté. La trajectoire se courbe vers la droite. Je ne saurais dire s'il s'agit de l'est ou de l'ouest, du nord ou du sud. La fusée rougit à l'horizon et s'appête à passer par dessus le bâtiment. Certains chuchotent : “Il faut rentrer et passer de l'autre côté!”. Nous hésitons. J'arrête de filmer. Je rentre. Je traverse à pas rapide la salle Jupiter. Certains courent. Je me dépêche, je cours à moitié. Je surgis de l'autre côté et cherche la fusée. Je ne la trouve pas. Mon oeil est attiré par un avion. Et puis je l'aperçois. La fusée est un maintenant un point lointain, une étoile dans le ciel. La voix dans les haut-parleurs nous annonce la séparation des boosters mais nous ne pouvons pas le voir à l'oeil nu. Doucement, nous sentons l'adrénaline retomber. Il n'y a pas besoin d'en voir plus. Quelque part, nous avons déjà dit au revoir à notre fusée. Nous restons avec quelques personnes dehors. On s'exprime, on est souriants, on est calmes et on parle de la suite. Du Webb.”

— Extrait de mon Journal de bord “La Guyane vers les étoiles”, *Lancement Soyouz*, 4 décembre 2021

1.1 La détection par méthode des transits

1.1.1 Introduction

Le 24 août 2006, une discussion controversée lors de l'Assemblée générale de l'Union Internationale d'Astronomie ou International Astronomical Union en anglais (IAU) aboutit à l'adoption de la définition suivante pour les planètes du Système solaire (Lecavelier Des Etangs et Lissauer, 2022). Une planète est un corps céleste qui :

1. est en orbite autour du Soleil,
2. a une masse suffisante pour que sa gravité l'emporte sur les forces des corps rigides, de sorte qu'elle adopte une forme d'équilibre hydrostatique (presque ronde),
3. a nettoyé le voisinage de son orbite.

Cette définition s'accompagne également d'une nouvelle sémantique pour nommer des corps de plus faibles masses qui ne respectent pas le troisième critère de la définition et qui ne sont pas des satellites. Il s'agit des planètes naines dont Pluton et Charon font maintenant partie. Tout autre corps du Système solaire ne respectant pas non plus le deuxième critère de la définition est appelé "petit corps du Système solaire". Ainsi, ce 24 août 2006, le Système solaire perd symboliquement une planète, générant un grand nombre de réactions allant à l'encontre de cette décision. Destituer un corps du Système solaire relève d'un acte portant atteinte à l'essence même de ce corps : il ne nous viendrait jamais à l'idée de refuser au Soleil sa condition d'étoile, car le Soleil *est* une étoile par nature. Mais contrairement à ce que nous pourrions penser, les définitions des objets célestes ne sont pas immuables dans le temps et les planètes ne font pas exception. Elles varient et s'adaptent en fonction des axes historiques de la Recherche et des découvertes observationnelles et théoriques aux cours des siècles. À titre d'exemple, les travaux de Doressoundiram et Lellouch, 2008 ont permis de déterminer l'évolution des définitions des planètes du Système solaire au cours du temps. La Fig. 1.1 présente ces travaux. De fait, de nombreux corps sont considérés comme des planètes, à commencer par la lune ou le Soleil et les astéroïdes. Les lunes de Jupiter ou de Saturne sont également ajoutées au cercle très privé des planètes, puis destituées. Uranus et Neptune, deux planètes actuelles de notre Système solaire sont découvertes respectivement en 1781 et 1846, par William Herschel qui découvre Uranus par observation et par Urbain Le Verrier qui découvre Neptune par prédictions mathématiques. Pluton ne fera qu'une brève apparition en tant que planète du Système solaire puisqu'elle est découverte en 1930 puis destituée en 2006. La définition actuelle compte, à l'heure où j'écris cette thèse, 8 planètes qui sont, dans l'ordre de proximité au Soleil : Mercure, Vénus, Terre, Mars, Jupiter, Saturne, Uranus et Neptune.

Un défi plus ardu consiste à décrire les planètes *qui ne sont pas* dans notre Système solaire. Nous les appelons des **exoplanètes** et leur définition est bien plus complexe car nous n'en connaissons pas les limites inférieures et supérieures de masses ni les conditions de formation. Une première recherche bibliographique rapide nous donne la définition suivante : "Une exoplanète est une planète en orbite autour d'une étoile autre que le Soleil". Cette définition justifie l'ajout du préfixe -exo, du grec ancien "en dehors" au terme planète mais ne fournit aucune borne inférieure ou supérieure de masse. En effet, comment définir la limite entre exoplanète et étoile ? Quels types d'étoiles peuvent abriter des exoplanètes en orbite autour d'elles ? Que faire de ces objets que l'on appelle "naines brunes" dont les masses sont insuffisantes pour être considérées comme des étoiles mais qui sont néanmoins bien plus massives que Jupiter, planète la plus massive du Système solaire ? La définition la plus récente établie par l'IAU est la suivante (Schneider, Dedieu et al., 2011; Chabrier, Johansen et al., 2014; Russell, 2021; Lecavelier Des Etangs et Lissauer, 2022) :

1. Les objets dont la masse réelle est inférieure à la masse limite pour activer la fusion thermonucléaire du deutérium (actuellement calculée à 13 masses de Jupiter pour les objets de métallicité solaire) qui gravitent autour d'étoiles, de naines brunes ou de rémanents stellaires et dont le rapport de masse avec l'objet central est inférieur à l'instabilité L_4/L_5 , ($M/M_{\text{central}} < 2/(25 + \sqrt{621}) \simeq 1/25$) sont des "planètes" (quelle que



FIGURE 1.1 – Évolution du nombre de corps considérés comme des planètes du Système solaire au cours des siècles. Le dernier changement concerne Pluton, la 9^e planète de notre Système, découverte en 1930 puis destituée en 2006 et aujourd’hui considérée comme “planète naine”. Figure adaptée de Doressoundiram et Lellouch, 2008, avec l’aimable autorisation d’Alain Doressoundiram.

soit la manière dont elles sont formées). La masse/taille minimale requise pour qu’un objet extrasolaire soit considéré comme une planète est la même que celle utilisée pour notre Système solaire : une masse suffisante pour que sa gravité l’emporte sur les forces des corps rigides, de sorte qu’elle adopte une forme d’équilibre hydrostatique (presque ronde),

2. Les objets sub-stellaires définis par une masse inférieure à la masse limite pour activer la fusion thermonucléaire du deutérium sont appelés “naines brunes”, quelle que soit la manière dont elles sont formées et leur localisation dans le système.
3. Les objets flottant librement (traduction littérale de l’anglais “free-floating objects”) dans les jeunes amas d’étoiles dont la masse est inférieure à la masse limite pour activer la fusion thermonucléaire du deutérium ne sont pas des “planètes” mais des “naines sous-brunes”.

Les découvertes successives et la compréhension que nous avons de ces objets permet de contraindre cette définition en constante évolution. Précisons tout de même que le terme “planète” est utilisé par abus de langage pour décrire à la fois les planètes du Système solaire et les exoplanètes. De manière générale, la détection et la caractérisation des systèmes exoplanétaires représente un champ de recherche récent en astrophysique. En philosophie, en théologie, bien évidemment en astrophysique et dans tout autre domaine de recherche, la question de l’existence d’autres mondes s’est toujours indéniablement posée car elle est intrinsèquement liée à notre condition humaine. L’idée sous-jacente à l’existence de ces mondes est celle de l’existence de la vie ailleurs. Sommes-nous seuls dans l’Univers? Au cours des siècles, cette question renvoie constamment au paradoxe entre l’omniprésence d’étoiles comme

le Soleil dans notre environnement proche (à l'échelle de notre Galaxie) et le manque de preuves observationnelles de l'existence de ces mondes. Les propriétés isotropiques de notre Univers, qui reposent sur le principe de cosmologie d'homogénéité et d'isotropie (Durrer, 2020) impliquent pourtant que d'autres mondes *devraient* exister. La très faible luminosité et la très petite taille des objets exoplanétaires rendent leur observation très difficile. La preuve observationnelle est apportée à la fin du XX^e siècle avec la découverte de deux exoplanètes orbitant un pulsar (PSR1257+12) (Wolszczan et Frail, 1992), puis d'une exoplanète orbitant une étoile en séquence principale (51-Pegasi) (Mayor et Queloz, 1995). Les travaux de Mayor et Queloz, 1995 se voient récompensés par le prix Nobel de Physique en 2019, récompense à la hauteur de l'impact de leur découverte et des perspectives qui en émanent : les autres mondes existent autour d'étoiles comme notre Soleil.

Les 28 dernières années ont été prolifiques en termes de détection. Au 17 avril 2023, la détection de 5338 exoplanètes était confirmée¹. Les méthodes de détection sont diverses et se regroupent sous deux catégories. Les méthodes directes permettent de résoudre spatialement la planète de son étoile et donc de l'imager ou d'en obtenir un spectre d'émission propre. Les méthodes indirectes reposent sur l'observation d'un système étoile-planète et de la détection de la modulation du spectre d'émission ou de la photométrie de l'étoile hôte induite par la présence d'une planète en orbite autour d'elle. La détection directe repose non seulement sur la séparation angulaire mais également sur le contraste de luminosité entre l'étoile et la planète.

Les observatoires au sol comme l'instrument Gemini-GPI (aujourd'hui en fin d'exploitation) et le Very Large Telescope (VLT)-Sphere permettent d'atteindre des contrastes de 10^{-7} . Les télescopes spatiaux comme le Hubble Space Telescope (HST)-STIS et ACS ainsi que le James Webb Space Telescope (JWST)-NICMOS et NIRCAM atteignent des contrastes entre 10^{-4} et 10^{-8} , seulement pour des très grandes séparations angulaires (> 1 arcsec). Les futurs Extremely Large Telescope (ELT) et Habitable Worlds Observatory (HWO) prévoient d'atteindre des exoplanètes respectivement à de très faibles résolutions angulaires (jusqu'à 0.1 arcsec) et des contrastes jusqu'à 10^{-10} . Ainsi, l'imagerie directe se limite aujourd'hui à l'observation de planètes géantes (ou naines brunes), jeunes et à longues périodes orbitales. A titre d'exemple, la plus petite planète imagée à ce jour est 51-Eridani b (Macintosh et al., 2015) dont la masse est 2.6 fois celle de Jupiter et la période orbitale est ~ 2 fois plus grande que celle de Jupiter. Les planètes gazeuses de faibles masses ($< 1 R_J$) et les planètes rocheuses dont les exo-Terres (Trauger et Traub, 2007) sont donc aujourd'hui inaccessibles par imagerie directe.

Nous comptons trois méthodes de détection indirecte : les micro-lentilles gravitationnelles, les vitesses radiales (par spectroscopie Doppler) et les transits. Parmi ces méthodes, les vitesses radiales et les transits ont permis la détection respectivement de 19 et 75 % des exoplanètes, comptabilisant à elles seules 94 % des exoplanètes connues à ce jour (NASA Exoplanet Archive²), dont des planètes rocheuses et tempérées semblables à notre Terre. Ces mondes sont très divers et surtout très différents de ceux de notre Système solaire. De nouvelles terminologies apparaissent. En comparaison avec les planètes de notre Système solaire, nous parlons de Jupiter chauds, de Sub-Neptunes ou encore de Super-Terres pour décrire leur masse, rayon et distance à l'étoile. La Fig. 1.2 présente cette diversité.

La méthode des vitesses radiales repose sur la spectroscopie Doppler de l'étoile hôte. Dans un système étoile-planète, la planète et l'étoile étant mutuellement attirées gravitationnellement, les deux corps tournent autour du centre de masse du système. En d'autres termes, l'étoile n'est pas fixe mais tourne autour du centre de masse et, de fait, la distance entre l'étoile et l'observateur varie au cours du temps. La lumière émise par l'étoile est donc affectée par l'effet Doppler : lorsque l'étoile se rapproche de nous, son spectre se décale en fréquence vers le bleu, et lorsqu'elle s'éloigne de nous, son spectre se décale en fréquence vers le rouge. L'observation de la vitesse des déplacements périodiques des lignes spectrales permet donc de révéler la présence d'une exoplanète autour de l'étoile. La méthode des vitesses radiales permet de mesurer la quantité $M_p \sin i$ où M_p est la masse de la planète et i l'inclinaison de l'orbite (voir Sect. 1.1.2) et donc de fournir une borne inférieure de la masse de la planète. La méthode des vitesses radiales est celle qui a permis la détection de la première exoplanète orbitant une étoile comme notre Soleil, 51-Pegasi b (Mayor

1. Les références sont disponibles sur le site <https://exoplanetarchive.ipac.caltech.edu/>

2. Le site est disponible à l'adresse suivante : <https://exoplanetarchive.ipac.caltech.edu/index.html>

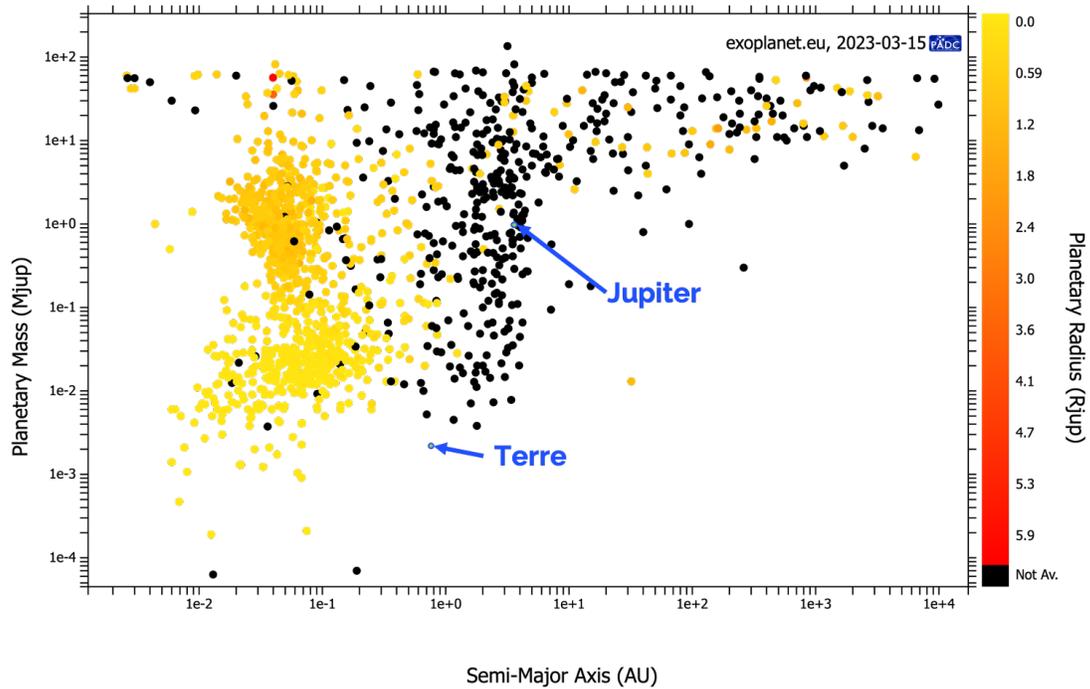


FIGURE 1.2 – Distribution des exoplanètes confirmées (en mars 2023), sous la forme d’un diagramme en échelle logarithmique de la masse de la planète exprimée en masses de Jupiter en fonction de la distance à l’étoile en unité astronomique (AU), 1 AU étant la distance Terre-Soleil. L’échelle de couleur représente les différents rayons planétaires en rayons de Jupiter. Plus la couleur est jaune, plus la planète est petite. Les planètes en noir sont les planètes pour lesquelles la valeur du rayon n’a pas été recensée. Figure obtenue à partir du site exoplanet.eu

et Queloz, 1995).

La méthode du transit repose sur le passage d’une exoplanète devant son étoile dans l’alignement de l’axe de visée des télescopes. Nous appelons cela un transit. Ce passage est périodique et sa fréquence dépend de la période orbitale de la planète. Lors de ce passage, une fraction de la lumière de l’étoile est bloquée par la planète et provoque une baisse de la luminosité de l’étoile, observable par nos télescopes. Cette diminution de luminosité correspond à la surface du disque stellaire masquée par la surface planétaire. La méthode des transits nous donne accès à la géométrie du système et nous permet d’estimer le rayon planétaire R_p , connaissant le rayon stellaire R_* . Le premier transit exoplanétaire a été observé en 1999 par Charbonneau, Brown, Latham et al., 2000 et a permis de confirmer la présence de la planète HD-209458b en orbite autour de l’étoile de type solaire HD-209458. La Fig. 1.3 présente le transit de la planète HD-209458b.

La méthode des transits présente des limitations : la probabilité d’observer un système exoplanétaire dont la planète orbite dans l’alignement entre l’axe de visée du télescope et l’étoile est très faible (de 5 à 10 %). De fait, la majorité des systèmes sont non-transitants. Cette probabilité dépend non seulement de cet alignement mais également de la proximité de la planète et à sa taille relative par rapport à celle de son étoile. De même, la méthode des vitesses radiales présente un signal détectable pour des planètes massives et très peu inclinées par rapport à l’observateur. La détection des petites rocheuses par méthode des transits requiert donc que celles-ci soient très proches de leur étoile,

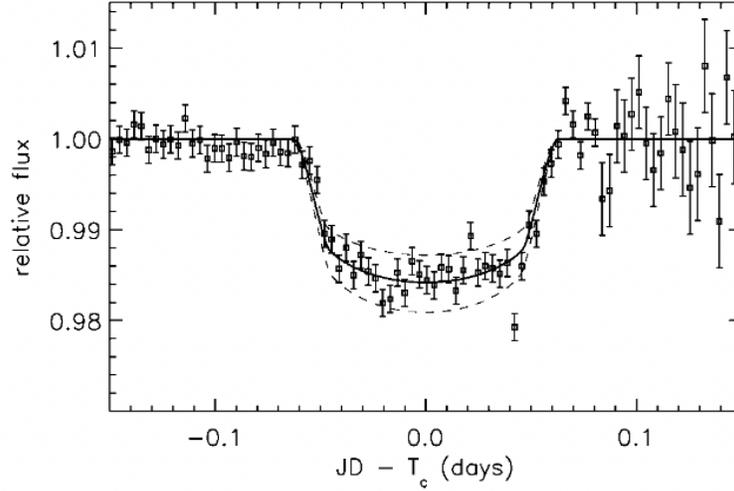


FIGURE 1.3 – Transit de la planète HD-209458b devant son étoile, provoquant une baisse de luminosité observée de l'étoile. Les points représentent les données obtenues avec le télescope STARE dans le cadre du projet qui porte le même nom (Brown et Charbonneau, 2000). La ligne en trait plein représente le modèle de transit associé. Les lignes en traits pointillés en dessous et au-dessus de la ligne en trait plein représentent le transit d'une planète dont le rayon serait respectivement 10% plus élevé et plus faible. Figure venant de Charbonneau, Brown, Latham et al., 2000.

étoile qui doit être également petite pour que la profondeur de transit soit observable. Aujourd'hui, la détection des planètes rocheuses de la taille de la Terre se fait majoritairement autour d'étoiles de faibles masses appelées les naines M et font l'objet d'un champ de recherche dédié (Sebastian et al., 2021).

Les méthodes des transits et des vitesses radiales sont complémentaires et permettent à elles-deux de fournir des contraintes à la fois sur la masse et sur le rayon de la planète, connaissant ceux de l'étoile. La connaissance du rayon et de la masse d'un objet permet d'en déduire sa densité moyenne (Odrzywolek et Rafelski, 2018). Enfin, le grand intérêt de la méthode des transits réside dans la caractérisation des atmosphères planétaires. Ainsi, la suite de cette introduction fournit l'ensemble des briques élémentaires nécessaires à la compréhension des méthodes de caractérisation observationnelle des atmosphères d'exoplanètes.

1.1.2 L'orbite Képlérienne

Le mouvement des planètes est régi par le problème à deux corps dont la détermination de la position et de la vitesse est communément appelé le problème de Kepler. La première loi de Kepler stipule qu'une planète décrit une orbite elliptique autour de son étoile dont le rayon r de l'orbite varie suivant l'équation

$$r = \frac{a(1 - e^2)}{1 + e \cos f} . \quad (1.1)$$

où a est le demi-grand axe, e est l'excentricité et $f = \theta - \varpi$ est l'anomalie vraie, selon la prescription de Murray et Correia, 2011 présenté sur la Fig. 1.4. L'Eq. 1.1 montre que r atteint son minimum en $\theta = \varpi$ et vaut $a(1 - e)$, et atteint son maximum en $\theta = \varpi + \pi$ et vaut $a(1 + e)$. Ces points particuliers sont appelés respectivement périastre (ou periapse) et apoastre (ou apoapse). Ainsi, l'angle θ est la longitude vraie et ϖ est la longitude du périastre, somme de l'argument du périastre ω et de la longitude du noeud ascendant Ω , termes définis plus en détails à la suite de

l'Eq. 1.10. En d'autres termes, ϖ correspond à l'angle entre le point de l'orbite le plus proche de l'étoile et la direction de référence. Pour le système Terre-Soleil, la direction de référence serait celle indiquée par le point vernal.

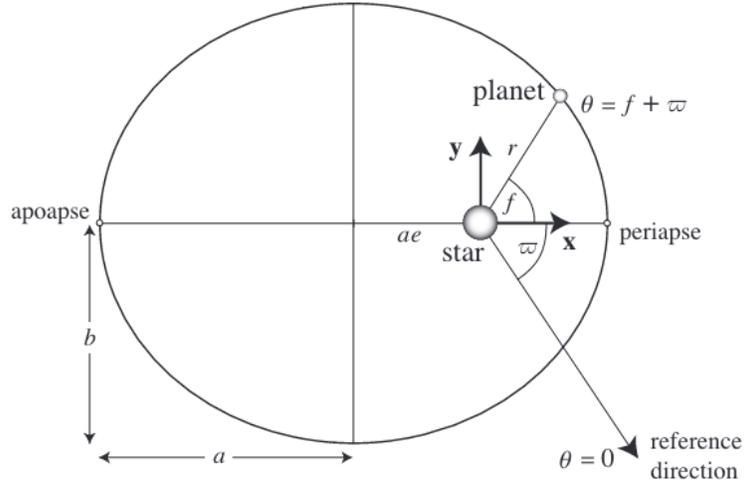


FIGURE 1.4 – Géométrie de l'orbite elliptique décrite à partir de l'anomalie vraie f . L'angle θ est l'angle entre la direction de référence (ou celle de l'observateur) et la position de la planète sur l'orbite qui correspond à la somme de l'anomalie vraie f et de la longitude du périastre ϖ . a est le demi-grand axe, b est le demi-petit axe et e est l'excentricité de l'orbite. Fig. venant de Murray et Correia, 2011.

Dans le cas particulier d'une orbite circulaire, l'excentricité est nulle $e = 0$, $r = a$ et la longitude du périastre ϖ est non définie. Nous introduisons par substitution la variable E , ou anomalie excentrique, qui nous exprimons en fonction de l'anomalie vraie f comme

$$\begin{cases} \cos(E) = \frac{e + \cos(f)}{1 + e \cos(f)} \\ \sin(E) = \frac{\sqrt{1-e^2} \sin(f)}{1 + e \cos(f)} \end{cases} \quad (1.2)$$

Ainsi, nous pouvons écrire l'Eq. 1.1 sous la forme

$$r = a(1 - e \cos E) \quad (1.3)$$

ce qui facilite l'écriture de l'équation différentielle du mouvement qui s'écrit donc sous la forme

$$\frac{dE}{dt} = \frac{n}{1 - e \cos E} \quad (1.4)$$

où n est le mouvement moyen qui se définit à partir de la période orbitale P

$$n = \frac{2\pi}{P} \quad (1.5)$$

Rappelons que la troisième loi de Kepler stipule que la période orbitale P est indépendante de l'excentricité e et dépend uniquement de la masse des deux corps (m_1 et m_2) et du demi-grand axe a de l'orbite

$$P^2 = \frac{4\pi^2}{G(m_1 + m_2)} a^3 . \quad (1.6)$$

où G est la constante universelle de la gravitation et vaut $G = 6.67260 * 10^{-11} \text{ Nm}^2 \text{ kg}^{-2}$. Enfin, la solution du problème de Kepler s'écrit comme

$$n(t - t_0) = E - e \sin E . \quad (1.7)$$

où t_0 exprime la condition aux limites correspondant à $E = 0$, appelé temps de passage au périastre selon la prescription de Murray et Correia, 2011. La quantité $n(t - t_0)$ est plus communément appelée M ou anomalie moyenne. M a la dimension d'un angle et augmente linéairement avec le temps. Lorsque la planète passe au périastre, $t = t_0$ ou $t = t_0 + P$, $M = f = 0$ et lorsque la planète passe à l'apoastre à $t = t_0 + P/2$, $M = f = \pi$. L'Eq. 1.7 s'écrit alors comme

$$M = E - e \sin E . \quad (1.8)$$

équation appelée l'équation de Kepler. La résolution de l'équation de Kepler se fait numériquement et voici quelques références à ce sujet : Murison, 2006 ; Raposo Pulido et Peláez, 2017 ; Borghi, 2021.

Supposons maintenant que la planète orbite dans un plan incliné par rapport au plan de référence. En plus du repère de coordonnées cartésiennes $(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ centré sur l'étoile, établi dans le référentiel du plan orbital de la planète présenté sur la Fig. 1.4, posons un repère de coordonnées cartésiennes $(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z})$ centré sur l'étoile selon les prescriptions de Murray et Correia, 2011 et de Perryman, 2018. Nous l'appellerons repère de référence tel que le plan de l'orbite soit incliné d'un angle i par rapport à ce plan de référence. La Fig. 1.5 présente l'orbite d'une planète en 3 dimensions.

Ainsi, selon la prescription de Murray et Correia, 2011, la position de la planète dans le repère du plan orbital s'écrit comme $\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}} + 0\hat{\mathbf{z}}$ avec

$$\begin{cases} x = r \cos f \\ y = r \sin f \\ z = 0 . \end{cases} \quad (1.9)$$

et par un système de rotations s'exprime dans le plan de référence par

$$\begin{cases} X = r (\cos \Omega \cos(\omega + f) - \sin \Omega \sin(\omega + f) \cos i) \\ Y = r (\sin \Omega \cos(\omega + f) + \cos \Omega \sin(\omega + f) \cos i) \\ Z = r \sin(\omega + f) \sin i . \end{cases} \quad (1.10)$$

où i est l'inclinaison de l'orbite par rapport au plan de référence comprise entre $0 \leq i \leq 180^\circ$. Le segment à l'intersection entre les deux plans est appelée ligne des noeuds. L'une des extrémités de ce segment est le noeud ascendant qui correspond au noeud de passage de la planète depuis la face inférieure vers la face supérieure du plan de référence. L'autre extrémité est le noeud descendant qui correspond au passage de la planète de la face supérieure à la face inférieure du plan de référence. De fait, Ω est la longitude du noeud ascendant correspondant à l'angle entre le vecteur du rayon au noeud ascendant et la direction de l'observateur définie comme étant \mathbf{Z} sur la Fig. 1.5. Nous notons également ω , l'argument du périastre, comme l'angle entre ce même vecteur du rayon au noeud ascendant et le périastre. Pour rappel, la somme de l'argument du périastre et de la longitude du noeud ascendant est la longitude du périastre, $\varpi = \omega + \Omega$.

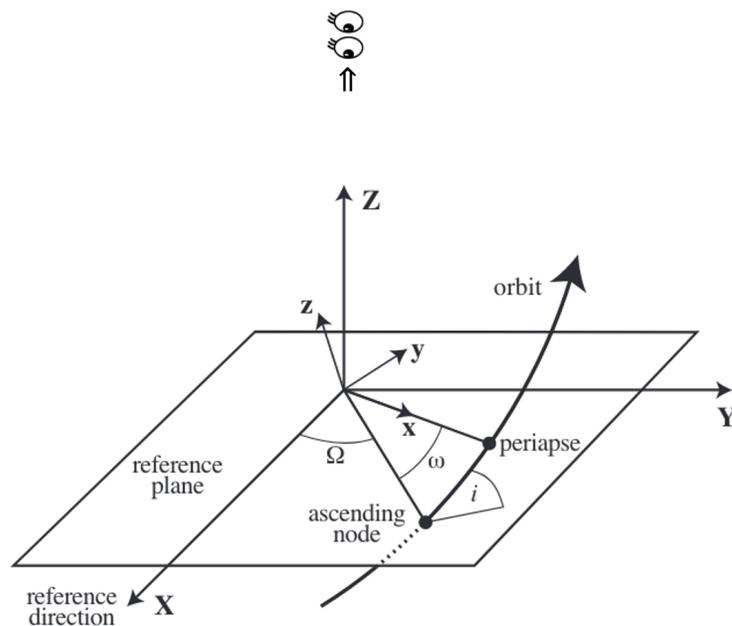


FIGURE 1.5 – Géométrie de l'orbite elliptique en trois dimensions par rapport à un plan de référence $(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z})$. Ω est la longitude du noeud ascendant, ω est l'argument du périastre et i est l'inclinaison de l'orbite de la planète définie dans le référentiel $(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$ par rapport au référentiel de référence. La direction de l'observateur est selon l'axe \mathbf{Z} . Figure venant de Murray et Correia, 2011.

1.1.3 La probabilité de détection

Le principe de la méthode des transits repose sur la détection du passage d'une exoplanète devant ou derrière son étoile ce qui implique que le plan orbital de la planète soit dans l'alignement de l'axe de visée des télescopes. En principe, il existe un ensemble de configurations orbitales pour lesquelles un événement de transit (ou d'éclipse) est détectable. De nombreuses hypothèses sont faites pour simplifier les modèles de transit et les configurations de détection. Afin de diminuer le nombre de paramètres inconnus, Winn, 2014, Murray et Correia, 2011 et Perryman, 2018 posent l'hypothèse que $\Omega = 180^\circ$. Cette condition place donc le noeud descendant selon l'axe $+X$ et le noeud ascendant selon l'axe $-X$. Le système d'Eq. 1.10 devient alors

$$\begin{cases} X = r \cos(\omega + f) \\ Y = r \sin(\omega + f) \cos i \\ Z = r \sin(\omega + f) \sin i . \end{cases} \quad (1.11)$$

La seconde hypothèse couramment utilisée est celle stipulant que les événements de transit (ou d'éclipse) sont centrés autour des conjonctions (Winn, 2014) soit lorsque $X = 0$. Nous poserons l'hypothèse du transit comme étant à la conjonction inférieure et l'éclipse comme étant à la conjonction supérieure. De fait, cela nous permet de contraindre l'anomalie vraie f et de l'exprimer en fonction de l'argument du périastre ω

$$f = \pm \frac{\pi}{2} - \omega . \quad (1.12)$$

Cette hypothèse est valable dans la plupart des cas, sauf pour des orbites très excentriques (Kipping, 2008).

Ainsi, en posant $\Omega = 180^\circ$, un évènement de transit (ou d'éclipse) a lieu lorsque le rayon de l'orbite projeté dans le plan (x, y) , $r_{\text{proj}} = \sqrt{X^2 + Y^2}$ atteint un minimum local. Nous obtenons donc

$$r_{\text{proj}} = r \sqrt{1 - \sin^2(\omega + f) \sin^2 i} . \quad (1.13)$$

Ainsi, à partir des Eq. 1.1, 1.12 et 1.13, nous exprimons la distance projetée de la planète dans le plan (x, y) par rapport à son étoile lors d'un évènement de transit ou d'éclipse par

$$b = \frac{a \cos i}{R_\star} \left(\frac{1 - e^2}{1 \pm e \sin \omega} \right) . \quad (1.14)$$

où b est appelé le paramètre d'impact. Selon la prescription de Winn, 2014, nous définirons le transit par l'appellation *tra* et l'éclipse par l'appellation *occ* (*occ*, pour occultation). De ce fait, le paramètre d'impact s'exprime comme

$$\begin{cases} b_{\text{tra}} &= \frac{a \cos i}{R_\star} \left(\frac{1 - e^2}{1 + e \sin \omega} \right) \\ b_{\text{occ}} &= \frac{a \cos i}{R_\star} \left(\frac{1 - e^2}{1 - e \sin \omega} \right) . \end{cases} \quad (1.15)$$

La paramètre d'impact b nous permet de définir la probabilité de détection d'un transit ou d'une éclipse selon le point de vue d'un observateur. Un observateur détecte un évènement de transit (ou d'éclipse) dans un cône d'angle d'ouverture α tel que $\sin \alpha = (R_\star \pm R_p)/r$ où R_p est le rayon de la planète. La Fig. 1.6 présente cette probabilité de détection. Le cas $\sin \alpha = (R_\star - R_p)/r$ correspond à une planète détectable dans sa globalité, que nous appellerons transit plein (ou *full transit*) et le cas $\sin \alpha = (R_\star + R_p)/r$ à une planète détectable partiellement, ou transit partiel (*grazing transit* en anglais). Ainsi, un transit (ou une éclipse) est détectable lorsque $|b| < 1 + R_p/R_\star$ ce qui permet de définir la probabilité de détection d'un transit (ou d'une éclipse) comme

$$\begin{cases} p_{\text{tra}} &= \frac{R_\star \pm R_p}{a} \left(\frac{1 + e \sin \omega}{1 - e^2} \right) \\ p_{\text{occ}} &= \frac{R_\star \pm R_p}{a} \left(\frac{1 - e \sin \omega}{1 - e^2} \right) . \end{cases} \quad (1.16)$$

Dans le cas des orbites circulaires, le paramètre d'impact se définit comme

$$b = \frac{a \cos i}{R_\star} . \quad (1.17)$$

La Fig. 1.7 présente la condition de détectabilité d'un transit dans le cas des orbites circulaires en fonction de l'inclinaison i de l'orbite. La probabilité de détection dans le cas des orbites circulaires s'écrit donc comme

$$p_{\text{tra/occ}} = \frac{R_\star \pm R_p}{a} . \quad (1.18)$$

L'Eq. 1.18 nous informe sur les planètes les plus facilement détectables. À titre d'exemple, une exoplanète de même rayon que Jupiter ($R_J = 69911$ km) et très proche de son étoile (demi-grand axe fixé à $a = 0.05$ (Beleznay et Kunimoto, 2022)), orbitant une étoile comme notre Soleil aurait une probabilité d'être détectée de $p = 0.1$. Au contraire, une exoplanète de même rayon et de même demi-grand axe que la Terre ($R_\oplus = 6500$ km, $a = 1$ AU) orbitant une étoile comme notre Soleil aurait une probabilité d'être détectée de $p = 0.005$.

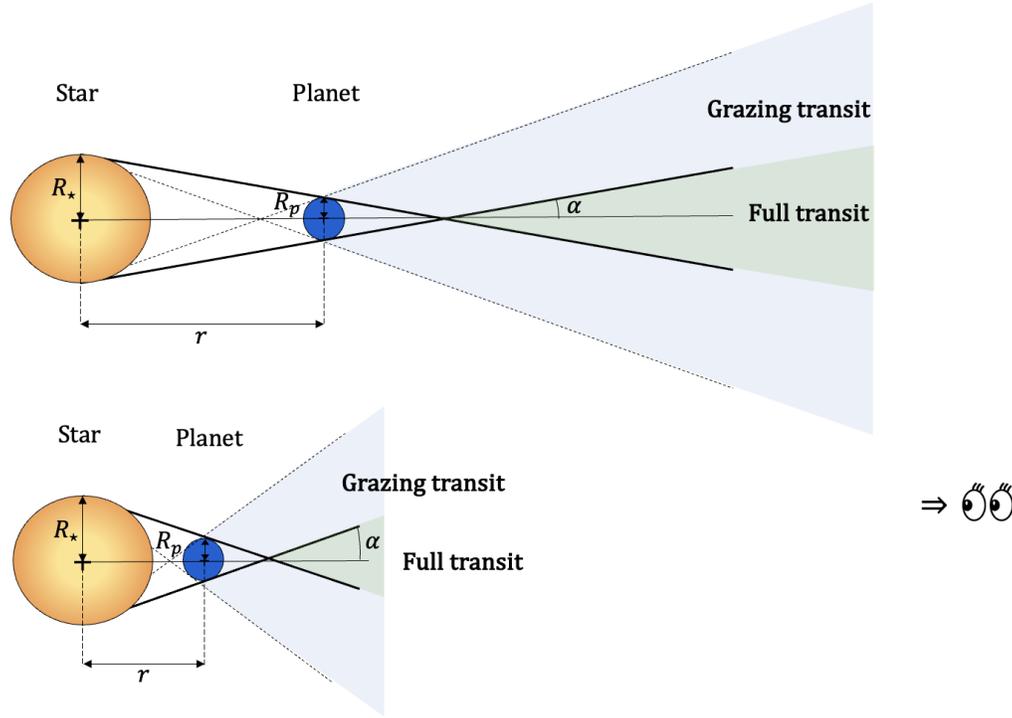


FIGURE 1.6 – Probabilité de détection d’un transit. Les transits sont détectables dans un cône dont l’angle d’ouverture est α avec $\sin \alpha = (R_* \pm R_p)/r$ où $R_* \gg R_p$. Le paramètre limitant est donc la distance r entre l’étoile et la planète. Dans le cas d’une orbite circulaire $r = a$, a étant le demi-grand axe de l’orbite. Nous définirons le transit plein ou *full transit* (toute la planète est visible depuis le point de vue de l’observateur) dans le cas où $\sin \alpha = (R_* - R_p)/r$. Nous définirons le transit partiel ou *grazing* (seulement une partie de la planète est visible par l’observateur) dans le cas où $\sin \alpha = (R_* + R_p)/r$.

Par ailleurs, les planètes à petit demi-grand axe, $a \simeq 0.05$ AU (Beleznay et Kunimoto, 2022) et leur étoile sont soumises à des effets de marées qui ont pour conséquence, entre autres, de circulariser leur orbite (Damiani et Mathis, 2018). Le verrouillage 1 : 1 par effets de marées a pour conséquence d’exposer toujours la même face planétaire à l’étoile. La planète a donc une “face chaude” dite côté jour et une “face froide” dite côté nuit (Heng et Showman, 2015). Dans la suite de cette introduction, nous nous intéresserons aux exoplanètes verrouillées 1 : 1 par effets de marées et nous traiterons donc du cas des orbites circulaires. Il est également possible de dériver les équations dans le cas des orbites excentriques (Kipping, 2008; Winn, 2014).

1.1.4 Les paramètres observables

En principe, l’observation d’un transit (ou d’une éclipse) ne nous donne pas accès aux paramètres orbitaux directement mais aux paramètres observables. De manière géométrique, les paramètres observables sont **la durée du transit t** (ou d’éclipse), **le temps de mi-transit t_0** et **la profondeur de transit $\Delta F/F$** où F est le flux reçu par l’observateur. La Fig. 1.8 présente les paramètres observables lors d’un transit. Nous définissons le temps de transit total t_T comme étant la durée du transit à partir de l’apparition de la planète dans le champ d’observation que l’on appelle *ingress*, jusqu’à sa disparition complète (ou *egress*). Nous définissons également le temps de transit plein t_F

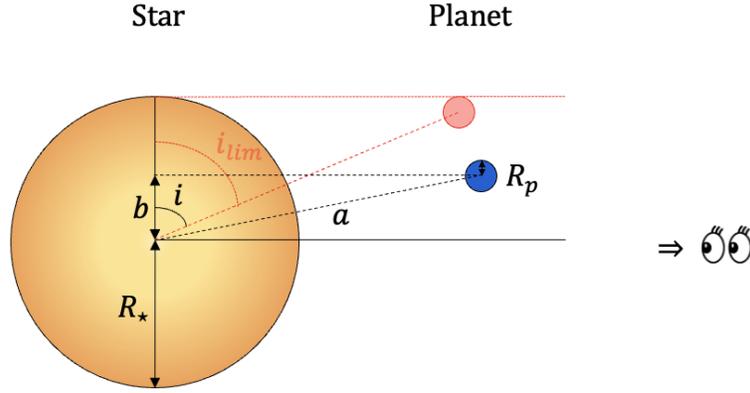


FIGURE 1.7 – Définition du paramètre d’impact $b = (a \cos i)/R_*$, dans le cas des orbites circulaires. Les transits sont détectables si l’inclinaison respecte la condition suivante, $i \geq i_{\text{lim}}$, pour $i \in [0; \frac{\pi}{2}]$, avec $\cos i_{\text{lim}} = (R_* - R_p)/a$. En d’autres termes, cela implique que $b \leq R_* - R_p$ pour un demi-grand axe a donné. La condition $b \leq R_* + R_p$ correspondrait à la détection d’un transit partiel.

comme étant la durée du transit à partir de la présence de la planète entière devant son étoile jusqu’au début de sa disparition. Ces temps de transit s’expriment en fonction des paramètres orbitaux de la planète, la période de son orbite P , le demi-grand-axe a , l’inclinaison de l’orbite i ainsi que le rayon de l’étoile R_* . Ainsi, selon la prescription de Winn, 2014, nous exprimons les temps de transit t_T et t_F comme

$$t_T = t_4 - t_1 = \frac{P}{\pi} \arcsin \left(\frac{R_* \sqrt{(1 + R_p/R_*)^2 - b^2}}{a \sin i} \right) \quad (1.19)$$

$$t_F = t_3 - t_2 = \frac{P}{\pi} \arcsin \left(\frac{R_* \sqrt{(1 - R_p/R_*)^2 - b^2}}{a \sin i} \right). \quad (1.20)$$

La forme du transit est décrite par le rapport des temps plein et total t_F/t_T qui s’exprime comme

$$\frac{t_F}{t_T} = \frac{\arcsin \left(\frac{R_* \sqrt{(1 - R_p/R_*)^2 - b^2}}{a \sin i} \right)}{\arcsin \left(\frac{R_* \sqrt{(1 + R_p/R_*)^2 - b^2}}{a \sin i} \right)}. \quad (1.21)$$

À titre d’exemple, nous pouvons estimer les temps de transit caractéristiques $t_{T,c}$ d’une planète comme la Terre ou comme Jupiter en orbite autour d’une étoile comme notre Soleil. Selon les prescriptions de Perryman, 2018; Winn, 2014, nous posons $i = \pi/2$, $b = 0$, $R_p \ll R_* \ll a$ et l’Eq. 1.20 devient

$$t_{T,c} \equiv \frac{R_* P}{\pi a}. \quad (1.22)$$

Avec $P = 365$ jours, $a = 1$ UA et $R_\odot = 695700$ km, le temps de transit pour une Terre est de 13 heures. En comparaison, le temps de transit de Jupiter est de 25 heures. Pour une Jupiter chaude, en posant $P = 10$ jours

et $a = 0.05$ AU (Belezny et Kunimoto, 2022), le temps de transit caractéristique est de 7 heures. De manière générale, il faut compter une dizaine d'heures pour observer un transit d'une géante gazeuse en orbite autour d'une étoile comme le Soleil.

D'autre part, la diminution relative de flux reçu par l'observateur pendant le transit s'exprime comme

$$\frac{\Delta F}{F} = \frac{F_H - F_P}{F_H} . \quad (1.23)$$

où H et P réfèrent respectivement à hors et pendant transit. Le flux reçu hors transit s'exprime comme la somme du flux de l'étoile et celui de la planète $F_H = S_\star \pi R_\star^2 + S_p \pi R_p^2$ où S_\star et S_p sont les brillances de surface de l'étoile et de la planète respectivement. Le flux reçu pendant transit s'exprime comme le flux hors transit diminué d'une quantité géométrique correspondant à la surface de la planète $F_P = S_\star \pi (R_\star^2 - R_p^2) + S_p \pi R_p^2$. La diminution relative de flux s'exprime alors comme

$$\frac{\Delta F}{F} = \frac{S_\star \pi R_p^2}{S_\star \pi R_\star^2 + S_p \pi R_p^2} . \quad (1.24)$$

En définitive, le rayon de la planète est considéré comme étant très petit devant celui de l'étoile $R_p \ll R_\star$ et sa brillance de surface l'est également $S_p \ll S_\star$ l'Eq.1.22 se simplifie comme

$$\frac{\Delta F}{F} = \left(\frac{R_p}{R_\star} \right)^2 . \quad (1.25)$$

Dans le cas de l'éclipse, la diminution relative de flux ΔF_e ne repose pas sur les propriétés géométriques de la planète et de l'étoile mais correspond au rapport des flux stellaire et planétaire

$$\frac{\Delta F_e}{F} = \frac{S_p \pi R_p^2}{S_\star \pi R_\star^2} . \quad (1.26)$$

soit

$$\frac{\Delta F_e}{F} = \frac{S_p}{S_\star} \left(\frac{R_p}{R_\star} \right)^2 . \quad (1.27)$$

1.1.5 Les propriétés orbitales

À partir des paramètres observables d'un transit, il nous est possible de dériver les paramètres orbitaux du système étoile-planète lesquels sont la masse de l'étoile M_\star , R_\star , R_p , a , i , et P (Seager et Mallen-Ornelas, 2003). La connaissance du rapport des temps de transit total t_T et plein t_F décrite par l'Eq. 1.22 nous permet d'inférer le paramètre d'impact b qui s'exprime comme

$$b = \left[\frac{(1 - \sqrt{\Delta F})^2 - \frac{\sin^2 t_F}{\sin^2 t_T} (1 + \sqrt{\Delta F})^2}{1 - \frac{\sin^2 t_F}{\sin^2 t_T}} \right]^{\frac{1}{2}} . \quad (1.28)$$

Le paramètre d'impact dépend donc de la forme du transit et du rapport des tailles planétaire et stellaire. De la connaissance du temps de transit total t_T seul donné par l'Eq. 1.20, nous pouvons inférer le rapport a/R_\star

$$\frac{a}{R_\star} = \left[\frac{(1 - \sqrt{\Delta F})^2 - b^2 (1 - \sin^2 \frac{t_T \pi}{P})}{\sin^2 \frac{t_T \pi}{P}} \right]^{\frac{1}{2}} . \quad (1.29)$$

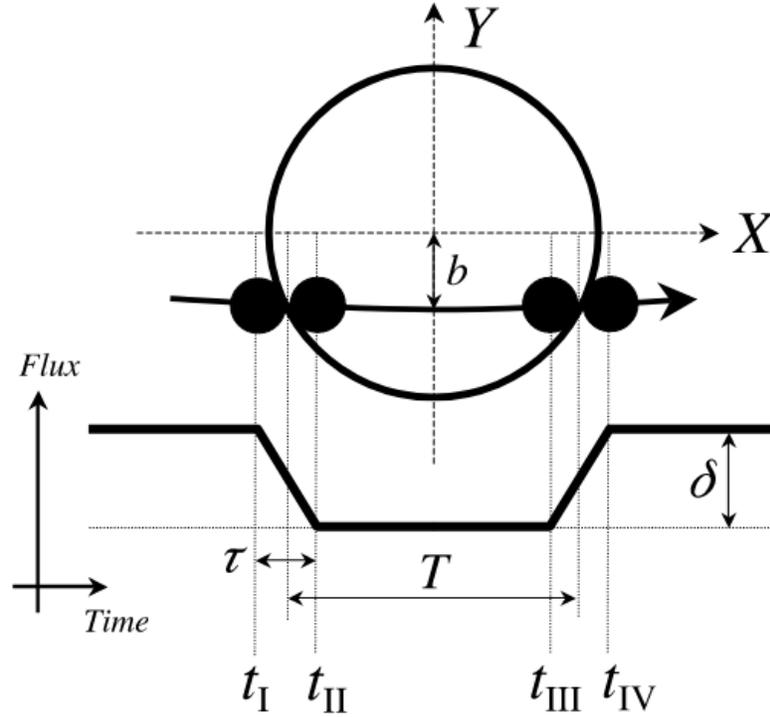


FIGURE 1.8 – Courbe de lumière d’une exoplanète et paramètres observables lors d’un transit. $\delta = \Delta F/F$ est la diminution relative de flux pendant le transit, T est le temps de transit global, b est le paramètre d’impact, $t_T = t_{IV} - t_I$ est le temps de transit dit total, $t_F = t_{III} - t_{II}$ est le temps de transit plein, lorsque la planète est entièrement devant son étoile, τ est la durée d’ingress (ou d’egress). Figure venant de Winn, 2014.

Ainsi, à partir des Eq. 1.17, 1.28 et 1.29, nous obtenons l’inclinaison i de l’orbite

$$i = \arccos\left(b \frac{R_\star}{a}\right). \quad (1.30)$$

Par ailleurs, lorsque la période orbitale est connue, la méthode des transits permet d’obtenir la densité de l’étoile qui peut s’exprimer en fonction des observables. La densité d’une étoile s’exprime comme

$$\frac{\rho_\star}{\rho_\odot} = \frac{M_\star/M_\odot}{(R_\star/R_\odot)^3}. \quad (1.31)$$

et peut être liée au rapport a/R_\star obtenu par l’Eq. 1.29 grâce à la troisième loi de Kepler décrite par l’Eq. 1.6 en posant $m_1 = M_\star$ et $m_2 = M_p$ et en supposant $M_p \ll M_\star$. En effet, la troisième loi de Kepler lie les masses M_\star et M_p , la période P et le demi-grand axe a absolu et non relatif (i.e. indépendant du rayon stellaire). Selon la prescription de Seager et Mallen-Ornelas, 2003 et de Winn, 2014, l’Eq. 1.31 devient

$$\rho_\star \equiv \frac{3\pi}{P^2 G} \left(\frac{a}{R_\star}\right)^3. \quad (1.32)$$



Enfin, la période orbitale P se mesure à partir du temps de mi-transit t_0 mais implique que nous ayons au moins deux transits à disposition ou un transit et une éclipse (qui sont séparés de $P/2$, dans le cas des orbites circulaires). Si la période orbitale est inconnue, la connaissance des rayon et masse stellaires est nécessaire pour l'inférer et la densité stellaire doit donc être connue. Par exemple, la masse et le rayon stellaires peuvent être obtenus par la connaissance du type spectral de l'étoile ou par astérosismologie et donc de la température effective T_{eff} (Garcia et Ballot, 2019), voire par combinaison des deux méthodes (Aguirre et al., 2017). Masse et rayon stellaires peuvent être mesurés indépendamment dans des conditions assez limitées par interférométrie (Karovicova et al., 2020) et vitesses radiales (Reffert et al., 2015).

Ainsi, la méthode des transits nous donne accès aux paramètres orbitaux et à la géométrie du système. Nous en obtenons, entre autres, un rapport de rayon planétaire et stellaire. Avec la connaissance du rayon stellaire par études spectrales ou astérosismologiques, nous pouvons en déduire le rayon planétaire seul R_p . Des observations complémentaires en vitesses radiales permettent de déterminer le produit $M_p \sin i$ (Wright, 2018; Perryman, 2018), où i est l'inclinaison de l'orbite et donc la masse de la planète M_p , comme mentionnée en partie introductive. La connaissance du rayon et de la masse planétaire nous donne accès à une densité moyenne de la planète qui s'exprime comme

$$\rho_p = \frac{M_p}{\frac{4}{3}\pi R_p^3}. \quad (1.33)$$

La densité moyenne d'une exoplanète est l'information la plus poussée que nous puissions obtenir par méthode des transits et vitesses radiales combinées, ce qui laisse de nombreuses questions en suspens. **Quelle est la structure des exoplanètes et comment assurer la répartition entre atmosphère, enveloppe et coeur? Quelle est la composition chimique des exoplanètes et de fait, quelles sont les similitudes et différences avec la composition chimique de l'étoile? Peut-on dégager des tendances statistiques de structure et de composition? Et de ce fait, peut-on déterminer et discriminer les différents processus qui régissent la formation et l'évolution des systèmes exoplanétaires?**

1.2 La caractérisation : étude des atmosphères, les observations avant le JWST

Une des solutions observationnelles permettant d'apporter des éléments de réponse aux grandes questions qui animent la communauté des exoplanètes est l'étude de leur atmosphère. En effet, la composition chimique, la structure et la dynamique des atmosphères des géantes gazeuses sont des traceurs de la formation et de l'évolution des systèmes (Madhusudhan, Mousis et al., 2011; Turrini et al., 2015; Madhusudhan, 2019). Les atmosphères d'exoplanètes gazeuses et rocheuses pourraient être également marqueurs de l'interaction gravitationnelle, et entre autres, de la migration (Chambers, 2009) ainsi que de l'interaction de marées entre la planète et son étoile hôte (Pierrehumbert et Hammond, 2019). Elles peuvent également être des traceurs de l'irradiation (Guillot, 2010b; Linsky, 2014; Heng et Showman, 2015; Mollière, Boekel et al., 2015; Heng et Showman, 2015; Tremblin, Chabrier, Mayne et al., 2017a; Bourrier et al., 2017) et donc de la photochimie (Hu, Seager et Bains, 2012, 2013; Hu et Seager, 2014; Fleury et al., 2019; Lavvas et Arfaux, 2021; Ranjan et al., 2022) ou encore du magnétisme et de l'interaction magnétique (Strugarek, 2018; Gunell et al., 2018; Gupta et al., 2023). L'étude des atmosphères ainsi que des interactions étoile-planète est d'autant plus importante qu'elle nous permet de caractériser les exoplanètes rocheuses et tempérées (Driscoll et Barnes, 2015; Auclair-Desrotour et al., 2017; Blackledge et al., 2020; Bolmont et al., 2020; Peterson et al., 2023; Strugarek, 2023) et donc de comprendre les conditions d'habitabilité de ces planètes (Wolf, 2017; Airapetian et al., 2020). Les références énumérées ici sont une sélection parmi de nombreux articles et livres, il s'agit d'une liste non exhaustive.

1.2.1 La spectroscopie de transit et d'éclipse

L'étude observationnelle des atmosphères se fait par détermination spectroscopique de leur composition moléculaire. La forme et hauteur des pics spectraux nous renseigne sur la structure et l'abondance des espèces chimiques présentes dans les atmosphères, paramètres que nous quantifions à l'aide d'ajustements de modèles inversés sur les données (ou *retrievals* en anglais) (Madhusudhan et Seager, 2009; Line, Wolf et al., 2013; Madhusudhan, 2018; Mollière, Wardenier, Boekel et al., 2019a; Min et al., 2020a; Barstow, Changeat et al., 2020; Fortney, Barstow et al., 2021; Al-Refai et al., 2021). Contrairement aux figures simplifiées d'exoplanètes en transit présentées dans la Sect. 1.1, une exoplanète se compose d'un coeur planétaire (que l'on appelle intérieur planétaire) et d'une atmosphère. Dans le cas des géantes gazeuses où la distinction entre intérieur planétaire et atmosphère est non triviale, nous appellerons atmosphère la couche non optiquement opaque dans les longueurs d'onde d'observation (visible et infrarouge). La Fig. 1.9 présente la structure d'une exoplanète et de son atmosphère, en orbite autour de son étoile. Nous définissons la hauteur d'échelle d'une atmosphère comme l'altitude à partir de laquelle la pression diminue d'un facteur e (Kreidberg, 2018). En d'autres termes, l'anneau atmosphérique est opaque à une hauteur d'échelle mais transparente au-dessus (Deming, Louie et al., 2019). De fait, la taille d'une atmosphère correspond à un certain nombre de fois cette hauteur d'échelle qui dépend de la composition moléculaire, de la gravité et des conditions de température qui y règnent. En considérant une atmosphère en équilibre hydrostatique et suivant la loi des gaz parfaits, la hauteur d'échelle d'atmosphère s'exprime comme

$$H = \frac{RT_p}{\mu g} . \quad (1.34)$$

où R est la constante des gaz parfaits qui vaut $8.314 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$, T_p est la température de l'atmosphère (supposée uniforme ici), μ est la masse molaire moyenne de l'atmosphère et g est la gravité qui y règne. Nous exprimons g comme

$$g = G \frac{M_p}{R_p^2} . \quad (1.35)$$

où G est la constante universelle de gravitation.

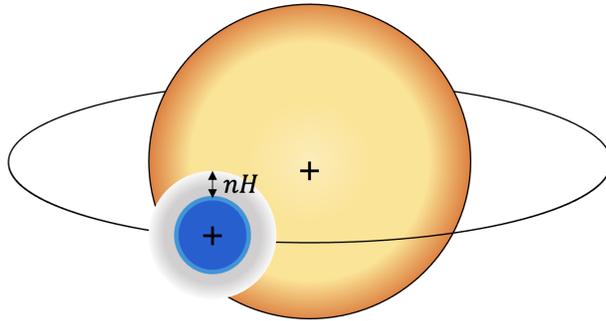


FIGURE 1.9 – Représentation de l'atmosphère d'une exoplanète en orbite autour de son étoile. La taille d'une atmosphère correspondant à un certain nombre n fois la hauteur d'échelle d'atmosphère H .

La profondeur de transit définie par l'Eq. 1.25 ne prend en compte que la lumière émise par l'étoile, partiellement bloquée par la présence de la planète. La majeure partie de la lumière étant émise par l'étoile, d'autres quantités sont négligées dans cette équation définie précédemment. En définitive, lors du transit, une partie de la lumière

émise par l'étoile traverse l'atmosphère de l'exoplanète qui diffuse et/ou absorbe cette lumière. Brown, 2001 décrit la variation relative de flux pendant un transit comme une quantité dépendante de la longueur d'onde et somme de trois contributions de flux différentes. La Fig. 1.10 et l'Eq. 1.36 présentent le bilan énergétique qui s'exprime comme

$$\frac{\Delta F(\lambda)}{F} = \frac{F_H(\lambda) + \delta F(\lambda)}{F_H(\lambda)} = 1 + [\delta F_{\text{Direct}}(\lambda) + \delta F_{\text{Therm}}(\lambda) + \delta F_{\text{Scat}}(\lambda)] / F_H(\lambda). \quad (1.36)$$

La contribution $\delta F_{\text{Direct}}(\lambda)$ est celle correspondant au flux stellaire bloqué par la planète, il s'agit d'une contribution négative. Une des autres quantités, plus faible, correspond à l'émission thermique directe de la planète $\delta F_{\text{Therm}}(\lambda)$ qui est à un corps à une température de brillance T_B . Le verrouillage par effets de marée impliquant un fort gradient de température entre le côté jour et le côté nuit, nous distinguerons deux températures $T_{p,\text{day}}$ et $T_{p,\text{night}}$ pour différencier les deux côtés. En réalité, l'atmosphère joue un rôle très important dans la recirculation de la chaleur. Les expressions des températures de jour et de nuit en fonction de la recirculation atmosphérique sont exprimées par les Eq. 1.41 et 1.42. Il existe également un fort gradient de température entre la surface et la haute atmosphère. Pour des soucis de simplification, nous considérerons qu'une température de jour et une de nuit. De plus, la chaleur latente émise par le coeur est négligée. Enfin, la quantité $\delta F_{\text{Scat}}(\lambda)$ correspond à la lumière de l'étoile diffusée par l'atmosphère de la planète. Ces contributions varient en fonction de la phase orbitale du point de vue de l'observateur. Selon la prescription de Brown, 2001, la profondeur de transit s'écrit alors comme

$$\frac{\Delta F(\lambda)}{F} = 1 + \frac{1}{\pi R_*^2} \int_0^{z_{\text{max}}} 2\pi (R_i + z) \left\{ 1 - \exp^{-[\tau(z,\lambda)]} \right\} dz. \quad (1.37)$$

où z est la hauteur à laquelle le rayon traverse l'atmosphère de la planète (ou altitude) et $\tau(z, \lambda)$ est la profondeur optique tangente à la direction d'observation. À l'aide de l'Eq. 1.37, Brown, 2001 nous montre que, lors d'un transit, les molécules présentes dans l'atmosphère absorbent et diffusent la lumière de l'étoile à différentes longueurs d'onde. La profondeur optique visible varie donc en fonction de la longueur d'onde et de la hauteur à laquelle les rayons traversent l'atmosphère. Ainsi, un observateur verra une variation spectrale du rayon apparent R_p de la planète.

Deming, Louie et al., 2019 proposent une expression simplifiée de l'Eq. 1.37 en prenant en compte non pas l'altitude z mais la hauteur d'atmosphère H définie à l'Eq. 1.34 et expriment la profondeur de transit comme

$$\frac{\Delta F(\lambda)}{F} \sim \left(\frac{R_p}{R_*} \right)^2 + 2 \frac{R_p H}{R_*^2}. \quad (1.38)$$

Le terme de gauche du membre de droite de l'Eq. 1.38 représente le transit de la planète seule, sans atmosphère, et celui de droite du membre de droite donne la contribution atmosphérique. À titre d'exemple, pour une Jupiter ($R_J = 69911$ km) transitant devant une étoile similaire à notre Soleil ($R_\odot = 695500$ km), la diminution de flux (contribution du terme de gauche du membre de droite) est de 1%. En supposant que Jupiter soit très proche de son étoile ($a < 0.05$ AU), et qu'elle ait une température de brillance de $T_B = 1400$ K, la contribution atmosphérique de la diminution de flux serait de 0.01%, soit une centaine de parties par million (ppm). Des méthodes pour évaluer les asymétries aux limbes sont aujourd'hui développées via les différences spectroscopiques entre les terminateurs matin et soir de la planète (Espinoza et Jones, 2021).

De manière similaire à la spectroscopie de transit, il est possible d'étudier le passage de la planète derrière son étoile (Charbonneau, Allen et al., 2005; Deming, Seager et al., 2005; Deming, Harrington et al., 2007), par spectroscopie d'éclipse. Le flux planétaire reçu lors de l'éclipse correspond à la brillance de surface côté jour de la planète, dans le cas des planètes verrouillées par les effets de marées. Cette brillance de surface est une combinaison de l'émission thermique de la planète et de son atmosphère et de la réflexion atmosphérique de la lumière de l'étoile. L'émission thermique de la planète peut être approximée avec une loi du corps noir $B_p(T_{p,\text{day}}, \lambda)$, dépendant de la température côté jour et de la longueur d'onde (Eq. 1.39). Il en va de même pour l'étoile dont la température considérée est la température effective T_{eff} . La réflexion dépend, entre autres, de l'albédo géométrique $A_g(\lambda)$ et de la

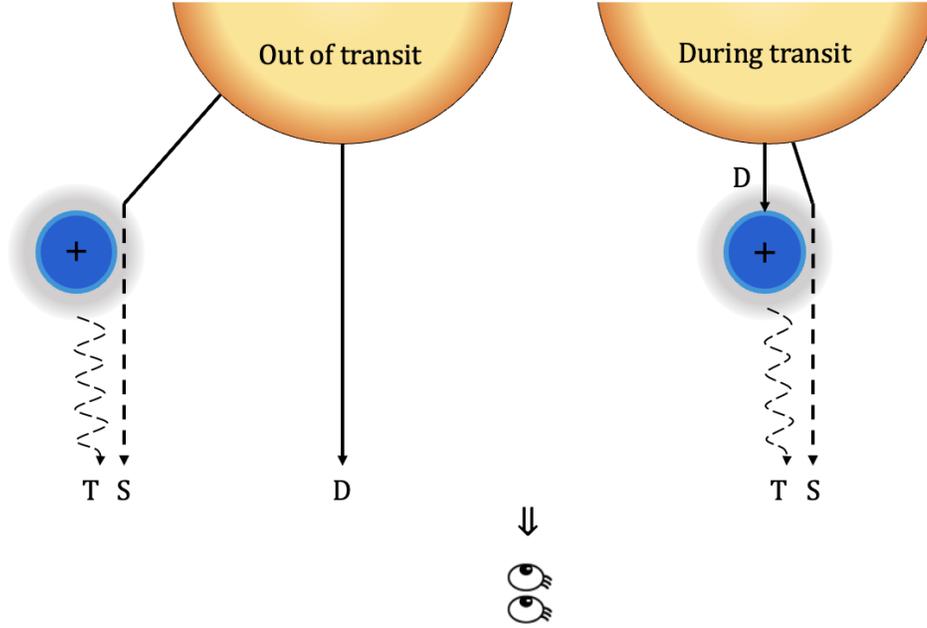


FIGURE 1.10 – Trois sources de rayonnement nous parviennent depuis le système étoile-planète. Le rayonnement direct de l'étoile (D) est partiellement bloqué pendant le transit. Le rayonnement thermique de la planète (T) varie en fonction des différentes températures et émissivité à la surface de la planète. L'atmosphère de la planète diffuse (S pour scattering en anglais) le rayonnement de l'étoile. Cette diffusion varie en fonction du changement de la phase illuminée du point de vue de l'observateur et des propriétés de diffusion de l'atmosphère.

phase à laquelle l'éclipse est observée du point de vue de l'observateur $\Phi(\alpha)$ (Eq. 1.40). L'albédo traduit la capacité de la planète à réfléchir la lumière. Ainsi, en prenant en compte la présence de l'atmosphère et selon la prescription de Tinetti, Encrenaz et al., 2013, l'Eq. 1.27, qui exprime la profondeur d'éclipse, peut s'écrire sous la forme de deux composantes. La composante du flux relatif venant de l'émission thermique s'exprime comme

$$\frac{\Delta F_e(\lambda)}{F} = \left(\frac{R_p}{R_\star} \right)^2 \left[\frac{B_p(T_{p,\text{day}}, \lambda)}{B_\star(T_{\text{eff}}, \lambda)} \right]. \quad (1.39)$$

et celle venant de la réflexion s'exprime comme

$$\frac{\Delta F_e(\lambda)}{F} = \left(\frac{R_p}{a} \right)^2 A_g(\lambda) \Phi(\alpha). \quad (1.40)$$

Selon les longueurs d'onde d'observation, les contributions de lumière réfléchie et émise sont différentes. La lumière réfléchie tend à dominer dans le proche infrarouge, là où l'émission thermique est faible. Au contraire, la planète étant un corps plus froid que son étoile, son pic d'émission se situe dans l'infrarouge proche et moyen. D'après l'exemple donné par Kreidberg, 2018, la Jupiter chaude HD 209458b, un peu plus grande que Jupiter ($R_p = 1.38 R_J$) mais moins massive ($M_p = 0.69 M_J$), orbitant très proche de son étoile ($a = 0.047 \text{ AU}$), a une profondeur d'éclipse de 50 ppm à $1 \mu\text{m}$ mais de 1000 ppm à $4.5 \mu\text{m}$, là où l'émission thermique de la planète $B_p(T_{p,\text{day}}, \lambda)$ domine (Line, Stevenson et al., 2016).

La température de la planète, déterminée par observation d'éclipse, dépend de son atmosphère et donc de sa capacité à recirculer la chaleur du point sub-stellaire au côté nuit de la planète. L'efficacité de recirculation est donnée par le paramètre ε ($0 \leq \varepsilon \leq 1$). Un coefficient ε proche de 1 traduit une bonne capacité de recirculation et donc une uniformisation de la température entre le côté jour et le côté nuit. Au contraire, un coefficient ε proche de 0 traduit un fort gradient de température entre le côté jour et le côté nuit, qui se matérialise par une chute de température aux limbes de la planète. Ainsi, la borne haute de la température côté jour mesurable pour une planète est celle correspondant à $\varepsilon = 0$ et à $A_B = 0$. Selon la prescription de Cowan et Agol, 201b, nous décrivons les températures de jour et de nuit comme étant

$$T_{p,\text{day}} = T_0 (1 - A_B)^{1/4} \left(\frac{2}{3} - \frac{5}{12} \varepsilon \right)^{1/4} . \quad (1.41)$$

$$T_{p,\text{night}} = T_0 (1 - A_B)^{1/4} \left(\frac{\varepsilon}{4} \right)^{1/4} . \quad (1.42)$$

où A_B est l'albédo de Bond de la planète, intégré sur toutes les longueurs d'onde. De plus amples explications concernant les différentes définitions de l'albédo sont données dans le Chap. 3 du livre de Seager, 2010. T_0 est la température d'équilibre au point sub-stellaire de la planète. En d'autres termes, il s'agit de la température d'irradiation de la planète que Cowan et Agol, 201b décrivent à partir de la température effective de l'étoile T_{eff} et un facteur de dilution

$$T_0 = T_{\text{eff}} \frac{R_\star}{a} . \quad (1.43)$$

Suivant un formalisme similaire à celui établi par Cowan et Agol, 201b, Schwartz et Cowan, 2015 et Schwartz, Kashner et al., 2017 décrivent plus en détail le bilan d'énergie des Jupiter chaudes et posent des contraintes quant aux différentes températures planétaires en fonction des albédos géométriques A_g , de Bond A_B et sphérique $A_S(\lambda)$ et donc de la réflectivité de l'atmosphère. En définitive, la relation albédo de Bond et efficacité de recirculation $A_B - \varepsilon$ peut être dégénérée dans le cas où ne pourrions pas distinguer l'émission thermique de la lumière réfléchie. Des observations dans le visible-proche infrarouge ou dans l'infrarouge moyen sont nécessaires pour que l'une des deux contributions (lumière réfléchie ou émission thermique) domine et soit distinguable de l'autre.

L'observation de l'éclipse planétaire peut nous renseigner sur la structure longitudinale (dans l'hypothèse d'une rotation orthogonale au plan de l'écliptique) de la planète et permet d'établir une cartographie spatiale de la luminosité apparente côté jour, ou **eclipse mapping** en anglais (Rauscher, Menou et al., 2007; De Wit et al., 2012; Cowan et Fujii, 2018). Cette cartographie se fait au moment de l'*ingress* et de l'*egress* où différentes zones de la planète sont partiellement obstruées par l'étoile. Il est alors possible de sonder différentes longitudes et donc d'établir la distribution spatiale de la luminosité apparente de la planète. De manière générale, **spectroscopies de transit et d'éclipse** sont deux observations complémentaires qui permettent une caractérisation plus globale de la planète et de son atmosphère. La spectroscopie de transit nous donne accès à la composition moléculaire, aux propriétés de diffusion ainsi qu'à la hauteur d'échelle de l'atmosphère. La spectroscopie d'éclipse nous donne également accès à la composition moléculaire. La présence d'absorptions moléculaires à certaines longueurs d'onde peut donc être discutée entre des observations en transit et en éclipse et nous informer sur la localisation de ces molécules dans l'atmosphère (Kreidberg, 2018).

1.2.2 L'étude de la courbe de phase

Les événements de transit et d'éclipse sont très localisés en phase et nous permettent de sonder uniquement la face de la planète côté jour et côté nuit. Rappelons que l'illumination de l'étoile est inhomogène sur l'ensemble

de la surface planétaire, lorsque la planète est verrouillée par les effets de marées. Un observateur peut donc, en suivant la planète tout le long de son orbite, sonder un ensemble de faces différentes et accéder ainsi à des variations longitudinales de sa brillance de surface. Nous appelons cela l'étude de la **courbe de phase**. Comme explicité dans la Sect. 1.2.1, la brillance de surface d'une exoplanète est une combinaison de lumière de l'étoile réfléchi et d'émission thermique, dépendantes de la longueur d'onde et de la face exoplanétaire observée. Ainsi, la courbe de phase est une modulation de la luminosité de l'étoile par celle de la planète, ponctuée d'événements de transit et d'éclipse, comme présentée sur la Fig. 1.11.

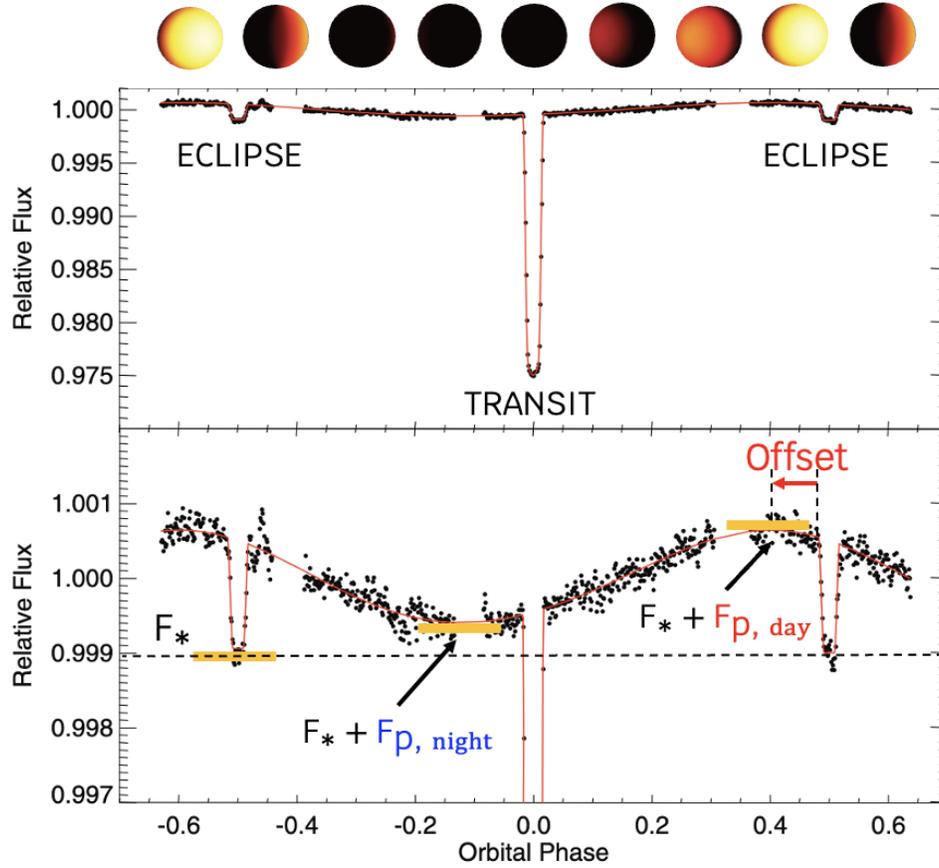


FIGURE 1.11 – Courbe de lumière photométrique de l'exoplanète HD 189733b observée par Spitzer/IRAC à $3,6 \mu\text{m}$. La courbe de phase nous donne accès au minimum de luminosité côté nuit et au maximum de luminosité côté jour et donc à l'amplitude de la variation de lumière apparente de la planète, ainsi qu'au décalage en phase du maximum de luminosité (ou *offset*). Les différentes phases sondées sont présentées au-dessus des courbes de lumière montrant ainsi la correspondance entre les minima et maxima de flux et la face visible de la planète du point de vue de l'observateur. Figure adaptée de Knutson, Lewis et al., 2012; Parmentier et Crossfield, 2018, crédit : NASA.

Les observables que nous obtenons par étude de la courbe de phase sont l'amplitude de la modulation que nous appellerons $A_{\phi(\lambda)}$ et le décalage (ou *offset*) Φ_{λ} du maximum de la courbe par rapport à l'éclipse. Ainsi, l'amplitude de la courbe de phase s'exprime comme

$$A_{\phi(\lambda)} = \frac{F_{p,\max} - F_{p,\min}}{F_{p,\max}}. \quad (1.44)$$

où $F_{p,\max}$ et $F_{p,\min}$ correspondent au maximum et minimum de la courbe de la phase, le minimum étant le flux reçu du côté nuit et la maximum étant le flux reçu du côté jour (Perez-Becker et Showman, 2013; Parmentier et Crossfield, 2018). L'Eq. 1.44 s'écrit alors sous la forme

$$A_{\phi(\lambda)} = \frac{F_{p,\text{day}} - F_{p,\text{night}}}{F_{p,\text{day}}}. \quad (1.45)$$

L'amplitude de la courbe de phase est très faible par rapport aux profondeurs de transit ou d'éclipse et devient détectable pour des planètes présentant de forts contrastes jour et nuit. Dans le cas des Jupiter chaudes, l'existence d'un décalage du maximum de la courbe de phase Φ_λ vient directement du décalage du point chaud de l'atmosphère sur la photosphère par rapport au point sub-stellaire (Parmentier, Showman et Fortney, 2020). Ce décalage résulte de la dynamique atmosphérique des planètes verrouillées par les effets de marées, pour lesquelles les ondes planétaires ramènent du moment angulaire vers l'équateur et vers l'est (Showman et Polvani, 2011), ce qui crée un jet appelé jet équatorial.

Selon la longueur d'onde d'observation, nous avons accès soit à la lumière réfléchiée par la planète, soit à son émission thermique. Une observation dans le visible permet d'accéder à la lumière réfléchiée et donc aux variations longitudinales de l'albédo géométrique $A_g(\lambda, \phi)$. La réflectivité de l'atmosphère varie en fonction de la présence de nuages qui sont visibles côté nuit, là où les conditions de pression et de température favorisent leur formation et leur existence (Parmentier et Crossfield, 2018). La circulation atmosphérique favorise la formation de ces nuages non pas au point sub-stellaire, mais à l'ouest de ce point. Ainsi, une courbe de phase étudiée dans le visible présente un offset négatif ($\Phi_\lambda < 0$), vers le terminateur ouest. Au contraire, l'étude de la courbe de phase en infrarouge permet d'accéder à l'émission thermique de la planète. Le maximum de température et donc le maximum d'émission se situe cette fois à l'est du point sub-stellaire. Cela résulte donc en un offset positif ($\Phi_\lambda > 0$). Comme le démontrent Parmentier, Showman et Fortney, 2020, un concept clé lié aux conditions de formations du point chaud est sa dépendance à la pression. L'étude d'une courbe de phase thermique permet donc d'accéder à la structure thermique verticale de l'atmosphère. De manière générale, l'étude de la courbe de phase en spectroscopie infrarouge pourrait donc nous permettre de contraindre les profils de pression et température des exoplanètes.

1.2.3 Déterminer la composition moléculaire et la structure des atmosphères : état de l'art et limitations

L'un des enjeux majeurs de l'étude des exoplanètes est la détermination de leur formation et de leur évolution (Madhusudhan, Mousis et al., 2011; Turrini et al., 2015; Madhusudhan, 2019). La composition chimique initiale du disque protoplanétaire dans lequel se forment les exoplanètes étant similaire à celle de l'étoile hôte, nous pouvons inférer les molécules présentes dans le disque protoplanétaire à partir de la composition chimique de l'étoile et de modèles de disques protoplanétaires (Henning et Semenov, 2013; Walsh et al., 2015). Pour ce faire, nous nous intéressons à la composition chimique d'une étoile. Une étoile est constituée d'hydrogène et d'hélium H/He et d'éléments dits métalliques (autres que H/He), majoritairement d'oxygène, de carbone et d'azote (O, C, N). Ces atomes se combinent en un grand nombre de molécules comme le dihydrogène H_2 , l'eau H_2O , le monoxyde de carbone CO, le dioxyde de carbone CO_2 , le méthane CH_4 , l'ammoniac NH_3 , le dioxygène O_2 ou encore le diazote N_2 (Moses et al., 2013). D'autres atomes et molécules existent de manière bien moins abondante que ceux formés par le trio C-O-N. Nous pouvons citer les métaux alcalins regroupant le sodium Na et le potassium K ou encore les oxydes de titane TiO et de vanadium VO (Kreidberg, 2018). L'idée sous-jacente à l'étude de ces éléments chimiques composant l'étoile hôte est celle de les chercher dans les atmosphères d'exoplanètes et donc de les utiliser comme

traceurs de formation et d'évolution. Nous cherchons non seulement à les détecter, mais également à mesurer leur abondance absolue et relative, de caractériser les conditions de pression et de température dans les atmosphères et, in fine, de discriminer les processus de formation soit par accrétion de matière (Pollack et al., 1996) soit par instabilité gravitationnelle (Boss, 1997). La notion de formation est liée à celle de l'évolution du système planétaire et donc de la migration des exoplanètes au cours de leur vie (Chambers, 2009). Le système solaire représente également un vivier d'éléments chimiques qui pourraient être présents dans les systèmes exoplanétaires. Ainsi, le phosphore P que l'on peut trouver sous forme de phosphine PH_3 , l'acétylène C_2H_2 , l'éthane C_2H_6 , le cyanure d'hydrogène HCN ou encore l'ozone O_3 pourraient être détectables dans les systèmes exoplanétaires (Tinetti, Encrenaz et al., 2013).

1.2.3.1 Détecter les atomes et molécules

Les atomes et molécules attendus dans les atmosphères ont des caractéristiques spectrales détectables dans le visible et dans l'infrarouge proche et moyen. La première détection atomique est celle du **doublet du sodium** dans le visible à moyenne résolution dans l'atmosphère de la Jupiter chaude HD 209458b observée par l'instrument STIS à bord du HST (Charbonneau, Brown, Noyes et al., 2002). Rappelons que HD 209458b est la première exoplanète observée et caractérisée par méthode des transits.

Les alcalins et l'hydrogène

Le **sodium**, le **potassium** et l'**hydrogène Lyman- α** ($\text{H}\alpha$) présentent également des signatures spectrales dans les longueurs d'onde de l'instrument STIS du HST (allant jusqu'à $1 \mu\text{m}$). Ces trois atomes ont été effectivement détectés dans les atmosphères de Jupiter chaudes (Nikolov et al., 2014; Sing, Désert et al., 2011). Précisons que dans le cas de planètes très fortement irradiées, il est possible de détecter un fort échappement atmosphérique, dont le traceur est l' $\text{H}\alpha$. Ainsi, Vidal-Madjar, Des Etangs et al., 2003 ont confirmé la présence d'une atmosphère étendue et en perte de masse autour de la planète HD 209458b ainsi que la détection d'éléments métalliques ionisés, OI et CII (Vidal-Madjar, Désert et al., 2004). Nous pouvons également citer les travaux de Ehrenreich et al., 2015 et de Lecavelier Des Etangs, Bourrier et al., 2012 concernant les planètes GJ 436b et HD 189733b.

L'eau sous forme de gaz

Le spectromètre WFC3 du HST, observant dans l'infrarouge proche (allant de 1.1 à $1.7 \mu\text{m}$), a permis la détection d'**eau sous forme de gaz** dans les atmosphères d'un grand nombre de planètes. Nous pouvons citer, entre autres, les travaux de Tinetti, Tennyson et al., 2012; Deming, Wilkins et al., 2013; Huitson et al., 2013; Birkby et al., 2013; Kreidberg, Bean, Désert, Line et al., 2014; Line, Stevenson et al., 2016; Stevenson, 2016; Tsiaras, Waldmann, Tinetti et al., 2019; Benneke, Wong et al., 2019.

Le monoxyde et le dioxyde de carbone

Les molécules composées de carbone comme le CO ou le CO_2 , détectables dans les atmosphères des Jupiter chaudes, possèdent des signatures spectrales dans l'infrarouge (globalement entre 2 et $5 \mu\text{m}$). Seul l'instrument IRAC du télescope *Spitzer* possède deux bandes photométriques larges centrées autour de 3.6 et $4.5 \mu\text{m}$ avec une bande passante respectivement de 0.75 et de $1 \mu\text{m}$, qui permettent de sonder la présence de ces molécules. Nous ne pouvons obtenir de ces bandes photométriques que deux points avec de larges barres d'erreur. Ainsi, à partir des données *Spitzer*, nous n'avons pu qu'intuiter la présence de ces molécules dans les atmosphères mais aucune détection spectroscopique n'a été faite (Kreidberg, 2018). Nous pouvons citer par exemple les travaux de Désert, Lecavelier Des Etangs et al., 2009 pour HD 189733b, ceux de Stevenson, Harrington, Nymeyer et al., 2010 pour GJ 436b et ceux de Madhusudhan,

Harrington et al., 2011 pour WASP-12b. La Fig. 1.12 résume les détections moléculaires et atomiques dans le proche infrarouge par spectroscopie de transit pour un ensemble de Jupiter chaudes, regroupant les points obtenus avec HST et *Spitzer* ainsi que les modèles prédits pour ces planètes.

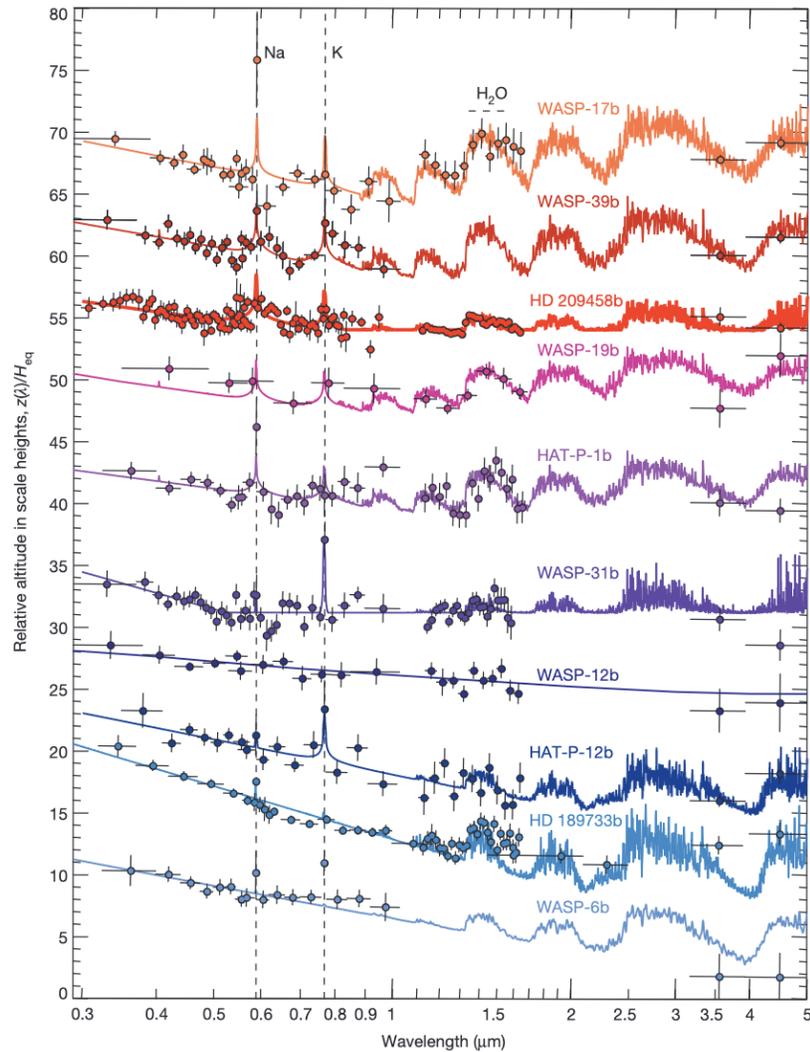


FIGURE 1.12 – Spectres en transmission d'un ensemble de Jupiter chaudes combinant les données HST et *Spitzer*. Ces spectres montrent la détection d'eau sous forme de gaz et de métaux alcalins (le sodium et le potassium) par HST, ainsi que des tentatives de détection de monoxyde et de dioxyde de carbone par photométrie *Spitzer*. Figure provenant de Sing, Fortney et al., 2016.

Les métaux de transition

L'oxyde de titane (TiO) et de vanadium (VO) sont des métaux de transition susceptibles de subsister sous forme gazeuse dans l'atmosphère côté jour des Jupiter ultra chaudes mais de se condenser au niveau du côté nuit (Fortney, Lodders et al., 2008; Parmentier, Showman et Lian, 2013). Bien que présents en quantité très faibles, ces métaux de transition possèdent des signatures moléculaires détectables en infrarouge proche et peuvent donc être observées en spectroscopie d'éclipse. Des tentatives de détection de TiO ont été menées avec HST pour les planètes WASP-12b (Sing, Lecavelier Des Etangs et al., 2013) et HAT-P-121b (Evans, Sing, Wakeford et al., 2016). Dans le premier cas, il n'y a pas de détection de TiO. Dans le second cas, la présence de TiO dans les modèles inversés de *retrievals* permet de reproduire les données mais il s'agit d'un résultat dégénéré.

En parallèle, la **spectroscopie haute résolution spectrale** au sol a permis de détecter des molécules comme le **monoxyde de carbone** dans l'atmosphère de HD 189733b (Kok et al., 2013) et de HD 179949b (Brogi et al., 2014) ou le **cyanure d'hydrogène** dans l'atmosphère de HD 209458b (Hawker et al., 2018) grâce à l'instrument CRILES du Very Large Telescope (VLT). Elle a également permis de confirmer des détections d'eau sous forme de gaz (Kok et al., 2013; Brogi et al., 2014). De plus, la spectroscopie basse résolution au sol à l'aide de l'instrument FORS2 du VLT a permis la détection, cette fois-ci confirmée, d'**oxyde de titane** dans l'atmosphère de WASP-19b (Sedaghati et al., 2017). Un bilan complet des atomes et molécules détectées est présenté dans l'article de Guillot et al., 2022.

Nuages et brumes

Les nuages sont omniprésents dans les planètes du Système solaire et se composent d'éléments dits volatils (i.e. H_2O , NH_3 , CH_4 , CO , CO_2). La présence de nuages et de brumes a été inférée et modélisée pour un grand nombre d'atmosphères d'exoplanètes couvrant une vaste gamme de températures, des super-Terres aux Jupiter chaudes (Marley, Ackerman et al., 2013; Parmentier, Showman et Lian, 2013; Marley et Robinson, 2015; Drummond, Mayne et al., 2018; Parmentier, Showman et Fortney, 2020). Les nuages des planètes les plus chaudes peuvent être composés d'éléments réfractaires (par opposition aux éléments volatils) présentant un très haut point d'ébullition comme les silicates ou les oxydes, responsables d'inversions thermiques. La présence de nuages impacte directement la dynamique atmosphérique, les conditions de recirculation de chaleur et la chimie hors équilibre de ces atmosphères. De nombreuses recherches observationnelles, majoritairement menées sur des Jupiter chaudes, ont révélé la présence de nuages par spectroscopie de transit dans le visible et l'infrarouge proche, par étude de la courbe de phase dans le visible ou encore par spectroscopie d'éclipse dans le visible ce qui correspond à la réflexivité de l'atmosphère (Evans, Pont et al., 2013; Demory, De Wit et al., 2013; Muñoz et Isaak, 2015; Shporer et Hu, 2015; Sing, Fortney et al., 2016; Helling et al., 2016; Madhusudhan, Agúndez et al., 2016; Stevenson, 2016). Les nuages ont plusieurs effets sur le spectre dont l'atténuation des hauteurs des signatures moléculaires et la présence d'une pente (uniquement dans le spectre visible), preuve de diffusion de Rayleigh dans l'atmosphère (Dragomir et al., 2015). La plupart des spectres d'exoplanètes en transit ont été réalisés par HST WFC3, nous permettant de résoudre uniquement la bande de l'eau. L'étude de la taille de la signature spectrale de l'eau a révélé que celle-ci était bien plus atténuée que prédit (inférieure à 2 fois la hauteur d'échelle d'atmosphère), là où elle devrait avoir une amplitude de 5 à 10 hauteurs d'échelle (Madhusudhan, 2019). Cela signifie que l'eau peut être présente mais bien moins abondamment que prévu (par les modèles de chimie à l'équilibre) ou que les nuages sont très hauts dans l'atmosphère et qu'ils constituent un plancher observationnel. Ainsi, seule l'étude du spectre à courtes longueurs d'onde (dans le visible) couplée à celle du spectre en infrarouge proche permet de contraindre les propriétés de diffusion de l'atmosphère. En suivant cette approche, Sing, Fortney et al., 2016 ont contraint la présence de nuages dans un grand nombre de Jupiter chaudes et ont répertorié des altitudes, abondances et pressions très diversifiées. Enfin, des études similaires n'ont pas pu être menées pour des planètes plus petites comme des super-Terres ou sub-Neptunes, HST n'ayant pas la sensibilité pour caractériser.

tériser ces planètes moins massives, à quelques exceptions près dont les sub-Neptunes HAT-P-26b (Wakeford et al., 2017) et K2-18b (Tsaras, Waldmann, Tinetti et al., 2019; Benneke, Wong et al., 2019).

1.2.3.2 Contraindre les abondances et la métallicité

Les abondances

L'étape suivant la détection d'espèces chimiques est celle de la détermination de leur abondance. Nous mesurons l'abondance dite absolue en déterminant la densité de cette espèce (en unité de volume de mélange) par rapport à la densité de dihydrogène dans l'atmosphère d'une exoplanète. L'utilisation du dihydrogène comme molécule dominante dans les atmosphères est valable pour les planètes gazeuses, composées majoritairement d'éléments légers comme l'hydrogène. Les abondances relatives renseignent sur les **ratios moléculaires** présents dans les atmosphères. La présence en plus grande abondance d'eau, de dioxyde de carbone ou de monoxyde de carbone peut refléter le lieu de formation des planètes en fonction des différentes lignes de glace (distances à l'étoile où les éléments chimiques se solidifient). Les abondances relatives peuvent être des traceurs de la formation planétaire (Turrini et al., 2015). La détermination des abondances à partir du spectre de transmission ou d'émission peut être fortement dégenérée respectivement à la présence de nuages et de brumes, ou avec les profils de température de l'atmosphère (Madhusudhan, 2018). Avant le JWST, la seule molécule dont l'abondance a pu être déterminée précisément est l'eau grâce à la combinaison d'observations en spectroscopie de transit avec HST WFC3 et STIS qui permettent d'accéder à la fois à la bande de l'eau autour de 1.4 μm et aux nuages dans le visible (Barstow, Aigrain et al., 2016; Pinhas et al., 2019; Wakeford et al., 2017). En spectroscopie d'éclipse avec HST WFC3, l'abondance de l'eau a pu également être déterminée (Kreidberg, Bean, Désert, Line et al., 2014; Line, Stevenson et al., 2016).

Le rapport C/O

Au-delà des mesures d'abondance relative qui nous donnent les ratios moléculaires, le ratio entre carbone et oxygène est utilisé comme traceur de formation (Turrini et al., 2015). Précisons que le ratio C/O solaire est de ~ 0.54 . Le rapport C/O déterminé pour les planètes est comparé à cette valeur et peut décrire les processus de formation et de migration. Par exemple, prenons un disque protoplanétaire de rapport C/O solaire et une planète qui se forme entre 1 AU et 2 AU (ou à l'intérieur de la ligne de glace de l'eau). Les grains de silicate sont sous forme condensée ce qui augmente la quantité relative de carbone sous forme de gaz. Ainsi le rapport C/O sous forme de gaz augmente à ~ 0.6 . Entre les lignes de glace de l'eau et du CO_2 (entre 2 et 10 AU), l'eau se condense augmentant davantage le rapport C/O sous forme de gaz à ~ 0.85 , l'oxygène étant maintenant piégé sous forme solide. Entre les lignes de glace du CO_2 et du CO, le CO_2 se solidifie et le rapport C/O sous forme de gaz augmente à 1. De plus amples détails sur l'utilisation du rapport C/O comme traceur de formation sont donnés dans les articles de Madhusudhan, 2012 et de Öberg et al., 2011.

La métallicité

La métallicité d'un objet peut se définir comme la fraction de la masse de cet objet qui n'est pas constituée d'hydrogène et d'hélium et constitue un facteur de comparaison avec notre Système solaire. Dans notre Système solaire, les planètes gazeuses les moins massives sont les plus métalliques. Ainsi, Uranus est bien plus métallique que Jupiter. La question de savoir si cette tendance peut s'appliquer aux systèmes exoplanétaires est non triviale (Fortney, Mordasini et al., 2013). D'un point de vue observationnel, la métallicité n'a pu être mesurée avec précision que pour une poignée de Jupiter chaudes. Kreidberg, Bean, Désert, Line et al., 2014 démontre que la Jupiter chaude WASP-43b présente une relation masse-métallicité en accord avec la relation du Système solaire mais au contraire,

Wakeford et al., 2017 démontre que la sub-Neptune HAT-P-26b est moins métallique que prédit. De manière générale, ces mesures de métallicité nous proviennent des mesures d'abondance de l'eau faite avec HST et restent très peu contraintes.

L'objectif premier de l'établissement des **rapports d'abondance** et de la **mesure des métallicités** planétaires est de contraindre les théories de formation des planètes dans le disque protoplanétaire à partir des compositions chimiques des atmosphères. Ce travail requiert d'avoir à disposition un échantillon de mesure important pour inférer statistiquement le lien entre composition chimie et formation. La mesure de la métallicité elle-même doit reposer sur un ensemble diversifié de molécules, contrairement à ce que nous avons à disposition aujourd'hui : des mesures faites à partir de la signature spectrale de l'eau.

1.2.3.3 De la dynamique atmosphérique globale

La composition chimique des exoplanètes n'est pas l'unique axe de recherche permettant de les caractériser. La compréhension de leur structure atmosphérique et interne, ainsi que celle de leur dynamique séculaire et orbitale représentent un enjeu majeur dans le domaine. L'analyse de la structure atmosphérique se fait par détermination du **profil de pression et de température P/T** en fonction de l'altitude. Les conditions de pression et de température impactent ou peuvent être impactées par la composition moléculaire et la **cinétique des réactions chimiques**, par la **présence de nuages ou de brumes** ou encore par la présence de vents ou de **recirculation atmosphérique** induisant une redistribution de chaleur. Aujourd'hui, la recherche de la compréhension de la dynamique atmosphérique se concentre majoritairement sur les Jupiter chaudes.

À la recherche d'inversions thermiques

Les travaux de Fortney, Lodders et al., 2008 ont démontré que les Jupiter chaudes se regroupent sous deux catégories, le facteur déterminant étant la température de la planète et donc la présence ou non d'oxydes de titane ou de vanadium sous forme gazeuse dans leur atmosphère. Les oxydes de titane et de vanadium ont une température de condensation très élevée et ne peuvent subsister sous forme de gaz uniquement dans les atmosphères les plus irradiées. Ces oxydes sous forme de gaz ont une capacité de chauffage très élevée et, de fait, une très faible quantité d'oxydes peut chauffer significativement l'atmosphère. Au contraire, pour des planètes ayant une atmosphère à une température inférieure à celle de la condensation de ces oxydes, celles-ci ne subsistent pas sous forme de gaz mais se condensent au fond de l'atmosphère. En conséquence de la présence de ces oxydes sous forme de gaz pour les planètes les plus chaudes, la tendance de la température atmosphérique s'inverse et augmente avec l'altitude au lieu de diminuer. Nous appelons cela l'inversion thermique (ou *thermal inversion* en anglais). La détermination de l'existence de ces inversions thermiques est primordiale pour comprendre la structure du profil P/T des atmosphères de ces Jupiter ultra-chaudes, dont la température côté jour peut atteindre 2500 K. La preuve observationnelle de ces inversions thermiques peut être fournie par analyse de l'émission thermique par spectroscopie d'éclipse et de courbe de phase, mais reste très limitée. Stevenson, Desert et al., 2014 a détecté l'existence d'une troisième catégorie, celle du profil isotherme, dans l'atmosphère des Jupiter ultra-chaudes WASP-43b. La présence d'une inversion thermique a été détectée dans l'atmosphère côté jour des planètes WASP-33b (Haynes et al., 2015), WASP-18b (Sheppard et al., 2017) et WASP-121b (Evans, Sing, Kataria et al., 2017) dont les températures de brillance sont supérieures à 2500 K. En revanche, celle de HD 209458 est non confirmée (Knutson, Charbonneau, Allen, Burrows et al., 2008; Line, Stevenson et al., 2016).



La recirculation atmosphérique

La dynamique atmosphérique est contrainte observationnellement par l'observation d'éclipses et de courbes de phase (voir Sect. 1.2.1 et Sect. 1.2.2). La Fig. 1.13 présente les émissions thermiques de 13 Jupiter chaudes observées en spectroscopie d'éclipse par HST/WFC3. Ces spectres d'émission nous renseignent sur la température côté jour de ces planètes, variant de 1500 à 3250 K. La courbe de phase nous renseigne cette fois-ci sur le contraste jour/nuit de la planète et sur la localisation du décalage du point chaud par rapport au point sub-stellaire. La première courbe de phase observée est celle de la Jupiter chaude HD 189733b, présentée sur la Fig. 1.11 (Knutson, Charbonneau, Allen, Fortney et al., 2007), qui révèle un écart de température entre le côté jour et le côté nuit de 250 K. La première courbe de phase spectroscopique est celle de la Jupiter chaude WASP-43b (Stevenson, Desert et al., 2014). Cette courbe de phase spectroscopique permet d'apporter des contraintes sur la structure thermique de la planète pour différentes longitudes et altitudes. Les résultats démontrent un fort contraste jour/nuit et un point chaud dont le décalage augmente avec la pression. Cela suggère que le transport de chaleur est plus efficace plus profondément dans l'atmosphère. *Spitzer* nous a permis de détecter la première courbe de phase d'une exoplanète plus petite qu'une Jupiter chaude. Il s'agit de celle de la super-Terre 55 Cancri e (Demory, Gillon et al., 2016) pour laquelle la température de jour mesurée est de 2700 K, celle de nuit est de 1400 K. Le point chaud, quant à lui, est décalé de 40 degrés vers l'est. L'ensemble des résultats d'observations de courbes de phase indique que l'efficacité de recirculation diminue avec l'augmentation de la température d'irradiation de la planète et un décalage du point chaud vers l'est. Ces conclusions sont en accord avec les modèles généraux de circulation (ou GCM) qui prédisent la dynamique tri-dimensionnelle des atmosphères. Ajoutons à cela que l'observation en spectroscopie haute résolution des exoplanètes (résolution de la signature du sodium, Wyttenbach et al., 2015) a permis de caractériser la vitesse des vents dans l'atmosphère de la Jupiter chaude HD 189733b (Louden et Wheatley, 2015), en prédisant une vitesse allant jusqu'à $5.3 \pm 1.2 \text{ km s}^{-1}$. Cette observation permet la caractérisation observationnelle du jet équatorial, en accord avec les résultats produits par les modèles GCM.

Enfin, les modèles de circulation passent aujourd'hui à une nouvelle étape, celle de la caractérisation de la variabilité temporelle des atmosphères. Des simulations hydrodynamiques réalisées par Cho et al., 2021 permettent de résoudre des événements temporels comme des tempêtes ou des vortex (Skinner et Cho, 2022), résultants d'activités cycliques du chauffage planétaire par irradiation (Skinner, Nästilä et al., 2022). La Fig. 1.14 présente des simulations haute résolution d'une Jupiter chaude centrée sur le point sub-stellaire. Les deux cartes montrent l'apparition de vortex résultant d'un chauffage dans les couches profondes de l'atmosphère. Ces vortex sont variables dans le temps, ils tournent, se rompent et se dispersent vers l'ouest, à l'opposée de leur lieu de formation à mi-latitudes (Skinner, Nästilä et al., 2022).

1.2.3.4 Les premières études de population

Les études de population menées jusqu'à présent prennent en compte des données spectroscopiques HST ou des données photométriques *Spitzer* (voir par exemple Cowan et Agol, 2011b et Wordsworth et Kreidberg, 2022). Ces études se concentrent notamment sur des géantes gazeuses pour lesquelles nous avons bien plus de données disponibles. En particulier, les travaux de Edwards, Changeat et al., 2022 et Changeat, Edwards, Al-Refai et al., 2022 ont pour objectif d'établir des relations entre les espèces chimiques détectées par spectroscopie et les paramètres planétaires (masse planétaire, métallicité, rapport C/O). Edwards, Changeat et al., 2022 se concentre sur la signature de l'eau sous forme de gaz des données HST STIS en configuration de transit de 70 exoplanètes afin d'en extraire, entre autres, la métallicité et d'étudier la relation masse-métallicité (Fortney, Mordasini et al., 2013). Edwards, Changeat et al., 2022 démontre que les résultats obtenus ne laissent apparaître aucune tendance significative entre ces deux paramètres, compte tenu des données à disposition. Cette même conclusion est faite concernant les valeurs de rapports C/O qui présentent de larges incertitudes et ne peuvent discriminer différents scénarios de formation

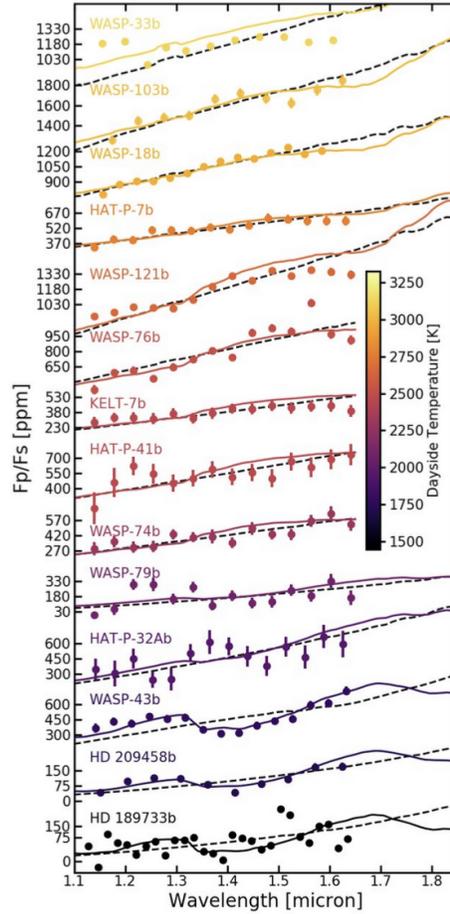


FIGURE 1.13 – Émissions thermiques côté jour de 13 Jupiter chaudes observées avec l'instrument WFC₃ du HST en spectroscopie d'éclipse. Les températures de brillance côté jour déduite de la spectroscopie varient entre 1500 et 3250 K. Figure venant de Mansfield et al., 2021.

planétaire. Changeat, Edwards, Al-Refaie et al., 2022 étudie les données HST WFC₃ et *Spitzer* IRAC de 25 géantes gazeuses en configuration d'éclipse et apporte des résultats similaires : les données actuelles ne permettent pas d'inférer des contraintes d'égalité concernant la métallicité et le rapport C/O. Changeat, Edwards, Al-Refaie et al., 2022 démontre également que des modèles de chimie hors équilibre sont favorisés par rapport à des modèles de chimie à l'équilibre et suggère une prévalence de la chimie hors équilibre dans les atmosphères des géantes gazeuses (Roudier et al., 2021; Kawashima et Min, 2021). De manière générale, l'approche d'une exoplanétologie comparative, fondée sur des études démographiques uniformes (impliquant les mêmes outils et méthodologies) pourrait contraindre les différents régimes chimiques dans les atmosphères ainsi que la dynamique atmosphérique et discriminer les scénarios de formation et d'évolution. Ces études nécessitent des données précises présentant une large couverture en longueur d'onde pour un grand nombre de planètes.

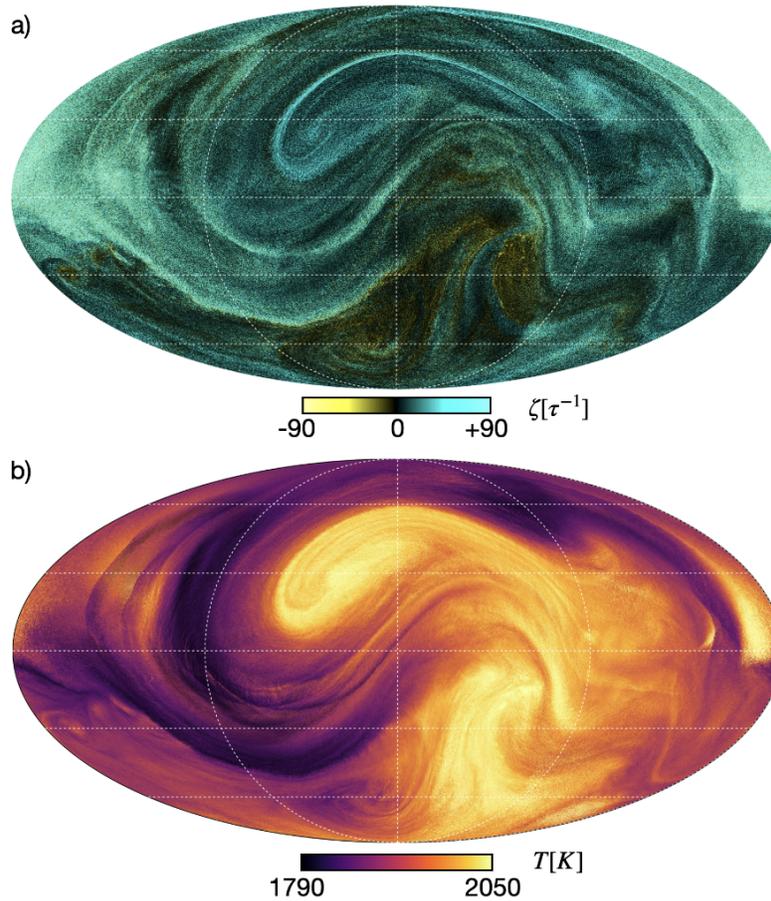


FIGURE 1.14 – Simulations hydrodynamiques haute résolution d’une Jupiter chaude centrée sur le point sub-stellaire à un instant $t=155$ unités de période orbitale et à une pression $P=10^5$ Pa. La partie haute de la figure présente la carte en vorticité et celle du bas présente la carte en température de l’atmosphère. Les deux cartes montrent l’apparition de vortex résultant d’un chauffage dans les couches profondes de l’atmosphère. Figure venant de Skinner, Nästilä et al., 2022.

1.2.3.5 Les effets de la contamination stellaire

Ma thèse s’articule autour d’observations en infrarouge moyen, domaine de longueurs d’onde pour lesquelles les variabilités de l’étoile ont un impact moindre comparé au domaine du visible et de l’infrarouge proche. Toutefois, l’étude d’atmosphères d’exoplanète couvre l’ensemble de la gamme de longueurs d’onde du visible à l’infrarouge moyen, il est donc important de connaître l’impact de l’activité d’étoile sur les données d’atmosphère, impact que l’on appelle contamination stellaire. Il est donc nécessaire de poser les quelques concepts clés liés à la structure visible des étoiles dans le cadre de la spectroscopie de transits d’exoplanètes. Dans cette section, nous montrerons l’impact de ces structures sur les courbes de lumière et les spectres, puis nous discuterons des limites observationnelles liées à cette contamination stellaire. L’ensemble de cette partie est fondé sur les articles de Radick et al., 1998; Shapiro et al., 2016; Apai et al., 2018; Rackham et al., 2018, 2019; Reinhold et al., 2019; The SAG21 committee et al., 2022.

La couche visible de l’étoile est sa photosphère pour laquelle la profondeur optique $\tau_\nu = \int_z^\infty k_\nu dz$ est égale à

τ_ν , où z est l'altitude z d'une couche de l'étoile à partir d'une altitude de référence et k_ν est le coefficient d'extinction, produit de l'opacité et de la masse volumique. La surface d'une étoile présente plusieurs signatures spectrales et structures spatiales qui sont détectables observationnellement. Nous décrivons ces structures suivant la terminologie employée pour les études du Soleil, étoile la mieux contrainte par observation. Lors d'un transit, les structures de la surface de l'étoile qui se manifestent par des baisses ou des augmentations locales de luminosité modifient la courbe de lumière si la planète venait à les occulter. Ces altérations sont dépendantes de la longueur d'onde.

Premièrement, les fines cellules convectives à la limite de la photosphère (couche à 5800 K pour le Soleil) créent des différentiels de température. Ainsi, le plasma montant vers les couches extérieures étant plus chaud que le plasma descendant vers les couches inférieures, le mouvement induit des variations spectrales respectivement vers le bleu et vers le rouge et des variations de luminosité apparente en lumière blanche. Ces fines cellules sont responsables de la **granulation** à la surface visible de l'étoile. Pour des étoiles de type M, K ou F, la convection à petite échelle et donc la granulation visible varie en fonction du rapport de surface entre les zones de plasma montantes et descendantes ainsi que du ratio de leur luminosité respectives. De manière générale, seules des observations très précises en vitesse radiale ou en spectroscopie haute résolution permettraient de résoudre ces granulations pour des étoiles autres que le Soleil. Les données à haute cadence des télescopes CoRoT, *Kepler/K2* ou encore *TESS* permettraient de résoudre temporellement ces granulations.

Évoquons à présent l'effet de l'**assombrissement centre-bord**. En effet, la luminosité apparente décroît radialement depuis le centre jusqu'aux bords. Afin d'expliquer ce phénomène, rappelons que le rayonnement observé d'une étoile provient d'une surface où la profondeur optique τ_ν est égale à 1. Le bord de l'étoile où $\tau_\nu = 1$ étant décalé d'un angle θ par rapport à l'observateur, celui-ci sonde une surface plus profonde au centre de l'étoile que sur les bords, comme le montre la Fig. 1.15. La température de la photosphère étant décroissante radialement vers l'extérieur de l'étoile, la température de la surface observée au bord de l'étoile est inférieure à celle observée au centre. La luminosité apparaît donc plus élevée au centre qu'aux bords de l'étoile. Ce phénomène affecte spectralement le transit à l'*ingress* et à l'*egress* en modifiant la forme initiale du transit (trapézoïdale géométriquement), en une forme arrondie (en U). Plus la longueur d'onde augmente, allant de l'ultraviolet vers le proche infrarouge, plus le transit s'arrondit. Ainsi, les points de contact du transit I-IV deviennent de plus en plus difficiles à distinguer, ce qui altère notre mesure des temps de transits plein t_F et total t_P , définis dans la Sect. 1.1.4, et donc de notre analyse des paramètres orbitaux et atmosphériques. Des modèles d'assombrissement centre-bord sont donc pris en compte dans l'ajustement des données pour décrire le profil d'intensité lumineuse depuis le centre jusqu'au bord. Ce profil s'approxime généralement par une loi quadratique ou par la loi à quatre coefficients énoncée par Mandel et Agol, 2002.

Par ailleurs, une étoile comme le Soleil présente une rotation différentielle entre l'équateur et les pôles (l'équateur tournant plus rapidement que les pôles) qui entraîne un ensemble de mécanismes complexes jusqu'à la formation de **tâches** (ou *spot* en anglais) à la surface de l'étoile (Babcock, 1961). Ces tâches se composent de deux zones : l'ombre à l'intérieur de la tâche où le champ magnétique est plus intense et donc la luminosité y est plus faible, et la pénombre, autour de l'ombre où le champ magnétique est moins élevé et donc la luminosité y est plus élevée que dans l'ombre, mais tout de même en dessous de celle à l'équilibre des pressions. La décroissance magnétique des tâches provoque une évolution latitudinale jusqu'aux pôles et donc jusqu'à inversion du champ magnétique dipolaire du Soleil, créant ainsi le cycle solaire tous les ~ 11 ans. Pour d'autres étoiles que le Soleil la présence et l'évolution des tâches dépend de l'équilibre de Rossby entre rotation (et donc de l'âge) et vitesse des mouvements de convection (et donc de la taille de la zone convective). Ainsi, les étoiles de type M, qui sont encore très jeunes, ont des périodes de rotations très diversifiées ce qui ne nous permet pas de contraindre l'équilibre de Rossby. En revanche, elles présentent des cycles magnétiques très longs. Au contraire, les étoiles de type F qui sont des rotateurs rapides présentent une gyrochronologie établie (Skumanich, 1972) mais de très courts cycles magnétiques.

La présence de **filaments** à la surface d'une étoile correspond à des structures convectives plus froides et plus volumineuses où le champ magnétique est très élevé. La présence de ce champ magnétique plus élevé nous permet

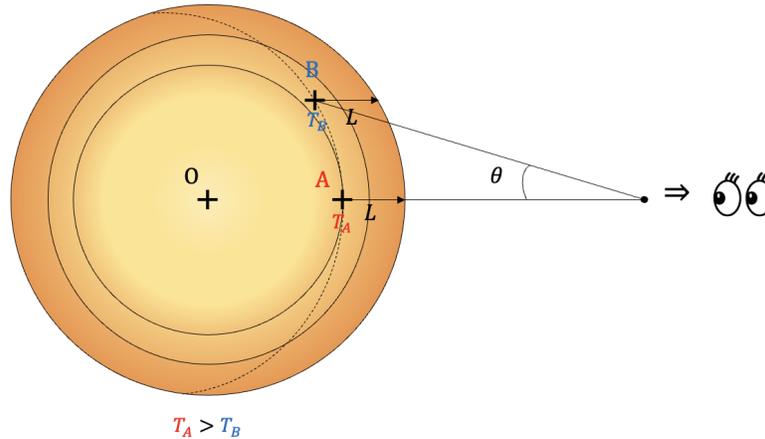


FIGURE 1.15 – Effet de l’assombrissement centre-bord de l’étoile. L correspond à la distance observable où la profondeur optique $\tau_\nu = 1$. Cette distance correspond au rayon au-delà duquel les photons émis par l’étoile sortent effectivement de l’étoile et deviennent observables. Un observateur verra donc de manière équivalente les photons émis en B, correspondant à une énergie plus faible et donc à une luminosité plus faible, et les photons émis en A, correspondant à une énergie plus élevée et donc à une luminosité plus élevée à cause de l’angle θ avec lequel il observe les bords de l’étoile.

de sonder les limites de ces zones convectives plus en profondeur et donc d’observer “à l’intérieur” de la zone. Un observateur placé en face de ces zones convectives ne verrait que le haut des cellules et ne remarquerait alors aucune différence de luminosité en lumière blanche. En revanche, un observateur décalé d’un certain angle θ par rapport à ces zones pourrait alors distinguer différentes régions internes à différentes températures et ainsi relever des variations de luminosité délimitant les zones convectives. Ces filaments peuvent donc être à l’*ingress* et à l’*egress* d’un transit. Les **facules** correspondent à un champ magnétique élevé et sont visibles au centre du disque solaire dans les bandes d’absorption de l’Hydrogène $H\alpha$ et dans les bandes H et K du Calcium ionisé CaII H&K. Bien que le Calcium ionisé ne soit pas un élément abondant dans le Soleil, la faible température de la chromosphère (à 4500 K) rend possible sa formation, et donc la détection des structures sur la totalité du disque. Dans des étoiles de plus faibles masses comme les naines M, il est également possible de détecter de l’eau et de l’oxyde de titane venant de l’absorption stellaire et non planétaire, dans le visible et l’infrarouge proche.

De manière générale, la spectroscopie de transit est affectée par l’existence de l’ensemble des structures stellaires énumérées ci-dessus, qui deviennent détectables dans certaines bandes de longueurs d’onde et qui induisent des variations de luminosité. Il s’agit donc de contraindre théoriquement ou observationnellement les structures de l’étoile afin de décorréler la contamination stellaire de la courbe de lumière planétaire (Rackham et al., 2018, 2019).

1.2.3.6 Limitations et dégénérescences

Le bilan que l’on peut dresser de l’ensemble des résultats observationnels obtenus ces 30 dernières années est le suivant. Les télescopes spatiaux *Spitzer* et HST, ainsi que les missions *Kepler*, TESS et CHEOPS mais également les télescopes au sol ont permis la détection de plus de 5000 exoplanètes et une première caractérisation de leur atmosphère. Ce travail de caractérisation par méthode des transits a été orienté vers les planètes massives et proches de leur étoile, à portée de nos télescopes. L’unique molécule caractérisée par spectroscopie basse résolution depuis l’espace est celle de l’eau dans l’infrarouge proche. L’analyse des courbes spectrales dans le visible a également permis d’inférer la présence de nuages dans les atmosphères. L’étude en spectroscopie d’éclipse et de courbe de phase

a permis une première caractérisation de la structure thermique des géantes gazeuses et de la dynamique de leur atmosphère. De manière générale, les revues de Tinetti, Encrenaz et al., 2013, Crossfield, 2015, Heng et Showman, 2015, Deming et Seager, 2017, Perryman, 2018, Kreidberg, 2018, Madhusudhan, 2019, Fortney, Dawson et al., 2021, Guillot et al., 2022, Edwards, Changeat et al., 2022 et Changeat, Edwards, Al-Refaie et al., 2022 dressent le bilan des deux premières décennies de recherche dans le domaine des exoplanètes.

Limitations en longueur d'onde

L'une des limitations principales est celle du domaine de longueur d'onde disponible par observation. Les molécules susceptibles d'être présentes dans les atmosphères d'exoplanètes présentent des signatures spectrales dans l'infrarouge moyen ($\sim 3 - 20 \mu\text{m}$) mais seul *Spitzer* a pu nous fournir des indices photométriques de la présence de CO et CO₂, mais sans confirmation. La caractérisation des atmosphères en terme de composition chimique nécessite la détection d'autres molécules afin de déterminer les abondances relatives, les rapports C/O et ainsi d'apporter des contraintes sur les théories de formation et d'évolutions des planètes. La nécessité d'étendre la gamme de longueur d'onde repose également sur le fait que la discrimination entre émission thermique et réflexion des planètes est aujourd'hui possible majoritairement pour des Jupiter ultra chaudes, dont le pic d'émission est dans l'infrarouge proche, à portée de nos télescopes.

Limitations en sensibilité

L'un des constats que l'on peut faire de l'ensemble des développements précédents est celui des planètes étudiées par méthode des transits. De fait, les Jupiter chaudes ont été les planètes caractérisées en majorité. Les planètes moins massives comme les Sub-Neptunes et les Super-Terres ont également fait l'objet de caractérisation atmosphérique mais leur taille plus petite limite ce travail. Il est nécessaire d'augmenter la sensibilité des télescopes pour résoudre les courbes de phase et les éclipses des planètes moins massives et ainsi caractériser leur structure. De fait, la dégénérescence de structure atmosphérique et interne entre Sub-Neptunes gazeuses et Super-terres rocheuses ne peut être levée (Bean, Raymond et al., 2021). Par ailleurs, aucune atmosphère n'a été détectée ni caractérisée autour de rocheuses tempérées. De fait, le champ de recherche lié à l'habitabilité des planètes nécessite des preuves observationnelles des compositions atmosphériques des planètes comme la Terre.

Limitations des modèles et dégénérescences

La majorité des modèles prend en compte une chimie dit à l'équilibre. Le terme équilibre fait référence à l'équilibre chimique, thermique et radiatif. Ces modèles ne prennent pas en compte les phénomènes qui peuvent rompre l'équilibre et être à l'origine à la fois de molécules et de structures thermiques observables par spectroscopie. Par exemple, Venot, 2014 propose de prendre en compte la cinétique des réactions chimiques incluant ainsi la photochimie (chimie en haute atmosphère liée à l'irradiation par l'étoile), les nuages et la recirculation atmosphérique. Par ailleurs, l'intérieur des planètes demeure dégénéré observationnellement et fait l'objet de nombreux modèles (Dorn et al., 2015; Perryman, 2018). Les *retrievals* atmosphériques assument alors une pression de fond de l'atmosphère qui correspond à des prédictions de modèles d'intérieur mais aucun couplage réel entre atmosphère et intérieur n'est aujourd'hui mis en place. Enfin, les *retrievals* se font majoritairement à l'aide de modèles inversés 1D (par souci de temps de calcul et de capacité numérique) mais peuvent biaiser les résultats en moyennant des effets 3D observables dans les atmosphères. Les travaux de Pluriel, Zingales et al., 2020; Pluriel, Leconte et al., 2022; Zingales et al., 2022; Nixon et Madhusudhan, 2022; Pluriel, 2023 discutent des améliorations possibles pour fournir des *retrievals* atmosphériques 2D voire 3D.

De manière générale, nous approchons des **limites observationnelles** des télescopes avant que le JWST ne soit lancé. Il est nécessaire d'agrandir la gamme de longueurs d'onde accessible par observation dans l'infrarouge moyen ainsi que la sensibilité des télescopes pour lever les dégénérescences de la caractérisation des atmosphères des géantes gazeuses aux rocheuses tempérées.

1.3 La nécessité d'observatoires spatiaux en infrarouge moyen : l'apport des missions JWST et Ariel

L'ensemble des dégénérescences et limitations présentées ci-dessus vont pouvoir être levées notamment grâce aux deux missions spatiales : JWST et Ariel. Ces deux missions opèrent dans l'infrarouge proche et moyen et vont donc permettre de sonder les compositions chimiques des atmosphères dans des gammes de longueurs d'onde encore inexplorées. La Fig. 1.16 présente les molécules ayant des signatures spectrales dans l'infrarouge moyen et leur résolution spectrale associée. Par exemple, des molécules comme le CH_4 ou encore le NH_3 , attendues dans les atmosphères plus froides que celles des Jupiter chaudes ($T < 1000\text{K}$) présentent des signatures spectrales en infrarouge moyen et seraient donc détectables.

Molécule	$\Delta\nu = 2B_0$ cm^{-1}	$\lambda(S_{\text{max}})$ 2–5 μm	S_{max} $\text{cm}^{-2} \text{am}^{-1}$	R 2–5 μm	$\lambda(S_{\text{max}})$ 5–16 μm	S_{max} $\text{cm}^{-2} \text{am}^{-1}$	R 5–16 μm
H_2O	29.0	2.69 (ν_1, ν_3)	200	130	6.27 (ν_2)	250	55
HDO	18.2	3.67 ($\nu_1, 2\nu_2$)	270	150	7.13 (ν_2)		77
CH_4	10.0	3.31 (ν_3)	300	300	7.66 (ν_4)	140	130
CH_3D	7.8	4.54 (ν_2)	25	280	8.66 (ν_6)	119	150
NH_3	20.0	2.90 (ν_3)	13	170	10.33	600	50
		3.00 (ν_1)	20		10.72 (ν_2)		
PH_3	8.9	4.30 (ν_1, ν_3)	520	260	8.94 (ν_4)	102	126
					10.08 (ν_2)	82	110
CO	3.8	4.67 (1-0)	241	565			
CO_2	1.6	4.25 (ν_1)	4100	1470	14.99 (ν_2)	220	420
HCN	3.0	3.02 (ν_3)	240	1100	14.04 (ν_2)	204	240
C_2H_2	2.3	3.03 (ν_3)	105	1435	13.7 (ν_5)	582	320
C_2H_6	1.3	3.35 (ν_7)	538	2300	12.16 (ν_{12})	36	635
O_3	0.9				9.60 (ν_3)	348	1160

FIGURE 1.16 – Signatures spectrales en infrarouge moyen où $\Delta\nu$ est la largeur de la bande spectrale correspondant aux transitions vibrationnelles et rotationnelles des molécules. $\lambda(S_{\text{max}})$ est la longueur d'onde correspondant à l'intensité maximale de la bande spectrale prédominante et R correspond à la résolution spectrale nécessaire pour distinguer deux transitions adjacentes. Table venant de Tinetti, Encrenaz et al., 2013.

De manière générale, l'objectif principal de la décennie actuelle et de la décennie suivante est de comprendre les structures et dynamiques atmosphériques afin de contraindre à la fois les théories de formation et d'évolution et les structures internes des exoplanètes. Un second objectif est la détermination ou non de l'unicité de notre Système solaire en termes de formation, d'évolution et de composition chimique. Enfin, l'un des objectifs à long terme est la détection de biosignatures dans les atmosphères et la discrimination des processus conduisant à leur formation.

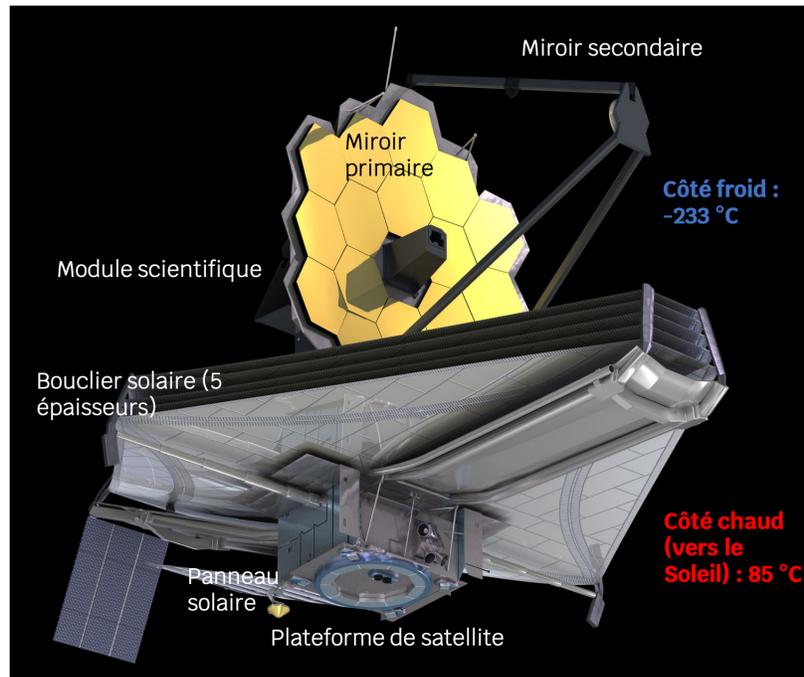


FIGURE 1.17 – Présentation du JWST. Le côté dit chaud est exposé au Soleil et regroupe les panneaux solaires ainsi que la plateforme du satellite qui assure la communication avec la Terre. La séparation entre les côtés chaud et froid se fait à l'aide du bouclier thermique constitué de 5 couches de matériau isolant. Le côté froid comprend les miroirs primaire et secondaire ainsi que le module scientifique avec l'ensemble des instruments, à l'arrière du miroir primaire. Crédit : NASA

1.3.1 Le James Webb Space Telescope

Le JWST, présenté sur la Fig. 1.17 a été conçu par la NASA, l'Agence Spatiale Européenne (ESA) et l'Agence Spatiale Canadienne (CSA). Il s'agit du plus grand télescope spatial jamais construit. Son miroir principal de 6,5 mètres de diamètre offre une surface collectrice de 25 m². Ce miroir est constitué d'un ensemble de 18 segments hexagonaux composés de béryllium, recouverts d'une fine couche d'or, repartis en trois fragments dont deux pliables qui se déploient une fois le télescope libéré de la coiffe du lanceur. Il opère dans l'infrarouge proche et moyen (de 0,6 à 28 μm). Il est positionné au point de Lagrange L2 et possède un écran thermique de la taille d'un terrain de tennis (22 x 12 mètres) qui lui permet d'être protégé du Soleil et donc de refroidir passivement. Il dispose à son bord de quatre instruments : le spectroscopie NIRSpec, le spectroscopie NIRISS, le spectro-imageur NIRCам et le spectro-imageur MIRI. MIRI ou Mid-Infrared Instrument est le seul instrument en infrarouge moyen (entre 5 et 28 μm). Ces instruments sont refroidis passivement autour de 40 K, à l'exception de MIRI qui est refroidi activement à 7 K. MIRI va nous permettre d'obtenir une sensibilité d'environ 50 fois meilleure que celle de *Spitzer* dans l'infrarouge moyen avec une résolution angulaire 7 fois supérieure. L'intérêt de l'instrument MIRI est sans précédent : cet instrument va nous permettre d'explorer la composition moléculaire des atmosphères en infrarouge moyen mais surtout, MIRI va nous donner accès à l'émission thermique des exoplanètes bien plus froides que celles actuellement caractérisées, ouvrant la voie aux planètes rocheuses chaudes ou tempérées. La sensibilité de JWST de manière générale va nous permettre de caractériser les atmosphères des **planètes rocheuses et tempérées** et nous fournir des résultats pionniers dans ce domaine. La Fig. 1.18 montre les gammes spectrales couvertes par le

HST et *Spitzer*, ainsi que celles couvertes par les instruments du JWST. Le chevauchement des longueurs d'onde des instruments d'HST et de JWST va permettre de comparer les résultats obtenus avec les deux observatoires. Plus d'information sur sa conception sont disponibles sur le site de la [NASA](https://www.nasa.gov) et le site français [jwst.fr](https://www.jwst.fr).

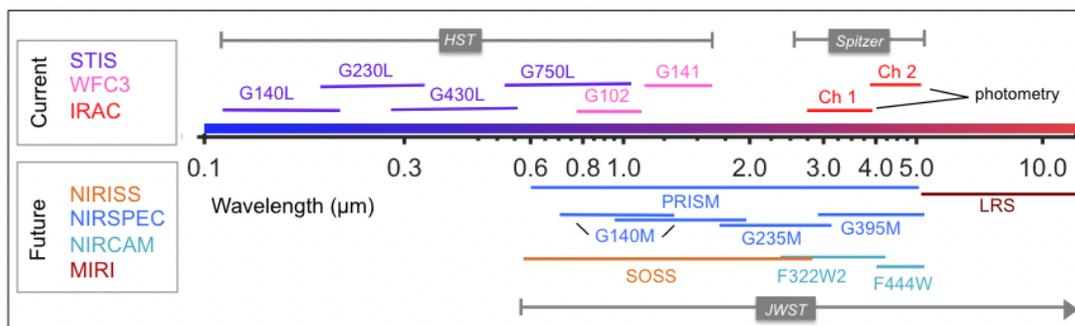


FIGURE 1.18 – Gammes de longueur d'onde couvertes par les observatoires HST (instruments STIS et WFC3), *Spitzer* (instrument IRAC) et JWST (instruments NIRISS, NIRSpec, NIRCAM et MIRI). L'instrument MIRI couvrira une gamme de longueurs d'onde allant jusqu'à 28 μm . Figure venant de Kreidberg, 2018.

1.3.2 La mission Ariel

Le second point clé lié à la caractérisation des atmosphères est la nécessité d'une **approche statistique** pour contraindre les populations planétaires et les relations de masse, de température, de composition et d'irradiation qui les lient. En effet, le JWST va nous permettre de sonder une large gamme de planètes allant des géantes gazeuses aux rocheuses tempérées, mais le nombre de planètes qui seront observées reste moindre, l'observatoire n'étant pas uniquement dédié à l'étude des exoplanètes. Nous avons aujourd'hui besoin d'études statistiques des exoplanètes connues à ce jour. C'est l'objectif de la mission Ariel, première mission spatiale entièrement dédiée à l'étude des atmosphères d'exoplanètes présentée sur la Fig. 1.19, qui opère également dans l'infrarouge proche et moyen (de 0.55 à 7.8 μm). Il s'agit de la mission M4³ du programme Cosmic-Vision de l'ESA (programme pour les années 2015-2025) dont le lancement est prévu pour 2029. Le Centre National d'Études Spatiales (CNES) assure la maîtrise d'ouvrage de l'instrument Ariel InfraRed Spectrometer (AIRS) et la maîtrise d'œuvre est assurée par le Commissariat à l'Énergie Atomique et aux énergies alternatives (CEA). AIRS est le spectroscopie infrarouge qui va observer dans les longueurs d'onde allant de 1.95 à 7.8 μm . L'instrument se compose de deux parties distinctes : le canal 0 dit CHO pour la gamme de longueurs d'onde comprise entre 1.95 et 3.90 μm et le canal 1 dit CHI pour la gamme de longueurs d'ondes comprise entre 3.90 et 7.80 μm . L'autre instrument, le Fine Guiding Sensor (FGS), permettra à la fois de guider le télescope et d'observer les exoplanètes dans la gamme visible et infrarouge proche allant de 0.55 à 1.95 μm . Ces deux instruments, refroidis à 40 K, observent simultanément, ce qui présente un avantage par rapport au JWST qui nécessite plusieurs observations pour couvrir la gamme de longueurs d'onde équivalente. De plus amples informations concernant la mission Ariel sont disponibles dans le [Red Book](#)⁴. Néanmoins, le miroir principal d'Ariel est bien plus petit que celui du JWST, avec un diamètre d'environ un mètre. L'atout majeur de ces

3. Les missions M de l'Agence Spatiale Européenne sont des missions de classe moyenne (le budget ESA présente un plafond de 470 millions d'euros).

4. Le Red Book est disponible à l'adresse suivante https://sci.esa.int/documents/34022/36216/Ariel_Definition_Study_Report_2020.pdf

deux observatoires est la possibilité de couvrir de larges gammes de longueurs d'onde allant du visible à l'infrarouge moyen et de permettre ainsi des caractérisations complètes des atmosphères d'exoplanètes.

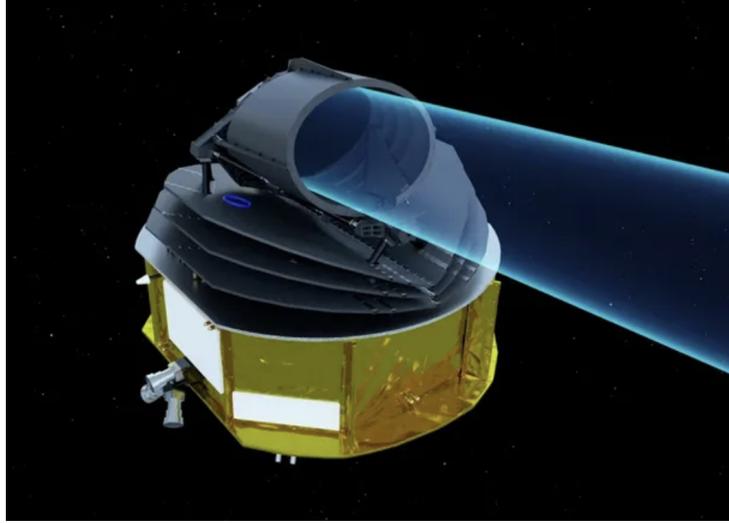


FIGURE 1.19 – Présentation de la mission Ariel. Son miroir ovale offre une surface collectrice équivalente d'un mètre carré. Crédit : ESA

1.3.3 De la difficulté de l'observation

La caractérisation des atmosphères ne repose pas uniquement sur la présence ou non de signatures spectrales moléculaires dans des gammes de longueurs d'onde données mais également sur la **délectabilité de ces signatures par les instruments qui les observent**. En effet, l'instrument se place comme intermédiaire entre la source observée et l'observateur, ce qui en fait le facteur limitant de l'observation. Ainsi, toute observation est limitée par les performances de l'instrument, entre autres par les résolutions spatiale et spectrale, mais également par les bruits ou biais qu'il peut introduire dans le signal acquis. De fait, il nous faut quantifier le rapport entre le signal dit utile nous venant de la source astrophysique et le bruit à la fois observationnel et instrumental qui altère ce signal. Ce rapport, que l'on appelle signal-sur-bruit, devient alors une référence permettant de quantifier l'observabilité des systèmes. Il requiert une connaissance poussée à la fois de la source et de l'instrument qui l'observe.

1.3.3.1 Le rapport signal-sur-bruit

Pour une cible donnée, et donc un signal photonique reçu, l'un des rôles de l'instrument est de convertir les photons en électrons. Cette conversion se fait avec une certaine efficacité, qui est quantifiable. Ainsi, le signal en électrons en sortie d'un instrument s'exprime comme

$$F = F_{\text{photon}} * \text{Tr} * S_T * Q_E * \frac{\lambda}{R} * t_i . \quad (1.46)$$

où Tr est la transmission du télescope et de l'instrument, S_T est la surface collectrice du télescope en m^2 , Q_E l'efficacité quantique de l'instrument, λ la longueur d'onde en m, R la résolution spectrale et t_i le temps d'intégration en s. Précisons que cette expression est une simplification des phénomènes en jeu dans la chaîne instrumentale.

Nous en fournisrons une présentation exhaustive ainsi que les valeurs des paramètres issues des tests au sol dans le Chap. 2. Les valeurs issues de la calibration en vol sont explicitées dans le Chap. 3. Le rapport signal-sur-bruit ou *signal-to-noise ratio* en anglais (SNR) s'exprime alors comme

$$SNR = \frac{F}{\sqrt{\sum_i \sigma_i^2}}. \quad (1.47)$$

où F est le signal converti en électrons par l'instrument, les σ_i sont les différents bruits altérant ce signal. Une liste exhaustive de ces bruits est fournie dans le Chap. 2. La limite fondamentale de bruit que l'on puisse atteindre est le bruit dit de photon, intrinsèquement lié à l'acquisition de photons au cours du temps. En effet, les étoiles émettent non pas N mais $N \pm \sqrt{N}$ photons par unité de temps. La quantité \sqrt{N} est le bruit de photon, qui provient d'une émission irrégulière des photons dont la probabilité par unité de temps suit une distribution de Poisson. Le seul moyen que nous ayons d'augmenter un SNR déjà limité par le bruit de photon est d'empiler plusieurs observations (ou *stacking* en anglais). Les étoiles brillantes ont un SNR plus élevé que les étoiles peu lumineuses (l'erreur relative \sqrt{N}/N diminue à mesure que N augmente), de sorte que les meilleures cibles pour la caractérisation des atmosphères en transit orbitent des étoiles ayant une magnitude apparente inférieure à 10 (Sing, Désert et al., 2011; Deming, Wilkins et al., 2013; Ingalls, Krick, Carey, Stauffer et al., 2016; Kreidberg, 2018).

1.3.3.2 Les systématiques instrumentales

Lors d'une observation à travers un télescope, le SNR dépend des performances de l'instrument mais également de l'amplitude des variations spectrales atmosphériques recherchées. De manière générale, l'ordre de grandeur de la contribution atmosphérique varie entre quelques pourcents et quelques ppm (Brown, 2001; Tinetti, Encrenaz et al., 2013; Encrenaz, 2014). De fait, les observations avec les télescopes HST et *Spitzer* ont montré que le bruit n'était pas dominé par le bruit de photon mais par les bruits instrumentaux, que l'on nomme ici **systématiques instrumentales**. Ces systématiques instrumentales prennent la forme de bruits colorés (Pont et al., 2006) et proviennent principalement de la chaîne de détection qui permet de convertir les photons reçus par le télescope en signal électronique. Les instabilités temporelles venant de l'instrument, directement liées à la méthode d'acquisition du signal électronique dans la chaîne de détection, altèrent le signal-sur-bruit et requièrent une attention particulière. De fait, la problématique de la stabilité temporelle des télescopes et instruments est l'un des facteurs limitant de l'observation d'exoplanètes en transit. Toute instabilité de pointage du télescope ou toute variabilité temporelle de l'instrument (par exemple des variations de température ou de tensions d'alimentation de l'instrument) pendant l'observation peuvent affecter la courbe de lumière. Ainsi, une observation spatiale d'atmosphère d'exoplanète n'est pas uniquement dépendante des variations photoniques très faibles que nous souhaitons détecter mais également du signal-sur-bruit et de la stabilité temporelle. À titre d'exemple, la Fig. 1.20 présente la courbe de lumière photométrique brute de la cible HD 189733b obtenue avec *Spitzer* IRAC à $4.5 \mu\text{m}$ (Knutson, Lewis et al., 2012). La courbe de lumière présente de fortes variabilités temporelles liées aux non-uniformités de la réponse intra-pixel (voir Ingalls, Krick, Carey, Laine et al., 2012), couplées à un échantillonnage de la fonction d'étalement du point ne suivant pas le critère de Shannon (voir Sect. 2.4.2 du Chap. 2) et de fortes instabilités de pointage du télescope.

Bien que sa stabilité de pointage soit excellente, HST présente d'autres inconvénients de stabilité liés à son orbite autour de la Terre : les courbes de lumière d'exoplanètes présentent des interruptions régulières ainsi que des dérives en flux. La Fig. 1.21 présente la courbe de lumière blanche des données spectroscopiques HST WFC3 de la cible WASP-121b (Evans, Sing, Kataria et al., 2017).

Comme le démontrent les Fig. 1.20 et 1.21, un travail minutieux de caractérisation du signal-sur-bruit et de la stabilité est nécessaire pour garantir des observations fiables. De fait, ce travail doit se faire en amont pour Ariel, qui vient de passer la *Preliminary Design Review* (PDR) avec succès, et en aval pour JWST, dont les performances sont aujourd'hui fixées et l'enjeu repose donc sur notre capacité à extraire le signal des données brutes.

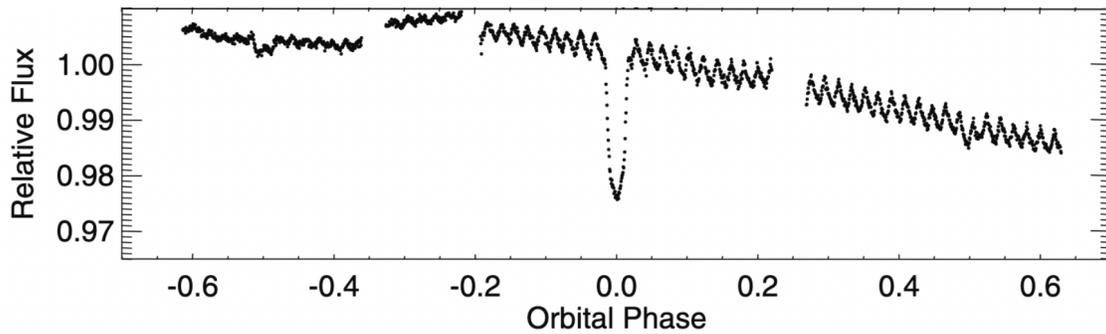


FIGURE 1.20 – Courbe de lumière brute des données photométriques obtenues avec *Spitzer* IRAC à $4.5 \mu\text{m}$ de la cible HD 189733b. Figure adaptée de Knutson, Lewis et al., 2012.

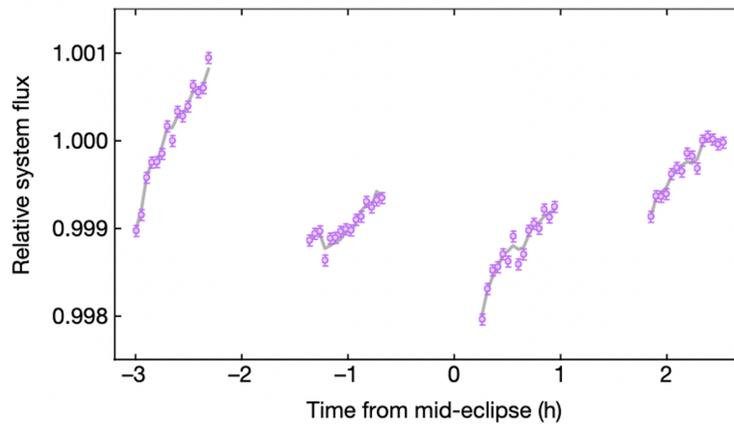


FIGURE 1.21 – Courbe de lumière blanche des données spectroscopiques HST WFC3 de la cible WASP-121b. Figure adaptée de Evans, Sing, Kataria et al., 2017.

1.4 Problématique de la thèse

Ma thèse est consacrée à l'étude d'atmosphères d'exoplanètes transitantes à l'ère du JWST, en particulier avec l'instrument en infrarouge moyen, le Mid-Infrared Instrument (MIRI), et s'inscrit dans une temporalité charnière qui est celle du lancement du JWST (en décembre 2021). Ma thèse se divise donc en plusieurs phases clés. La première est la préparation du traitement des futures données en amont du lancement, la deuxième est l'étude des premières données post-lancement d'étude des performances afin de valider les méthodes de réduction et la troisième est l'étude scientifique des observations reçues au cours de la première année d'exploitation du JWST. **L'objectif de ma thèse est de garantir une préparation robuste à l'arrivée des premières données, une exploitation exhaustive des premières données afin de garantir les meilleures performances instrumentales, d'utiliser cette expertise pour analyser de nombreuses observations d'atmosphères d'exoplanète en infrarouge moyen et de fournir les résultats scientifiques associés.**

1.4.1 De l'instrumentation à l'interprétation scientifique des observations

Dans ce contexte, mon travail s'articule autour de trois grands axes de recherche : l'instrumentation, la réduction des données et l'interprétation scientifique des résultats. De manière générale, la compréhension des instruments nous permettant d'observer est primordiale pour établir les méthodes de réduction et déterminer l'impact des différents choix méthodologiques sur les données finales obtenues. Cette compréhension permet d'assurer une réduction robuste sans introduction de biais dans les données qui pourraient être interprétés comme résultats scientifiques mais qui ne le sont pas. La réduction et l'analyse des données sont deux étapes clés, car elles permettent d'extraire et produire les données finales à partir desquelles l'interprétation scientifique sera faite. De fait, l'interprétation scientifique doit prendre en compte, sous la forme d'incertitudes, les hypothèses liées aux méthodes de réduction, aux méthodes d'ajustement de modèles et également aux modèles eux-mêmes qui sont utilisés pour interpréter les résultats. De fait, il est nécessaire de définir la relation non triviale entre les données issues d'un instrument et les modèles permettant l'étude scientifique de ces données. La Fig. 1.22 présente mes principales contributions de thèse suivant ces trois principaux axes de recherche.

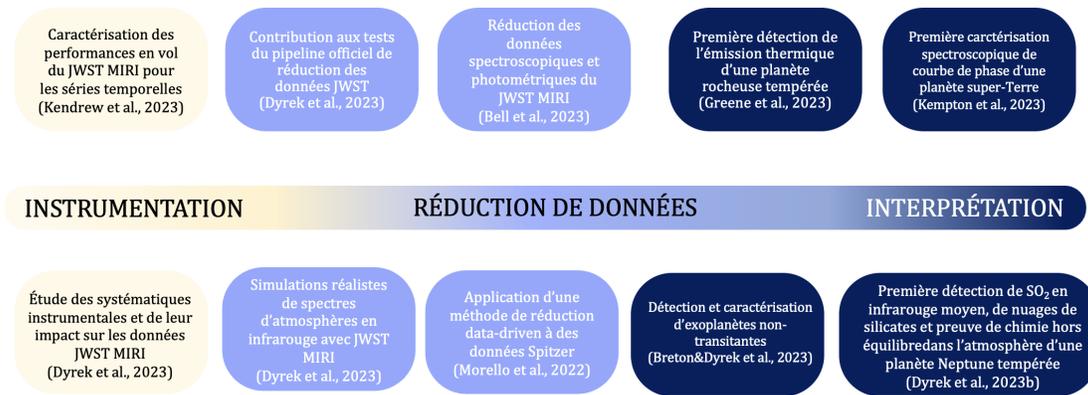


FIGURE 1.22 – Les trois principaux axes de recherche : l'instrumentation, la réduction des données et l'interprétation des résultats.

1.4.2 Organisation du manuscrit

Ce manuscrit s'organise comment s'ensuit. Le Chapitre 2 porte sur l'élaboration de simulations d'observations d'atmosphères d'exoplanètes à l'aide du Mid-InfraRed Instrument (MIRI) du JWST (à l'époque encore en attente de son lancement) et de son spectromètre basse résolution (LRS). L'objectif principal de ces simulations est de permettre à la communauté de valider les méthodes de réduction de données et de prédire les détections moléculaires. Le Chapitre 3 présente l'étude des performances en vol du LRS de MIRI après le lancement du JWST. En particulier, ce travail s'appuie sur le premier transit exoplanétaire observé par MIRI, celui de la Super-Terre L168-9b, choisie comme cible pour l'étude des performances. Le Chapitre 4 présente l'analyse scientifique des courbes de lumières photométriques et spectroscopiques d'atmosphères d'exoplanètes, des géantes gazeuses aux rocheuses tempérées. Le Chapitre 5 présente les travaux annexes de la thèse, la conclusion et les perspectives. Les articles première auteure, les articles avec une contribution principale ainsi que les articles de consortiums publiés pendant la thèse sont joints au manuscrit.

CHAPITRE 2

Préparer l'arrivée des données JWST, l'apport des simulations

Sommaire

2.1	Introduction	66
2.2	Le spectro-imageur infrarouge MIRIm	67
2.2.1	Le plan focal	68
2.2.2	Le spectromètre basse résolution ou LRS	69
2.2.3	L'architecture du détecteur	70
2.2.4	Le mode de lecture du détecteur	70
2.2.5	Les effets détecteur à prendre en compte	72
2.3	L'enjeu de la stabilité : les effets de persistance	75
2.3.1	La nature des effets de persistance	77
2.3.2	Inférer des modèles de persistance à partir de tests au sol	78
2.4	La chaîne de simulation	81
2.4.1	Structure du pipeline de simulation	83
2.4.2	Le principe de la conversion des photons en signal électronique	83
2.4.3	Les outils utilisés	87
2.4.4	Le package MIRISim-TSO	89
2.5	Des simulations pour préparer l'arrivée des données : résultats et applications	90
2.5.1	Images spectrales et courbes de lumière	91
2.5.2	Le spectre atmosphérique	93
2.5.3	Évaluation des performances de la chaîne de simulation	93
2.5.4	Applications des simulations	96
2.6	Conclusion et perspectives	100

“Nous sommes le 7 [décembre], je n’ai pas eu le temps d’écrire avant. Le 5 au matin (tôt), nous partons de Cayenne pour aller à Cacao, ville située plus à l’ouest, dans les terres. Sur la route, je constate que la Guyane est bien plus vallonnée que ce que j’imaginai. Je trouve cela surprenant, je ne sais pas vraiment pourquoi. Le paysage me rappelle de plus en plus le Brésil, la végétation est extrêmement dense et se déverse sur les routes. En fait, les routes goudronnées sont le seul moyen d’accéder à Cacao. Sans elles, la végétation reprendrait le dessus et l’accès à la ville serait perdu. Nous arrivons à Cacao vers 9h30 et prenons la direction du marché (secondaire). La ville de Cacao a deux marchés. Aujourd’hui, nous animons des ateliers au milieu des vendeurs, des acheteurs, des fruits et des légumes. Je précise qu’il s’agit de notre premier jour de travail, nous ne savons pas vraiment à quoi nous attendre. Le marché est à moitié couvert. Une partie est abritée sous un carbet. L’autre partie est dehors, ponctuée de tentes, comme il en existe en France métropolitaine. Je suis frappée par plusieurs choses. Sous le carbet, des personnes cuisinent et vendent des plats exclusivement vietnamiens. Ça m’interpelle. On m’explique alors que la guerre du Vietnam a forcé de nombreuses populations à fuir. Les réfugiés, principalement des agriculteurs, se sont installés à Cacao et dans la région. Je fais un petit tour. Je découvre des fruits et des légumes aux couleurs vives, quelle beauté et quelle opulence ! Ce que je vois me rappelle à nouveau le Brésil, je suis ravie de retrouver la sensation de communion avec la nature. J’achète une bouteille de jus de maracuja, une sorte de fruit de la passion, un goût étonnant. J’avoue que c’est surtout rafraîchissant. Il fait chaud et humide. Les animations se passent bien et le public semble très intéressé. Les enfants adorent la fusée Saturne V en Légo. Elle fait plus d’un mètre de haut ! Nous montrons également des maquettes de planètes et des vraies météorites ! C’est éprouvant d’attirer le public et de lui parler en continu. Le temps passe vite. Nous animons deux ou trois heures, jusqu’à l’heure du repas. Mon premier repas local est un plat vietnamien : une salade de nems et une brochette de saucisses à la citronnelle. C’est excellent. Après le repas, nous ne prenons pas le temps de nous reposer. Nous décidons de descendre au marché principal, ce qui nous fait une petite marche d’une dizaine de minutes sous la pluie. La végétation est magnifique et les maisons aussi. Je vois des plantes que je n’avais jamais vues. A peine arrivés sur le marché principal, nous décidons d’aller au musée des insectes. J’avoue ne pas être rassurée, entourée de tous ces insectes morts ET vivants. Des cafards, des scorpions, des miganes et j’en passe. Mon appréhension disparaît très vite à l’écoute du guide. Il est passionné. Drôle de passion, je préfère les planètes. Le guide nous parle de la Guyane et de son histoire, allant des pièces de monnaie à la richesse de la faune et la flore, en passant bien évidemment par la diversité des insectes. Tout cela me plaît ! J’évite judicieusement la serre à papillon, j’avoue que la version volante des insectes ne m’inspire pas. La journée n’est pas finie ! Nous prenons la route de retour vers Cayenne et nous nous arrêtons à Matoury. Je fais une sieste dans le van. Nous arrivons à la brasserie Jeune Gueule, une brasserie moderne dans la forêt, où nous donnons une conférence à des passionnés d’astronomie. Après la conférence, nous avons le droit à des bières et à un repas vietnamien. Nous décidons de prendre la route du retour, il est tard. Je prends le volant du van pour la première fois. Il est vraiment facile à conduire, j’apprécie ce moment de tranquillité dans la nuit. Nous rentrons à l’hôtel à Cayenne, morts de fatigue. Nous allons nous coucher. Sans trop de cérémonies, bonne nuit ! Ah j’oubliais, les croissants de Guyane sont excellents. J’en ai mangé hier.”

— Extrait de mon Journal de bord “La Guyane vers les étoiles”, *Le marché de Cacao*, 7 décembre 2021



2.1 Introduction : pourquoi simuler la spectroscopie de transit avec JWST/MIRI?

Le James Webb Space Telescope, dont la conception a commencé avant le lancement de Hubble en 1996, avait plusieurs objectifs initiaux : l'observation des premières étoiles et galaxies, la ré-ionisation de l'Univers à la sortie de l'âge sombre, l'observation de l'assemblage des galaxies et l'observation de la naissance des étoiles et des systèmes protoplanétaires. Dans le Chap. 1, nous avons présenté quelques dates clés dont la première détection d'une exoplanète orbitant une étoile comme le Soleil en 1995 (Mayor et Queloz, 1995) et l'observation du premier transit exoplanétaire en 2002 (Charbonneau, Brown, Noyes et al., 2002). Ainsi, lors des premières définitions de la mission spatiale JWST, les exoplanètes n'étaient pas encore découvertes. Elles ne constituaient pas un objectif scientifique de la mission, qui ont ensuite été revus pour inclure l'observation des systèmes exoplanétaires. Ainsi, le cahier des charges de l'instrument MIRI ne prend pas en compte les besoins en stabilité et sensibilité que requiert l'étude d'atmosphères d'exoplanètes. En effet, les signaux atmosphériques recherchés vont de quelques pourcents à l'ordre de grandeur du ppm. Grâce à son unique sensibilité, JWST est amené à observer des atmosphères de planètes de faible masse comme les rocheuses tempérées de la taille de notre Terre, dont le signal photonique est de l'ordre du ppm. Rappelons que l'observation des atmosphères par méthode des transits dépend de deux critères principaux :

1. la **stabilité temporelle** du télescope et de l'instrument pendant l'observation de la courbe de lumière,
2. le **rapport signal-sur-bruit** de l'instrument pendant l'observation de la courbe de lumière et l'acquisition de spectres.

Tout d'abord, la stabilité de pointage du JWST est prévue pour être de 4 μarcsec (mas) soit deux ordres de grandeur en dessous de celle du télescope *Spitzer*. Elle devrait être du même ordre de grandeur que celle de HST. De manière générale, la stabilité de pointage du JWST n'apparaît pas comme étant le facteur limitant pour l'observation des atmosphères par méthode des transits, en particulier pour l'instrument MIRI pour lequel l'échantillonnage de la fonction d'étalement du point respecte de critère de Shannon à partir de 7 μm (voir Sect. 2.4.2). Le rapport signal-sur-bruit et donc le bruit lié aux systématiques instrumentales est un facteur sur lequel nous devons nous concentrer. Rappelons que le bruit de photon, lié intrinsèquement à l'acquisition de photons, est le bruit minimum observable. L'objectif ultime des observations est donc la limitation par ce bruit de photon. Dans le cas de l'étude des signaux atmosphériques, les systématiques instrumentales tendent à dominer les observations. Elles sont au moins du même ordre de grandeur voire un ordre de grandeur au-dessus des profondeurs de transit ou d'éclipse que l'on cherche à détecter avec JWST qui sont au maximum de 2 % et au minimum, deux ordres de grandeur en dessous (Martin-Lagarde, 2020). En conséquence, les signaux atmosphériques extrêmement faibles sont perdus dans les systématiques instrumentales. L'enjeu réside alors dans la capacité des scientifiques à mettre au point des méthodes de réduction robustes pour en extraire le signal atmosphérique recherché.

Dans le contexte de préparation à l'arrivée des futures données, il est nécessaire de **démontrer la faisabilité de l'observation d'atmosphères d'exoplanètes avec JWST** et de **tester en amont la robustesse et les performances des méthodes de réduction**. Pour cela, seules des simulations réalistes, qui prennent en compte les variations temporelles fines des systématiques instrumentales, peuvent préparer la communauté à la réduction des données JWST et à leur future interprétation scientifique. Les simulations actuelles au sein de la communauté sont constituées pour la plupart de modèles d'atmosphères auxquels sont ajouté un bruit de photon théorique ou une valeur moyenne de bruits blancs additifs (Beichman et al., 2014; Greene, Line et al., 2016; Rocchetto et al., 2016; Mollière, Van Boekel et al., 2017; Batalha, Lewis et al., 2018). A titre d'exemple, le simulateur *PandExo* (Batalha, Mandell et al., 2017) repose sur le même principe et ajoute du bruit blanc ainsi que le fond observationnel et son bruit photonique associé. Le simulateur *Pandemia* (Pontoppidan et al., 2016) encapsulé dans l'outil *Exposure Time Calculator* prend en compte l'instrument et la structure de la chaîne de détection dans les simulations mais ne fournit qu'un rapport signal-sur-bruit intégré sur la durée d'observation. Aucun de ces simulateurs ne prend en compte les variabilités temporelles de l'instrument et leur impact sur la détectabilité des signatures moléculaires dans les

atmosphères. Par ailleurs, pour tester les méthodes de réduction de données, il est nécessaire de produire des simulations conformes au format des futures données dans l'unité de sortie de la chaîne de détection.

J'ai donc créé des simulations réalistes, conformes au format des futures données du JWST, qui prennent en compte l'ensemble de la chaîne de détection de MIRI ainsi que les bruits temporels et biais susceptibles d'altérer les observations. Les simulations produites ont été fournies à la communauté dans le cadre de la préparation à l'arrivée des données, ont permis de tester les méthodes de réduction et de prouver la détectabilité de signatures moléculaires par méthode des transits pour différents types de planètes, allant des Jupiter chaudes aux rocheuses tempérées. Dans ce chapitre, je commencerai par présenter l'architecture et le fonctionnement de l'instrument MIRI, puis je fournirai une liste exhaustive de l'ensemble des systématiques instrumentales qui affectent le signal-sur-bruit et la stabilité des observations. Dans un second temps, j'introduirai la chaîne de simulation mise en place ainsi que les outils associés. Enfin, je présenterai les performances des simulations, les résultats obtenus ainsi que l'apport à la communauté dans le cadre des programmes de l'*Early Release Science* (ERS) et du temps garanti d'observation (ou *Guaranteed time observation*, GTO en anglais) du JWST.

2.2 Le spectro-imageur infrarouge MIRIm

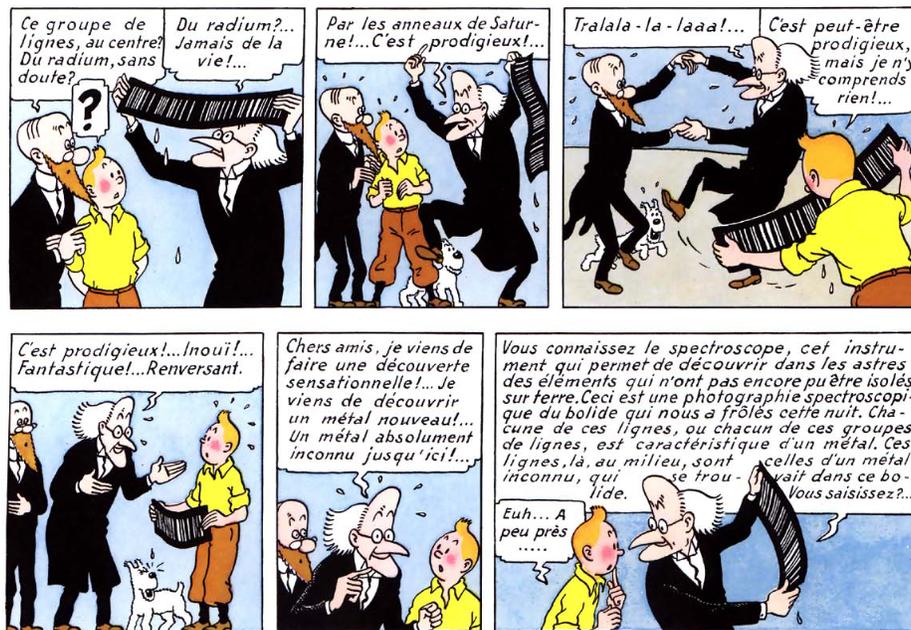


FIGURE 2.1 – Définition d'un spectroscopie selon le personnage fictif, Professeur Calys. Figure issue des *Aventures de Tintin* (Hergé et Hergé, 1984).

L'instrument MIRI du JWST est un spectroscopie et imageur couvrant une très vaste gamme de longueurs d'onde allant de 5 à 28.5 μm . Il s'agit d'un instrument spatial intégralement en infrarouge moyen et activement refroidi à ~ 7 K. Il se compose de deux sous-instruments : le spectromètre moyenne résolution à intégrale de champ (MRS) et le spectro-imageur (MIRIm). MIRIm est composé d'un imageur, de quatre coronographe et d'un spectromètre basse résolution (le *Low Resolution Spectrometer* ou LRS) d'une résolution de $R \sim 100$ à 7.5 μm , allant

de 5 à 12 μm . Le mode du LRS que nous utilisons est appelé *slitless* ou sans fente. Il existe un autre mode du LRS, le *slit*, qui lui possède une fente qui est située en bas du plan focal, à droite du coronographe à 10.65 μm de l'imageur. Ce mode n'est pas utilisé (à l'heure à laquelle j'écris ma thèse) dans le cadre d'observations en séries temporelles car la stabilité spectro-photométrique est susceptible d'être impactée par les mouvements du télescope et donc de l'image produite dans la fente. De fait, le LRS *slitless* a été mis en place pour éviter ce problème. Le spectro-imageur MIRIm a été conçu et assemblé au CEA Paris-Saclay qui en a la maîtrise d'oeuvre, en collaboration avec d'autres laboratoires français sous la supervision du CNES. De manière générale, MIRI est l'une des deux contributions instrumentales européennes à la mission JWST (avec l'instrument NIRSPec, développé dans l'industrie). Concentrons-nous à présent sur la structure du spectro-imageur MIRIm. La Fig. 2.2 présente une image du modèle de test du spectro-imageur MIRIm et une image du modèle de vol du détecteur. L'image du spectro-imageur nous permet de décrire son architecture. La lumière entre par le plan focal pour ensuite traverser un ensemble d'optiques jusqu'à la roue à filtre. Cette roue à filtre se compose d'un ensemble de filtres pour l'imagerie à bande spectrale large ou la coronographie et d'un assemblage de prismes pour la spectroscopie basse résolution. Après avoir traversé la roue à filtre, la lumière est focalisée sur le détecteur, dont nous voyons la partie arrière sur l'image de gauche.

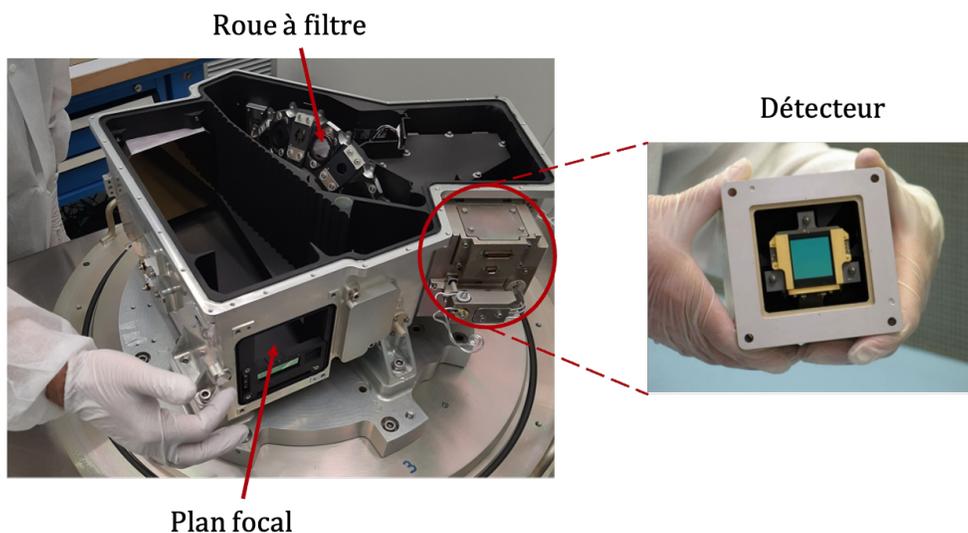


FIGURE 2.2 – *À gauche* : modèle de test de MIRIm. Le faisceau de lumière traverse le plan focal puis les optiques, passe à travers la roue à filtre et arrive sur le détecteur. *À droite* : image du détecteur de vol de MIRIm. Crédit : CEA pour l'image de gauche et NASA pour l'image de droite.

2.2.1 Le plan focal

Le plan focal de MIRIm (Kendrew, Scheithauer et al., 2015; Wright, Wright et al., 2015; Ressler, Sukhatme et al., 2015), présenté sur la Fig. 2.3, est divisé en plusieurs sous-ensembles, que l'on nommera subarray. Quatre subarray à gauche sont alloués à la coronographie (masques de 10.65, 11.4, 15,5 et 23 μm) qui sont le coronographe de phase à 4 quadrants (masque supérieur), mis au point pour le JWST par une équipe de chercheurs de l'Observatoire de Paris. Ces coronographes appelés 4QPM (Four-Quadrant Phase Masks), ainsi que le coronographe de Lyot, permettent d'atténuer le flux de l'étoile et d'observer des objets angulairement très proches. L'imageur se situe à droite des coro-

nographiques, il s'agit d'un subarray rectangulaire dont le champ de vue est de 113 secondes d'arc par 74 secondes d'arc. La spectroscopie basse-résolution sans fente (LRS) est réalisée en haut à gauche. L'imageur lui-même peut être utilisé partiellement et fractionné en sous-ensembles. Il existe quatre subarrays supplémentaires que l'on peut utiliser pour de l'imagerie, que nous nommons SUB256, SUB128, SUB64 et BRIGHTSKY qui permettent de sélectionner une zone du plan focal. Ces subarrays sont utilisés pour l'imagerie des sources très brillantes (Ressler, Sukhatme et al., 2015). Précisons que le détecteur de MIRIm est une technologie Silicium dopée à l'Arсениe Si:As de 1024 par 1024 pixels actifs. Nous reviendrons sur la technologie du détecteur et son fonctionnement dans la Sect. 2.2.3. Le champ de vue d'un pixel du détecteur est de 0.11 seconde d'arc (Rieke et al., 2015; Wright, Wright et al., 2015).

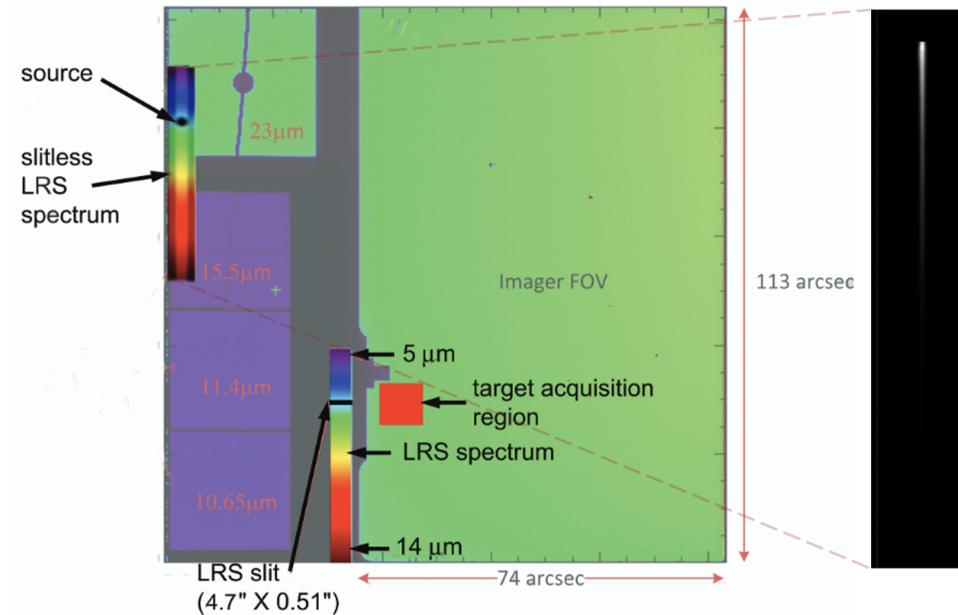


FIGURE 2.3 – *À gauche* : Plan focal de MIRIm présentant les champs de vue de l'imageur (à droite), des quatre coronagraphes (à gauche) des spectromètres basse résolution ou LRS avec (au milieu en bas) ou sans fente (en haut à gauche). Dans cette thèse, nous nous concentrerons principalement sur le LRS sans fente en haut à gauche. *À droite* : Exemple de spectre produit par le LRS (issu de simulations). Figure adaptée de Kendrew, Scheithauer et al., 2015.

2.2.2 Le spectromètre basse résolution ou LRS

Le LRS permet d'obtenir des spectres pour des longueurs d'onde comprises entre 5 et 12 μm (Kendrew, Scheithauer et al., 2015). Ces longueurs d'onde sont dispersées grâce à un ensemble de prismes Ge/ZnS montés sur la roue à filtre dont l'efficacité totale de transmission est de 80%. Ensuite, la lumière est projetée sur le détecteur. La résolution spectrale est linéaire, elle dépend de la longueur d'onde et varie entre 40 à 5 μm et 160 à 10 μm mais la dispersion ne l'est pas. En d'autres termes, les longueurs d'onde comprises entre 3 et 4 μm arrivent sur un même pixel, créant ainsi un repliement du spectre à courtes longueurs d'onde. La dispersion entre 5 et 12 μm est non linéaire également mais les longueurs d'onde ne se recouvrent pas. L'une des contraintes liées à la spectroscopie sans fente est la présence du fond observationnel (ou background) qui est également présent dans chacune des observations. Ce fond doit être soustrait pour éviter toute contamination du spectre de l'objet observé. Enfin, le LRS couvre une zone rectangulaire du détecteur de 476 par 72 pixels.

2.2.3 L'architecture du détecteur

Bien que la théorie liée à la détection de photons ne soit pas un aspect central de ma thèse, il est nécessaire de poser quelques bases liées au fonctionnement du détecteur infrarouge de MIRIm et sa technologie associée. Rappelons que le détecteur de MIRIm est une technologie Silicium dopée à l'Arsenic Si :As (Rieke et al., 2015) de 1024 par 1024 pixels actifs. Pour cette explication, nous nous appuyons sur la Fig. 2.4. Les photons incidents entrent dans le substrat de Silicium d'une épaisseur de 25 à 35 μm , électriquement neutre (zone de droite de la figure a.) puis traversent le contact transparent et atteignent la zone active de Silicium dopée à l'Arsenic de 3 à 4 μm d'épaisseur. Dans cette zone, la couche active absorbe les photons et permet ainsi aux électrons de passer de la bande de valence à la bande de conduction. Sous la zone de détection (à gauche sur la figure a.), une fine couche de blocage fait le lien avec les billes d'indium (ou *metallization* sur la figure a.). Ces billes sont le contact entre les pixels de détection et les circuits de lecture du détecteur (voir la Fig. 2 de l'article de Rieke et al., 2015). Au-dessus de chaque bille d'indium, nous pouvons trouver la jonction polarisée qui permet l'attraction des photoélectrons vers ces billes (figure b.). Le signal généré par ces photoélectrons est ensuite lu grâce à l'électronique de lecture.

Le détecteur étant refroidi à ~ 7 K, les fuites thermiques dues au passage d'électrons dans la bande de conduction par énergie thermique sont extrêmement faibles (voir Sect. 2.2.5.1). Il n'y a pas de limite physique entre les pixels, la séparation se fait uniquement au niveau des jonctions polarisées au-dessus des billes d'indium. Cela amène à une possibilité de diffusion inter-pixel au niveau des quatre pixels autour de celui recevant les photons. Un électron peut donc se déplacer d'un pixel à un autre. Par ailleurs, les colonnes du détecteur ont une proportion de pixels morts de 0.1%. Nous appelons efficacité quantique d'un détecteur la capacité de conversion des photons en électrons. Ce facteur dépend de la longueur d'onde et s'exprime en $e^- \text{ photon}^{-1}$. Ce facteur est souvent couplé à la capacité de transmission du détecteur et le produit des deux est l'efficacité de conversion photon-électron (*photon conversion efficiency* en anglais ou PCE). Entre 5 et 10 μm , le PCE vaut à peu près 0.25 et varie légèrement avec la longueur d'onde. De plus amples explications sur la technologie du détecteur de MIRIm sont fournies dans les articles de Love et al., 2005; Rieke, 2003; Rieke, 2007; Gáspár et al., 2021. Toutes les propriétés du détecteur sont fournies dans l'article de Rieke et al., 2015.

2.2.4 Le mode de lecture du détecteur

Le mode de lecture du détecteur repose sur un système qui s'appelle le mode de lecture non-destructif (Love et al., 2005; Rieke, 2003; Rieke, 2007; Rieke et al., 2015; Kendrew, Scheithauer et al., 2015). Les charges sont accumulées dans une capacité de l'électronique de lecture. La quantité maximale de photoélectrons que l'on peut accumuler dans cette capacité est le niveau de saturation. Ainsi, cette capacité doit être régulièrement vidée, de préférence avant d'atteindre la saturation. Pour ce faire, la quantité de photoélectrons présente dans la capacité est lue par l'électronique de lecture à intervalles réguliers, que l'on appelle *frame time* de manière non-destructive : nous laissons les électrons s'accumuler sans vider la capacité. Après un temps défini par la saturation, que l'on appelle *integration time* la capacité est vidée entièrement par ce que nous appelons un *reset*. Dans le cas du MIRI LRS, nous en effectuons deux. Après les deux resets, les photoélectrons peuvent s'accumuler à nouveau et ainsi répéter ce schéma de lecture non-destructive. L'ensemble des intégrations ou rampes au cours du temps forment le temps total d'observation ou *exposure time*. Ce mode de lecture est présenté sur la Fig. 2.5. De manière plus spécifique, la lecture consiste à charger une capacité du circuit associé qui résulte en la génération d'un signal en V, qui correspond à une quantité ΔV entre un niveau de tension de base et le niveau de la capacité. La tension en V est ensuite amplifiée et convertie en un signal numérique en *digital number* (ou DN) avec un gain donné exprimé en $e^- \text{ DN}^{-1}$. Chaque reset permet de revenir à une tension de base à laquelle on ajoute un *offset* électronique. Deux lignes du détecteur sont liées par un même circuit de lecture qui lit et reset les pixels deux à deux. Cette particularité du circuit a pour effet de créer des différences d'offset entre les lignes paires et impaires. Enfin, le circuit de lecture est source de nombreuses non-linéarités entre la tension appliquée au niveau de la jonction et celle en sortie correspondant à la charge de la

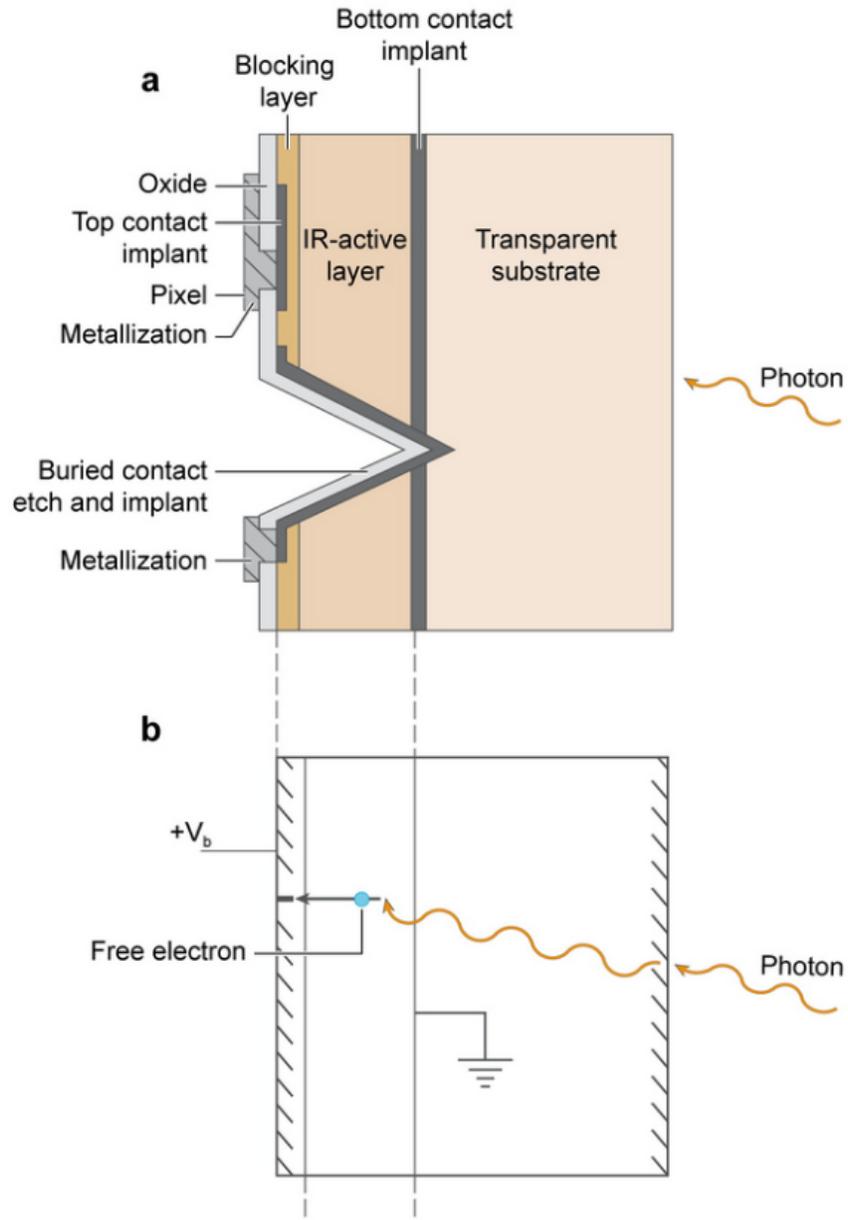


FIGURE 2.4 – Architecture d'un détecteur photoconducteur Si :As (Silicium doppé à l'Arsenic). Figure adaptée de Rieke, 2003; Rieke, 2007.

capacité. Des non-linéarités de la conversion analogique-numérique apparaissent selon le niveau de signal dans le pixel et le gain appliqué. L'intégration est également non-linéaire majoritairement à cause de la charge de la capacité et du comportement du détecteur proche de la saturation, susceptible de subir des fuites inter-pixels. Le reset est

également source de phénomènes transitoires qui peuvent altérer le début d'une intégration. L'ensemble des bruits, biais et non-linéarités est présenté dans la Sect. 2.2.5. Voici quelques caractéristiques de la lecture du LRS de MIRI telles qu'elles étaient connues **avant le lancement** (Kendrew, Scheithauer et al., 2015) :

1. Le subarray du LRS sur le plan focal est plus communément appelé *SLITLESSPRISM*,
2. Le mode de lecture non-destructif par défaut est appelé *FASTRI*,
3. Le frame time du mode de lecture *FASTRI* est de 0.159 seconde (Kendrew, Scheithauer et al., 2015),
4. La capacité du détecteur est de 250000 électrons (Rieke et al., 2015),
5. Le gain vaut $5,5 \text{ e}^- \text{ DN}^{-1}$ (Ressler, Sukhatme et al., 2015),
6. L'offset après un reset est de 10000 électrons et vaut 3000 électrons après deux resets (Argyriou, 2021),
7. A titre d'exemple, une intégration d'une observation d'une source étoile-planète est échantillonnée entre quelques frames et quelques centaines de frames, conduisant à des temps d'intégration de quelques secondes à dizaines de secondes. La durée d'exposition ou d'observation est quant à elle définie par l'évènement que l'on souhaite observer (i.e. un transit, une éclipse ou une courbe de phase).

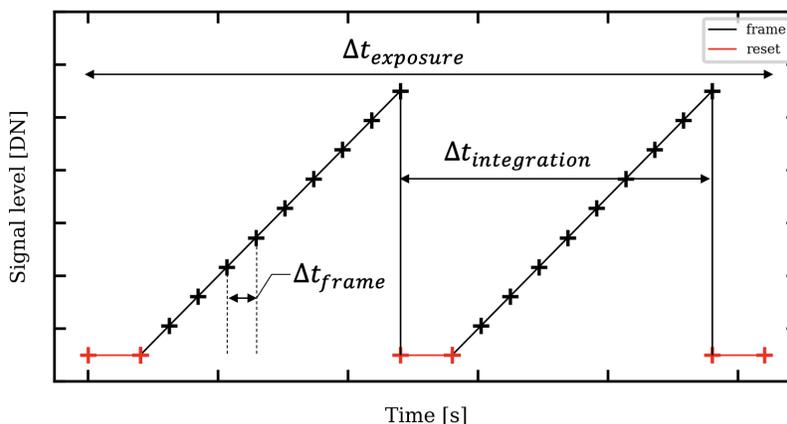


FIGURE 2.5 – Mode de lecture non-destructive *FASTRI* du détecteur du spectro-imageur MIRI. Chaque intégration (ou rampe) est composée de deux resets et d'une série de frames. Le nombre de frames est déterminé par la magnitude de la source et le niveau de saturation des pixels du détecteur. Une exposition ou observation est un ensemble de plusieurs intégrations. Ici, nous présentons deux intégrations consécutives. Figure adaptée de Ressler, Sukhatme et al., 2015.

2.2.5 Les effets détecteur à prendre en compte

Tout détecteur présente des imperfections qui introduisent des bruits, biais et non-linéarités dans la conversion des photons en électrons puis dans la lecture et la conversion en DN. L'ajout de certains de ces effets dans les simulations est nécessaire pour préparer les méthodes de réduction à leur prise en compte. Précisons que ces bruits peuvent impacter le détecteur spatialement (à l'échelle du pixel ou de plusieurs rangées de pixels) ou temporellement (sur la durée d'une intégration).

2.2.5.1 Le courant d'obscurité

Le courant d'obscurité (ou *dark current* en anglais) est un signal résiduel généré au sein du détecteur par agitation thermique des atomes qui permet aux électrons du semi-conducteur de passer spontanément dans la bande de

conduction sans contribution des photons. La quantité de charges liées au courant d'obscurité qui s'accumule dans la capacité augmente linéairement avec le temps et s'accompagne d'un bruit qui suit une loi de Poisson. Ce courant est susceptible de saturer les observations, il existe donc deux possibilités pour le minimiser : réduire les temps de pose ou diminuer la température du détecteur. La nécessité de réduire le courant d'obscurité est la raison pour laquelle MIRIm est refroidi activement à ~ 7 K (Ressler, Cho et al., 2008; Rieke et al., 2015). Pour le mesurer, il est nécessaire d'obstruer le détecteur afin de ne générer que des charges issues de l'agitation thermique et non du fond de ciel ou d'une source. Le courant d'obscurité du détecteur de MIRIm vaut $0.2 \text{ e}^- \text{ s}^{-1}$. Il s'agit là de la valeur issue de tests au sol avant le lancement. Des tests au sol ont également permis de générer des cartes de courant d'obscurité en DN, par pixel et par frame sur une durée d'intégration donnée. Ce courant d'obscurité doit être soustrait lors de la réduction des données.

2.2.5.2 Les pixels morts et les pixels chauds

Certains pixels sont défaillants comme les pixels morts ou les pixels chauds. Les pixels morts (noirs sur une image) ne peuvent produire de signal et les pixels chauds (blancs sur une image) sont saturés par le courant d'obscurité qui est anormalement élevé. La quantité de pixels défaillants est fournie comme spécification au constructeur et peut être testée en laboratoire en effectuant une carte de l'imageur et du LRS. De même, ces pixels morts et chauds devront être exclus des calculs lors de la réduction des données pour éviter toute erreur de calibration du signal de sortie.

2.2.5.3 Le bruit de lecture

Le bruit dit de lecture est dans notre cas le bruit de la chaîne électronique qui comprend le bruit thermique des fluctuations des charges aux bornes de la capacité, le bruit d'amplification et le bruit de quantification (de la conversion analogique-numérique) dont nous évaluons une valeur moyenne (RMS) (McMurtry et al., 2005). Lors des tests au sol, le bruit de lecture a été mesuré en réglant la tension de polarisation du détecteur à 0 V de manière à ce que tout courant provenant de la couche détectrice, celle présentée sur la Fig. 2.4, soit éliminé et que seul le bruit de tension des amplificateurs de sortie et de l'électronique soit mesuré. Rappelons que les courants provenant de la couche détectrice sont le photo-courant ou le courant d'obscurité. La valeur RMS mesurée au sol du bruit de lecture est de 14 électrons (Rieke et al., 2015; Ressler, Sukhatme et al., 2015) et tend à dominer à très faibles flux et au début d'une intégration pour des pixels situés dans le fond observationnel. A titre d'exemple, l'observation de galaxies très lointaines peut être dominée par le bruit de lecture en début d'intégration.

2.2.5.4 Les non-linéarités de la rampe

Lors d'une intégration, la rampe obtenue par lectures non-destructives est non-linéaire. Lorsque la non-linéarité n'est pas correctement prise en compte lors de la réduction de données, cela peut introduire des erreurs de calibration absolue et donc d'estimation du niveau de flux dans chaque pixel.

Le reset anomaly et le Reset Switch Charge Decay (RSCD)

Le reset du détecteur s'accompagne d'un effet transitoire qui impacte les premières frames de l'intégration suivante ce qui crée une non-linéarité en début de rampe (Rauscher, Fox et al., 2007; Ressler, Cho et al., 2008; Ressler, Sukhatme et al., 2015) que l'on mesure uniquement lorsque le détecteur est dans l'obscurité. Le reset anomaly est causé par la présence de charges piégées dans le détecteur (possiblement à la surface, au niveau des billes d'indium) même après reset et sans illumination. La cause est encore non identifiée. Lorsque le détecteur est illuminé, les problématiques liées au reset sont appelées le Reset Switch Charge Decay (RSCD) qui sont responsables d'une

augmentation plus forte de la rampe en début d'intégration (à partir de la seconde intégration) et donc de non-linéarités. Par ailleurs, le reset se fait par paire de rangées de pixels. Par exemple, la première rangée est lue, ensuite la deuxième, puis le reset est appliqué aux deux rangées. Cela crée des effets de parité sur les rampes. Par exemple, le niveau de signal d'une rampe issue d'une ligne impaire est plus élevé que celui d'une rampe issue d'une ligne paire. Enfin, le reset provoque une baisse de l'offset en début de rampe, le point de départ des rampes serait donc différent pour la première intégration et les suivantes. L'ajout du second reset dans les rampes de MIRIm est en partie liée à cette problématique et corrige les erreurs d'offset en début de rampe après 2 resets (Argyriou, 2021).

Le first et last frame effect

Le first et last frame effect sont une conséquence directe du reset du détecteur et présentent des effets de parité. Comme son nom l'indique, cet effet impacte la première et la dernière frame d'une intégration qui sont systématiquement plus faibles que les valeurs empiriques évaluées par extrapolation linéaire de la rampe. La valeur de la dernière frame est encore plus faible pour les lignes impaires dont la tension de reset est influencée par celle de la ligne adjacente (Ressler, Sukhatme et al., 2015; Argyriou, 2021).

La non-linéarité de l'accumulation de charges

De manière générale, la réponse du détecteur diminue lorsque l'accumulation de charge augmente, ce qui a pour effet de créer une déviation de la linéarité de la rampe qui se manifeste par une diminution de la valeur de la pente en fonction du temps d'intégration. La rampe peut donc être modélisée par un polynôme d'ordre 2 (Rieke et al., 2015; Argyriou, 2021). Par abus de langage, nous appelons "non-linéarité" de la rampe celle liée uniquement à l'accumulation de charges bien que de nombreuses autres sources de non-linéarité aient un impact.

La saturation et les fuites inter-pixels

La saturation a lieu lorsque la quantité de charge accumulée dépasse la capacité du détecteur. La valeur issue de tests au sol est de 58000 DN. La rampe atteint alors un plateau, ce qui consiste en une cassure complète de la linéarité. De plus, des fuites de charges inter-pixels ont pour effet d'augmenter la quantité de charges lues par les pixels adjacents aux pixels saturés et donc de créer une autre forme de non-linéarité. Cette fuite de charge commence déjà à partir de 20000 DN, bien avant que le pixel n'ait atteint la saturation (Argyriou, 2021).

Les rayons cosmiques

Les instruments du JWST peuvent être impactés par des particules énergétiques (majoritairement des rayons cosmiques galactiques constitués de protons) qui se retrouvent sur sa trajectoire. Les collisions entre ces particules et les électrons libres du substrat génèrent un grand nombre de paires électron-trou qui créent ponctuellement un surplus de signal qui impacte une frame donnée. L'effet des rayons cosmiques est très localisé spatialement et touche quelques pixels localement, la plupart du temps. Lorsqu'un rayon cosmique impacte le détecteur, la frame concernée subit un saut de signal. La suite de l'intégration continue donc à partir d'un point de départ plus élevé que prévu. Les effets des rayons cosmiques créent donc des cassures de linéarité dans les rampes. Les travaux pré-lancement liés à l'impact des rayons cosmiques sont majoritairement basés sur la caractérisation en vol de l'instrument IRAC de *Spitzer* (Hora et al., 2006; Hagan et al., 2021).

La Fig. 2.6 présente une sélection de rampes issues de la calibration au sol de MIRI qui reflètent l'ensemble des effets de non-linéarités. De plus amples détails sont donnés dans la thèse d'Argyriou, 2021. La raison pour laquelle

nous portons un intérêt très particulier aux non-linéarités des rampes vient de la méthodologie employée pour traiter les rampes : la conversion des rampes en pentes. En effet, la valeur de flux en DN s^{-1} est extraite par les méthodes de réduction par ajustement linéaire de la rampe. Nous devons donc nous assurer que les rampes soient corrigées et linéarisées avant d'appliquer la régression, au risque d'extraire des valeurs de flux erronées. Réciproquement, inclure les non-linéarités dans les simulations permet de tester ces étapes de correction et de nous assurer que les flux obtenus en sortie de la réduction correspondent à ceux en entrée (en considérant une calibration absolue similaire entre l'entrée et la sortie).

2.2.5.5 Le champ plat

Le champ plat (ou *flat field* en anglais) rend compte du caractère non uniforme du signal collecté sur l'ensemble des pixels du détecteur en réponse à une source uniforme. Autrement dit, la réponse du détecteur n'est pas uniforme spatialement. Tout d'abord, la réponse de chaque pixel est différente ce qui crée des uniformités. Par ailleurs, les traitements mécaniques d'amincissement ainsi que les traitements anti-reflets peuvent créer des disparités sous la forme de motifs (comme des cercles concentriques par exemple). Il est donc nécessaire de diviser toute image observée par le champ plat afin de prendre en compte ces disparités de sensibilité.

2.2.5.6 Un bruit total dominé par le bruit de photon

En faisant l'hypothèse que les bruits sont indépendants, le bruit total s'exprime alors comme la somme quadratique des bruits impactant les observations. Ainsi, le bruit total σ_{tot} s'exprime comme

$$\sigma_{\text{tot}} = \sqrt{\sigma_{\text{photon}}^2 + \sigma_{\text{dark}}^2 + \sigma_{\text{read}}^2} . \quad (2.1)$$

où σ_{photon} est le bruit de photon reçu à la fois de la source du fond observationnel, défini dans le Chap. 1, Sect. 1.3.3.1, σ_{dark} est le bruit lié au courant d'obscurité, σ_{read} est le bruit de lecture (soit la somme quadratique du bruit d'amplification et du bruit de numérisation lié à la conversion analogique-numérique). Seul le bruit de photon dépend de la source et donc du nombre de photons reçus sur une durée donnée. Rappelons que les bruits liés au courant d'obscurité et à la lecture sont de l'ordre de grandeur d'un électron ou de la dizaine d'électrons ($14 e^-$). Le fond observationnel prévu pour les observations est de $110 e^- s^{-1}$. Le bruit de photon lié au fond observationnel sur la durée d'une frame (0.159 s) est donc de ~ 4 électrons. En d'autres termes, les pixels du fond ne deviennent dominés par le bruit de photon qu'à partir de ~ 11 frames. Avant cela, c'est le bruit de lecture qui domine. En revanche, des pixels situés dans la trace (zone du détecteur où la lumière de la source est dispersée) reçoivent un niveau de flux bien plus élevé, d'au moins un ordre de grandeur au-dessus du niveau de fond. Le bruit de photon domine donc les intégrations des pixels de la trace dès la première frame. Le signal dit "utile" est donc bien dominé par le bruit de photon. Dans un souci de robustesse des simulations, nous décidons de prendre en compte également le bruit de lecture. Cela permet la prise en compte correcte des barres d'erreurs de chacune des frames pour tous les pixels et donc d'assurer la propagation des erreurs jusqu'à la conversion des rampes en pentes puis de la soustraction du fond.

2.3 L'enjeu de la stabilité : les effets de persistance

L'un des enjeux majeurs de l'observation des exoplanètes en transit est la stabilité temporelle. Comme explicité dans le Chap. 1, plusieurs sources d'instabilité temporelle peuvent impacter les observations : la stabilité de pointage du télescope, l'échantillonnage de la fonction d'étalement du point (ou point spread function, PSF en anglais), les dérives instrumentales dues à la température et donc à l'électronique de lecture et enfin, les effets de persistance.

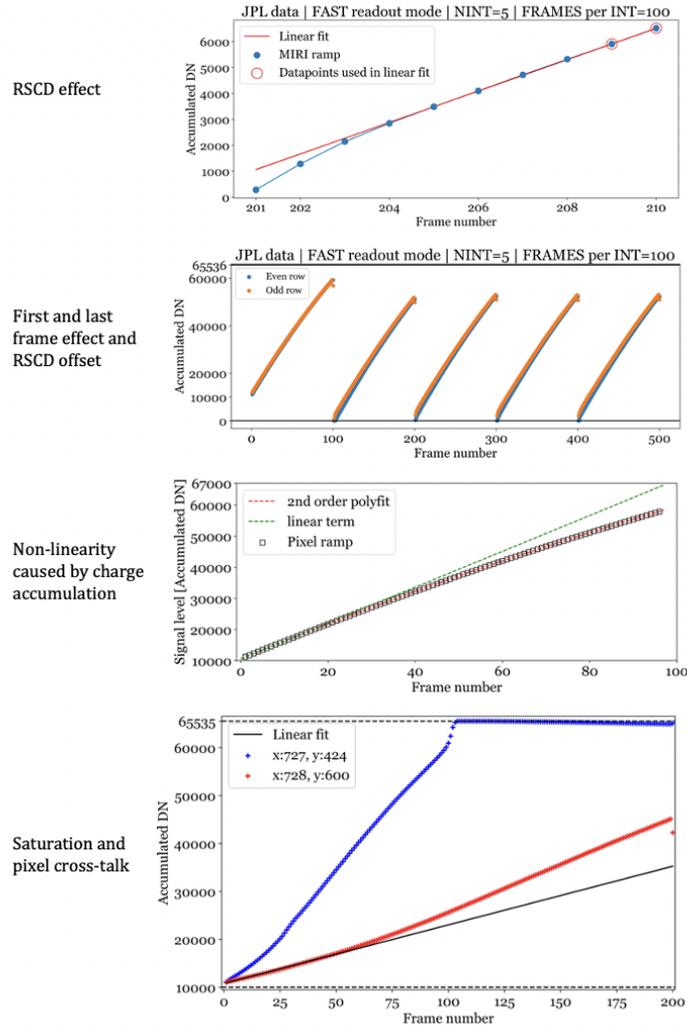


FIGURE 2.6 – Illustration des différentes non-linéarités de la rampe. En partant du haut, *Figure 1* : Impact du Reset Switch Charge Decay (RSCD) sur les premières frames visible à partir de la seconde intégration (courbe bleue). Le niveau de signal au début de la rampe est plus faible qu'attendu et la pente est plus élevée que l'extrapolation linéaire des frames suivantes (courbe rouge). *Figure 2* : Rampes venant de deux pixels voisins issus d'une paire de rangées dont le reset est simultané. La courbe orange illustre les rampes d'un pixel issu d'une rangée impaire et la courbe bleue celui d'une rangée paire. Le last frame effect est visible surtout sur la courbe orange, pour les pixels des rangs impairs. Par ailleurs, l'offset dû au RSCD est visible à partir de la seconde intégration. *Figure 3* : Non-linéarité de la réponse du détecteur (de l'accumulation de charges) illustrée sur la courbe rouge et comparée à l'extrapolation linéaire des premières frames (en vert). *Figure 4* : Exemple de rampe saturée (courbe bleue) à partir de la frame 100, issue de tests du MRS et non de MIRIm (le même principe s'applique aux deux détecteurs) et de fuite inter-pixel qui augmente la pente de la rampe (courbe rouge), issue du même jeu de tests. La courbe noire présente l'extrapolation linéaire de la courbe rouge. Figures individuellement produites par calibration au sol et venant d'Argyriou, 2021.

Dans le cas du JWST, la stabilité de pointage prévue est excellente (~ 4 marsec) et donc n'apparaît pas comme une problématique limitante pour la stabilité. L'échantillonnage de la PSF pour le MIRI LRS de $7 \mu\text{m}$ est également très bonne, nous n'attendons donc pas de bruit intra-pixel, contrairement à *Spitzer* dont l'échantillonnage de la PSF de l'instrument IRAC et donc le bruit intra-pixel était l'un des facteurs limitants et a nécessité de nombreux travaux de correction (Ballard et al., 2010; Ingalls, Krick, Carey, Laine et al., 2012; Stevenson, Harrington, Fortney et al., 2012; Krick et al., 2016; Morello, Waldmann et al., 2016). Concernant la stabilité en **température**, les spécifications de stabilité sont les suivantes : la variation de la réponse du détecteur à une illumination constante doit être inférieure à 5% pour des durées comprises entre quelques minutes et plusieurs jours. La température du détecteur est régulée à 1 mK et de nombreux capteurs permettent de la contrôler. Ressler, Cho et al., 2008 présente les résultats obtenus par des tests au sol de stabilité. Le test de durée dite court-terme ($<$ une heure) démontre que l'intensité normalisée en sortie varie entre 0.995 et 1.005, la spécification est donc atteinte. Le test de durée dite long-terme (3 jours) est un ensemble de trois points moyennés sur une journée dont les variations sont également comprises entre 0.995 et 1.005. Les variations de température ne devraient pas non plus être un facteur limitant pour les observations. L'enjeu principal repose alors sur un effet que nous appelons **effet de persistance** et qui regroupe l'ensemble des artéfacts dus aux effets de latence et de rémanence du détecteur, conséquence des utilisations précédentes de l'instrument. Par exemple, une observation précédente d'une source très brillante pourrait laisser une trace sur le détecteur (des charges pouvant rester piégées), créant ainsi une rémanence. Ces effets de persistance ont été observés lors des tests de MIRI au Jet Propulsion Laboratory (JPL) en 2018. Ces tests sont des courbes de lumières en DN s^{-1} obtenues en éclairant le détecteur avec un ensemble de corps noirs à différentes températures. L'ajustement de modèles sur ces données révèle que les effets de la persistance dépendent du flux (Martin-Lagarde, 2020).

2.3.1 La nature des effets de persistance

Les effets de persistance dépendent donc de l'histoire du détecteur et modifient le début des observations sous la forme d'une dérive de la courbe de lumière. Cette dérive crée un surplus ou un déficit du niveau attendu de flux et s'estompe temporellement jusqu'à atteindre la valeur attendue. Les tests JPL ont montré l'existence de trois types d'effets de persistance différents : le response drift, l'idle recovery et l'anneal recovery. Un exemple de response drift est montré sur la Fig. 2.7.

Le **response drift** (la dérive de la réponse en français mais nous utilisons le terme anglais) se produit lorsque le détecteur est soudainement illuminé après un certain temps passé sans recevoir de flux. Le signal de sortie n'est pas stabilisé et augmente lentement vers la valeur attendue (Rieke et al., 2015). Cet effet est dépendant du niveau de flux en sortie d'un pixel. Plus la source est brillante, plus le temps de stabilisation est court.

L'**anneal recovery** (ou effet du recuit en français) est un effet de latence dû à un recuit du détecteur (ou chauffage du détecteur). Dans un détecteur de Si :As, les collisions entre les particules chargées comme les rayons cosmiques et les atomes de silicium peuvent endommager la structure cristalline. C'est ce que nous appelons les *radiation damage* (en anglais) (Oblakowska-Mucha, 2017). Des recuits du détecteur sont donc effectués pour libérer ces impuretés. Le détecteur est donc chauffé entre 15 et 20 K de plus que la température nominale, puis refroidi à nouveau à 6.7 K. Par conséquent, au début d'une observation, le signal de sortie est plus élevé que la valeur nominale et diminue progressivement vers sa valeur attendue. Cet effet est totalement indépendant de la valeur de flux en sortie d'un pixel.

L'**idle recovery** (ou effet des phases d'attente en français) est le dernier effet de persistance identifié. Entre deux phases d'observation, le détecteur est constamment illuminé par le fond de ciel. En d'autres termes, le détecteur acquiert du signal et donc du bruit de fond. Pour éviter cela, des resets consécutifs (ou *idle* en anglais) sont effectués (Argyriou, 2021) suivant la cadence du temps de frame. Ainsi, au début de l'observation d'une cible, le niveau du signal de sortie est plus élevé que prévu et diminue lentement vers sa valeur nominale. Cet effet dépend à la fois du flux en sortie d'un pixel et du temps passé à effectuer ces resets consécutifs.

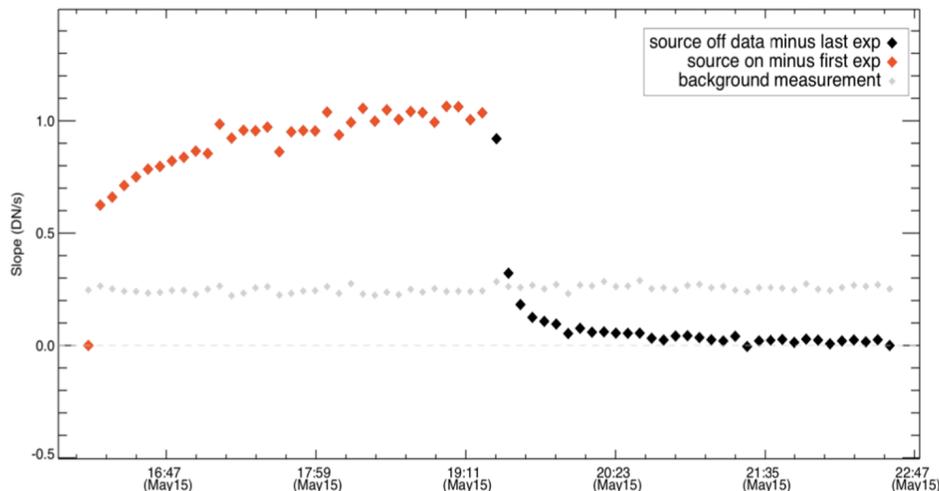


FIGURE 2.7 – Tests JPL (2018) des effets de persistance de l’instrument MIRI normalisés à 0. Les points de mesure en rouge correspondent à une illumination du détecteur et les points en noir correspondent au retour à 0 après extinction de la source. Le début de l’observation est impacté par le response drift. La courbe en gris montre le niveau de fond. De plus amples détails sont fournis dans la thèse de Martin-Lagarde, 2020.

2.3.2 Inférer des modèles de persistance à partir de tests au sol

Martin-Lagarde, 2020 décrit ces effets de persistance à l’aide de fonctions exponentielles dépendant du temps et donc de la durée d’exposition. Nous présentons ici les modèles inférés à partir des données de tests. Les tests d’illumination pour évaluer l’effet du response drift ont été réalisés pour une gamme de flux allant de 0 à 5000 DN s^{-1} . Le temps t d’observation varie entre $t_0 = 0$, le début de l’observation, et $t_0 + n_{\text{int}}\Delta t_{\text{int}}$, $n_{\text{int}} \in \mathbb{N}$, où n_{int} est le nombre d’intégrations et Δt_{int} est la durée d’intégration. Le response drift s’exprime comme

$$S_{\text{RD}}(t) = S_0 + a_1(S_0) \exp\left(-\frac{t}{\alpha_1(S_0)}\right). \quad (2.2)$$

où S_0 est le niveau attendu de flux dans un pixel en DN s^{-1} , $a_1(S_0)$ est l’amplitude de l’exponentielle exprimée en DN s^{-1} . $\alpha_1(S_0)$ est la constante de temps (en s). L’anneal recovery et l’idle recovery suivent une tendance similaire : le niveau de flux diminue en fonction du temps jusqu’à atteindre la valeur de flux attendue. L’anneal recovery commence dès le refroidissement du détecteur à 6.7 K après recuit, ce qui ne coïncide pas forcément avec le début de l’observation mais peut avoir lieu avant. Dans ce cas, la variable de temps s’exprime sous la forme de $t + t_A$ où t_A est une valeur négative qui permet de prendre en compte le début de l’anneal. De fait, l’anneal recovery s’exprime comme

$$S_A(t) = S_0 + b_1 \exp\left(-\frac{t + t_A}{\beta_1}\right) + b_2 \exp\left(-\frac{t + t_A}{\beta_2}\right). \quad (2.3)$$

où S_0 est le niveau attendu de flux dans un pixel en DN s^{-1} , b_1 et b_2 sont les amplitudes des deux exponentielles exprimées en DN s^{-1} . β_1 et β_2 sont les constantes de temps (en s). L’idle recovery s’exprime également à l’aide d’une exponentielle dont l’amplitude dépend du temps d’idle Δt_1 (temps passé à effectuer des reset consécutifs).

L'idle recovery s'exprime de la manière suivante :

$$S_I(t) = S_0 + c(S_0, \Delta t_I) \exp\left(-\frac{t}{\gamma(S_0)}\right), \quad (2.4)$$

où S_0 est le niveau attendu de flux dans un pixel en DN s^{-1} , $c(S_0, \Delta t_I)$ est l'amplitude de l'exponentielle exprimée en DN s^{-1} . $\gamma(S_0)$ est la constante de temps (en s). Les valeurs des coefficients introduits ici pour l'anneal recovery et l'idle recovery sont fournies par Martin-Lagarde, 2020. L'expression mathématique du response drift a été modifiée à partir des expressions fournies dans Martin-Lagarde, 2020 qui introduisaient une discontinuité à 750 DN s^{-1} par le passage d'une à deux exponentielles. Nous avons éliminé la discontinuité en modélisant le response drift par une seule exponentielle pour tous les niveaux de flux. Les expressions numériques des coefficients du response drift sont données par

$$\begin{cases} a_1(S_0) = 2.94507350 \cdot 10^{-6} S_0^2 - 3.2788689210^{-2} S_0 - 4.70669170 \\ \alpha_1(S_0) = 2.59295558 \cdot 10^3 e^{-8.57428099 \cdot 10^{-3} S_0^2} + 1.20593193 \cdot 10^2. \end{cases} \quad (2.5)$$

2.3.2.1 Devons-nous prendre en compte les effets de persistance dans les simulations ?

L'impact des effets de persistance des détecteurs Si:As est peu connu et peu caractérisé. Ressler, Cho et al., 2008 mentionnent le terme "images latentes" pour décrire la rémanence de cibles brillantes sur le détecteur mais le terme "effets de persistance" n'est pas évoqué. La latence a pu être testée dans un contexte de post-saturation du détecteur, ce qui ne correspond pas aux trois effets de persistance décrits ci-dessus. Ressler, Cho et al., 2008 précisent que ces effets devront être caractérisés de manière plus approfondie par des tests en vol. De manière générale, seuls les tests JPL de 2018 nous donnent un aperçu de ces effets sur une gamme de flux qui correspondant au fond et à la queue du spectre (entre 0 et 5000 DN s^{-1}), mais pas aux forts flux qui peuvent atteindre les 10^4 DN s^{-1} . La question de l'impact de ces effets sur la stabilité des futures observations reste en suspens. En d'autres termes, l'amplitude de ces effets est-elle supérieure au bruit de photon correspondant au niveau de flux considéré? En combien de temps ces effets se dissipent-ils en comparaison avec une observation de transit (~ 10 heures)? Faut-il considérer un temps d'attente avant de commencer les observations? Pour répondre à ces questions, nous commençons par évaluer l'impact de chacun des effets de persistance : nous calculons la différence entre le signal parfait sans effet et celui impacté par l'effet, intégré sur 10 heures, et nous le comparons au bruit de photon associé au signal parfait. Les résultats obtenus sont présentés dans la table 2.1. Le response drift et l'anneal recovery ont un impact important sur le signal à 20 DN

TABLE 2.1 – Différence entre le signal parfait sans effet et celui impacté par l'effet, intégré sur 10 heures et calculé pour les trois effets de persistance. Nous considérons deux niveaux de flux différents : 20 et 4000 DN s^{-1} . Ces valeurs sont à comparer au niveau du bruit de photon.

Effect	At 20 DN s^{-1} (in DN)	At 4000 DN s^{-1} (in DN)
Noise level	361	5116
Response drift	3005	18137
Anneal recovery	3159	3159
Idle recovery	1.14	350339

s^{-1} , l'écart au signal parfait étant supérieur au bruit de photon. De même, à 4000 DN s^{-1} , l'écart peut être jusqu'à 70 fois plus élevé que le niveau de bruit pour le response drift et l'idle recovery. En d'autres termes, les effets intégrés sur une dizaine d'heure sont supérieurs au bruit de photon à faible flux (20 DN s^{-1}) et à flux moyen (4000 DN

s^{-1}). Cela signifie que nous devons soit les prendre en compte dans les méthodes de réduction de données et donc par extension dans les simulations, soit nous en affranchir. Une façon de nous en affranchir est d'attendre que les effets s'estompent. Nous cherchons donc à déterminer la valeur du temps d'attente pour que l'effet disparaisse dans le bruit de photon.

2.3.2.2 L'évaluation du temps d'attente avant le début des observations

La Fig. 2.8 présente le critère d'attente pris en compte pour le response drift. En d'autres termes, quel temps t_0 devons-nous attendre avant de commencer l'observation de manière à ce que le signal intégré entre le début et la fin de l'observation soit inférieur au bruit de photon du signal en fin d'observation ?

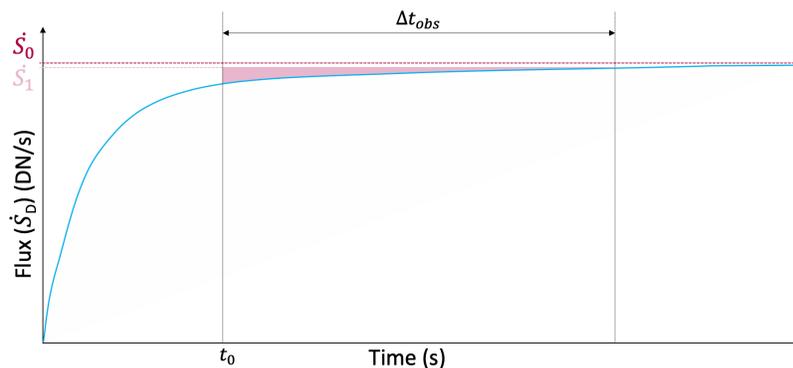


FIGURE 2.8 – Exemple d'estimation du temps d'attente avant le début des observations de transit défini de manière que le signal intégré entre le début et la fin de l'observation (en rose) soit inférieur au bruit de photon du signal \dot{S}_1 qui est le signal à la fin de la fenêtre d'observation Δt_{obs} pour le response drift.

La fenêtre d'observation est définie comme étant deux fois le temps de transit : nous encadrons le temps de transit d'un demi temps de transit de part et d'autre. Nous noterons Δt_{obs} la durée de la fenêtre d'observation avec $\Delta t_{obs} = 2T$, T étant le temps de transit. t_0 est le début de la prise en compte des données et $t_0 + \Delta t_{obs}$ est la fin de la prise en compte des données. Nous estimons le temps d'attente avant de considérer les données entre $t = 0$ et $t = t_0$. Le niveau de signal impacté par response drift à $t_0 + \Delta t_{obs}$ (à la fin de l'observation) s'exprime comme

$$\dot{S}_1(t_0) = \dot{S}_0 + a_1(S_0) \times e^{-\frac{t_0 + \Delta t_{obs}}{\alpha_1(S_0)}}. \quad (2.6)$$

Ce signal est donc la nouvelle référence, à défaut d'avoir atteint le signal \dot{S}_0 initialement attendu à la fin de l'observation. Nous intégrons cette nouvelle référence entre t_0 et $t_0 + \Delta t_{obs}$ en la considérant constante sur la fenêtre d'observation

$$S_1(t_0) = \dot{S}_1(t_0 + \Delta t_{obs}) \times \Delta t_{obs}. \quad (2.7)$$

Le signal affecté par le response drift sur la fenêtre d'observation s'exprime comme

$$S(t_0) = \int_{t_0}^{t_0 + \Delta t_{obs}} \dot{S}_0 + a_1(S_0) \times e^{-\frac{t}{\alpha_1(S_0)}} dt \quad (2.8)$$

$$= S(t_0) = \dot{S}_0 \times \Delta t_{obs} + a_1(S_0) \cdot \alpha_1(S_0) \times e^{-\frac{t_0}{\alpha_1(S_0)}} \left(1 - e^{-\frac{\Delta t_{obs}}{\alpha_1(S_0)}}\right). \quad (2.9)$$

Le déficit de signal par rapport au signal en fin d'observation sur la fenêtre d'observation s'exprime comme

$$F(t_0) = S_1(t_0) - S(t_0) . \quad (2.10)$$

Le bruit de photons (en DN) du signal en fin d'observation s'écrit comme

$$b(t_0) = \frac{\sqrt{\dot{S}_1 * \Delta t_{\text{obs}} * g}}{g} . \quad (2.11)$$

où g est le gain électronique en $e^- \text{ DN}^{-1}$. Le temps d'attente s'obtient par le zéro de la fonction $F_b(t_0)$ qui s'exprime comme

$$F_b(t_0) = S_1(t_0) - S(t_0) - b(t_0) . \quad (2.12)$$

Nous obtenons des résultats pour une gamme de flux comprise entre 20 et 4000 DN s^{-1} , qui correspond à celle des tests. La Fig. 2.9 présente les temps d'attente avant de commencer l'observation en fonction du niveau de flux pour les trois effets.

Le temps d'attente du response drift est maximisé autour des faibles flux, avec un temps d'attente d'environ 3 heures. Pour les flux plus élevés, le temps d'attente diminue considérablement autour d'une dizaine à une vingtaine de minutes. Le temps d'attente pour l'anneal recovery a un ordre de grandeur de quelques dizaines de minutes. La tendance de ce temps d'attente montre que l'effet a un impact moindre à des forts flux puisqu'il disparaît plus rapidement dans le bruit de photon, l'amplitude de l'anneal étant constante quel que soit le flux. Le temps d'attente de l'idle recovery ne dépasse pas les deux heures. L'idle recovery étant un surplus de signal dépendant du niveau de flux, plus le niveau de flux est élevé, plus le temps d'attente est grand, de l'ordre de grandeur de la durée d'un transit (~ 2 heures), ce qui rend l'attente impossible à considérer. En effet, les forts flux sont ceux qui correspondent au signal utile et non au fond. Entre 20 et 560 DN s^{-1} , l'effet est négligeable puisqu'il est directement perdu dans le bruit, le temps d'attente est donc nul. Les conclusions que nous pouvons tirer de cette étude sur les effets de persistance issus de tests au sol sont les suivantes :

- Les temps d'attente avant de commencer les observations varient de quelques minutes à quelques heures selon les effets de persistance et les niveaux de flux sur le spectre. Le temps d'attente est de l'ordre de grandeur du temps de transit, ce qui n'est pas envisageable pour un observatoire tel que le JWST dont les temps d'observation sont très coûteux. Les effets de persistance sont non seulement non négligeables mais ne pourront être évités. Il faut donc les corriger par réduction de données, et de fait, les inclure dans les simulations.
- Les tests au sol présentent des limitations en flux, les flux testés étant loin d'être représentatifs des forts flux au niveau du maximum du spectre (pouvant aller jusqu'à $\sim 10^4 \text{ DN s}^{-1}$).
- Les tests nous donnent uniquement accès aux effets séparément les uns des autres. En principe, ces effets sont susceptibles d'être présents simultanément dans les observations. La corrélation entre eux n'a donc pas été étudiée par tests.
- Des tests en vol et des études poussées concernant ces effets seront nécessaires pour les contraindre et caractériser leur impact sur la stabilité des observations.

2.4 La chaîne de simulation

Rappelons que nous avons pour objectif de créer des simulations de courbes de lumière d'exoplanètes telles qu'observées avec le spectro-imageur MIRIm du JWST. L'architecture des simulations est présentée sur la Fig. 2.10. Pour cela nous devons simuler le flux reçu par le système étoile-planète par la pupille d'entrée du télescope, prendre

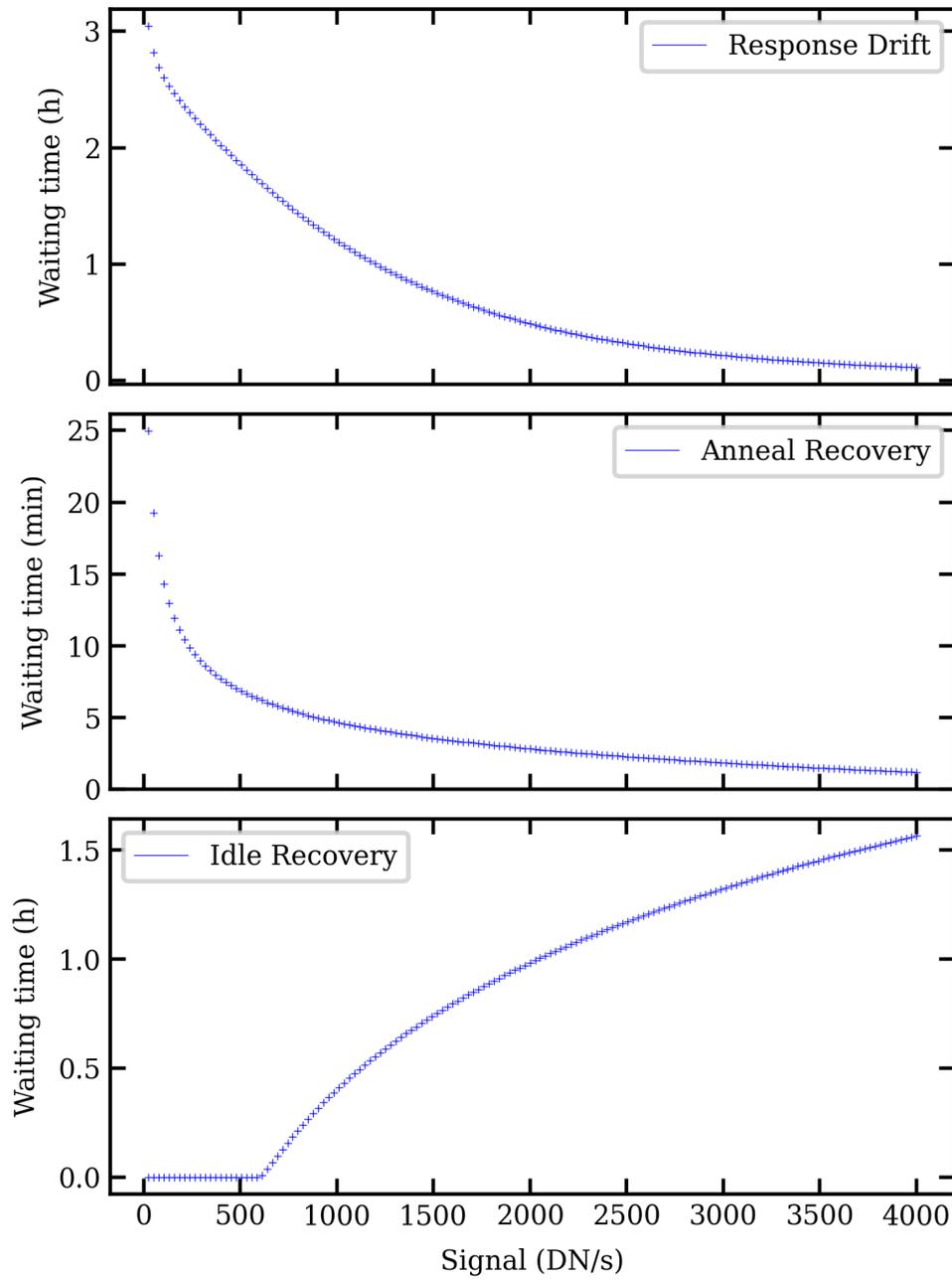


FIGURE 2.9 – Estimation des temps d'attente avant le début d'une observation en fonction du niveau de flux, établi comme étant le temps à partir duquel la variation de l'effet est inférieure au bruit de photon du signal en fin d'observation. Application aux trois effets : de haut en bas, au response drift, à l'anneal recovery, à l'idle recovery.

en compte la diffraction et la transmission des optiques jusqu'à l'instrument, disperser les photons sur le détecteur dans le cas du LRS, les convertir en électrons puis en DN et enfin, reproduire le mode de lecture non-destructif du détecteur en échelonnant des frames sous la forme d'une intégration. À ce niveau-là, nous devons prendre en compte l'ensemble des bruits et des effets du détecteur, affectant une seule intégration uniquement. Nous répétons ce schéma de simulation sur toutes les intégrations en considérant le flux reçu par le système étoile-planète constant sur une intégration. Cette hypothèse est valable considérant qu'une intégration dure en moyenne quelques secondes voire quelques minutes et que les variabilités stellaires et planétaires de luminosité que l'on peut résoudre temporellement sont de l'ordre de l'heure, de la dizaine d'heure voire de quelques jours. Comme explicité en introduction de ce Chapitre et dans la Sect. 2.3, la stabilité temporelle est un élément clé des observations par méthode des transits. Nous devons donc prendre en compte les variations instrumentales basse fréquence affectant non pas une mais plusieurs intégrations, voire l'observation entière. Les simulations incluent donc les effets de persistance sous la forme d'une boucle rétro-active qui s'applique à l'échelle de l'intégration mais qui prend en compte toutes les intégrations concernées.

2.4.1 Structure du pipeline de simulation

La prise en compte des bruits de la chaîne de détection ainsi que les instabilités temporelles permettent d'obtenir des simulations réalistes qui peuvent défier la robustesse des outils de réduction et la détectabilité des signatures moléculaires dans les atmosphères. Pour ce faire, nous devons fournir des simulations dont le format correspond exactement au format des futures données reçues par télémétrie du JWST. Les données nous parvenant du JWST MIRI sont sous la forme de fichiers dits non-calibrées ou *uncal* de ~ 2 Go contenant chacun un certain nombre d'intégrations d'images spectrales de la source observée. Chaque intégration de chaque pixel se compose de l'ensemble des frames en sortie du mode de lecture non-destructif du détecteur. Le nombre de fichiers reçu dépend de la durée totale d'observation. À titre d'exemple, chaque fichier d'une observation avec le MIRI LRS se compose de 412×72 pixels \times N frames \times M intégrations, N et M étant des paramètres définis à partir de la magnitude de la source observée, des caractéristiques du détecteur et de l'observation réalisée. De manière similaire, chaque fichier en sortie de l'imageur en photométrie se compose de 1024×1024 pixels \times N frames \times M intégrations. Nous appelons cela le *datamodel* du spectro-imageur du JWST MIRI. Bien que les simulations soient faites à la fois pour le LRS et l'imageur, l'accent a été mis sur le LRS car il s'agit là de l'un des apports principaux de l'instrument MIRI du JWST : la spectroscopie en infrarouge moyen.

Avant de présenter les outils utilisés pour la simulation et les résultats, il est nécessaire d'explicitier les étapes de conversion du signal photonique en signal électronique en prenant en compte les optiques du télescope, la chaîne de détection de MIRIm et les bruits associés pour plus de clarté.

2.4.2 Le principe de la conversion des photons en signal électronique

Concentrons-nous sur la prise en compte du télescope et de l'instrument MIRIm dans les simulations. Pour cela, considérons des photons nous parvenant du système étoile-planète au niveau de la pupille d'entrée du télescope. Le principe de la conversion des photons en signal électronique repose sur quatre grandes étapes. Tout d'abord, la lumière blanche du système étoile-planète (qui correspond à une source ponctuelle) est **diffractionnée** par les optiques du télescope et forme une tache de diffraction, la PSF. Une tache de diffraction en deux dimensions est composée, en autres, d'une tache centrale, appelée la tache d'Airy qui s'exprime en fonction de fonctions de Bessel de première espèce. Un exemple de tache d'Airy est montrée sur l'image centrale de la Fig. 2.11.

Une coupe à une dimension de cette tache nous donne la largeur à mi-hauteur (*full width at half maximum*, FWHM en anglais) du maximum d'intensité lumineuse qui varie en fonction de la résolution angulaire $\sim 1.22\lambda/D$ où λ est la longueur d'onde et D le diamètre de la pupille de sortie du télescope (diamètre équivalent qui prend en

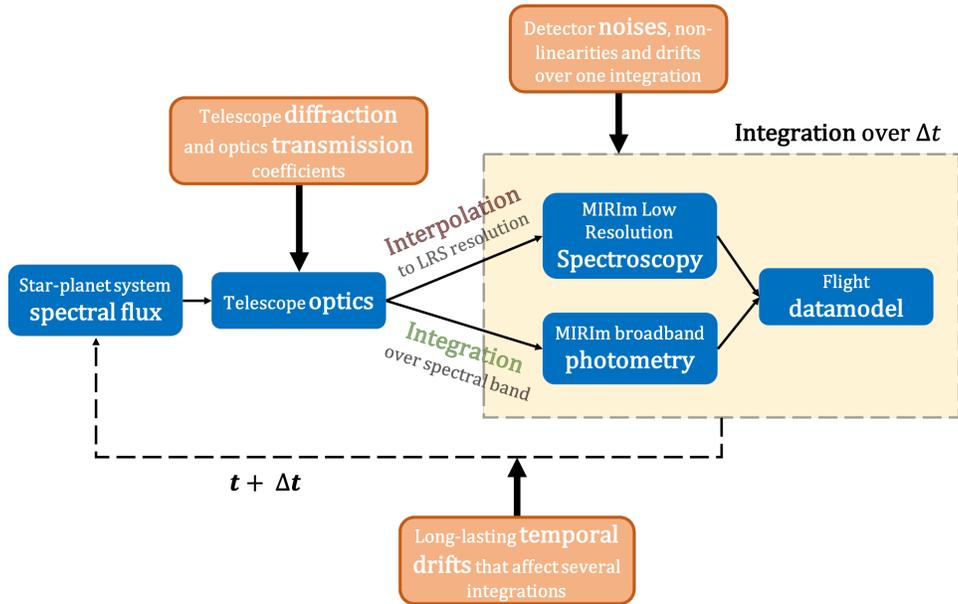


FIGURE 2.10 – Structure des simulations pour le LRS et l'imagerie de MIRIm. Le flux du système-étoile planète en entrée est diffracté et converti en nombre de photons par seconde arrivant sur chaque pixel du détecteur. Ces photons sont ensuite dispersés sur le détecteur et convertis en électrons, puis en DN sous la forme d'une intégration correspondant au mode de lecture non-destructif *FASTRi* dont le frame time dépend du mode d'observation (imageur ou LRS). Les bruits de détecteur sont ajoutés à ce niveau-là. Les tendances basse fréquence qui affectent plusieurs intégrations sont ajoutées au niveau de chaque frame. La sortie des simulations consiste en une série temporelle d'images ou d'images spectrales suivant le formalisme du *datamodel* du JWST.

compte l'ensemble des optiques du télescope jusqu'à l'instrument). L'image de la source ponctuelle obtenue avec le télescope est un produit de convolution entre la PSF et la source ponctuelle, PSF qui s'élargit avec la longueur d'onde. Dans un second temps, la lumière blanche reçue par l'étoile traverse le plan focal, puis est collimatée et réfléchiée par un ensemble de miroirs constituant les optiques de l'instrument MIRIm et enfin **dispersée** sur le détecteur par le double prisme monté sur la roue à filtre. Cela crée un spectre en deux dimensions dont la dimension verticale est la dimension spectrale et la dimension horizontale est la dimension spatiale correspondant aux PSFs dispersées. Le spectre résultant est présenté sur l'image de droite de la Fig. 2.11. La diffraction étant dépendante de la longueur d'onde, la FWHM de la tâche d'Airy augmente verticalement. L'émission stellaire étant également dépendante de la longueur d'onde par la loi de Planck qui décroît spectralement dans l'infrarouge moyen, le maximum sur le spectre se situe donc au niveau des courtes longueurs d'onde. Le détecteur étant composé de pixels dont la taille est définie, les PSFs des longueurs d'onde couvrent un ensemble de pixels différents. Un concept clé qui lie taille des pixels et taille de la FWHM est donc l'échantillonnage de la PSF. L'échantillonnage doit suivre le critère de Shannon, la PSF doit donc être résolue par un minimum de 2 pixels (voir Fig. 2.12). Précisons que la résolution angulaire est déterminée par la taille de la PSF qui dépend de la longueur d'onde et de la diffraction, et non celle du pixel qui est établie par le fabricant. Les PSFs des instruments du JWST ont une signature particulière et reconnaissable sous la forme d'une croix à 6 branches qui sont dues aux trois directions de diffraction : verticale, horizontale et diagonale (venant des deux bras symétriques soutenant le miroir secondaire). Plus d'information concernant les PSFs des

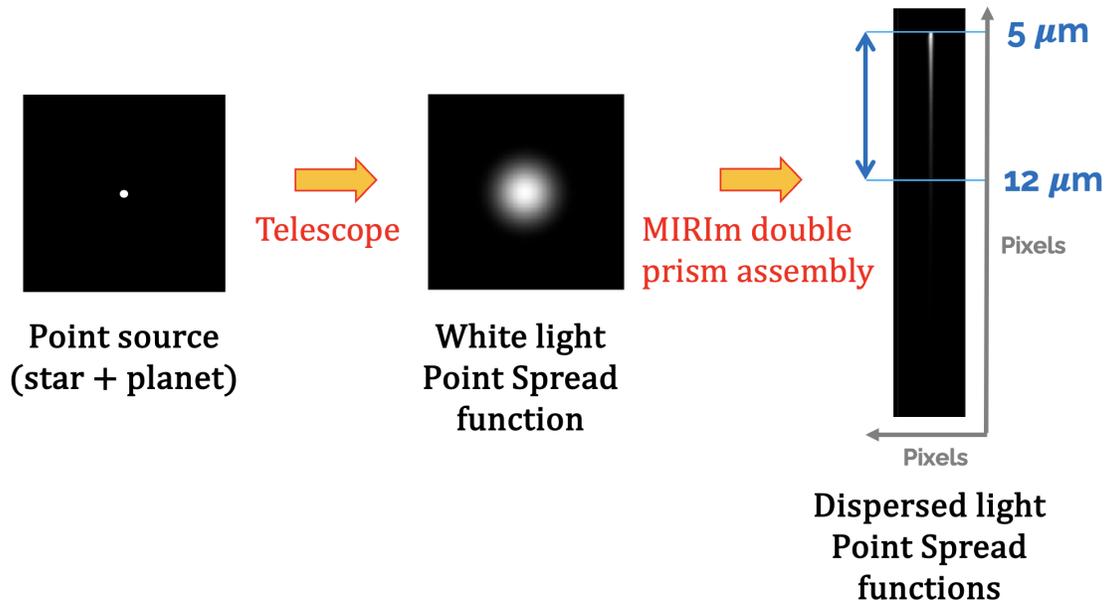


FIGURE 2.11 – Création d’un spectre à partir d’une source ponctuelle, puis de la fonction d’étalement du point (*point spread function*, PSF en anglais) créée par diffraction par les optiques du télescope. La PSF montrée ici est un exemple de tâche de diffraction que l’on peut obtenir sur un détecteur lors de l’observation d’une source ponctuelle sans dispersion de la lumière blanche. Lors d’observations spectroscopiques, seule l’image de droite (le spectre) est créé sur le détecteur. Crédit pour l’image de la PSF : Gennaro et Geoff, 2010.

canaux photométriques de MIRI peut être trouvée sur le site dédié du STScI¹. Enfin, les photons qui arrivent sur chaque pixel sont **convertis en électrons**, quantité qui est ensuite **lue par le circuit de lecture** du détecteur selon le formalisme de lecture décrit dans les Sect. 2.2.3 et 2.2.4.

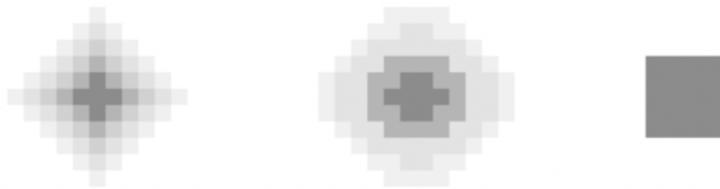


FIGURE 2.12 – Échantillonnage de la PSF selon le critère de Shannon. L’exemple de droite montre une PSF mal échantillonnée car contenue intégralement dans un seul pixel. La PSF doit être échantillonnée par deux pixels, au minimum.

1. Le site est disponible à l’adresse suivante : <https://jwst-docs.stsci.edu/jwst-mid-infrared-instrument/miri-performance/miri-point-spread-functions>

2.4.2.1 Simuler une image et un spectre

Afin de simuler les PSFs des sources ponctuelles obtenues par spectroscopie LRS de MIRI ou par photométrie, nous avons utilisé un ensemble de PSFs monochromatiques obtenues par tests au sol et modèles optiques (Perrin, Soummer et al., 2012; Perrin, Sivaramakrishnan et al., 2014) que nous appelons $F_{\text{PSF}_{\text{norm}}}(\lambda)$. La dispersion par l'assemblage du double prisme est simulée en positionnant chacune des PSFs monochromatiques sur le pixel correspondant à la loi de dispersion (qui donne la relation entre les pixels et les longueurs d'onde). Cette loi est donnée par la Fig. 3 du papier de Kendrew, Scheithauer et al., 2015. La dispersion du LRS est non-linéaire : les courtes longueurs d'onde sont concentrées sur un petit nombre de pixels comparé aux grandes longueurs d'onde. La résolution spectrale correspondant au rapport $\lambda/\Delta\lambda$ varie linéairement en fonction de la longueur d'onde de 30 à 250 entre 5 et 12 μm . Par ailleurs, la dispersion verticale sur le détecteur subit une faible distorsion optique modélisable par une loi polynomiale issue d'ajustements de modèles sur des données de tests. Après avoir positionné ces PSFs monochromatiques sur chacune des rangées du détecteur, nous les convoluons à un flux théorique du système étoile-planète $F_{\oplus\text{ph}}(\lambda)$ exprimé en fonction de la longueur d'onde. Ainsi, les PSFs en flux absolu nommées $F_{\text{PSF}}(\lambda)$ s'expriment comme

$$F_{\text{PSF}}(\lambda) = \mathcal{P}(\lambda) * F_{\oplus\text{ph}}(\lambda) . \quad (2.13)$$

où $\mathcal{P}(\lambda)$ est la fonction de transfert du télescope exprimée par

$$\mathcal{P}(\lambda) = A T_{\text{T}}(\lambda) F_{\text{PSF}_{\text{norm}}}(\lambda) . \quad (2.14)$$

avec $F_{\oplus\text{ph}}(\lambda)$ qui est le flux reçu par le télescope du système étoile-planète en $\text{photon s}^{-1} \text{ m}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$, A est la surface collectrice du miroir principal en m^2 et T_{T} est un facteur sans dimension exprimant la transmission des optiques jusqu'à l'instrument. Nous prenons ensuite en compte l'échantillonnage des PSFs du LRS. Ainsi, le flux reçu par chacun des pixels centraux représente une sous-quantité donnée du flux incident qui crée la PSF. Les PSFs en flux absolu sont donc une somme du flux reçu par chaque pixel qui les constituent

$$F_{\text{PSF}}(\lambda) = \sum_{i=1}^n F_{\text{pixel},i}(\lambda) . \quad (2.15)$$

où n est un nombre entier de pixels qui forme la tache de diffraction de chacune des PSFs.

2.4.2.2 Simuler la conversion photon-électron

Le flux de photons $F_{\text{pixel},n}(\lambda)$ qui arrive sur un pixel est ensuite converti en un signal électronique $S_{\text{pixel},n}(\lambda)$ et intégré sur la durée d'une frame. La conversion et l'intégration sur la durée d'une frame peut être décrite par la fonction de transfert $\mathcal{E}_n(\lambda)$ qui permet de lier les deux quantités $F_{\text{pixel},n}(\lambda)$ et $S_{\text{pixel},n}(\lambda)$

$$S_{\text{pixel},n}(\lambda) = \mathcal{E}_n(\lambda) \times F_{\text{pixel},n}(\lambda) . \quad (2.16)$$

où $\mathcal{E}_n(\lambda)$ s'exprime comme

$$\mathcal{E}_n(\lambda) = \frac{\Delta\lambda \times t_{\text{frame}} \times \text{tr}_d \times \text{QE}(\lambda)}{g} . \quad (2.17)$$

$S_{\text{pixel},n}(\lambda)$ est donc obtenu en intégrant le flux de photon sur la durée d'une frame t_{frame} en seconde, sur une bande de longueur d'onde $\Delta\lambda$ (en μm). Le produit $\text{QE}(\lambda) \text{tr}_d(\lambda)$ est le PCE du détecteur (en $e^- \text{ photon}^{-1}$) avec $\text{QE}(\lambda)$ l'efficacité quantique du détecteur (en $e^- \text{ photon}^{-1}$) et $\text{tr}_d(\lambda)$ le facteur sans dimension de transmission de l'assemblage du double prisme et les optiques de l'instrument. g est le gain électronique permettant d'obtenir des DN, en $e^- \text{ DN}^{-1}$.

Les quantités $S_{\text{pixel},n}(\lambda)$ obtenues sont ensuite ajoutées sous la forme d'une somme cumulative dont la valeur initiale est l'offset. Chaque valeur de signal final obtenu est ensuite modifiée pour prendre en compte les non-linéarités des rampes, explicités dans la Sect. 2.2.5.4. Les tests au sol ont montré que les effets impactant effectivement la rampe sont la non-linéarité de la réponse de l'électronique (ou accumulation de charges), les effets des rayons cosmiques et les effets de la saturation, effets que nous ajoutons à chaque frame de chaque intégration, à l'échelle du pixel. Nous ajoutons ensuite le courant d'obscurité à la rampe. Nous prenons ensuite en compte les pixels morts ou chauds que nous repérons à l'aide d'un masque 2D de la taille du subarray LRS. Enfin, nous multiplions chaque image spectrale par le champ plat.

2.4.2.3 Effets de persistance, fond observationnel et bruit de photon

Les effets de persistance qui impactent plusieurs intégrations sont ajoutés dans un second temps après la simulation de l'ensemble des intégrations de l'observation, ce qui permet de garder en mémoire leur ordre et d'adapter l'intensité de l'effet à chacune d'entre elles. Avant d'appliquer les effets de persistance, nous ajoutons une image spectrale du fond observationnel à chaque frame, de manière à éviter tous pixels négatifs induits par la prise en compte des effets de persistance (cette précaution est surtout valable pour le response drift). La dernière étape consiste à l'ajout du bruit du photon à chaque frame et à chaque pixel. De cette manière, nous nous assurons que le bruit de photon soit bien appliqué à l'ensemble {source+fond observationnel}.

2.4.3 Les outils utilisés

Les simulations sont réalisées avec différents outils présentés sur la Fig. 2.13. Le premier outil de la chaîne de simulation est le package `ExoNoodle` (Martin-Lagarde, 2020; Martin-Lagarde et al., 2020) qui permet de modéliser la série temporelle de spectres du système étoile-planète dont le flux est reçu à la pupille d'entrée du télescope. Dans un second temps, nous utilisons l'outil `MIRISim` (Klaassen et al., 2020) qui simule l'ensemble de la chaîne de détection de MIRIm à partir des PSFs normalisées à l'entrée de l'instrument jusqu'à la sortie du signal numérique. Puis, nous utilisons l'outil `MIRISim-TSO` (Martin-Lagarde, 2020; Dyrek, Ducrot et al., 2023) qui permet d'ajouter les effets de persistance dans les simulations. Enfin, la dernière étape consiste à appliquer le pipeline officiel de réduction des données `JWST` ², étape qui permet de vérifier que les simulations soient bien compatibles avec le pipeline.



FIGURE 2.13 – Outils de la chaîne de simulation comprenant les packages `ExoNoodle`, `MIRISim` et `MIRISim-TSO`. La dernière étape consiste à l'application du pipeline officiel de réduction des données `JWST` .

2.4.3.1 exoNoodle

La première étape des simulations consiste à créer ce que nous appelons une scène astronomique ou tout simplement une source de lumière, qui dans notre cas est la lumière reçue d'un système étoile-planète lorsque la planète

2. Le pipeline `JWST` est disponible à l'adresse suivante : <https://jwst-pipeline.readthedocs.io/en/latest/>

orbite autour de son étoile. De nombreux codes de simulations de courbes de lumières existent et suivent la prescription de Mandel et Agol, 2002 et de Giménez, 2006. Parmi ces outils, nous pouvons citer PyTransit (Parviainen, 2015), le module TRIP du package ExoTETHyS (Morello, Claret et al., 2020) ou encore PyPplusS (Rein et Ofir, 2019) qui simulent des transits planétaires. D'autres modèles permettent à la fois de simuler des transits et des courbes en vitesses radiales comme TAP (Gazak et al., 2012), EXOFAST (Eastman et al., 2013) et JKTEBOP (Popper et Etzel, 1981; Southworth et al., 2004), qui permet de simuler des transits d'étoiles binaires. De nouveaux outils d'ajustements de modèles sur des données en langage Python ont également fait leur apparition, dont les plus récents sont exoplanet (Foreman-Mackey, Luger et al., 2021) et starry (Luger, Agol et al., 2019). Les outils batman (Kreidberg, 2015), PyLightcurve (Tsiaras, Waldmann, Rocchetto et al., 2016) et SPIDERMAN (Louden et Kreidberg, 2018) permettent également d'ajuster des modèles de transit, d'éclipse et de courbes de phase sur des données. Par ailleurs, les transits étant affectés par l'assombrissement centre-bord (Mandel et Agol, 2002), de nombreux codes permettent de générer les coefficients associés à cet effet : ExoTIC-LD (Laginja et Wakeford, 2020), exoCTK (Bourque et al., 2021), ExoTETHyS.SAIL (Morello, Claret et al., 2020) et Limbdark.jl (Agol, Luger et al., 2020).

Il ne s'agit pas ici d'une liste exhaustive de codes mais plutôt d'un aperçu de l'état de l'art en matière de modèles de courbes de lumière qui existent au sein de la communauté. L'ensemble de ces codes permet d'obtenir des courbes de lumières blanches (intégrées spectralement sur une gamme de longueur d'ondes) en flux relatif (le flux stellaire est normalisé à 1). Seul le code de Martin-Lagarde, 2020; Martin-Lagarde et al., 2020 permet de générer des spectres en transmission ou en émission suivant la planète en orbite autour de son étoile en **flux absolu**. Nous appelons cela des séries temporelles de spectre en flux absolu. Le modèle suit la prescription de Mandel et Agol, 2002 et l'outil s'appelle `exoNoodle`³. Nous l'avons sélectionné pour générer nos modèles de spectres d'atmosphères d'exoplanètes. Le code `exoNoodle` requiert les paramètres suivants en entrée :

1. Le spectre d'émission de l'étoile
2. Les spectres d'émission côté jour et côté nuit de la planète
3. Le spectre en transmission de l'atmosphère sous la forme d'un rapport de rayons $(R_p/R_*)^2$.
4. Les coefficients (quadratiques) d'assombrissement centre-bord. Il est possible de fournir des coefficients dépendant de la longueur d'onde.
5. Les paramètres orbitaux : la période orbitale P , le demi-grand axe a , la distance à l'étoile depuis l'observateur d , l'inclinaison de l'orbite i et les masses et rayons planétaires et stellaires, respectivement M_p , R_p et M_* , R_* .
6. Les phases orbitales correspondant au début et à la fin des observations (comprises entre -1 et 1)
7. L'échantillonnage temporel correspondant à l'intervalle de temps entre deux générations de spectres. Dans notre cas, nous choisissons le temps d'intégration du LRS pour la cible observée.
8. Un pas en longueur d'onde $\Delta\lambda$.

La sortie des simulations d'`exoNoodle` correspond à une série temporelle de spectre en μJy . Le nombre de spectres générés dépend de la durée d'observation choisie et de l'échantillonnage temporel associé.

2.4.3.2 MIRISim

La seconde étape après la création de modèles de spectres en séries temporelles et celle de la génération d'images spectrales telles qu'elles seraient obtenues avec le LRS de MIRI. En introduction de ce chapitre, nous avons évoqué les différents codes permettant de générer des spectres tels que produits par le LRS (Pontoppidan et al., 2016; Batalha, Mandell et al., 2017). Dans notre cas, nous souhaitons générer des images spectrales réalistes. Pour ce faire, nous basons notre travail sur l'outil `MIRISim`⁴ (Klaassen et al., 2020) dont nous utilisons la version stable 2.4.2. `MIRISim`

3. Le code est disponible à l'adresse suivante <https://gitlab.com/mmartin-lagarde/exoNoodle-exoplanets>

4. Le code est disponible à l'adresse suivante https://wiki.miricle.org/Public/MIRISim_Public

permet de simuler presque la totalité des modes d'observations de MIRI allant de l'imageur et du LRS MIRIm à la spectroscopie moyenne résolution (MRS). Seule la coronographie n'est pas comprise dans le package. Le code est fondé sur l'utilisation de fichiers de calibration que nous appelons *Calibration Data Products* ou CDP qui sont les résultats des tests au sol qui sont donc fournis en entrée du simulateur et qui permettent de reproduire l'instrument de manière la plus réaliste possible. MIRISim prend en entrée les séries de spectre produit par ExoNoodle en μJy , que nous appelons *la scène observationnelle* et prend en compte, entre autres, le chemin optique du télescope et de l'instrument, la dispersion sur le subarray du LRS et l'efficacité de conversion photon-électron. Les simulations sont réalisées avec les paramètres suivants : le subarray pris en compte est le *SLITLESSPRISM* et le filtre est celui de l'assemblage du double prisme nommé *P750L*. Les effets détecteurs pris en compte sont les suivants :

1. Un masque de pixels chauds ou morts que l'on signale comme DO-NOT-USE (ne pas utiliser en français).
2. Une carte de courant d'obscurité en DN pixel⁻¹,
3. Une carte de champ plat en DN pixel⁻¹,
4. La valeur du gain électronique en e⁻ DN⁻¹,
5. Les non-linéarités de la rampe (les rayons cosmiques et la non-linéarité de la réponse),
6. La saturation du détecteur,
7. Le bruit de lecture.

En revanche, MIRISim est fondé sur un ancien mode de lecture que l'on appelle *FAST* et qui ne prend en compte qu'un seul reset. Nous avons donc ajouté un reset supplémentaire de 0.159 s, modifié le chronogramme correspondant et changé la valeur de l'offset à 3000 électrons (qui valait 10 000 après un reset), pour reproduire le mode de lecture *FASTR* du détecteur. Par ailleurs, certains effets comme le RSCD n'ont pas été ajoutés dans les simulations, les tests au sol ayant démontré que leur impact était moindre (Argyriou, 2021).

2.4.4 Le package MIRISim-TSO

Afin de prendre en compte les effets de persistance, nous avons créé le package MIRISim-TSO, une librairie *Open Source*⁵ intégralement codé en Python 3 (Martin-Lagarde, 2020; Dyrek, Ducrot et al., 2023), dont le format d'entrée est compatible avec le format de sortie de MIRISim qui correspond à une série temporelle d'intégrations de matrices 3D en DN. Les deux premières dimensions correspondent à la taille du subarray LRS (72 x 416 pixels) et la troisième dimension est le nombre de frames par intégration. L'ajout des effets de persistance se fait en intégrant les équations 2.2, 2.3 et 2.4 entre t et $t + \Delta t_{\text{frame}}$, avec Δt_{frame} le temps de frame et en ajoutant le surplus ou le déficit de signal à la valeur obtenue par MIRISim. Cette opération est appliquée à chaque pixel indépendamment. Le fond observationnel est pris en compte à partir d'une estimation au sol de $110 \text{ e}^- \text{ s}^{-1}$, converti en DN s⁻¹ puis intégré entre t et $t + \Delta t_{\text{frame}}$ afin de l'ajouter à l'échelle de la frame et du pixel. Une fois le fond observationnel ajouté, le bruit de photon peut être appliqué aux simulations. Tout d'abord, le signal S au niveau de chaque frame en DN est converti en électrons à l'aide du gain électronique. Puis, nous faisons un tirage de Poisson que nous appliquons à la différence des frames. Le nombre N d'électrons produits par le détecteur sur la durée d'une frame suit la loi de Poisson

$$\Pr(N = k) = \frac{e^{-Sg} (Sg)^k}{k!} . \quad (2.18)$$

où le produit Sg est le nombre d'électrons en sortie d'un pixel obtenus après un temps de frame. Le bruit de photon en DN correspond à la déviation standard de la distribution de Poisson qui varie en racine de la valeur du signal S_{diff}

$$\sigma = \frac{\sqrt{S_{\text{diff}} g}}{g} . \quad (2.19)$$

5. Le code est disponible librement à l'adresse suivante : https://gitlab.com/mmartin-lagarde/mirisim_tso

où S_{diff} est la valeur du signal en DN correspondant à la différence entre les paires de frames au niveau de chaque pixel. Les fichiers de sortie de MIRISim-TSO sont également des cubes de M intégrations qui sont ensuite combinés dans des fichiers de 2 Go pour respecter le formalisme des fichiers bruts officiels (que l'on appelle fichiers segmentés) dont la structure est celle des fichiers non calibrés *uncal.fits*. Ces fichiers segmentés sont donc constitués de jeux de données 4D ($72 \times 416 \times N$ frames $\times M$ intégrations) qui sont pleinement compatibles avec le pipeline de réduction de données officiel *jwst*.

2.5 Des simulations pour préparer l'arrivée des données : résultats et applications

Dans cette section, je présente les résultats des simulations. Dans un premier temps, je montre le format de sortie des simulations et présente les courbes de lumière spectrales que j'obtiens. Dans un second temps, je discute des performances scientifiques et numériques ainsi que des résultats après application des méthodes de réduction officielles. Enfin, je présente l'ensemble des applications des simulations produites à l'intention de la communauté pour préparer l'arrivée des premières données. Commençons donc par présenter le format des simulations et les résultats obtenus. Mon cas d'étude est la planète WASP-80b, une Jupiter ($R_p = 0.9990 R_{\text{Jup}}$) orbitant très proche de son étoile (~ 3 jours) mais dont la masse et la température d'équilibre sont plutôt proches de celle d'une Neptune chaude (respectivement $M_p = 0.538 M_{\text{Jup}}$ et $T_{\text{eq}} \sim 700$ K) (Triaud, Anderson et al., 2013; Mancini et al., 2014; Triaud, Gillon et al., 2015). Cette planète est donc une cible particulièrement intéressante pour le JWST dont l'observation du transit avec le MIRI LRS était prévue en août 2022 (et a effectivement eu lieu en août 2022) dans le cadre du Temps Garanti d'Observation (PI : Thomas P. Greene, PID : 1177⁶). J'ai donc simulé le transit de cette planète avec le MIRI LRS pour valider la méthode, préparer l'observation et surtout tester les méthodes de réduction de données. La Table 2.2 présente les propriétés de l'étoile et de la planète prises en compte pour produire les simulations.

Les coefficients de l'assombrissement centre-bord ont été calculés à l'aide du package ExoTETHyS (Morello, Claret et al., 2020) selon la prescription de Kipping, 2013. Il s'agit de coefficients quadratiques dont les valeurs sont 0.65 et 0.08. Plus d'information concernant les formalismes des coefficients d'assombrissement centre-bord sont fournies par les modèles analytiques de Claret, 2000. Le modèle atmosphérique est un modèle 1D en équilibre hydrostatique, généré dans une configuration de transit, permettant de produire ainsi le spectre en transmission à l'aide du package Aurora (Welbanks et al., 2019). Nous ne prenons pas en compte les nuages, nous imposons une abondance moléculaire constante en fonction de l'altitude et faisons l'hypothèse d'une thermochimie compatible avec une composition solaire (Partridge et Schwenke, 1997; Rothman et al., 2010; Yurchenko et Tennyson, 2014). Ainsi, pour les quatre molécules H_2O , CH_4 , CO_2 et CO , les log-abondances valent respectivement -3, -4, -5, et -8 (Madhusudhan, 2012; Woitke et al., 2018). De plus, nous ferons l'hypothèse que l'atmosphère suit un profil pression-température isotherme à 700 K, proche de la température d'équilibre de la planète (Triaud, Anderson et al., 2013; Mancini et al., 2014). Enfin, le spectre stellaire intégré dans les simulations est un modèle PHOENIX-ACES (Husser et al., 2013) interpolé à la température et à la métallicité de l'étoile (présentées dans la Table 2.2). Les spectres disponibles s'arrêtent souvent autour de $10 \mu\text{m}$, il est donc nécessaire de les coupler avec un spectre suivant une loi du corps noir.

6. Les détails concernant cette observation sont donnés sur le site : <https://www.stsci.edu/jwst/science-execution/program-information.html?id=1177>

TABLE 2.2 – Paramètres d'entrée d'exoNoodle pour la simulation du transit de la cible WASP-8ob avec le MIRI LRS.

Parameter	Value	Source
T_{eff} (K)	3965 ± 157	Stassun et al., 2019
$\log g$ (dex)	4.620 ± 0.011	Stassun et al., 2019
Metallicity [Fe/H] (dex)	-0.140 ± 0.160	Triaud, Anderson et al., 2013; Bonomo et al., 2017
R_{\star} (R_{\odot})	0.6365 ± 0.0188	Stassun et al., 2019
M_{star} (M_{\odot})	0.6169 ± 0.0202	Stassun et al., 2019
R_{p} (R_{Jup})	$0.9990^{+0.0300}_{-0.0310}$	Triaud, Gillon et al., 2015
M_{p} (M_{Jup})	$0.538^{+0.035}_{-0.036}$	Triaud, Gillon et al., 2015
P (days)	$3.06785234^{+0.00000083}_{-0.00000079}$	Triaud, Gillon et al., 2015
Distance (pc)	49.78760 ± 0.11605	Stassun et al., 2019
i (deg)	$89.02^{+0.11}_{-0.10}$	Triaud, Gillon et al., 2015
a (AU)	$0.0344^{+0.0001}_{-0.0011}$	Triaud, Gillon et al., 2015
e	< 0.0020	Bonomo et al., 2017; Triaud, Gillon et al., 2015; Triaud, Anderson et al., 2013

2.5.1 Images spectrales et courbes de lumière

J'ai donc réalisé une simulation d'un ensemble de 4506 intégrations de 4.611 secondes chacune comprenant 29 frames en suivant le dimensionnement fourni par l'Astronomer's Proposal Tool⁷ (APT), l'outil officiel avec lequel sont faites les propositions d'observation, ou *proposals* en anglais. La simulation est centrée autour du transit de WASP-8ob et permet d'obtenir une série temporelle d'images spectrales produites avec le MIRI LRS. Dans cette simulation, nous prenons en compte les paramètres, bruits et effets listés dans la Sect. 2.4.3. Les tests au sol ont montré que les effets de persistance sont dominés par le response drift au niveau des pixels les plus brillants, nous ajoutons donc le response drift dans les simulations. La Fig. 2.14 présente les résultats obtenus.

A gauche, il s'agit de la courbe de lumière blanche du transit de WASP-8ob, sommée entre 5 et 12 μm , obtenue avec ExoNoodle. Chaque point de la courbe de lumière blanche se décline sous la forme d'un spectre qui est ensuite converti en image spectrale avec MIRISim (image de droite). L'image de droite correspond donc à une image spectrale à une phase orbitale donnée. L'image spectrale a les dimensions du MIRI LRS, soit 72 x 416 pixels, le maximum du spectre se situe au niveau de la ligne de pixels 390 et la trace s'étend jusqu'au pixel 150, correspondant à 12 μm . Nous produisons au total 4506 (nombre d'intégrations) x 29 (nombres de frames) spectres en DN, qui sont ensuite modifiés par le package MIRISim-TSO pour inclure le response drift. Après avoir produit les simulations, nous utilisons le pipeline de réduction de données jwst et le pipeline d'analyse Eureka!⁸ (Bell, Ahrer et al., 2022). Dans un souci de clarté, précisons les rôles de chacun des packages jwst et Eureka!. Lorsque les données nous parviennent du télescope, elles sont sous un format dit "brut" correspondant au format du mode de lecture du détecteur : Y x Z pixels x N frames x M intégrations, dans l'unité de sortie du convertisseur analogique-numérique, en DN. Les scientifiques sont intéressés par des niveau de flux calibrés et non pas de signal en sortie de la chaîne de détection. Le pipeline officiel jwst est donc automatiquement appliqué sur les données par le STScI qui opère le télescope à Baltimore aux Etats-Unis, pour fournir aux scientifiques des données calibrées. Ce pipeline est constitué

7. L'outil est disponible à l'adresse suivante : <https://www.stsci.edu/scientific-community/software/astronomers-proposal-tool-apt>

8. Le pipeline Eureka! est disponible à l'adresse suivante : <https://eurekadocs.readthedocs.io/en/latest/>

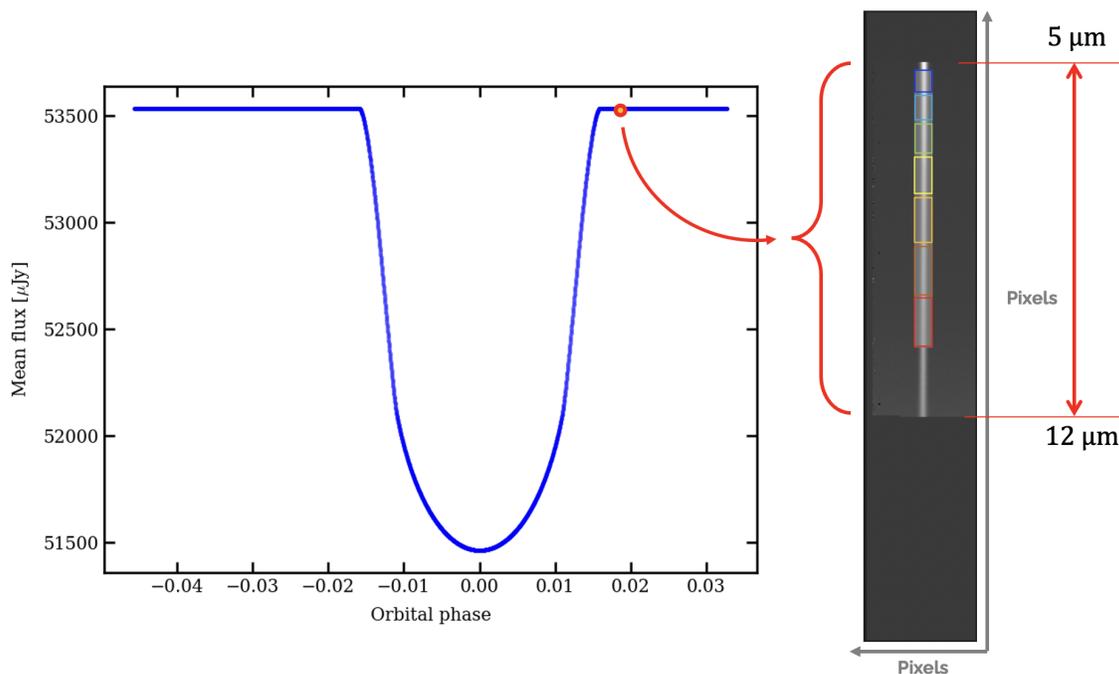


FIGURE 2.14 – Résultats de simulation. *A gauche* : Courbe de lumière blanche entre 5 et 12 μm de WASP-8ob produite avec ExoNoodle en flux absolu. *A droite* : Exemple d'une image spectrale produite par simulation après les étapes MIRISim, MIRISim-TSO et soustraction du fond observationnel. Chaque point de la courbe de gauche est apparié à un spectre du système étoile-planète à une phase donnée, et donc à une image spectrale en sortie des simulations.

de deux étapes, *Stage 1* et *Stage 2*. La première étape corrige des systématiques issues du détecteur, explicitées dans la Sect. 2.2.5 et convertit les rampes en pente pour obtenir un flux en DN s^{-1} . La seconde étape permet, entre autres, de calibrer le flux en MJy sr^{-1} . Le package Eureka! permet d'analyser des données à partir des niveaux de flux et *in fine* d'obtenir la courbe de lumière ou le spectre atmosphérique souhaité. Nous utilisons donc ces deux outils pour la réduction des données, l'un après l'autre. Précisons que l'ensemble des étapes de la réduction et de l'analyse des données sont explicitées dans le Chap. 3.

De manière plus explicite, pour la simulation de WASP-8ob avec le MIRI LRS, à partir des 4506×29 images spectrales, nous devons convertir les rampes en pente afin de produire une seule image par intégration en DN s^{-1} . L'étape suivante est celle de la soustraction du fond observationnel et de la division par le champ plat, également expliquées en détail dans le Chap. 3. La soustraction du fond est faite ici en suivant l'étape officielle du pipeline, qui non seulement soustrait le fond mais coupe l'image spectrale entre 5 et 12 μm . L'image spectrale de la Fig. 2.14 est donc tronquée au-delà de 12 μm et au-dessus de 5 μm . Cette étape devrait être supprimée avant l'arrivée des premières données, ce qui nous permettrait d'accéder à l'ensemble de l'image spectrale, même après soustraction du fond.

Nous devons ensuite procéder à l'extraction du spectre, ce qui correspond à une photométrie optimisée pour toutes les longueurs d'onde à la résolution d'origine du LRS. Cela nous permet d'obtenir un spectre 1D par intégration. En sommant l'ensemble des spectres 1D entre 5 et 12 μm , nous obtenons la courbe de lumière blanche normalisée en sortie des simulations, présentée sur l'image du haut de la Fig. 2.15, sur laquelle l'effet de persistance

est visible au début de l'observation. La seconde partie de la Fig. 2.15 présente les courbes de lumière chromatiques extraites entre 5 et 12 μm . Chaque courbe est moyennée entre deux bornes spectrales d'une largeur de 0.43 μm . Sur la figure, nous comptons 11 canaux spectraux, séparés les uns des autres par un décalage de 0.025, dans un souci de lisibilité. Les canaux sont présentés dans l'ordre croissant, de bas en haut. La présentation sous la forme de courbes de lumière chromatiques permet de visualiser la dépendance en flux de l'effet de persistance ainsi que la dépendance en longueur d'onde de la profondeur de transit. L'unité de temps en sortie des simulations n'est plus la période orbitale, unité de sortie d'ExoNoodle, mais une unité de temps absolue, le *Barycentric Modified Julian Date Temps Dynamique Barycentrique* (BMJD_TDB) qui permet d'exprimer les dates d'observation. Dans nos simulations, la date choisie est celle prévue pour les observations JWST (initialement prévues en août 2022), les phases orbitales de la planète sont donc calibrées en fonction de cette date.

2.5.2 Le spectre atmosphérique

La robustesse et la validation des simulations réside dans la capacité à reproduire, en sortie, le modèle de spectre atmosphérique fourni en entrée. En d'autres termes, les barres d'erreur des points spectraux en sortie des simulations doivent inclure les points du modèle atmosphérique. La manière dont nous produisons le spectre atmosphérique est une étape de réduction extrêmement importante puisqu'elle est fondée sur des méthodes d'inférence bayésienne (l'ensemble de la méthodologie de la réduction des données est explicitée dans le Chap. 3). Nous commençons par choisir un nombre donné de canaux spectraux sur lesquels le flux est moyenné. Un modèle de transit planétaire est ensuite ajusté sur chacune des courbes de lumière spectrales, en utilisant les valeurs des paramètres orbitaux obtenues par ajustement de la courbe de lumière blanche comme information *a priori* pour l'ajustement des courbes de lumière spectrales. Cette étape d'ajustement inclut un modèle de systématiques instrumentales temporelles, ce qui nous permet de corriger des effets de persistance. Le paramètre que nous cherchons à ajuster est le rapport $(R_p/R_*)^2$ pour chaque canal spectral, ce qui nous permet de construire le spectre atmosphérique en sortie. La Fig. 2.16 présente 36 points spectraux obtenus par ajustement de 36 courbes de lumières entre 5 et 12 μm . Chaque point s'accompagne de barres d'erreurs issues de l'ajustement du modèle ainsi que de la propagation des erreurs de réduction. Les points obtenus sont en excellente adéquation avec le modèle de spectre en transmission de l'atmosphère, fourni en entrée des simulations (la courbe rouge sur la figure).

2.5.3 Évaluation des performances de la chaîne de simulation

2.5.3.1 Distribution des résidus d'ajustement du modèle

La méthode de réduction utilisée est le package *Eureka!* qui nous a permis de produire, entre autres, le spectre atmosphérique en sortie des simulations, présenté sur la Fig. 2.16. Rappelons que les simulations ont pour objectif premier de tester la robustesse des méthodes de réduction. Dans ce contexte, j'ai collaboré avec NASA Ames, équipe qui a développé l'outil *Eureka!* pour l'établissement des performances de la réduction et surtout la capacité à corriger des effets de persistance. Nous établissons la robustesse de l'obtention du spectre en étudiant les résidus de l'ajustement des modèles de transit et de systématiques sur les simulations. Les résidus d'ajustement $R(t)$ s'expriment comme

$$R_\lambda(t) = D_\lambda(t) - M_\lambda(t) . \quad (2.20)$$

où $M_\lambda(t)$ est le modèle et $D_\lambda(t)$ est la courbe de lumière spectrale que nous ajustons. Les résidus temporels ne doivent présenter aucun motif ni variabilité temporelle, et doivent suivre une loi Normale qui s'apparente à un bruit blanc. Nous déterminons l'écart-type des résidus comme la distance de chacun des points simulés aux points du modèle, que nous exprimons par la moyenne quadratique (ou *root mean square*, RMS, en anglais) en fonction

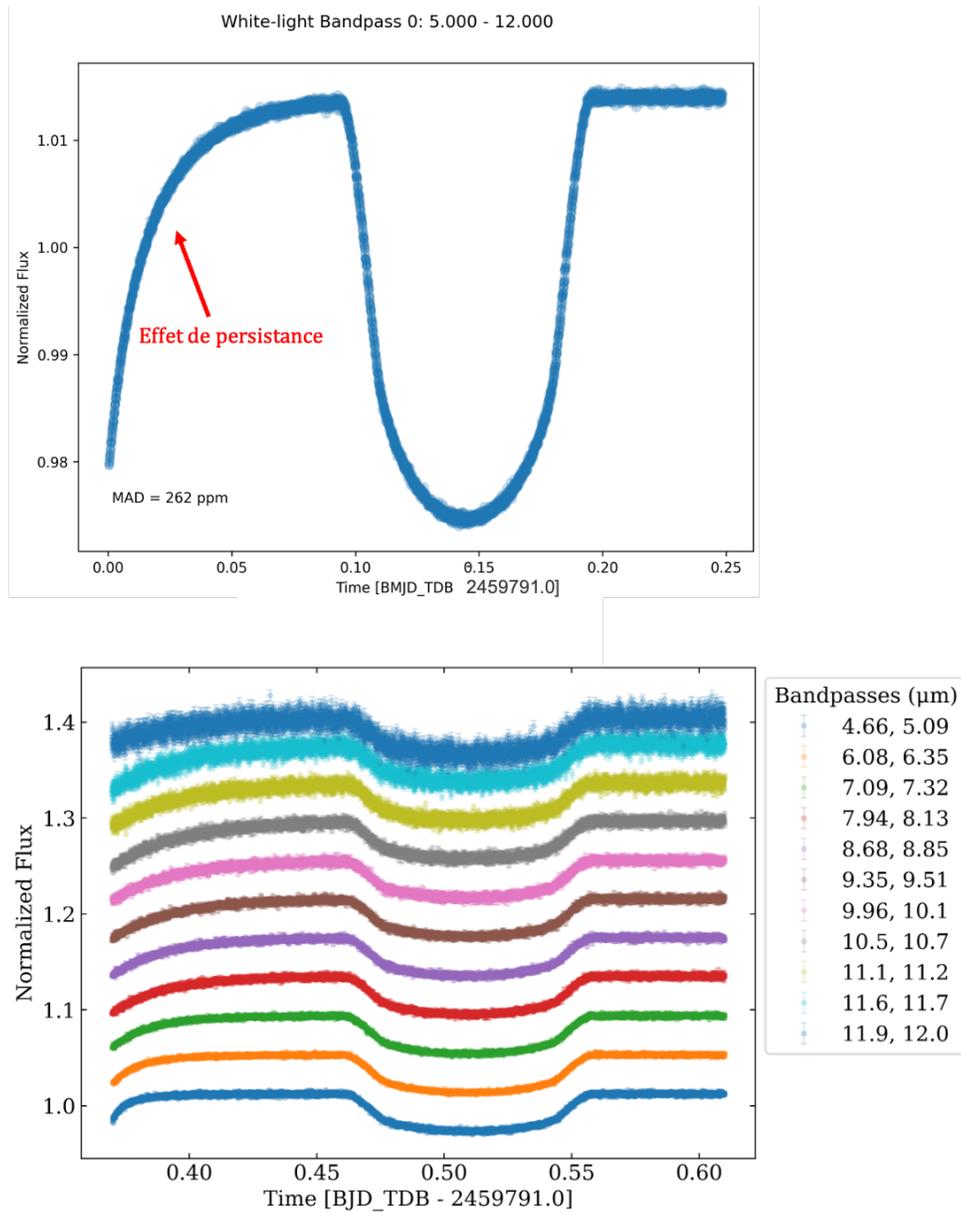


FIGURE 2.15 – *Figure du haut*: Courbe de lumière blanche en sortie des simulations après réduction des données par les pipelines `jwst` et `Eureka!`. Le response drift apparaît au début de l'observation. La dispersion temporelle des points de la simulation est donnée par la déviation absolue moyenne (MAD). *Figure du bas*: 11 courbes de lumière chromatiques, présentées avec un décalage de 0.025 pour plus de clarté. Les courbes sont dans l'ordre croissant des longueurs d'onde, de bas en haut. L'image du haut est produite à l'aide du package `Eureka!` (Bell, Ahrer et al., 2022) et l'image du bas est produite à l'aide du package `chromatic`.

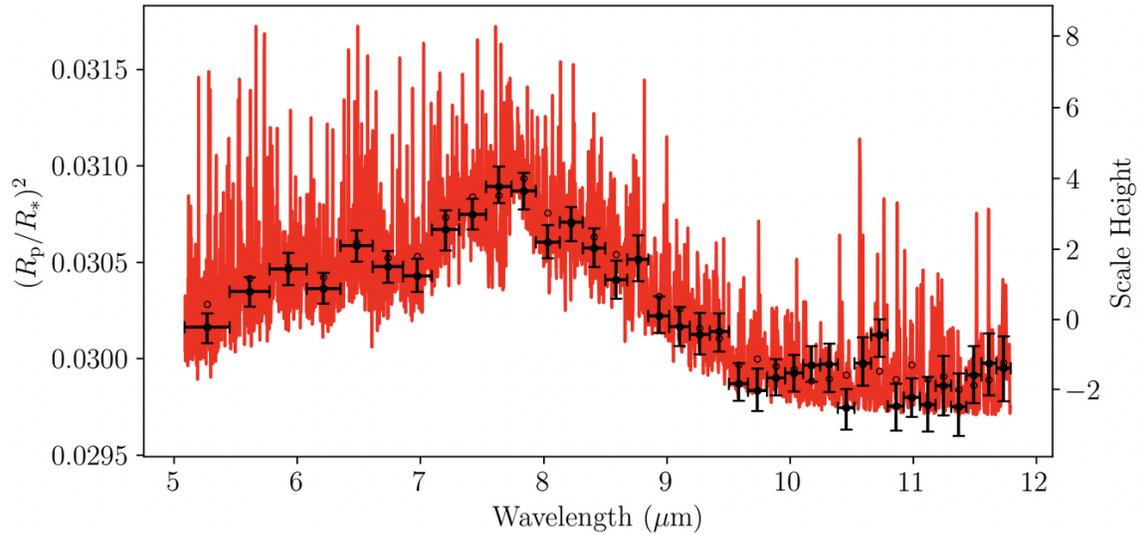


FIGURE 2.16 – Spectre en transmission de l’atmosphère de WASP-8ob obtenu après réduction des données (points noirs) et comparaison au modèle atmosphérique en entrée des simulations (courbe rouge). L’unité du spectre est le rapport $(R_p/R_*)^2$ et l’échelle à droite de la figure présente la hauteur d’échelle de l’atmosphère, soit l’altitude correspondant aux variations spectrales. Les cercles noirs correspondent à la moyenne des points du modèle en entrée calculés sur un nombre de points correspondant à la taille des bins spectraux en sortie. Spectre obtenu en sortie du package de réduction de données *Eureka!* (Bell, Ahrer et al., 2022).

de différentes échelles temporelles de la courbe de lumière, ou encore appelée la variance d’Allan (Howe, 1995). En d’autres termes, nous calculons la moyenne quadratique sur plusieurs ensembles de points de données, allant de seulement quelques points à l’ensemble des points de la courbe de lumière. Un ajustement est validé si la moyenne quadratique suit une loi Normale quel que soit l’échelle considérée. Les résultats d’ajustement de la courbe de lumière blanche des simulations sont présentés sur la Fig. 2.17. L’image de gauche présente la valeur de la moyenne quadratique (en ppm) en fonction des échelles temporelles, qui suit une loi Normale à toutes les échelles. Les résidus gaussiens à grandes échelles démontrent la capacité de la méthode de réduction de données à prendre en compte les variabilités temporelles basse-fréquence, dont les effets de persistance. Cela signifie que les résidus ne présentent plus de bruit corrélé temporellement. L’image de droite présente la distribution des résidus, qui suivent ici une loi Normale.

2.5.3.2 Temps de calcul numérique

L’une des spécifications des simulations est le temps de calcul numérique. En effet, chaque observation compte des milliers, voire des dizaines de milliers d’intégrations pour un ensemble de 72×416 pixels, pour une seule observation. Les outils comme *MIRISim* n’ont pas été prévus pour être utilisés pour des séries temporelles de spectres mais seulement pour générer un unique spectre ou une unique image. La prise en compte de séries temporelles requiert l’utilisation en parallèle du code *MIRISim*. Pour ce faire, nous faisons appel au package *pipeline-parallel*⁹. Ce package a été développé à l’origine pour le pipeline de réduction des données *JWST* , optimisé pour le langage Python. Les besoins en mémoire vive du pipeline sont de l’ordre de grandeur de plusieurs dizaines de Go (jusqu’à

9. Le code est disponible à l’adresse suivante : https://gitlab.com/jwst_fr/pipeline_parallel

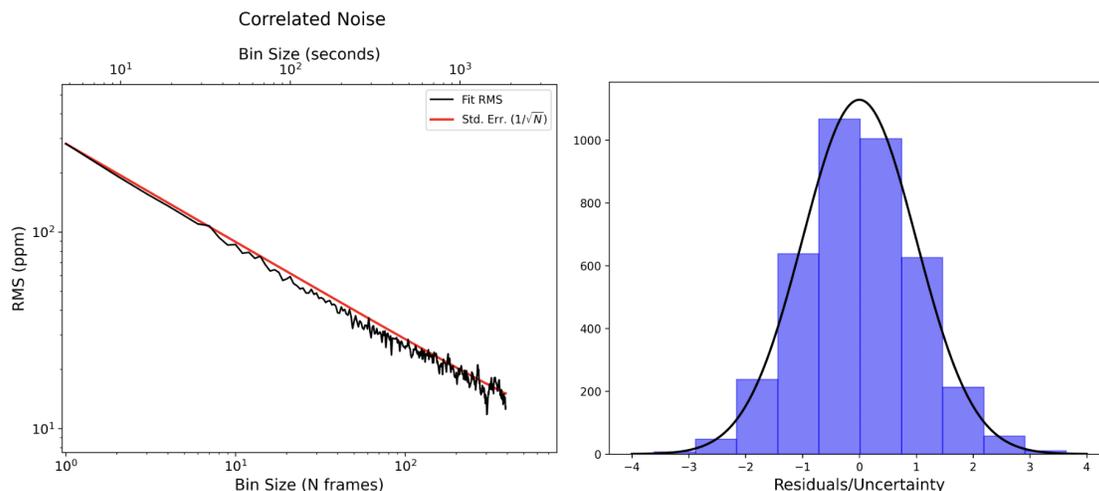


FIGURE 2.17 – À gauche : Variance d’Allan (Howe, 1995) des résidus de l’ajustement du modèle sur la courbe de lumière blanche des simulations de WASP-8ob (courbe en noir), en accord avec un bruit blanc à toutes les échelles temporelles (courbe en rouge). À droite : Distribution des résidus de l’ajustement des simulations, suivant une loi Normale centrée réduite. Figure réalisée avec la méthode de réduction de données Eureka! (Bell, Ahrer et al., 2022).

~40 Go). Le package `pipeline-parallel` est fondé sur la fonction `ProcessPool()` qui permet d’exécuter un grand nombre de fonctions suivant le parallélisme embarrassant (ou *embarassingly parallel* en anglais). Cette méthode de calcul parallèle ne requiert aucune communication entre les sous-tâches. La création de chaque image spectrale par `MIRISim` est indépendante de la suivante, nous pouvons donc utiliser le package `pipeline-parallel` et ainsi lancer en parallèle chacune des intégrations. De plus, nous utilisons plusieurs noeuds de calcul (jusqu’à 6 noeuds) en parallèle pour réduire davantage les temps de calcul de `MIRISim` et surtout `MIRISim-TSO`. La Fig. 2.18 présente les performances en temps de calcul des codes `MIRISim` et `MIRISim-TSO` ainsi que les deux étapes du pipeline de réduction des données `jwst`, qui sont explicitées dans le Chap. 3, en fonction de la taille des fichiers reçus en entrée d’un package donné.

La parallélisation du code a permis de réduire le temps de calcul de `MIRISim` de ~18h pour 4506 intégrations à ~3h, pour un ensemble de fichiers de séries temporelles de spectres en entrée de moins de 2 Go. La sortie de `MIRISim` est un ensemble de 4506 images spectrales de plus de 12 Go. La parallélisation sur plusieurs noeuds de calcul a permis de réduire le temps de calcul de `MIRISim-TSO` à une demi-heure, produisant en sortie un ensemble de 4506 images spectrales de ~12 Go également. Le pipeline de réduction de données `jwst` tourne quant à lui entre une demi-heure et une heure et demie pour 4506 images spectrales.

2.5.4 Applications des simulations

Le réalisme et l’exhaustivité de mon outil m’ont valu une place d’honneur dans la communauté. Ainsi, j’ai été invitée par l’Early Release Science (ERS) exoplanetary transit team à fournir plusieurs jeux de simulation officiels pour la préparation des méthodes de réduction du JWST. L’ERS est le premier programme d’observation du JWST dont l’objectif est de présenter les premiers résultats scientifiques obtenus par les instruments (Stevenson, Lewis et al., 2016; Bean, Stevenson et al., 2018). Il s’agit d’un programme à haute visibilité qui suit une politique *Open Science* permettant de rendre immédiatement publiques l’ensemble des données acquises. Il s’agit également d’un programme

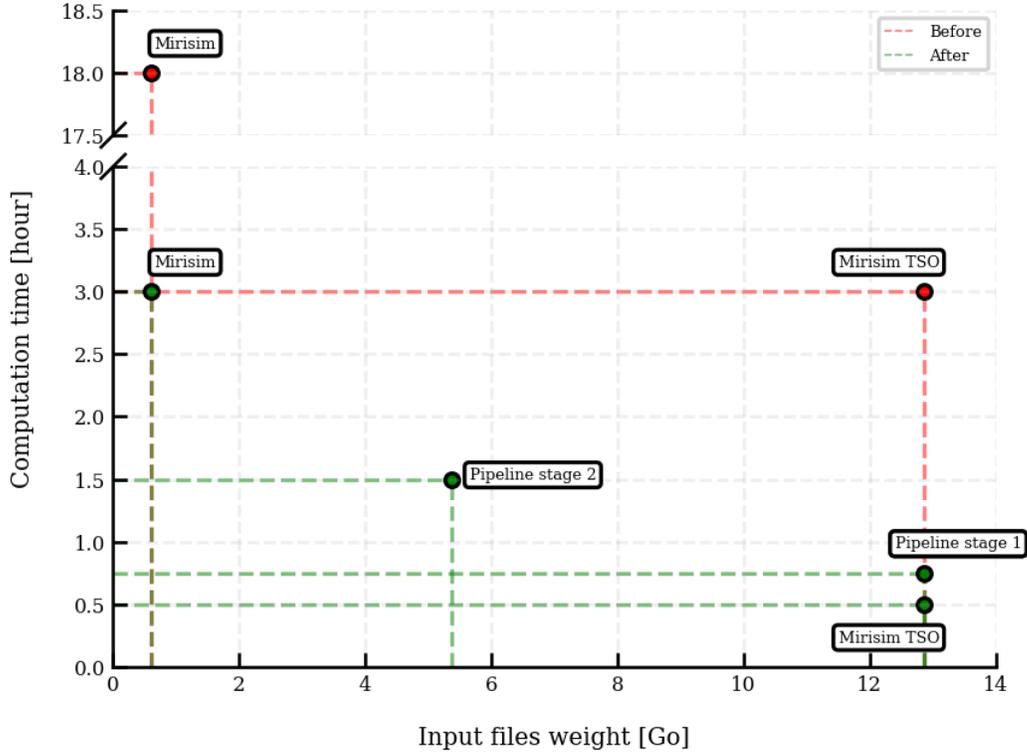


FIGURE 2.18 – Temps de calcul des différents outils utilisés pour les simulations ainsi que pour les deux étapes de la réduction de données `jwst`. Ce temps de calcul est exprimé en fonction de la taille des fichiers en entrée du code considéré. Le temps de calcul du code `MIRISim` et de `MIRISim-TSO` est réduit d'un facteur 6 pour 4506 intégrations après parallélisation.

collaboratif dont une majorité des membres de la communauté internationale font partie. Ce programme est précédé de plusieurs étapes cruciales de préparation dont les Data Challenges qui réunissent, entre autres, les développeurs des codes de réduction, codes qui seront ensuite utilisés publiquement pour analyser les futures données du JWST. Dans ce contexte, la fourniture de simulations robustes et réalistes à la communauté représente un enjeu pour la bonne préparation des méthodes de réduction à l'arrivée des premières données.

2.5.4.1 Préparer l'Early Release Science

Entre décembre 2021 et avril 2022, j'ai donc fourni plusieurs jeux de simulations avec le MIRI LRS de différentes cibles prévues pour l'ERS. J'ai notamment simulé l'observation de l'exoplanète NGTS-10b, initialement prévue comme cible, puis dans un second temps, l'observation de **WASP-43b**, cible officielle de l'ERS de MIRI. Ces deux exoplanètes sont des Jupiter chaudes orbitant très proches de leurs étoiles, avec des périodes orbitales respectivement de 0.76 (McCormac et al., 2020) et 0.81 jour (Hellier, Anderson, Cameron, Gillon, Jehin et al., 2011). La proximité avec l'étoile permet d'observer une courbe de phase complète de la planète en moins de ~ 30 h et donc de

réaliser les spectres d'émission thermique côté jour (spectroscopie d'éclipse), de transmission atmosphérique (spectroscopie de transit) et surtout d'émission thermique côté nuit (spectroscopie de la courbe de phase). J'ai donc fourni trois niveaux de données simulées :

1. Les données brutes en DN ou *_uncal* : les images spectrales brutes en sortie des simulations sous la forme de 72×416 pixels \times N frames \times M intégrations,
2. Les données en DN s^{-1} ou *_rateints* : les images spectrales après conversion des rampes en pentes sous la forme de 72×416 pixels \times N intégrations,
3. Les données dites "calibrées" ou *_calints* pour laquelle nous n'appliquons pas de calibration en flux mais juste la division par le champ plat et la soustraction du fond observationnel (en DN s^{-1}) : sous la forme de 72×416 pixels \times N intégrations.

Les simulations brutes de NGTS-10b¹⁰ comptent 1857 intégrations de 300 frames chacune, réparties en 43 fichiers segmentés de 2 Go pour lesquelles j'ai réalisé deux jeux de données, avec et sans effets de persistance. Cela a permis aux développeurs des méthodes de réduction de tester la robustesse de leur correction des systématiques temporelles basse-fréquence. La notice d'explication des simulations fournie à la communauté dans le cadre du Data Challenge MIRI 2022 est fournie en Annexe A. Les simulations de WASP-43b comptent 6799 intégrations de 63 frames chacune, réparties en 19 fichiers segmentés de 2 Go. À titre d'exemple, la Fig. 2.19 présente la courbe de lumière blanche de WASP-43b obtenue après réduction des simulations. La courbe de lumière est centrée sur l'éclipse à $7.75 \mu\text{m}$ et agrandie pour montrer les variations de la courbe de phase. Le modèle issu des paramètres obtenus par ajustement des points simulés (courbe rouge) est en parfait accord avec le modèle injecté dans les simulations (courbe bleue).

2.5.4.2 Préparer le Temps Garanti d'Observation

Dans le cadre de la préparation du Temps Garanti d'observation (GTO) de l'instrument MIRI dont le *Principal Investigator* est Pierre-Olivier Lagage, et parmi l'ensemble des cibles prévues, l'une des cibles choisie demande une attention très particulière : la planète rocheuse et tempérée **TRAPPIST-1b**. TRAPPIST-1b est la première exoplanète d'un système de 7 planètes rocheuses orbitant une étoile ultra-froide, ou naine M. Les naines M sont les candidates les plus propices à la recherche et à la caractérisation des planètes rocheuses tempérées, leur transit devenant détectable grâce aux rayons stellaires ~ 10 fois plus petits que celui de notre Soleil. L'étude de ces étoiles a conduit à la détection du système TRAPPIST-1 (Gillon, Triaud, Demory et al., 2017), aujourd'hui le meilleur candidat observationnel pour l'étude des planètes rocheuses et tempérées. L'âge du système est estimé à 7 milliards d'années (Burgasser et Mamajek, 2017a) et les 7 planètes forment une chaîne de résonance de Laplace, trois par trois. Le système étant extrêmement compact, les planètes sont confrontées à des effets de marée considérables. De plus amples détails sur ce système sont fournis dans le Chap. 4.

Dans de telles circonstances, nous ne savons pas si les planètes du système ont pu conserver une atmosphère ou non. Nous ne savons pas non plus si elles ont eu une atmosphère primitive riche en éléments volatils comme l'hydrogène ou l'hélium et qui aurait pu être substituée par une atmosphère secondaire. Nous cherchons à répondre à ces questions en étudiant la planète la plus proche : TRAPPIST-1b. En effet, TRAPPIST-1b étant bien plus irradiée que les autres planètes, il est très improbable qu'elle ait pu conserver une atmosphère. S'il s'avérait qu'elle ait effectivement conservé une atmosphère, cela nous donnerait des indices précieux sur les compositions atmosphériques des autres planètes, dont trois sont dans la zone habitable de l'étoile (Kasting et al., 2014).

Les transits de ces planètes ont déjà été détectés et étudiés en photométrie uniquement par plusieurs observatoires dont *Spitzer* (Ducrot et al., 2020) mais aucune éclipse de ces planètes n'a jamais été détectée. L'un des pro-

10. Les simulations pour l'ERS sont accessibles librement à l'adresse <https://ers-transit.github.io/data-challenge-with-simulated-data.html>

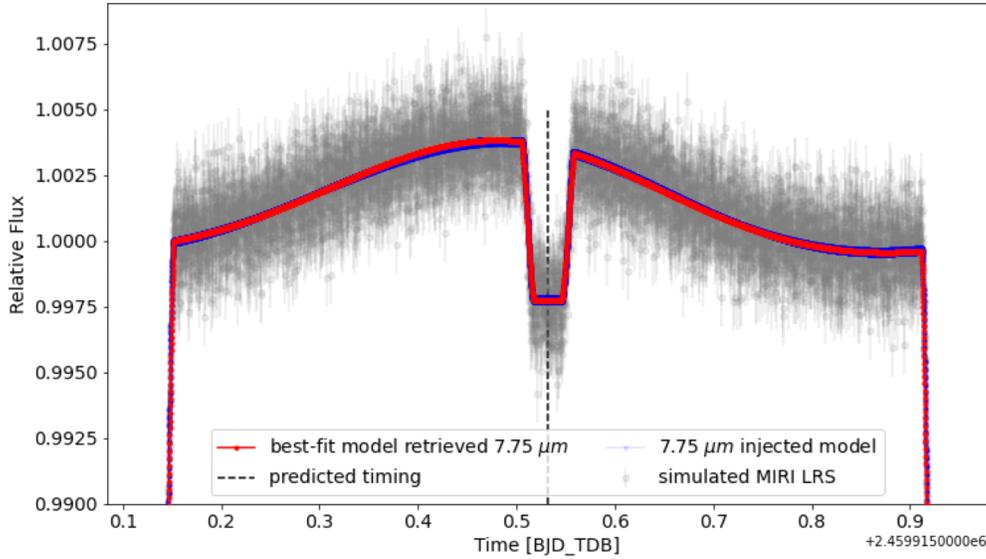


FIGURE 2.19 – Courbe de phase des simulations MIRI LRS de WASP-43b à $7.75 \mu\text{m}$. Le meilleur modèle issu de l’ajustement des points simulés (en rouge) est comparé au modèle injecté dans les simulations (courbe bleue). Le modèle injecté est fourni par P. Cubillos. Réduction des simulations réalisée avec *Eureka!* (Bell, Ahrer et al., 2022).

grammes du GTO (PID 1279)¹¹ est donc dédié à l’observation de 5 éclipses de TRAPPIST-1b. Les observations sont prévues non pas en spectroscopie mais en photométrie à bande large avec l’imageur de MIRI à $12.8 \mu\text{m}$. De plus, ce programme GTO est couplé à un programme similaire à $15 \mu\text{m}$ (PID 1177)¹². L’objectif de ces deux programmes est non seulement de détecter l’émission de cette exoplanète rocheuse tempérée mais de sonder la bande d’émission du CO_2 , à la recherche d’une atmosphère de CO_2 (Lustig-Yaeger et al., 2019a).

J’ai donc simulé 5 éclipses de TRAPPIST-1b en photométrie avec l’imageur de MIRI. Chaque observation se compose de 280 images en série temporelle centrée à $12.8 \mu\text{m}$, avec une bande passante de $\Delta\lambda = 2.4 \mu\text{m}$ et une FWHM égale à 0.420 arcsec ¹³. Nous avons donc un total de 1400 images pour 5 observations. Par souci de réalisme, les dates de début de chacune des observations ont été variées en fonction des différentes dates d’observation prévues. L’ensemble des propriétés orbitales de TRAPPIST-1b peuvent être trouvées dans le Chap. 4. La Fig. 2.20 montre une des images brutes en sortie des simulations. La partie gauche est l’image complète de 1024×1024 pixels. La source TRAPPIST-1 a été placée au milieu du subarray de l’imageur. L’image de droite est un agrandissement de 22×22 pixels qui montre la PSF de TRAPPIST-1 à $12.8 \mu\text{m}$. Les deux images ont été colorisées.

L’extraction du flux observé pour chaque image se fait par photométrie d’ouverture de la tâche d’Airy. Ainsi, chaque image nous donne une valeur de niveau de flux ce qui nous permet d’obtenir une courbe photométrique du système étoile-planète. Nous réalisons 5 observations pour augmenter le signal-sur-bruit à 5. En d’autres termes, il

11. Le programme d’observation JWST 1279 est disponible ici : <https://www.stsci.edu/jwst/phase2-public/1279.pdf>

12. Le programme d’observation JWST 1177 est disponible ici : <https://www.stsci.edu/jwst/phase2-public/1177.pdf>

13. Les informations relatives à l’imagerie à bande large de MIRI peut être trouvé ici : <https://jwst-docs.stsci.edu/jwst-mid-infrared-instrument/miri-instrumentation/miri-filters-and-dispersers>

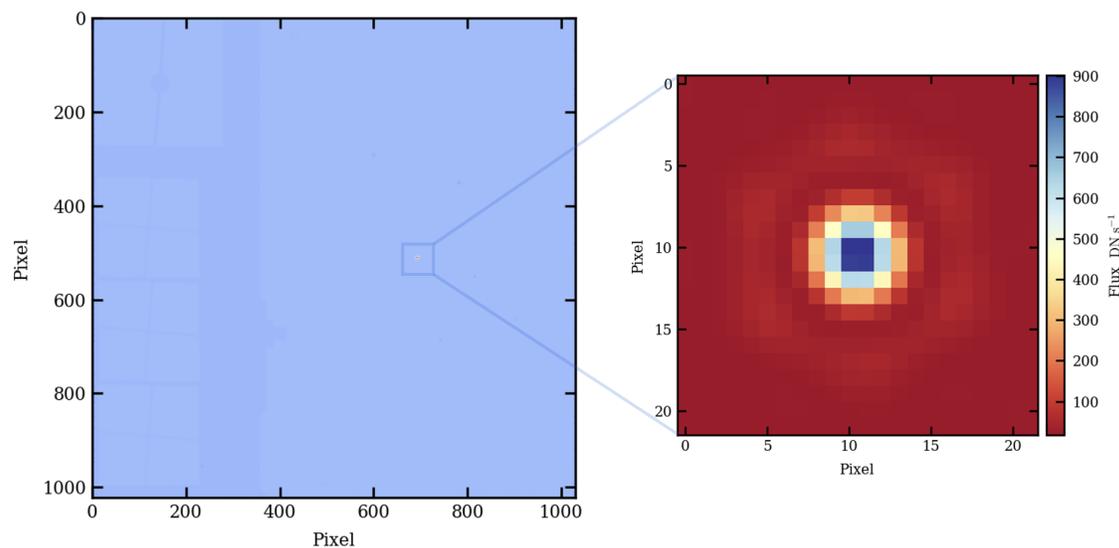


FIGURE 2.20 – Exemple d’une image brute en sortie des simulations MIRISim et MIRISim-TSO de l’observation de TRAPPIST-1b avec l’imageur de MIRI à $12.8 \mu\text{m}$. L’observation prévue est une série temporelle photométrique de l’éclipse de TRAPPIST-1b dont nous présentons ici l’image à mid-éclipse. *À gauche* : Image brute de 1024×1024 pixels de TRAPPIST-1 par l’imageur à bande large de MIRI à $12.8 \mu\text{m}$. L’étoile apparaît au centre du subarray de l’imageur. *À droite* : Agrandissement de 22×22 pixels de l’étoile qui permet de faire apparaître la PSF de TRAPPIST-1 à $12.8 \mu\text{m}$. Nous voyons la tache d’Airy ainsi que le premier anneau de la PSF.

nous faut au moins 5 observations photométriques superposées pour rendre l’éclipse de TRAPPIST-1b détectable à 5σ . La Fig. 2.21 présente la courbe de lumière photométrique simulée des 5 éclipses superposées de TRAPPIST-1b (image en haut à gauche). Les points en noir sur la courbe sont des moyennes temporelles de 8 points consécutifs. Cette technique de moyennage s’appelle le *binning temporel* et permet de réduire les barres d’erreur de chaque point moyenné et donc d’augmenter le signal-sur-bruit. L’observation est entièrement dominée par l’effet de persistance et l’éclipse, qui est agrandie en haut à droite, est totalement noyée dans les systématiques instrumentales. L’enjeu repose alors sur notre capacité à en extraire le signal. Nous venons donc ajuster un modèle d’éclipse couplé à un modèle de systématiques (courbe en rouge). L’ajustement des systématiques instrumentales permet de corriger la courbe de lumière, présentée au milieu en bas et ainsi de prédire une détection de l’éclipse à $\sim 3\sigma$. L’ensemble de l’analyse des simulations y compris l’ajustement du modèle sont faits avec l’outil *trafit* (Gillon, Deming et al., 2010; Gillon, Triaud, Fortney et al., 2012; Gillon, Demory et al., 2014).

2.6 Conclusion et perspectives

Dans ce chapitre, j’ai présenté les simulations réalistes d’observations d’exoplanètes en transit avec le spectromètre basse résolution (LRS) du spectro-imageur en infrarouge moyen (MIRI) du JWST allant de 5 à $12 \mu\text{m}$ avec une résolution de $R \sim 100$ à $7.5 \mu\text{m}$. La caractérisation des atmosphères d’exoplanètes représente un défi d’observation puisque les signaux que nous cherchons à caractériser sont très faibles, de l’ordre de la dizaine à la centaine de ppm. Ces signaux sont perdus dans les systématiques instrumentales. L’enjeu repose alors sur notre capacité à en extraire ces signaux et donc à réduire les données. La robustesse des méthodes de réduction ne peut se vérifier que

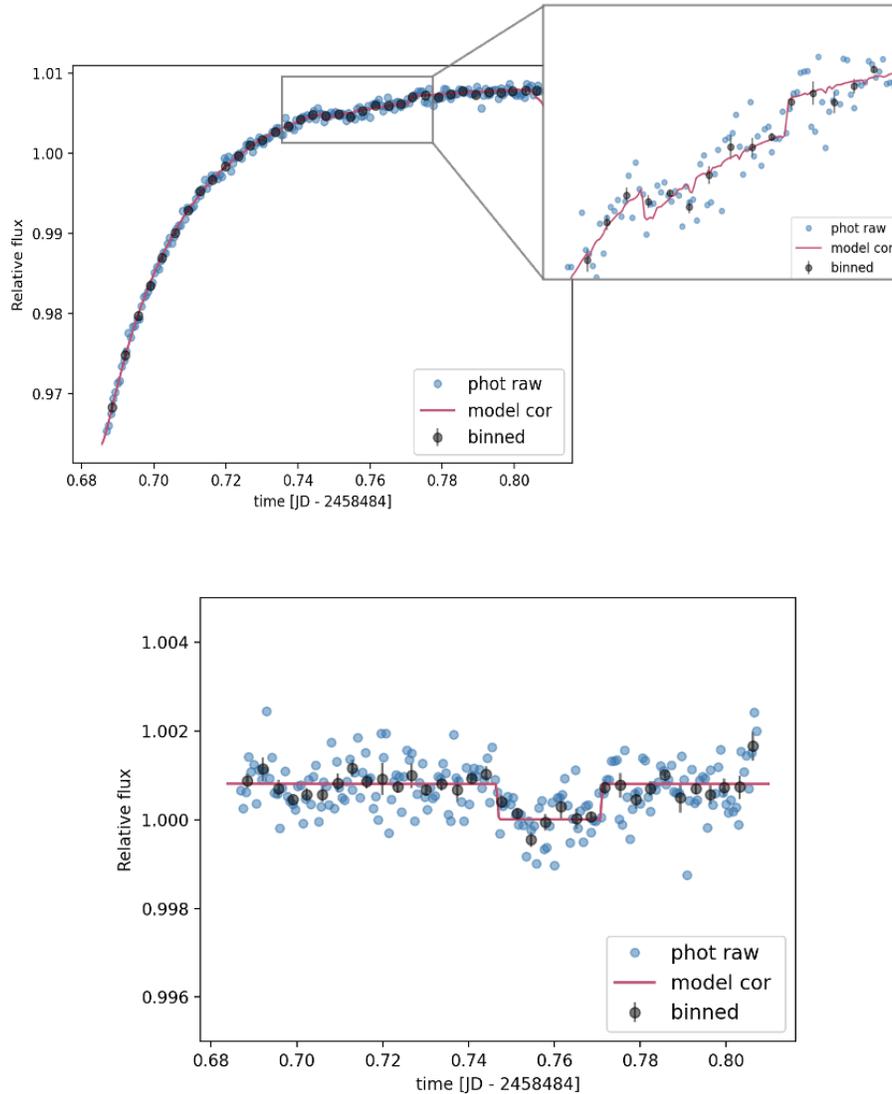


FIGURE 2.21 – *En haut à gauche* : Simulation de 5 courbes de lumières photométriques superposées de l'éclipse de TRAPPIST-1b obtenues par l'imagerie de MIRI à $12.8 \mu\text{m}$. Les points en noir sur la courbe sont des moyennes temporelles de 8 points consécutifs. L'observation est entièrement dominée par l'effet de persistance. *en haut à droite* : Agrandissement centré sur l'éclipse de TRAPPIST-1b. *En bas au milieu* : Ajustement d'un modèle d'éclipse et de systématiques instrumentales (courbe en rouge) permettant de corriger la courbe de lumière de prédire une détection de l'éclipse à $\sim 3\sigma$. Les simulations ont été analysées avec le package `trafit` (Gillon, Deming et al., 2010; Gillon, Triaud, Fortney et al., 2012; Gillon, Demory et al., 2014) et sont présentées ici avec l'aimable autorisation de E. Ducrot.

par l'analyse de simulations réalistes qui prennent en compte l'ensemble des bruits, biais et instabilités temporelles susceptibles de mettre à mal les observations d'exoplanètes en transit. Ainsi, les simulations que j'ai créées incluent la

modélisation du système exoplanétaire, le télescope et son chemin optique, l'instrument et sa chaîne de détection.

- J'ai créé des simulations à l'aide des outils ExoNoodle (Martin-Lagarde, 2020; Martin-Lagarde et al., 2020) qui permet de modéliser la série temporelle de spectres du système étoile-planète dont le flux est reçu à la pupille d'entrée du télescope, MIRISim (Klaassen et al., 2020) qui simule l'ensemble de la chaîne de détection de MIRIm à partir des PSFs normalisées à l'entrée de l'instrument jusqu'à la sortie du signal numérique et enfin MIRISim-TSO (Martin-Lagarde, 2020; Dyrek, Ducrot et al., 2023) qui permet d'ajouter les effets de persistance dans les simulations;
- J'ai démontré les performances des simulations en les appliquant au cas d'étude WASP-8ob, dans le cadre du Temps Garanti d'Observation (GTO) (PI : Thomas P. Greene, PID : 1177), en collaboration avec NASA Ames. L'ajustement d'un modèle de transit et d'un modèle de systématiques instrumentales permet à la fois de corriger les dérives temporelles et d'obtenir un spectre en sortie dont les barres d'erreurs contiennent le spectre fourni comme modèle en entrée et donc de valider les simulations. Ces résultats permettent de tester la robustesse des méthodes de réduction et donc de les perfectionner en attendant l'arrivée des premières données;
- J'ai fourni les simulations officielles de l'Early Release Science (ERS) exoplanetary transit team (Stevenson, Lewis et al., 2016; Bean, Stevenson et al., 2018) dans le cadre des Data Challenges MIRI pré et post-lancement en 2021 et 2022. L'objectif de ces simulations était d'aider la communauté et, entre autres, les développeurs des codes de réduction. Ces codes seront ensuite utilisés publiquement pour analyser les futures données du JWST. J'ai donc simulé les courbes de phase complètes de deux Jupiter Chaudes NGTS-10b (McCormac et al., 2020) et WASP-43b (Hellier, Anderson, Cameron, Gillon, Jehin et al., 2011), simulations qui sont accessibles publiquement suivant la politique *Open Science* de l'ERS;
- Enfin, j'ai démontré la détectabilité de l'émission côté jour de l'exoplanète rocheuse et tempérée TRAPPIST-1b avec 5 observations photométriques MIRI à bande large à 12.8 μm et 5 autres à 15 μm . Ces simulations permettent de préparer les futures observations des GTO 1279 (PI : Pierre-Olivier Lagage) et 1177 (PI : Thomas P. Greene). L'objectif de ces deux programmes est très ambitieux : il s'agit non seulement de détecter l'émission de cette exoplanète rocheuse tempérée mais de sonder la bande d'émission du CO_2 , à la recherche d'une potentielle atmosphère de CO_2 (Lustig-Yaeger et al., 2019a).

Après ce travail réalisé en amont de la réception des données, les simulations seront perfectionnées avec la prise en compte de la calibration en vol du JWST pour permettre non seulement de tester les méthodes de réduction sur les vraies données mais également de préparer les futurs cycles d'observation, travail qui fait l'objet d'un article (Dyrek, Ducrot et al., 2023). Les cycles d'observation du JWST étant fondés sur le système de candidature des propositions d'observation, il est nécessaire de démontrer la faisabilité du programme d'observation et en particulier la détectabilité des molécules en spectroscopie. Les modifications apportées aux simulations ainsi que les résultats sont présentés dans le Chap. 3. Dans un souci de transparence, tous les codes et packages utilisés pour les simulations sont ou ont été rendus publics.



Photographies prises dans le cadre du programme de médiation “La Guyane vers les étoiles” en décembre 2021. *A gauche* : Roulage du lanceur Ariane V vers le pas de tir du Centre Spatial Guyanais *Europe’s Spaceport* *A droite* : Lancement du JWST vu depuis le site d’observation Toucan situé à 5 km du pas de tir. Photographies présentées ici avec les aimables autorisations de B. Trahin et A. Richard Hara.

CHAPITRE 3

Les premières données : méthodes de réduction et analyse instrumentale

Sommaire

3.1	Introduction	107
3.2	Réduire et analyser les données LRS : méthodes et outils	108
3.2.1	Corriger des effets détecteur et convertir les rampes en pentes	109
3.2.2	Soustraire le fond observationnel, diviser par le champ plat et calibrer	111
3.2.3	Extraire les spectres 1D et les courbes de lumière spectrales	113
3.2.4	Ajuster un modèle de transit et de systématiques instrumentales sur les données	116
3.3	Premières données de transit exoplanétaire avec le MIRI LRS	122
3.3.1	La cible L168-9b : réduction des données	123
3.3.2	Evaluer les performances du MIRI LRS	124
3.4	Les simulations comme référence	128
3.4.1	L'adaptation des simulations à la calibration en vol	128
3.4.2	Simuler la spectroscopie de transit de la cible L168-9b : comparaison aux données	129
3.4.3	Analyse du rapport bruit-sur-signal	130
3.4.4	Des simulations pour préparer les futurs cycles d'observation	135
3.5	Étude des effets de persistance	141
3.5.1	Établir l'allure des effets de persistance	141
3.5.2	La télémétrie du JWST, un accès à l'historique de l'instrument	142
3.5.3	Étendre l'analyse à l'ensemble des cibles MIRI LRS : l'outil MIRIPersistence	143
3.6	Conclusion et perspectives	144

“[Lundi 6 décembre :] première journée officielle de médiation avec les élèves. J’ai l’impression d’être ici depuis une semaine, nous avons vécu tellement de choses en si peu de temps. Ce matin, nous avons rendez-vous au collège Concorde avec 6 classes de 3^e. C’est la première fois que j’enseigne à des collégiens. Je suis debout, devant une classe entière. Comment les intéresser? Je décide de sortir la fusée [Saturne V en Légo] et de raconter l’histoire de la conquête spatiale au XX^e siècle. Je ne suis pas experte, mais je devrais m’en sortir. Je parle (pêle-mêle) d’histoire, de propulsion, de lancement, de la Lune, d’assistance gravitationnelle, de la vie des astronautes et de retour sur Terre. Les élèves paraissent plutôt intéressés. J’en vois certains discuter au fond de la classe. Je ressens la difficulté de m’occuper d’une classe. J’essaie d’être ludique. Ça tombe bien, la fusée est démontable. J’attaque alors l’explication des différentes phases de lancement. Nous laruons les étages de la fusée en direct. Les élèves sont amusés, un peu moqueurs. Peut-être sont-ils trop grands pour lancer des fusées en Légo? Les deux classes suivantes que j’ai eues (une demi-heure chacune) étaient plus faciles. Je m’habitue petit à petit au discours, je n’ai plus besoin d’improviser. Je m’habitue aussi au ton, à la manière de demander le silence ou de chercher l’intérêt des élèves. Même les professeurs assises au fond de la classe sont intéressées et posent des questions. La sonnerie retentit. Je me sens fatiguée. Peu après, nous avons rendez-vous dans la salle commune avec toutes les classes de 3^e pour parler d’orientation scolaire et leur présenter notre parcours. Le directeur est présent. Nous prenons le temps de lui parler pendant la pause. Il nous apprend l’existence d’inégalités sociales fortes entre les élèves. Les métropolitains, dits “métro” sont favorisés financièrement. Ils sont déposés à l’école par leurs parents ou des chauffeurs. D’autres se lèvent à quatre heures du matin pour venir à l’école et marchent parfois jusqu’à dix kilomètres entre l’arrêt de bus et l’école. Bref. Je ne suis pas étonnée. [...] Nous sommes dans la salle commune avec les élèves. Le directeur à l’air de s’amuser et parle énergiquement au micro. Nous sentons qu’il s’agit de son moment. Les élèves, au contraire, ont faim et commencent à se disperser. Moi aussi, j’ai faim. Je ressens l’envie d’aller manger et de prendre une vraie pause. Nous nous présentons, nous répondons tour à tour à des questions. Debout face à cette assemblée, je prends le temps d’observer la salle. Je vois quelques élèves dormir profondément. Je reconnais là ceux qui se lèvent à quatre heures du matin. Je repense à l’inégalité des chances. La réussite scolaire est-elle si dépendante de la chance qui nous est donnée au départ? J’aimerais que cela ne soit pas le cas. Je me fais une raison. Je les vois dormir en face de moi. J’espère que ces enfants trouveront leur voie dans ce monde. Il est midi. Nous quittons le collège. Nous avons rendez-vous à l’école élémentaire Rochambeau cet après-midi. Après un repas rapide (bélas), nous allons à l’école. Cet après-midi, je parle à deux classes de CP et à une classe de CM2. Je présente la fusée à toutes les classes, les enfants sont admiratifs et très curieux. Ils posent plein de questions. Voilà qui me change de la matinée avec les collégiens. Cela part même un peu dans tous les sens avec les plus petits. Ils prennent la parole spontanément et racontent des histoires. J’apprends à les canaliser, à donner la parole tour à tour et à les écouter. Cela me demande énormément d’énergie d’être avec les enfants, car eux en ont à revendre, mais j’avoue préférer leur compagnie à celle des collégiens. Nous rentrons à l’hôtel, fatigués. Le lendemain nous devons prendre la route en direction du nord pour rejoindre Mana. J’apprends avant d’aller me coucher que quelques cas de paludisme ont été déclarés là-bas. Je décide de commencer les anti-paludiques. Nous verrons bien les effets secondaires. Certains décident au contraire de ne risquer aucun effet secondaire et n’en prennent pas.”

— Extrait de mon Journal de bord “La Guyane vers les étoiles”, Collège Concorde et école Rochambeau, 6 décembre

2021

3.1 Introduction : étudier les performances en vol du MIRI LRS dans le cadre de l'observation d'exoplanètes en transit

Le JWST est mis en orbite par le lanceur Ariane V (vol VA256), le 25 décembre 2021, à partir du Centre Spatial Guyanais (CSG) à Kourou en Guyane, base spatiale conjointement gérée par l'ESA et le CNES. La Fig. 3.1 présente les dernières images du JWST prises par une caméra embarquée dans le dernier étage du lanceur, juste après son largage. La mise en orbite autour du point de Lagrange L2 est un tir dit "parfait", les paramètres de tir étant très proches des valeurs prédites, ce qui joue un rôle décisif sur la durée de vie du JWST. En effet, le peu de corrections nécessaires à l'ajustement de la trajectoire jusqu'à l'insertion au L2 lui permettent aujourd'hui d'avoir à disposition plus de 26 ans de carburant pour être opéré. Cette durée, plus de deux fois supérieure à celle établie par la spécification qui était de 10 ans va permettre à la communauté de produire des résultats scientifiques sur une durée bien plus longue.

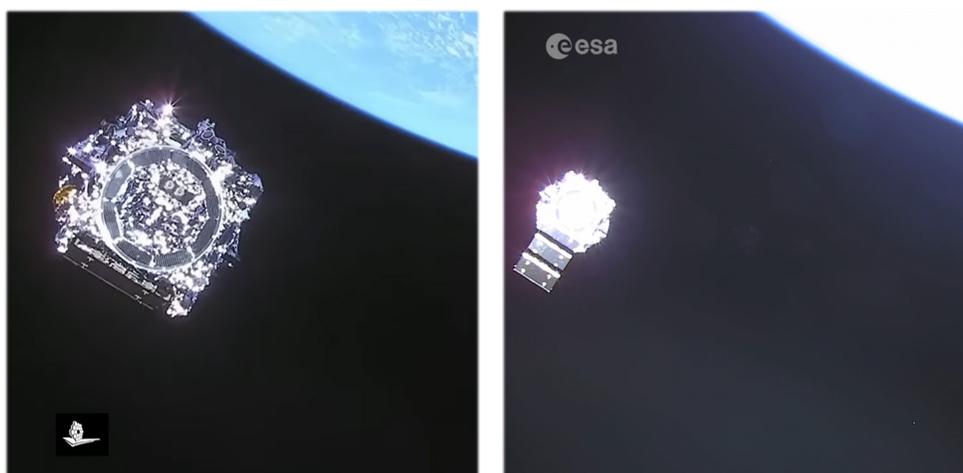


FIGURE 3.1 – *A gauche* : Image officielle du JWST prise par une caméra embarquée dans le dernier étage du lanceur Ariane V, après son largage et sa mise en orbite vers le point de Lagrange L2. *A droite* : Dernière image du JWST par le lanceur Ariane V. Le panneau solaire s'est déployé pour assurer son apport en énergie. Figures obtenues via le site grand public [Webb Space Telescope](https://www.webbtelescope.org/).

Entre les mois de décembre et de juin 2022, le JWST et ses instruments sont testés et calibrés, nous appelons cette période le *commissioning*. Les deux premières semaines du voyage vers L2 sont dédiées au déploiement et à l'alignement des miroirs du JWST, phases extrêmement critiques, car il s'agit du premier télescope déployé dans l'espace. Cette étape est constituée du déploiement des 5 couches du bouclier thermique, des bras soutenant le miroir secondaire puis des deux panneaux latéraux constituant le miroir primaire. Il faut ensuite ajuster les 18 segments du miroir primaire (à 50 micromètres près), pour former un miroir unique équivalent. Il faut également ajuster le miroir secondaire. Cela se fait grâce à des actionneurs placés au dos de chacun des segments et à l'aide de l'instrument NIRCam qui aide à la mesure de la qualité image. De plus amples détails sur cette période de déploiement sont disponibles sur le site [jwst.fr](https://www.jwst.fr/). Après cette première phase de mise en fonctionnement, de déploiement et d'alignement, il faut tester chacun des instruments, nous assurer qu'ils fonctionnent et établir leurs performances en vol. Ainsi, pendant plus de trois mois, des équipes se sont relayées au STScI à Baltimore pour mener à bien cette étape. Les températures des différents sous-systèmes sont nominales. Les segments du miroir principal ont une température comprise entre 35 et 55 K, le miroir secondaire est à 29 K, les instruments en infrarouge proche sont entre 35 et 39 K

et MIRI, refroidit activement, est 6.4 K^1 . De fait, l'ensemble des instruments fonctionnent de manière nominale, les performances sont excellentes. Le bilan général du télescope et de ses instruments après commissioning est disponible dans l'article de Rigby et al., 2022. L'une des informations clé de cet article est la stabilité de pointage du JWST qui est de ~ 1 mas, meilleure que la spécification prévue de 4 mas.

Les premières images et le premier spectre exoplanétaire officiels sont rendus publics le 12 juillet 2022. Cette période marque le tournant de ma thèse. Ainsi, à partir du mois de juillet 2022, je me concentre sur les données du premier transit exoplanétaire observé par le MIRI LRS pendant le commissioning, celui de la super-Terre L168-9b, choisie comme cible d'étude des performances du LRS. En effet, la détermination des performances instrumentales est une étape clé car elle établit quantitativement **la qualité des données brutes** et donc les besoins des méthodes de réduction, qui doivent s'adapter aux données en vol. Il est nécessaire de garantir l'utilisation de méthodes de réduction efficaces afin d'assurer des résultats scientifiques robustes. L'objectif principal de ce travail est donc d'**identifier les causes des systématiques instrumentales observées dans les données en vol** que n'aurions pas établies par tests au sol. La difficulté de cet exercice repose sur l'impossibilité d'accéder aux sorties intermédiaires de la chaîne instrumentale : l'efficacité quantique, la transmission du détecteur, l'amplification, les différents gains de conversion des électrons en volts puis en DN sont inconnues. Nous n'avons accès qu'aux données en sortie de la chaîne de détection envoyées par le télescope en DN.

La première observation d'un transit exoplanétaire faite par le MIRI LRS a été menée pendant le commissioning (Bouwman et al., 2022). Il s'agissait d'une étude préliminaire qu'il a été nécessaire d'approfondir afin de garantir une compréhension robuste et exhaustive des performances instrumentales. J'ai donc étudié les premières données de ce transit exoplanétaire du MIRI LRS pour identifier les instabilités temporelles dont les effets de persistance, les fluctuations du fond observationnel et les non-linéarités des rampes, travail qui m'a permis d'établir une collaboration avec le STScI. J'ai adapté mes simulations aux données en vol de manière à les utiliser pour identifier et étudier les systématiques instrumentales, mais également à soutenir la communauté dans la préparation des futurs cycles d'observation. Dans ce chapitre, je commencerai par présenter les méthodes et outils de réduction et d'analyse des données, puis je dresserai le bilan des performances globales du JWST ainsi que celui du premier transit acquis par le MIRI LRS, celui de la super-Terre L168-9b. Dans un second temps, je présenterai l'adaptation des simulations aux données en vol et leur contribution dans l'étude des systématiques instrumentales observées dans les données de la cible L168-9b. Enfin, je fournirai une étude instrumentale approfondie du MIRI LRS réalisée dans l'objectif d'identifier et de quantifier l'ensemble des systématiques instrumentales susceptibles d'**altérer la stabilité temporelle des observations** du MIRI LRS.

3.2 Réduire et analyser les données LRS : méthodes et outils

Les données reçues par le JWST sont mises à disposition sur la plateforme Barbara A. Mikulski Archive for Space Telescopes (MAST)², par le STScI. Le STScI est chargé d'appliquer une première réduction des données afin de convertir le format initial correspondant à la sortie des détecteurs en un format intelligible par les utilisateurs, et donc de fournir à la communauté des données calibrées en MJy sr^{-1} . Dans le cas d'observations d'exoplanètes en transit, les données n'ont pas besoin d'être calibrées et peuvent nous parvenir directement en DN s^{-1} . En effet, nous cherchons à établir non pas des valeurs absolues mais des rapports de flux correspondant à des profondeurs spectrales de transit ou d'éclipse, ce qui nous permet ensuite d'obtenir un spectre atmosphérique.

Les réduction et analyse de données se font en 6 grandes étapes :

1. Les températures sont régulièrement mises à jour sur le site <https://webb.nasa.gov/content/webbLaunch/whereIsWebb.html>

2. La plateforme MAST est accessible ici : <https://mast.stsci.edu/portal/Mashup/Clients/Mast/Portal.html>

- **Étape 1** - sur les données brutes ou *_uncal* : correction des systématiques détecteur et conversion des rampes en pentes. Obtention des fichiers dits *_rateints* ;
- **Étape 2** - sur les pentes non calibrées ou *_rateints* : soustraction du fond observationnel et division par le champ plat. Obtention des fichiers dits *_calints* ;
- **Étape 3** - sur les pentes non calibrées ou *_calints* : extraction d'une série temporelle de spectres 1D à partir de la série d'images spectrales ;
- **Étape 4** : Extraction de *bin* ou canaux spectraux à partir de la série temporelle 1D ;
- **Étape 5** : ajustement d'un modèle de transit, d'éclipse et/ou de courbe de phase couplé à un modèle de systématiques instrumentales temporelles sur chacun des bins spectraux ;
- **Étape 6** : création d'un spectre de transmission ou d'émission à partir des résultats de l'ajustement du paramètre R_p/R_* .

Les étapes 1 et 2 sont réalisées à l'aide du pipeline officiel *jwst* qui produit des fichiers calibrés, voire même des séries temporelles de spectres 1D. Nous appellerons ces deux étapes la **réduction des données**. Cet outil est régi par le STScI qui se charge de l'appliquer sur les données brutes. Les étapes 3 à 6 sont réalisées à l'aide de l'outil *Eureka!*, un code *Open Source* développé par Bell, Ahner et al., 2022, étape que nous appellerons **analyse de données**. D'autres outils de réduction et/ou d'analyse sont élaborés par la communauté. Parmi eux nous pouvons citer *Cascade*³ qui est un code *Open Source* d'analyse de données et qui permet d'exécuter les étapes 2 à 6. La réduction des données *jwst* s'appuie sur des fichiers de calibration en vol que nous appelons les fichiers *Calibration Reference Data System*⁴ ou CRDS. Les premiers fichiers de calibration disponibles sur le site étaient ceux issus du commissioning et sont régulièrement mis à jour en fonction des différents résultats d'analyses instrumentales menées par le STScI.

3.2.1 Corriger des effets détecteur et convertir les rampes en pentes

L'objectif principal de la première étape est de convertir les rampes, issues des lectures non-destructives du détecteur, en pentes. Cette conversion est précédée d'un grand nombre d'autres étapes qui consistent, entre autres, à corriger des non-linéarités des rampes. Le format de sortie de l'étape 1 est une série temporelle d'images spectrales 3D ($72 \times 416 \times M$ intégrations) en DN s^{-1} . La Fig. 3.2 présente l'ensemble des fonctions de l'étape 1. Les fonctions décrites ainsi que leur ordre d'exécution correspond à la version 1.11.1 (dernière en date à l'heure où j'écris cette thèse) du pipeline *jwst*. La sortie de la première étape est un ensemble de fichiers en DN s^{-1} que l'on appelle *_rateints*.

Initialisation DQ : L'étape 1 est amorcée par une fonction d'initialisation qui consiste à signaler, pour chaque image spectrale, les pixels défectueux. Ces pixels sont par exemple chauds, morts, instables ou complètement saturés et donc inutilisables. La fonction d'initialisation les marque donc par ce qu'on appelle des *data-quality flags* ou marqueurs de qualité en français, par un système de code binaire qui permet d'encapsuler la cause de la défaillance du pixel dans le flag. Le système de marquage se fait à l'aide d'un masque ayant les dimensions du LRS (72×416 pixels) et qui répertorie les pixels défaillants connus au préalable. Ce masque fait partie des fichiers de calibration fournis par le STScI. De manière générale, cette procédure nous évite de prendre en compte les pixels défaillants dans les fonctions suivantes et l'analyse de données.

Détection de la saturation : La deuxième étape consiste à détecter les frames ayant atteint le niveau de saturation du détecteur. Un exemple d'atteinte de la saturation est donné sur la Fig. 2.6 du Chap. 2. Il est possible que certaines frames ne soient pas saturées et donc encore utilisables. Cette étape se charge donc d'enlever les frames saturées en fin de rampe pour permettre l'ajustement de la rampe sur les frames restantes.

3. Le code *CASCADE* est disponible à l'adresse suivante : <https://gitlab.com/jbouwman/CASCADE>

4. Les fichiers CRDS sont disponibles à l'adresse suivante : <https://jwst-crds.stsci.edu/>

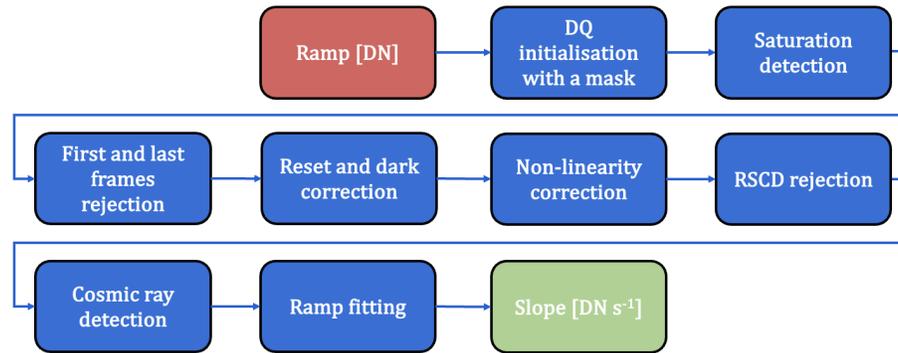


FIGURE 3.2 – Ensemble des fonctions appliquées aux données brutes MIRI LRS par l'étape 1 du pipeline *jwst*. Les fonctions décrites ainsi que leur ordre d'exécution correspond à la version 1.11.1, dernière version en date (lors de l'écriture de ma thèse). Figure adaptée de Argyriou, 2021.

Rejet de la dernière frame : La troisième étape est le rejet systématique de la dernière frame qui est impacté par le last frame effect, effet qui est explicité dans la Sect. 2.2.5.4 du Chap. 2. Précisons que la première frame, impactée par le first frame effect, n'est pas rejeté du jeu de donnée.

Correction du reset et du courant d'obscurité : La quatrième étape soustrait une carte 4D (72 x 416 x X frames x Y intégrations) du courant d'obscurité et du reset anomaly, interpolée aux dimensions des données. Initialement, la correction du reset anomaly était appliquée indépendamment de celle du courant d'obscurité, qui lui était corrigé après l'étape "RSCD rejection".

Correction des non-linéarités : L'étape suivante consiste à corriger la rampe des non-linéarités. Cette correction concerne les non-linéarités de la réponse de l'électronique, encore appelée non-linéarité de l'accumulation de charges, qui tend à diminuer la valeur de la pente localement. Un exemple est donné sur la Fig. 2.6 du Chap. 2. La spécification prévue pour cette étape est une correction à 5 % et se fait en appliquant un facteur correctif de linéarisation à chaque frame. Ces facteurs sont les mêmes pour tous les pixels.

Détection du RSCD : La fonction "RSCD rejection" consiste à exclure les 4 premières frames de l'ajustement de la rampe. L'effet de RSCD, expliqué dans la Sect. 2.2.5.4 du Chap. 2 crée des non-linéarités en début de rampe et fait l'objet d'investigations supplémentaires de la part du STScI. Initialement, cette étape n'était pas activée dans la réduction de données. (voir la Sect. 3.4.3).

Détection des rayons cosmiques et points aberrants : La septième étape consiste à détecter et à corriger les frames impactés par les rayons cosmiques. Les rayons cosmiques créent un saut de signal localement, et donc des ruptures de pente. La méthode appliquée pour la correction des rayons cosmiques est celle du *two-points difference* (Anderson et Gordon, 2011).

Ajustement de la rampe : La fonction principale de l'étape 1 est de dériver la valeur de pente en DN s^{-1} de chacune des rampes. La méthode utilisée est une minimisation des moindres carrés que l'on nomme *ordinary least*

squares (OLS) (Robberto, 2013). Précisons que l’algorithme applique une pondération optimale qui donne un poids supplémentaire aux premières et aux dernières frame de la rampe, en fonction du nombre de frames (Fixsen et al., 2000; Robberto, 2007; Casertano, 2022). La Fig. 3.3 résume les résultats de l’ajustement de la rampe à partir des données brutes obtenues avec le MIRI LRS.

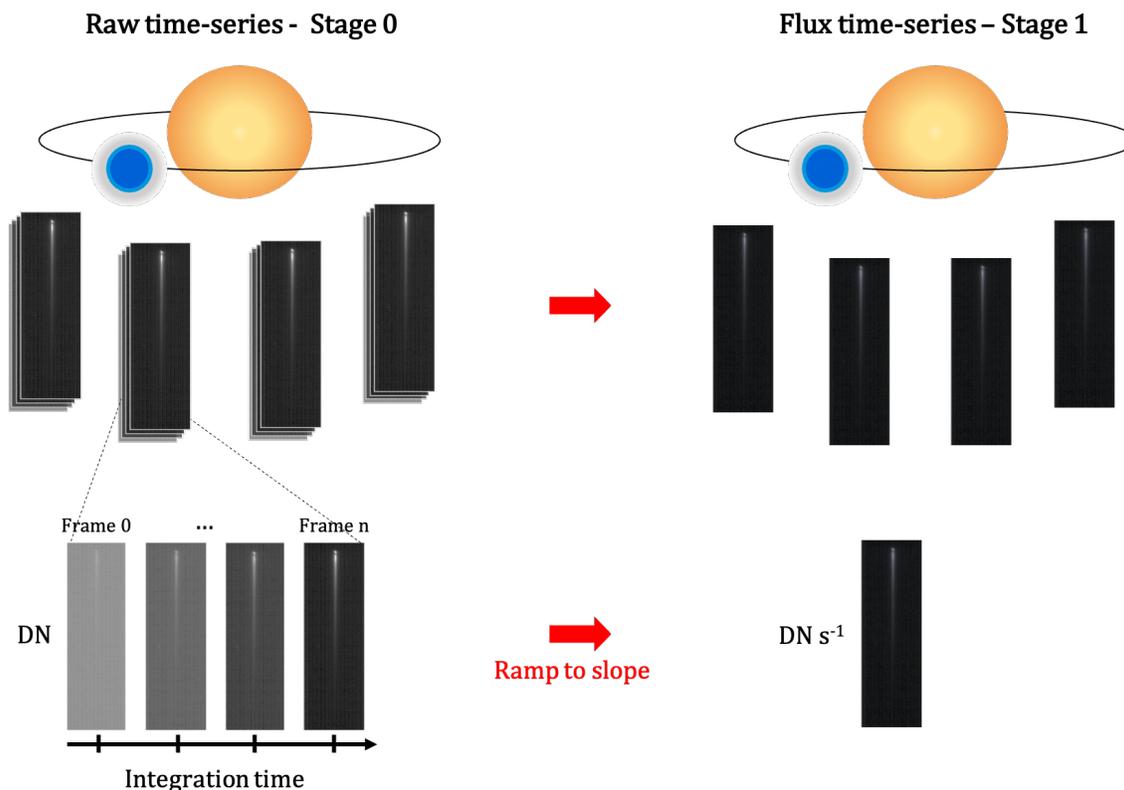


FIGURE 3.3 – *A gauche* : données non calibrées reçues par le JWST sous la forme d’images spectrales obtenues par le MIRI LRS. L’observation est composée d’un ensemble d’intégrations prise tout au long de l’orbite de l’exoplanète. Ces intégrations sont faites de rampes en unité de signal (DN). *A droite* : données en sortie de la première étape du pipeline de réduction `jwst` sous la forme d’images spectrales obtenues après conversion des rampes en pente en unité de flux (DN s^{-1}).

3.2.2 Soustraire le fond observationnel, diviser par le champ plat et calibrer

La seconde étape de la réduction des données se fait également avec le pipeline `jwst` et s’applique sur des séries temporelles d’images spectrales en DN s^{-1} . Les fonctions de la seconde étape sont présentées sur la Fig. 3.4. La première fonction sert à appliquer des transformations de coordonnées à la source observée de manière à exprimer sa position en *World Coordinate System* (WCS) qui fournit la position d’un objet indépendamment des pixels qui le constituent. Nous appelons cette fonction “Assign WCS”. La seconde fonction est celle de la soustraction du fond observationnel. Cela peut se faire soit en soustrayant une image de fond prise au préalable, soit en extrapolant une valeur moyenne d’un petit ensemble de pixels situés dans le fond de l’image spectrale et de le soustraire à chaque

pixel de cette image. La troisième fonction est la division par le champ plat, défini dans la Sect. 2.2.5 du Chap. 2. L'étape suivante est la calibration absolue. Cette étape se fait en appliquant un facteur de conversion exprimé en $(\text{MJy sr}^{-1})/(\text{DN s}^{-1})$ et obtenue à partir de l'observation de l'étoile de calibration BD+60 1753, une naine blanche de magnitude 9.64 en bande K (centrée autour de $2.2 \mu\text{m}$). L'unité en stéradian considérée ici est l'angle solide sous-tendu par un pixel, soit $2.8440 \cdot 10^{-13} \text{ sr}$. L'ensemble des informations relatives à la calibration absolue sont fournies dans l'article de Gordon, 2022. Enfin, la dernière étape consiste à extraire le flux 1D des séries temporelles d'images spectrales.

Dans le cadre de l'observation des atmosphères d'exoplanètes, nous n'appliquons pas de calibration absolue. Par ailleurs, dans notre cas précis, la soustraction du fond et l'extraction des spectres 1D se font à l'aide d'autres outils. Pour résumer, lors de cette seconde étape, nous choisissons d'activer uniquement certaines fonctionnalités du pipeline `jwst`, à savoir le changement des coordonnées vers le système WCS et la division par le champ plat. La sortie de la seconde étape du pipeline est donc un ensemble de fichiers non calibrés en DN s^{-1} que l'on appelle `_calints`.

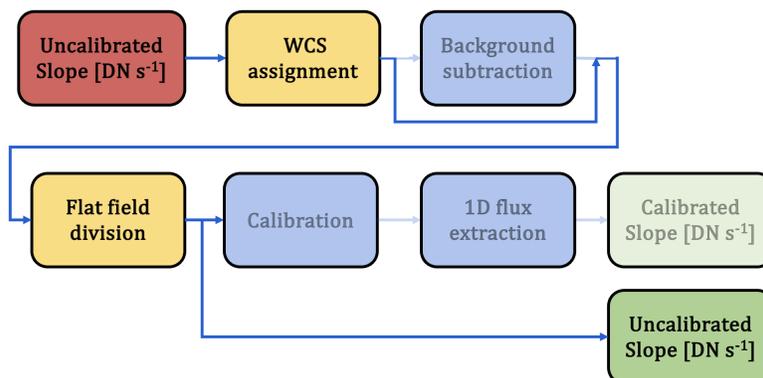


FIGURE 3.4 – Étape 2 du pipeline `jwst`. Ensemble des fonctions appliquées aux images spectrales en DN s^{-1} issues de l'étape 1 du pipeline. Les fonctions décrites ainsi que leur ordre d'exécution correspondent à la version 1.11.1, dernière version en date (lors de l'écriture de ma thèse). Dans le cadre de l'observation des atmosphères d'exoplanètes, nous n'appliquons pas de calibration absolue. La soustraction du fond et l'extraction des spectres 1D se font à l'aide d'autres méthodes et outils, également explicités dans ce manuscrit.

La soustraction du fond se fait donc après la seconde étape du pipeline. La raison pour laquelle nous appliquons une soustraction indépendante repose sur la nécessité de prendre en compte des variabilités temporelles du fond. En effet, il est nécessaire d'extraire une carte de fond pour chaque image et de la soustraire à cette même image indépendamment des autres. Pour ce faire, nous appliquons la méthodologie explicitée par Bouwman et al., 2022. Plusieurs colonnes à gauche et à droite de la trace sont sélectionnées et interpolées pour créer une image de fond aux dimensions équivalentes à celle de l'image spectrale du MIRI LRS. Cette image factice de fond est ensuite soustraite à l'image spectrale. Cette opération est répétée sur toutes les images spectrales de la série temporelle. Rappelons que la soustraction du fond est nécessaire car nous n'avons pas de fente sur le chemin optique du LRS slitless pour isoler la source.

3.2.3 Extraire les spectres 1D et les courbes de lumière spectrales

Nous parlerons à présent non plus de réduction des données mais d'analyse de données. La troisième étape consiste à extraire des spectres 1D à partir des images spectrales en DN s^{-1} en sortie de l'étape 2. Ce travail est réalisé sur chacune des images spectrales de la série temporelle. En amont de l'extraction spectrale, Eureka! offre aujourd'hui la possibilité de soustraire le fond observationnel en procédant par une soustraction colonne par colonne indépendante pour chacune des images spectrales. Le fond est estimé par un ajustement d'un modèle polynomial d'ordre 1 ou 2 entre les colonnes à gauche et à droite de la trace.

3.2.3.1 Extraction spectrale

La première étape de l'extraction spectrale est la détermination de la position de la source. Cela se fait en cherchant le pixel associé au maximum de flux sur la première image spectrale de la série temporelle. La position de la source est indiquée par une croix sur la Fig. 3.5. Dans un second temps, nous procédons à une extraction dite simple en considérant une boîte rectangulaire contenant le spectre. Cela nous permet de rejeter une majorité des pixels du fond. Nous passons donc d'une image ayant les dimensions du MIRI LRS (72×416 pixels) à un subarray de 12 colonnes \times 239 lignes extrait entre les colonnes 28 et 40 et les lignes 150 à 389. Un exemple réduit de ce subarray est donné sur l'image de gauche de la Fig. 3.5 (9×15 pixels).

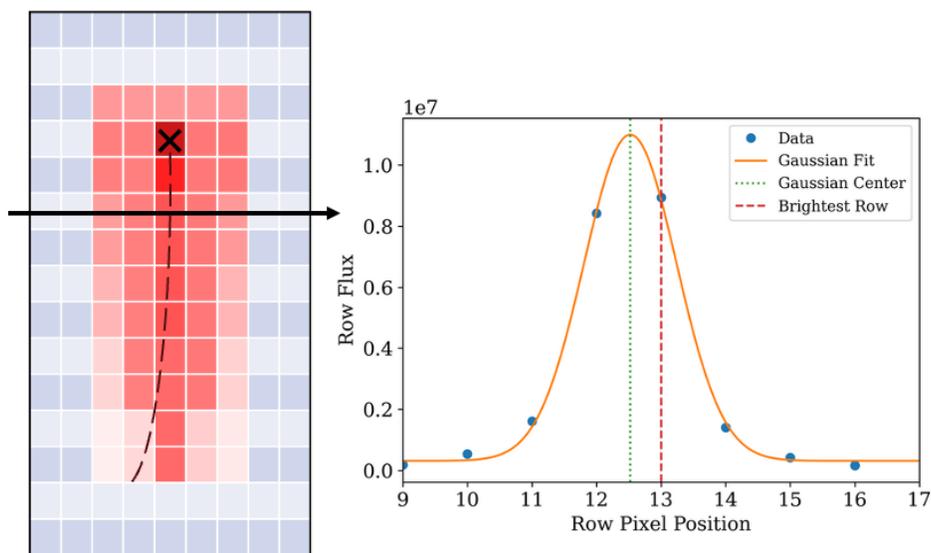


FIGURE 3.5 – Étape 3 ou extraction spectrale 1D à partir d'une image spectrale faite à l'aide du package Eureka!. À gauche : Subarray contenant l'image spectrale. Le maximum, qui correspond à la position de la source, est indiqué par une croix. La flèche noire indique la direction de l'extraction optimisée du spectre par un ajustement d'une fonction gaussienne. Cette procédure est réalisée sur l'ensemble des lignes. La courbe en pointillé montre la possibilité d'une courbure du spectre. À droite : Ajustement d'une fonction gaussienne (courbe en orange) sur le flux des pixels d'une ligne (points en bleu). La courbe verte est la position de la moyenne de la gaussienne et celle en rouge est la position du pixel le plus brillant de la ligne. L'unité est le DN s^{-1} . Image de droite venant de la [documentation](#) du package Eureka! (Bell, Ahrer et al., 2022).

Il est possible que la trace soit courbée. En d'autres termes, le maximum de flux constituant le spectre se décale en fonction de la ligne et ne correspond plus à la même colonne (courbe en pointillé sur l'image de gauche). Il est

donc possible de corriger cette courbure en appliquant une fonction polynomiale d'ordre 2 au pixel contenant le maximum de flux de chaque ligne. Dans un troisième temps, nous appliquons une extraction optimisée du spectre 1D. Pour chaque ligne du subarray de l'image spectrale (flèche noire sur l'image de gauche), nous venons ajuster une fonction gaussienne sur la distribution de flux de chacun des pixels de cette ligne, une PSF 1D pouvant être approximée par une fonction gaussienne. L'image de droite montre l'ajustement sur les pixels d'une ligne (courbe en orange). La courbe verticale verte est la moyenne de l'ajustement et celle en rouge est la position du pixel le plus brillant de la ligne. Précisons que la prise en compte d'une valeur moyenne et non d'une valeur médiane donne plus de poids au flux du pixel brillant qu'à celui des pixels localisés dans les ailes de la PSF. L'image de droite est issue d'un ajustement réel sur les données du MIRI LRS et en particulier sur la ligne du pixel le plus brillant.

Nous appliquons cet ajustement sur l'ensemble des lignes du subarray ce qui nous permet d'obtenir un spectre 1D dont les valeurs correspondent aux valeurs moyennes de l'ajustement par la fonction gaussienne. Nous répétons cette procédure sur l'ensemble des images spectrales de la série temporelle. Nous obtenons donc une carte 2D de Y valeurs de flux en $\text{DN s}^{-1} \times M$ intégrations. Les lignes de pixels sont ensuite associées aux longueurs d'onde correspondante à l'aide de la fonction de dispersion de MIRI (Kendrew, Scheithauer et al., 2015). Nous obtenons donc une carte 2D de flux en DN s^{-1} en fonction de la longueur d'onde et du nombre d'intégrations. Par ailleurs, Eureka! offre également la possibilité de déterminer la position de la source pour toutes les intégrations et non pas seulement pour la première. Cela permet d'identifier toute dérive temporelle de la position de la source.

3.2.3.2 Choix des bins spectraux et extraction des courbes de lumières

À partir des séries temporelles de spectre 1D, nous venons choisir des tailles de canaux spectraux ou *bins*. En d'autres termes, nous choisissons de moyenniser certaines longueurs d'onde pour former des canaux spectraux. Cette technique est extrêmement utile pour améliorer le signal-sur-bruit si nécessaire, qui augmente en fonction de la racine carrée du nombre de points considérés dans le bin. Nous pouvons tout à fait considérer chaque ligne indépendamment ou moyenniser le flux d'un nombre donné de lignes (pouvant correspondre à la résolution initiale de l'instrument). Dans la Sect. 2.2.5.4 du Chap. 2 où je présente le mode de lecture et de reset du détecteur, je précise que le reset est appliqué non pas sur une ligne mais sur une paire de lignes, créant ainsi des disparités de niveaux de signal lors des premières frames de l'intégration suivante et donc par extension des disparités du niveau de flux obtenu par ajustement de la rampe. Je conseille donc de considérer un minimum de 2 pixels afin de moyenniser cet effet de reset. La taille des bins peut être uniforme ou non, selon les besoins d'amélioration du signal-sur-bruit. La Fig. 3.6 montre une carte 2D des valeurs de flux en DN s^{-1} en fonction de la longueur d'onde et du nombre d'intégrations sur laquelle les bins spectraux considérés sont tracés en pointillés. Les données analysées sont les simulations de la cible WASP-8ob présentée dans le Chap. 2. Pour chaque bin extrait, nous produisons la courbe de lumière associée. Dans le cas de l'analyse des simulations de WASP-8ob, nous avons extrait 15 bins, nous produisons donc 15 courbes de lumières spectrales, ainsi que la courbe de lumière blanche entre 5 et 12 μm .

3.2.3.3 Rejet des outliers

Le travail de rejet des outliers s'effectue sur les courbes de lumières spectrales obtenues à l'étape précédente. Un outlier ou valeur aberrante en français, est un point de la courbe de lumière dont la valeur est anormalement élevée ou basse. La méthode appliquée pour identifier ces points est celle du *sigma-clipping* ou d'écrêtage de courbe. Nous choisissons une "boîte" d'une taille donnée : entre 5 et 10 points. L'objectif de l'exercice est de déplacer cette boîte le long de la courbe de lumière et d'y appliquer une série d'opérations de détection et de rejet d'outliers. La méthode consiste à calculer la médiane glissante et de comparer l'écart de chacun des points de la boîte à cette médiane par rapport à un certain nombre de fois la médiane de la déviation standard glissante. Nous définissons la valeur O_{X_i} comme

$$O_{X_i} = (X_i - \text{med}(X)) - 5 \text{ med}(\sigma_X) . \quad (3.1)$$

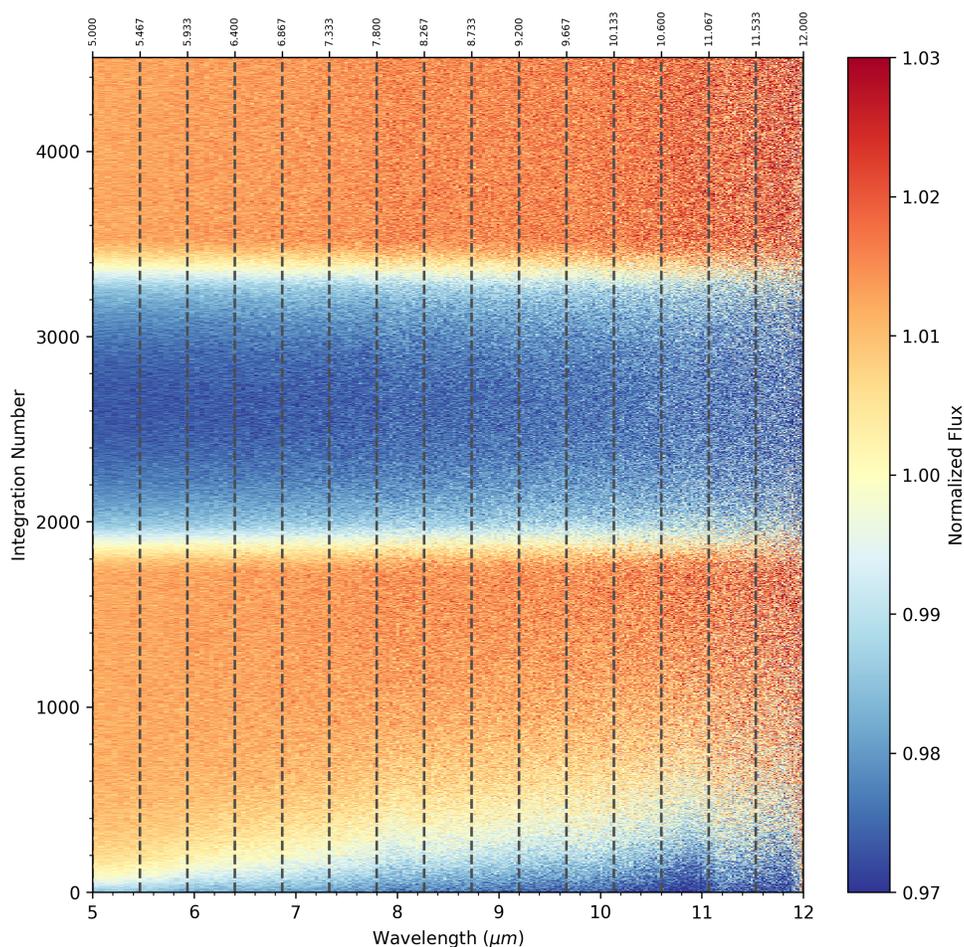


FIGURE 3.6 – Carte 2D de la série temporelle de spectres des simulations de WASP-8ob (présentées dans le Chap. 2) obtenue avec le package *Eureka!* (Bell, Ahrer et al., 2022). Chaque ligne de cette carte est un spectre 1D extrait entre 5 et 12 μm . Les spectres sont tracés en fonction du temps (direction verticale), qui correspond au nombre d’intégrations. L’échelle de couleur indique les niveaux de flux normalisé à la valeur du flux avant transit. Le transit apparaît entre les intégrations 1800 et 3400. Le début de l’observation est marqué par l’effet de persistance, le response drift ici. Les lignes verticales en pointillés représentent les 15 bins spectraux considérés pour cette analyse.

où X est l’ensemble des points de la boîte, $\text{med}(X)$ est la médiane de ces points et $\text{med}(\sigma_X)$ est la médiane de l’écart-type de ces points. La condition de rejet appliquée est définie par $5 \text{ med}(\sigma_X)$. De fait, un point X_i est considéré comme un outlier si et seulement si O_{X_i} respecte la condition

$$|O_{X_i}| > 0. \quad (3.2)$$

Les points considérés comme outliers sont ensuite masqués et ne sont plus considérés dans les opérations suivantes. Ce même principe de rejet d’outliers peut être appliqué spatialement à l’étape 1 pour masquer les pixels chauds, morts ou saturés. *Eureka!* propose également cette fonctionnalité à l’étape 3, avant l’extraction du spectre

1D.

3.2.4 Ajuster un modèle de transit et de systématiques instrumentales sur les données

L'objectif de l'analyse de données est de produire un spectre atmosphérique que l'on définit par la variation spectrale du rapport $R_p(\lambda)/R_*$. Nous pouvons considérer que la valeur R_* est connue par modélisation stellaire (avec des contraintes sismiques ou spectroscopiques) ou des observations interférométriques directes (voir Sect. 1.1.4 du Chap. 1) et estimer la valeur du paramètre $R_p(\lambda)$ seul. De manière générale, nous estimons le rapport $R_p(\lambda)/R_*$ directement. Notre unique possibilité d'obtenir les valeurs de ce paramètre est de les inférer à partir des courbes de lumières extraites à l'étape 4. L'approche considérée est l'inférence dite bayésienne qui nous permet d'obtenir une distribution statistique du paramètre $R_p(\lambda)/R_*$ conditionnellement à une distribution de ce paramètre estimée en amont et le jeu de données à disposition pour l'inférer. Il est donc nécessaire de préciser que **la distribution statistique obtenue pour le paramètre $R_p(\lambda)/R_*$ n'est pas une probabilité absolue mais bien une probabilité conditionnelle, conditionnée justement par la qualité des données, le modèle choisi et la valeur initiale qui lui est attribuée.** En d'autres termes, les valeurs et barres d'erreur des points d'un spectre atmosphérique sont hautement dépendants de la qualité de notre réduction de données et donc de notre capacité à corriger des systématiques instrumentales, ainsi que de la paramétrisation de nos modèles.

3.2.4.1 Inférence bayésienne

Considérons un modèle de transit paramétrisé avec un jeu de paramètres θ . Considérons des données d'une courbe de lumière décrite par la matrice 1D \mathbf{S}_{obs} . La distribution *a posteriori* des paramètres du modèle conditionnellement aux données des courbes de lumière, $p(\theta | \mathbf{S}_{\text{obs}})$, s'exprime par le théorème de Bayes (1763) comme

$$p(\theta | \mathbf{S}_{\text{obs}}) = \frac{p(\mathbf{S}_{\text{obs}} | \theta) p(\theta)}{p(\mathbf{S}_{\text{obs}})}. \quad (3.3)$$

où $p(\theta)$ est la probabilité *a priori* des paramètres du modèle. En d'autres termes, nous sommes des agents rationnels, exprimant à travers le paramètre $p(\theta)$ la confiance que nous portons dans notre connaissance de la distribution statistique de θ . $p(\mathbf{S}_{\text{obs}} | \theta)$ exprime la probabilité du jeu de paramètres considéré étant donné les observations à disposition. De fait, elle exprime l'accord entre le modèle de transit choisi et les données de la courbe de lumière. Nous appelons fonction de *vraisemblance* des données conditionnellement au modèle décrit par le jeu de paramètres θ , la fonction $\mathcal{L}(\mathbf{S}_{\text{obs}}, \theta)$ équivalente à la probabilité du jeu de paramètres considéré étant donné les observations considérées

$$\mathcal{L}(\mathbf{S}_{\text{obs}}, \theta) \equiv p(\mathbf{S}_{\text{obs}} | \theta). \quad (3.4)$$

et $p(\mathbf{S}_{\text{obs}})$ est la vraisemblance marginale, utile pour comparer des modèles et considérée ici comme un facteur de normalisation. Nous faisons l'hypothèse qu'une observation de transit suit une loi du χ^2 dont les points de données $\mathbf{S}_{\text{obs}_i}$ sont distribués selon une loi normale multivariée de moyenne $\boldsymbol{\mu} = {}^t(\mu_1, \dots, \mu_n) \in \mathbb{R}^n$ et de matrice de covariance $\boldsymbol{\Sigma} = (\sigma_{j,j'}, j, j' = 1, \dots, n) \in \mathbb{M}(n, n)$. La log-vraisemblance $\ln \mathcal{L}(\mathbf{S}_{\text{obs}}, \theta)$ s'exprime comme

$$\chi^2 \equiv \ln \mathcal{L}(\mathbf{S}_{\text{obs}}, \theta) \quad (3.5)$$

$$= -\frac{n^2}{2} \ln(2\pi) - \frac{n}{2} \ln(\text{Det}(\boldsymbol{\Sigma})) - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n {}^t(\mathbf{S}_{\text{obs}_i} - \boldsymbol{\mu}) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{S}_{\text{obs}_i} - \boldsymbol{\mu}) \quad (3.6)$$

En principe, pour réduire les temps de calculs numériques, nous faisons l'approximation que les termes non-diagonaux de la matrice de covariance Σ sont nuls i.e. la fluctuation statistique des points de données est indépendante d'un point à l'autre. Notre objectif est d'échantillonner la distribution *a posteriori* $p(\theta \mid \mathbf{S}_{\text{obs}})$. Pour ce faire, nous utilisons des chaînes de Markov, *Markov Chain Monte Carlo* ou MCMC (Hammersley et Handscomb, 1964; MacKay, 2003) qui explorent aléatoirement l'espace des paramètres θ à la recherche de la zone où la probabilité postérieure est la plus élevée. Chaque pas de la marche aléatoire nous amène à un point de l'espace des paramètres que nous comparons au point précédent, et que nous gardons pour l'échantillonnage de notre distribution *a posteriori* s'il se situe dans une zone où la probabilité postérieure est plus élevée. Pour ce faire, nous utilisons l'algorithme de *Metropolis-Hastings* ou échantillonneur M-H (Metropolis et al., 1953; Hastings, 1970; Geyer et Thompson, 1995; Green, 1995), dont un exemple 1D est présenté sur la Fig. 3.7. La distribution *a posteriori* que nous cherchons à échantillonner, ou encore appelée distribution cible $p(\theta \mid \mathbf{S}_{\text{obs}})$ est montrée en bleu sur l'ensemble des étapes.

1. Plaçons-nous à un point de départ θ_0 de l'espace des paramètres. Ce point de départ est en général tiré aléatoirement depuis la distribution *a priori* $p(\theta)$.
2. Le point suivant où nous devons aller est donné par un tirage aléatoire suivant une loi de proposition $Q(\theta_t; \theta_{t+1})$ (courbe en jaune à t_0) qui dépend du point actuel où nous sommes.
3. La probabilité d'acceptation α de ce point par rapport au point précédent est donnée par une comparaison à la distribution cible $p(\theta \mid \mathbf{S}_{\text{obs}})$ et s'exprime comme

$$\alpha = \min \left(1, \frac{p(\theta_{t+1} \mid \mathbf{S}_{\text{obs}}) Q(\theta_t; \theta_{t+1})}{p(\theta_t \mid \mathbf{S}_{\text{obs}}) Q(\theta_{t+1}; \theta_t)} \right). \quad (3.7)$$

4. La probabilité d'acceptation est comparée à un tirage ν suivant une loi uniforme entre 0 et 1, $\mathcal{U}(0, 1)$.
 - Si $\alpha > \nu$, le point est accepté;
 - Si $\alpha \leq \nu$, le point est rejeté et nous restons au point où nous sommes actuellement. Nous gardons tout de même une trace de ce rejet en prenant en compte le choix du point actuel dans l'échantillonnage de la distribution cible.
5. Selon le résultat du test, nous nous déplaçons au point θ_{t+1} ou nous restons au point θ_t

L'algorithme M-H converge en $t \rightarrow +\infty$ mais nous pouvons obtenir une distribution qui correspond à la distribution asymptotique avec une erreur limitée en un temps fini. Nous pouvons estimer le taux de convergence par la fonction dite d'autocorrélation (MacKay, 2003). Le temps d'autocorrélation nous donne le nombre d'étapes que doit parcourir la chaîne pour atteindre un état stationnaire, ou en d'autres termes, pour que les tirages de la distribution cibles soient totalement indépendants de l'état initial. De fait, nous devons supprimer le début de la chaîne (ou *burn-in* en anglais), qui est totalement dépendant du point de départ et ne peut répondre à ce critère. Précisons que plus la chaîne est efficace, plus le temps d'autocorrélation est faible. En revanche, la mesure du temps d'autocorrélation demande de suréchantillonner la chaîne par rapport à ce qui est nécessaire en principe pour avoir une distribution satisfaisante. Un autre diagnostic de la convergence est le test de *Gelman-Rubin* (G-R) (Gelman A., 1992) qui consiste à analyser le comportement de plusieurs chaînes lancées en parallèle dont les points de départ sont différents et largement dispersés. Le test G-R repose sur la variation d'un rapport de deux estimateurs de la variance de la distribution cible, de manière à ce que l'un des estimateurs sous-estime la variance et l'autre la sur-estime. Si les deux estimateurs convergent effectivement vers la variance de la distribution cible, leur ratio converge vers 1 quand $t \rightarrow +\infty$. Numériquement, la convergence est déclarée à partir d'un certain nombre de pas n , lorsque le ratio est proche de 1, dans un certain intervalle de confiance.

3.2.4.2 Les paramètres du modèle ajusté et les outils utilisés

Le modèle que nous venons ajuster sur nos données de transit est une combinaison d'un modèle de transit et d'un modèle de systématiques instrumentales qui sont, dans la plupart des cas, des effets de persistance. Le modèle

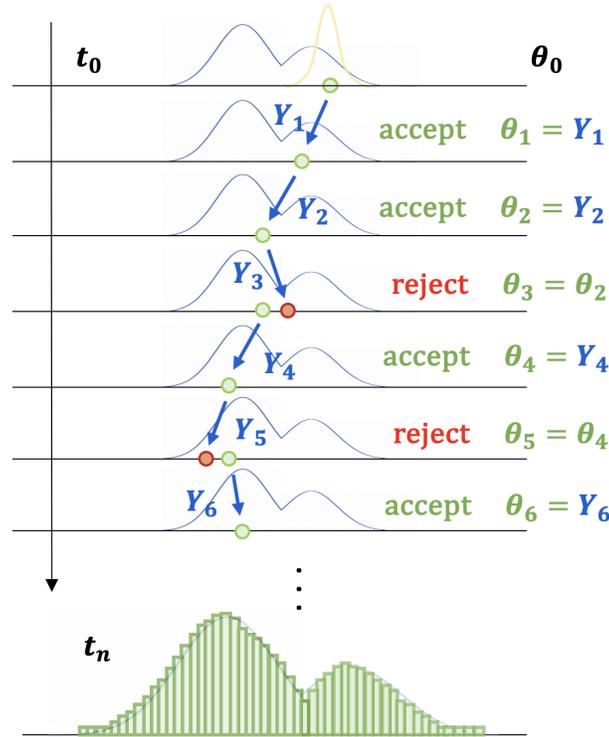


FIGURE 3.7 – Schéma de l'algorithme de Metropolis-Hastings (M-H) (Metropolis et al., 1953; Hastings, 1970). Depuis un point de départ θ_0 de l'espace des paramètres θ , nous choisissons le point suivant θ_1 par un tirage aléatoire à l'aide d'une loi de proposition (courbe en jaune) qui dépend du point θ_0 . La probabilité d'acceptation α de θ_1 par rapport à θ_0 est donnée par une comparaison à la distribution cible (courbe en bleue), décrite par l'Eq. 3.7. La probabilité d'acceptation est comparée à un tirage ν suivant une loi uniforme entre 0 et 1. De fait, α_1 étant supérieure à ν_1 , le point θ_1 est accepté, ce qui nous permet d'avancer dans l'exploration de l'espace des paramètres, il en va de même pour le point θ_2 . Au contraire, α_3 étant inférieure à ν_3 , le point θ_3 est rejeté. En appliquant ce critère d'acceptation à toutes les étapes de la marche, l'algorithme M-H permet d'obtenir une bonne approximation de la distribution cible en un temps fini $t = t_n$.

$M(\theta)$ que nous ajustons s'exprime donc comme la somme du modèle de courbes de lumière spectroscopiques et d'un modèle de systématiques qui modulent cette courbe de lumière et qui dépendant également de la longueur d'onde

$$M(\theta, \lambda) = M_{\text{transit}}(\theta, \lambda) + M_{\text{systematics}}(\theta, \lambda) \quad (3.8)$$

Le jeu de paramètres θ du modèle $M(\theta, \lambda)$ que nous venons ajuster sur les données comprend les paramètres suivants :

1. Le rayon normalisé de la planète R_p/R_* suivant une loi normale;
2. Les coefficients quadratiques d'assombrissement centre-bord (u_1, u_2) suivants une loi uniforme entre 0 et 1, $\mathcal{U}(0, 1)$.
3. Les paramètres de modèles exponentiels (reflétant une augmentation ou une décroissance exponentielle des effets de persistance) et/ou polynomiaux d'ordre n (exprimant toute dérive de la courbe de lumière au cours du temps) pour l'ajustement des systématiques, chaque paramètre suivant une loi normale;

4. Le temps de mi-transit t_0 suivant une loi normale;
5. Le demi-grand axe normalisé a/R_* suivant une loi normale;
6. L'inclination de l'orbite i suivant une loi normale;
7. L'excentricité e de l'orbite suivant une loi uniforme entre 0 et 1, $\mathcal{U}(0, 1)$.

Précisons que certains paramètres sont fixés à des valeurs données, en général venant de la littérature, de manière à ce que l'équation de Kepler puisse être résolue (voir Sect. 1.1.2 du Chap. 1). De fait, nous fixons la valeur du rayon stellaire ainsi que celle de la période orbitale P , que nous estimons contraintes par des observations complémentaires ou antérieures. Si toutefois la période n'était pas contrainte, nous pourrions également estimer sa distribution. Dans ce cas, nous devrions fixer le demi-grand-axe, pour éviter les dégénérescences. Par ailleurs, nous devons ajouter une contrainte supplémentaire sur l'argument du périastre qui est souvent fixée à 90° . Les planètes que nous étudions ayant pour la plupart une orbite circulaire, le choix de cette contrainte n'est pas un problème. Nous pouvons également choisir de fixer l'excentricité à 0, pour la même raison. L'objectif premier de cet ajustement est d'obtenir la distribution *a posteriori* du paramètre R_p/R_* pour chaque bin spectral que nous avons extrait à l'étape 4. À cet égard, les paramètres orbitaux sont ajustés uniquement sur la courbe de lumière blanche et nous les fixons ensuite pour l'ajustement des courbes de lumières spectroscopiques. La Table 3.1 présente les paramètres ajustés dans chacun des cas. Précisons que $\theta_{(u_1, u_2)}$ est le sous-ensemble des paramètres d'assombrissement centre-bord et $\theta_{\text{systematics}}$ est le sous-ensemble des paramètres de systématiques instrumentales.

TABLE 3.1 – Paramètres d'ajustement pour la courbe de lumière blanche et les courbes de lumière spectroscopiques.

Parameter	White fit	Spectroscopic fit
R_p/R_{star}	✓	✓
$\theta_{(u_1, u_2)}$	✓	✓
$\theta_{\text{systematics}}$	✓	✓
t_0	✓	–
a/R_*	✓	–
P (days)	✓	–
i (deg)	✓	–
e	✓	–

Les modèles de transit considérés dans le package `Eureka!` sont le modèle de transit et d'éclipse `batman` (Kreidberg, 2015) couplé à une série de Fourier modélisant la courbe de phase ainsi que le modèle de transit, d'éclipse et de courbe de phase `starry` (Luger, Agol et al., 2019). Les échantillonneurs à disposition pour estimer la distribution *a posteriori* du jeu de paramètres du modèle sont les suivants :

- L'échantillonneur par chaînes MCMC `emcee` (Foreman-Mackey, Hogg et al., 2013), fondé sur la marche non pas d'une unique chaîne de Markov mais de plusieurs chaînes en parallèle que l'on appelle des *walkers* et qui sont corrélés entre eux, permettant une meilleure exploration de l'espace des paramètres (Goodman et Weare, 2010).
- L'échantillonneur par chaînes MCMC `dynesty` (Speagle, 2020) qui repose sur un échantillonnage appelé le *dynamic nested sampling* qui consiste à remplacer les points ayant les distributions postérieures les plus faibles (points morts) par de nouveaux points issus de tirages aléatoires mais dont la probabilité est supérieure à celles des points morts, ce qui permet de concentrer les points en une zone très proche de la distribution postérieure en très peu d'itérations. Précisons que le nested sampling permet, entre autres, d'estimer la probabilité $p(\mathbf{S}_{\text{obs}})$, terme que nous considérons toujours comme un facteur de normalisation et donc que nous omettons dans nos calculs (Buchner, 2023).

- L'échantillonneur no-u-turn de l'algorithme nuts (Hoffman et Gelman, 2011) fondé sur une sous-classe des chaînes MCMC, le *Hamiltonian Monte Carlo* (HMC). Le HMC repose sur un système hamiltonien fictif pour lequel la distribution postérieure à échantillonner est considérée comme une surface de potentielle. Chaque point de la chaîne a pour condition de départ une vitesse nulle dans cette structure de potentielle dans lequel il est lâché. Le mouvement du point est ensuite intégré (avec une intégration leapfrog, ou saute-mouton en français), ce qui nous donne le point d'arrivée, que l'on prend comme point de départ du point suivant. Cette méthode est extrêmement dépendante du pas et du temps d'intégration qui doivent être choisis minutieusement afin de se déplacer au mieux vers les puits de potentiel qui correspondent aux maxima de probabilité. L'échantillonneur no-u-turn permet d'ajuster automatiquement les pas et temps d'intégration afin d'éviter à l'utilisateur la tâche pénible de faire cette optimisation à la main. Le HMC est plus rapide et permet la convergence de chaînes avec des jeux de paramètres à grandes dimensions (Betancourt et Girolami, 2013).

Tout ajustement par chaînes MCMC ou HMC peut être précédé par un ajustement simple à la recherche du maximum de vraisemblance par une minimisation de moindres carrées, que l'on peut considérer comme une étape d'initialisation. Cette minimisation nous permet d'avoir une première estimation des valeurs des paramètres du modèle. Nous pouvons alors fournir ces valeurs ainsi qu'une distribution statistique associée comme probabilité *a priori* $p(\theta)$ pour l'échantillonnage de la distribution cible par MCMC ou HMC. Enfin, précisons qu'Eureka! nous offre la possibilité de supprimer des points du jeu de données soit en décimant la courbe de lumière, soit en enlevant des points consécutifs aberrants au début ou à la fin de la courbe de lumière pour minimiser la présence de systématiques instrumentales avant l'ajustement.

3.2.4.3 La distribution *a posteriori* des paramètres

Nous évaluons la qualité d'un ajustement à l'aide de deux critères. Le premier critère est l'analyse de la distribution commune entre paires de paramètres qui est une projection 2D de la matrice de covariance et qui permet d'établir les corrélations entre ces paramètres. De fait, plus les paramètres sont corrélés, plus leur variance augmente. L'ajustement est concluant lorsque la distribution *a posteriori* des paramètres suit une loi normale ou s'il existe un moyen d'extraire les paramètres statistiques même si ces paramètres sont corrélés. La Fig. 3.8 montre un exemple de cette projection, que nous appelons *corner plot* en anglais. Cette figure montre la corrélation *a posteriori* des paramètres d'un modèle spectral de transit ajusté sur les simulations de WASP-8ob. Le corner plot montré ici correspond à un ajustement sur un bin spectral entre 5 et 5.125 μm dont les paramètres sont ceux présentés dans la deuxième colonne de la Table. 3.1, à savoir le ratio R_p/R_{star} , les coefficients d'assombrissement centre-bord u_1 et u_2 , les paramètres de systématiques instrumentales c_0 , r_0 et r_1 correspondant à la fonction $c_0 + r_0 e^{-tr_1}$ et le paramètre *scatter_mult* décrivant la dispersion des points de données. La figure montre une corrélation entre les deux paramètres u_1 et u_2 dont les distributions *a priori* suivent une loi uniforme entre 0 et 1. Cette corrélation augmente l'écart-type du paramètre R_p/R_{star} . En général, les valeurs de ces paramètres peuvent être obtenues par modèles et donc faire l'objet d'une distribution *a priori* suivant une loi normale centrée en ces valeurs. De fait, nous réduirions les barres d'erreur du paramètre R_p/R_{star} et obtiendrions un meilleur ajustement. Cette solution comporte un risque, celui d'obtenir des résultats dits *model-dependent* ou en d'autres termes, conditionnés par des modèles. Dans le cas précis des coefficients d'assombrissement centre-bord, les modèles sont mal contraints en infrarouge moyen, il est donc préférable de laisser une distribution *a priori* qui suit une loi uniforme entre 0 et 1 et d'obtenir des barres d'erreur du paramètre R_p/R_{star} plus élevées. Le second critère déterminant la qualité d'un ajustement est la distribution des résidus qui doit suivre une loi normale et ne présenter aucune corrélation temporelle (ou bruit rouge) à toutes les échelles temporelles (voir Fig. 2.17 du Chap. 2). La Fig. 2.17 montre que les résidus de l'ajustement des simulations de WASP-8ob sont effectivement gaussiens. Il s'agit d'ailleurs d'un des critères utilisés pour valider les simulations.

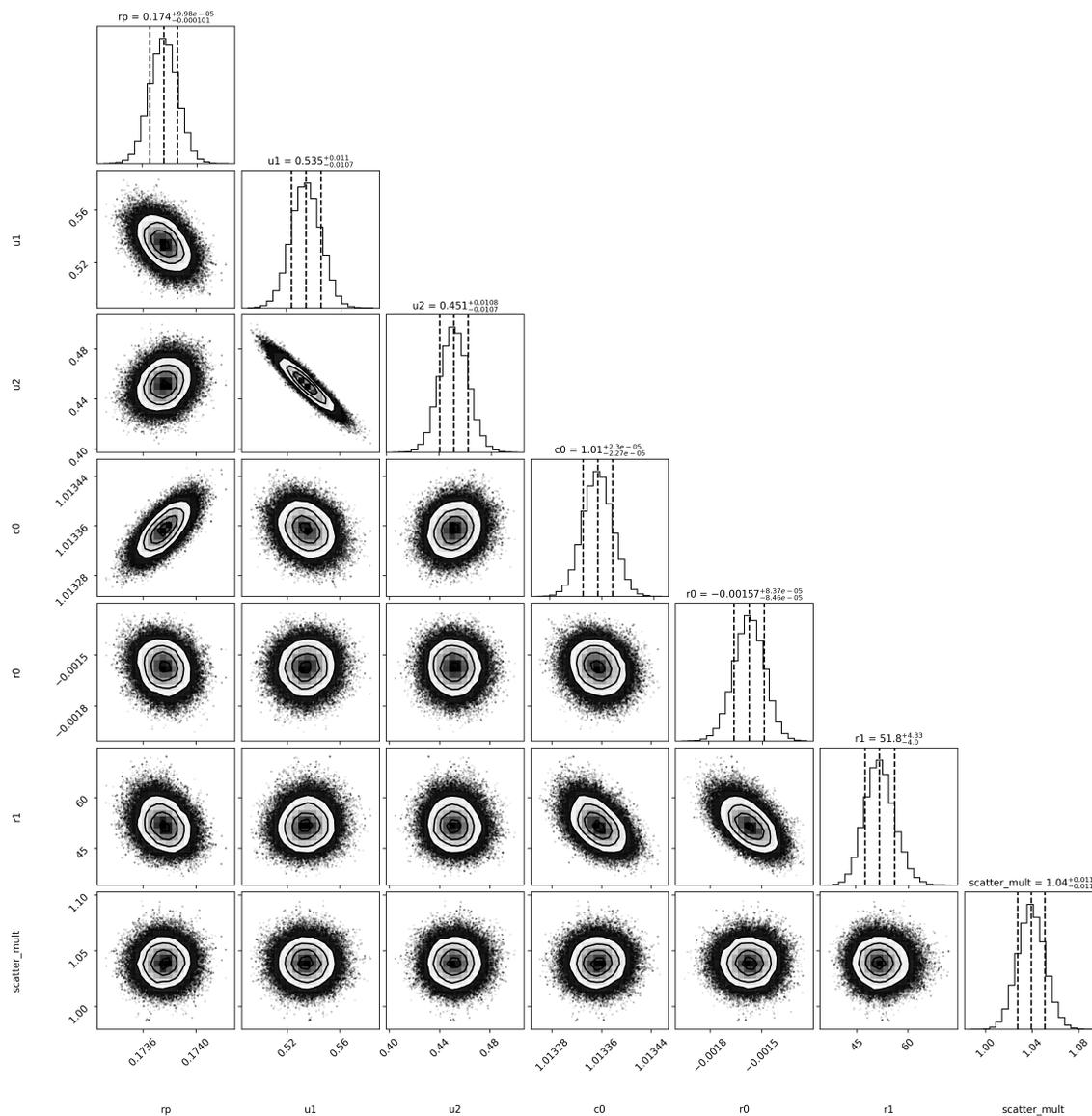


FIGURE 3.8 – Projection 2D de la matrice de covariance de la distribution *a posteriori* de l’ajustement des simulations de WASP-80b. Les paramètres ajustés sont le ratio R_p/R_{star} , les coefficients d’assombrissement centre-bord u_1 et u_2 , les paramètres de systématiques instrumentales c_0 , r_0 et r_1 correspondant à la fonction $c_0 + r_1 e^{-tr_1}$ et le paramètre $scatter_mult$ décrivant la dispersion des points de données. La projection 2D montre une corrélation entre les deux paramètres u_1 et u_2 dont les distributions *a priori* sont mal connues et donc mal contraintes. Cette corrélation augmente l’écart-type du paramètre R_p/R_{star} . De meilleures contraintes sur les coefficients d’assombrissement centre-bord pourraient aider à réduire les barres d’erreur. Figure obtenue en sortie de l’étape 5 d’Eureka! (Bell, Ahner et al., 2022) à l’aide du package `corner.py`

3.2.4.4 Construire le spectre atmosphérique

La dernière étape de l'analyse des données consiste à rassembler l'ensemble des résultats des ajustements spectraux dans un même graphe : celui du spectre atmosphérique. Chaque ajustement spectral nous donne, entre autres, une distribution *a posteriori* du rayon normalisé de la planète R_p/R_{star} qui suit une loi normale. Le spectre atmosphérique n'est rien d'autre que l'ensemble des valeurs des moyennes des distributions accompagnées de barres d'erreur correspondant aux écarts-types des distributions. Un exemple de spectre obtenu par ajustement des simulations de WASP-8ob est présenté sur la Fig. 2.16 du Chap. 2 (points noirs sur le graphe).

3.3 Premières données de transit exoplanétaire avec le MIRI LRS

Dans cette partie, je vais me concentrer sur les premières données de transit exoplanétaire reçues par le MIRI LRS et présenter l'ensemble des analyses qui ont été menées afin de déterminer les performances de l'instrument. Le travail accompli pendant le commissioning du JWST a permis d'établir que le fonctionnement de l'instrument MIRI du JWST était nominal pour tous les modes d'observation (Wright, Rieke et al., 2023), dont les performances ont été testées et validées (Boccaletti, Cossou et al., 2022; Bouwman et al., 2022; Argyriou, Glasse et al., 2023) pendant près de 3 mois. L'observation d'atmosphères d'exoplanètes requiert une stabilité temporelle du télescope et des instruments sur plusieurs heures, ce qui doit faire l'objet d'une étude de performances spécifique et approfondie. C'est la raison pour laquelle un programme d'observation dédié à l'étude de la stabilité spectro-photométrique dans le cadre d'observations d'exoplanètes en transit a été mené pendant le commissioning (PID 1033)⁵. Ce programme consiste à observer une exoplanète en transit avec le LRS pour en obtenir un spectre qui permettra ainsi d'établir les performances en série temporelle du LRS. Ce programme a donc pour objectifs de tester la stabilité spectro-photométrique du LRS, de déterminer les performances des méthodes de réduction et d'analyse de données ainsi que de fournir une première estimation de la limite du bruit-sur-signal ou *noise-to-signal ratio*, NSR en anglais, défini dans le Chap. 1. Dans ce contexte, le choix de la cible repose sur plusieurs critères (Bouwman et al., 2022) :

- L'étoile doit être brillante de manière à ce que le bruit-sur-signal à $7.5 \mu\text{m}$ soit au maximum de ~ 70 ppm. Connaissant le bruit photonique de l'étoile, nous pouvons estimer le bruit instrumental;
- L'étoile ne doit pas saturer le détecteur. Cela signifie qu'elle est observable en plus de 5 frames, 5 étant la limite fixée par le STScI;
- Le transit de la planète doit être détectable et estimable à partir de la courbe de lumière blanche avec une erreur maximum de ~ 100 ppm. Par ailleurs, la valeur de la profondeur de transit à une longueur d'onde donnée doit être connue dans la littérature, nous cherchons ici à confirmer une valeur, pas à mener une détection d'exoplanète;
- La planète doit avoir une gravité de surface suffisamment élevée et/ou une température d'équilibre T_{eq} suffisamment faible pour que la hauteur d'échelle d'atmosphère soit très faible et qu'en conséquence, toute potentielle variation spectrale de l'atmosphère soit comprise dans le bruit photonique de l'étoile. En d'autres termes, nous ne voulons pas que l'atmosphère soit détectable de manière à ce que toute signature spectrale observée soit attribuable à des systématiques instrumentales et non à la composition chimique de l'atmosphère;
- L'étoile doit être visible dans le champ de vue du JWST aux mois de mai-juin 2022 (période dédiée à cette étude de performances).

5. Le programme d'observation JWST 1033 est disponible ici : <https://www.stsci.edu/jwst/phase2-public/1033.pdf>

3.3.1 La cible L168-9b : réduction des données

Le choix de la cible La cible d’observation choisie est L168-9, une étoile de type M1V située à 25 pc de nous autour de laquelle orbite une Super-Terre, L168-9b, découverte par Astudillo-Defru et al., 2020. L168-9b possède un rayon de $R_p = 1.39 R_\oplus$ et une masse de $M_p = 4.6 M_\oplus$. La période orbitale est de $P = 1.4015$ jours. Les éphémérides du temps de mi-transit ont été évaluées à partir de l’article de Patel et Espinoza, 2022. La température d’équilibre de cette exoplanète est comprise entre 668 et 965 K, et son atmosphère apparaît comme étant très fine et surtout libre de toute enveloppe primordiale composée d’hydrogène ou d’hélium (Astudillo-Defru et al., 2020). Le transit de L168-9b a donc été observé avec le mode d’observation *SLITLESSPRISM*, le 29 mai 2022, pendant une durée totale de ~ 4 heures. L’observation est constituée de 9371 intégrations de 9 frames chacune, ce qui correspond à une durée d’intégration de 1.431 s auquel nous ajoutons 2 resets d’une durée équivalente à une frame (0.159 s). Les données sont réparties en 5 fichiers, ce qui représente un total d’environ 6 Go.

L’étape de *target acquisition* Toute observation est précédée d’une *target acquisition* ou acquisition de la cible en français. Cette étape permet de positionner la source à une position de référence sur le détecteur et d’assurer ainsi, dans le cas du LRS slitless, une calibration en longueur d’onde correcte. La cible est d’abord placée dans une zone correspondant à une ouverture de $\sim 5 \times 5$ arcsec (soit 48×48 pixels) en utilisant un des filtres d’imagerie à bande large de MIRIm et non l’assemblage du double prisme directement. Un algorithme à bord détermine ensuite le centre de masse de la cible et le compare à une position nominale, nous fournissant ainsi la valeur du décalage de la cible par rapport à cette position de référence. Le télescope fait alors une manoeuvre d’ajustement pour placer la cible sur la position de référence. Lorsque la position de la cible est ajustée, une image est prise, avant de tourner la roue à filtre et de sélectionner l’assemblage du double prisme (Rigby et al., 2022; Bouwman et al., 2022; Wright, Rieke et al., 2023; Kendrew, Bouwman et al., 2023, in prep.)

La réduction des données La réception des premières données est un moment de grande émotion. La Fig. 3.9 montre un exemple d’image spectrale brute de la cible L168-9b obtenue avec le LRS de MIRI qui correspond ici à la dernière frame de la première intégration. Nous procédons à la réduction et l’analyse des données en suivant les étapes décrites dans la Sect. 3.2. Nous menons la réduction initiale des données avec la version 1.5.3 du pipeline *jwst* et la version 0916 des fichiers CRDS. Les étapes appliquées lors de cette réduction initiale des données sont : l’initialisation DQ, l’application du masque, la détection de la saturation, le rejet de la dernière frame de chaque intégration, la correction du reset et du courant d’obscurité (indépendamment l’une de l’autre), la correction des non-linéarités, la détection des rayons cosmiques et l’ajustement de la rampe. Nous venons ensuite soustraire le fond observationnel et diviser par le champ plat. Précisons que nous ne calibrons pas les données et que l’unité en sortie est le DN s^{-1} . Nous obtenons ainsi une série temporelle de 9371 images spectrales de 72×416 pixels en DN s^{-1} . La Fig. 3.10 présente la série temporelle de la moyenne sur chaque image, ou courbe de lumière globale. Les deux premières intégrations de chaque fichier segmenté sont en moyenne plus élevée que la médiane de la courbe de lumière, ce qui est dû à une imperfection de la correction du courant d’obscurité dans la version du pipeline initiale, imperfection qui vient d’être corrigée dans la dernière version du pipeline 1.11.1. Par ailleurs, les données de télémétrie fournies dans les fichiers brutes indiquent un mouvement de l’antenne haut gain (*high gain antenna*, HGA en anglais) pendant l’observation. Ce mouvement a provoqué une très brève instabilité temporelle, ce qui a affecté le niveau de flux de quelques intégrations de la courbe de lumière (marqué par la ligne rouge sur la Fig. 3.10). L’ensemble des points mentionnés sont donc considérés comme des points aberrants que nous viendrons rejeter par méthode de rejet des *outliers* à l’étape 4 de l’analyse.

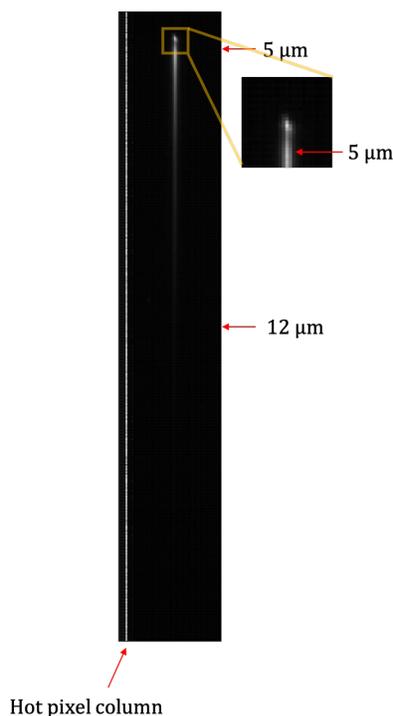


FIGURE 3.9 – Exemple de données brutes du LRS de la cible Li68-9b. Il s’agit ici d’une image spectrale correspondant à la dernière (9^e) frame de la première intégration. La trace spectrale est située au centre du subarray de 72 x 416 pixels. La colonne claire à gauche du spectre est une colonne de pixels chauds, que nous devons masquer lors de la réduction. Nous montrons également les lignes de pixels correspondant aux limites de longueurs d’onde du LRS, 5 et 12 μm . De manière générale, nous ne prendrons pas en compte les pixels respectivement au-dessus et en dessous de ces limites lors de l’extraction du spectre 1D.

3.3.2 Evaluer les performances du MIRI LRS

L’analyse des données L’analyse des données est menée à l’aide du package *Eureka!* (version 0.1, première version du package). Nous sélectionnons les pixels de la trace (du pixel 155 à 385 en hauteur et du pixel 13 à 64 en largeur) puis venons extraire la série temporelle de spectres 1D en considérant une mi-largeur à mi-hauteur de 4 pixels. Nous sélectionnons ensuite 25 canaux spectraux entre 5 et 12.2 μm avec un pas de 0.145 μm et procédons au rejet des *outliers* pour chacune des courbes de lumières en itérant le procédé explicité dans la Sect. 3.2.3 10 fois. La courbe de lumière blanche obtenue est présentée sur la Fig. 3.11. L’observation n’est pas centrée sur le transit qui est légèrement décalé car le début des observations est susceptible de varier dans un intervalle d’une heure. Le second constat est la présence d’un surplus de signal en début d’observation que l’on peut interpréter comme un effet de persistance que nous étudierons dans la Sect. 3.5.

Nous venons ensuite ajuster le modèle de transit sur les courbes de lumière spectrales pour obtenir la distribution du paramètre $R_p/R_{\text{star}}(\lambda)$. Ici, nous présentons les résultats obtenus en utilisant le modèle *starry* (Luger, Agol et al., 2019) et l’échantillonneur no-u-turn du package *nuts* mais précisons que cet échantillonneur était initialement non disponible dans le package *Eureka!* lors de la réception des premières données. La première analyse a été menée à l’aide de l’échantillonneur de M-H de l’algorithme *emcee* (Foreman-Mackey, Hogg et al., 2013). La comparaison avec les packages *emcee* et *dynesty* (Speagle, 2020) donne des résultats similaires à 3σ de confiance.

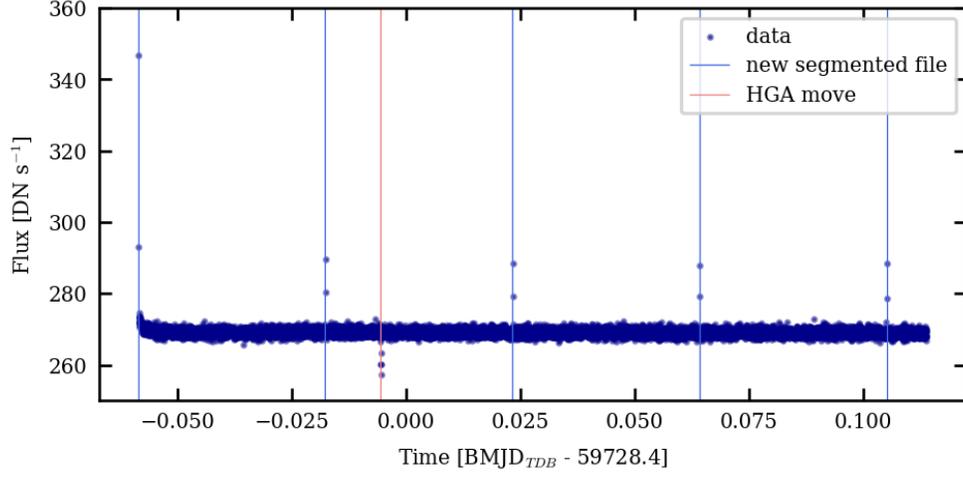


FIGURE 3.10 – Courbe de lumière globale des données Li168-9b obtenue après réduction des données et avant extraction spectrale. Figure obtenue en moyennant chacune des images spectrales (de dimensions 72 x 416 pixels). Les valeurs moyennes des deux premières intégrations de chaque fichier sont plus élevées que la médiane de la courbe de lumière et sont donc des points aberrants. Nous observons également un mouvement de l’antenne haut gain (*high gain antenna*, HGA en anglais) pendant l’observation, ce qui conduit à une brève diminution de flux après ~ 1 heure d’observation.

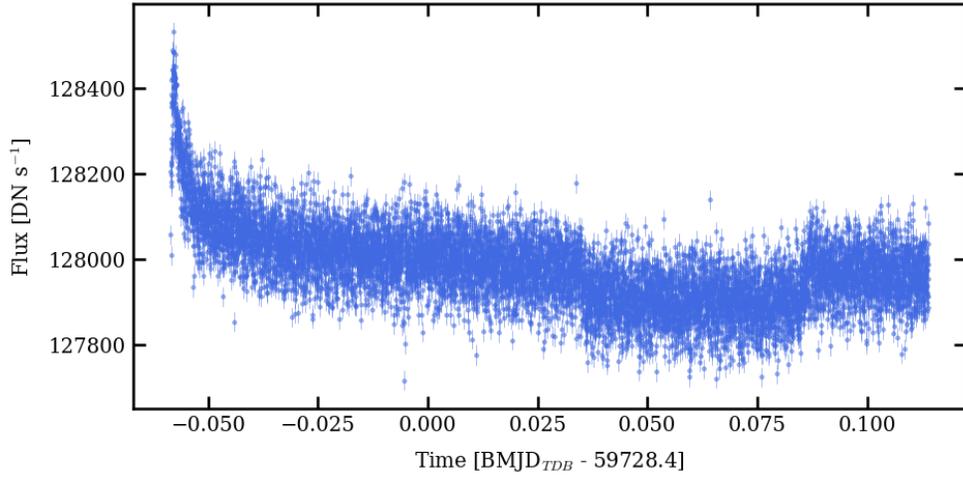


FIGURE 3.11 – Courbe de lumière blanche des données Li168-9b obtenue après réduction et analyse. Le surplus de flux en début d’observation est dû à un effet de persistance, discuté plus en détail dans la Sect. 3.5.

Nous fixons le demi grand-axe à 0.02091 ± 0.00024 AU (Astudillo-Defru et al., 2020) en considérant les paramètres libres suivants ainsi que leur distribution *a priori* associée :

- i. R_p/R_* suivant une loi normale $\mathcal{N}(0.02, 0.01^2)$ venant de la valeur obtenue par l’article de Patel et Espinoza, 2022;

2. Les coefficients quadratiques d'assombrissement centre-bord (u_1, u_2) suivants une loi uniforme entre 0 et 1, $\mathcal{U}(0, 1)$;
3. Les paramètres d'une double exponentielle pour ajuster les effets de persistance $c_0 + r_0e^{-tr_1} + r_3e^{-tr_4}$:
 - c_0 (DN s⁻¹) $\sim \mathcal{N}(1, 0.1^2)$,
 - r_0 (DN s⁻¹) $\sim \mathcal{N}(-0.01, 0.005^2)$,
 - r_1 (s⁻¹) $\sim \mathcal{N}(75, 30^2)$,
 - r_3 (DN s⁻¹) $\sim \mathcal{N}(-0.008, 0.0005^2)$,
 - r_4 (s⁻¹) $\sim \mathcal{N}(350, 50^2)$.
4. Le temps de mi-transit t_0 suivant une loi normale $\mathcal{N}(59728.4603, 0.005^2)$ BMJD_{TDB};
5. La période orbitale P suivant une loi normale $\mathcal{N}(1.40150, 0.00018^2)$ (Astudillo-Defru et al., 2020);
6. L'inclination de l'orbite i suivant une loi normale $\mathcal{N}(85.5, 0.7^2)$ (Astudillo-Defru et al., 2020);
7. L'excentricité e de l'orbite suivant une loi normale $\mathcal{N}(0., 0.1^2)$ (Astudillo-Defru et al., 2020).

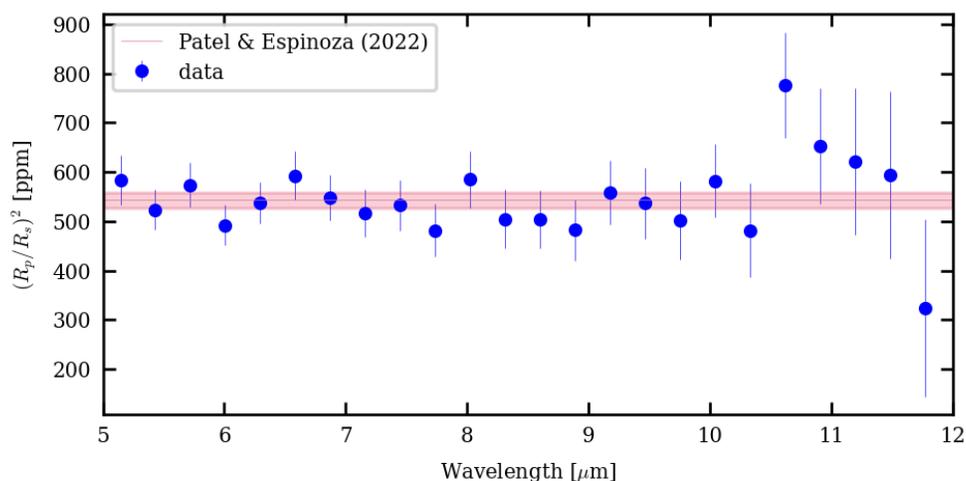


FIGURE 3.12 – Spectre en transmission de L168-9b obtenu après ajustement des 25 courbes de lumières spectrales extraites par réduction et analyse des données. La valeur issue de l'article de Patel et Espinoza, 2022 est également précisée.

La Fig. 3.12 présente le spectre par rapport à la valeur de l'article de Patel et Espinoza, 2022 prise ici comme valeur de référence dans le visible. L'un des objectifs principaux de l'évaluation des performances du MIRI LRS en série temporelle est de déterminer la stabilité spectro-photométrique ainsi que d'évaluer les performances des méthodes de réduction. De fait, les résultats des ajustements sont excellents : les résidus suivent une loi Normale centrée réduite pour tous les canaux spectraux, nous n'avons donc plus de bruit corrélé temporellement après ajustement. À titre d'exemple, les variances d'Allan (Howe, 1995) des résidus de l'ensemble des canaux allant de 5 à 7 μm sont présentées sur la Fig. 3.13.

Ce premier résultat obtenu sur les premières courbes de lumière spectroscopiques du MIRI LRS est un indicateur de l'excellente qualité des données et des méthodes de réduction et d'analyse employées. Les limites de la stabilité spectro-photométrique spectrale, qui correspondent aux ratios bruit-sur-signal sont présentées dans l'article de Bouwman et al., 2022 et atteignent 50 ppm à 7.5 μm , ce qui correspond au NSR théorique établi (voir Fig. 9 de Bouwman et al., 2022). En revanche, le NSR évalué pour les points spectroscopiques compris entre 5 et 7 μm

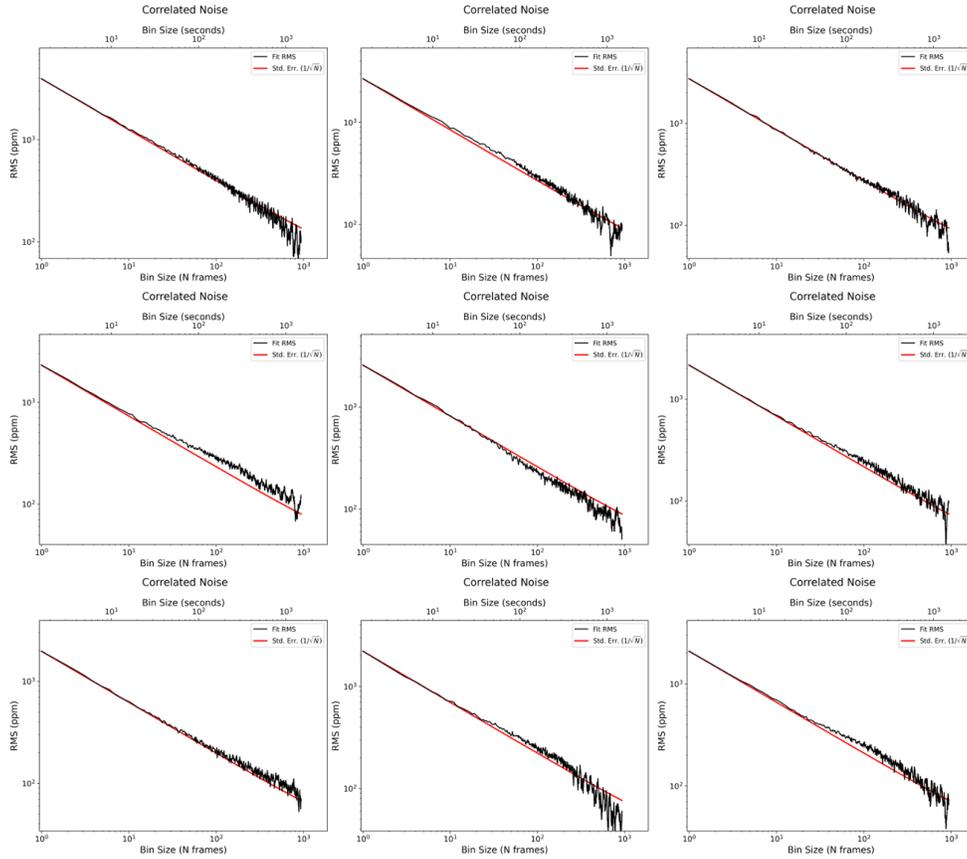


FIGURE 3.13 – Variances d’Allan (Howe, 1995) obtenues pour les résidus d’ajustement des 9 premiers canaux des données L168-9b, correspondant aux longueurs d’onde allant de 5 à 7 μm . L’ajustement a été réalisé à l’aide du package Eureka! (Bell, Ahrer et al., 2022).

est plus élevé que la valeur évaluée à 7.5 μm et atteint des valeurs jusqu’à 50% supérieures à la limite théorique. Les résidus d’ajustement étant gaussiens, ce surplus de bruit-sur-signal à courtes longueurs d’onde n’est donc pas lié à la stabilité temporelle des observations mais à la **dispersion des points des courbes de lumière spectroscopiques**, dont les valeurs en DN s^{-1} et les barres d’erreur associées sont issues de la conversion des rampes en pentes (effectuée à l’étape 1 de la réduction des données) puis de la soustraction du fond et la division par le champ plat (effectuée à l’étape 2). Cet excès de bruit-sur-signal impacte directement les barres d’erreur des points du spectre d’atmosphère à courtes longueurs d’onde. Il est donc nécessaire de comprendre la cause de cet excès et, si possible, d’apporter une correction. Ainsi, en collaboration avec Bouwman et al., 2022 et le STScI, j’ai donc suggéré d’utiliser les simulations comme référence pour étudier la possibilité d’une cause instrumentale ainsi que d’évaluer les sorties des différentes étapes de la réduction.

3.4 Les simulations comme référence

Dans cette section, je présente les modifications apportées aux simulations pour la prise en compte des données de calibration en vol. Je montre les résultats obtenus, la comparaison aux données L168-9b et enfin, je mène l'analyse du rapport bruit-sur-signal (Dyrek, Ducrot et al., 2023).

3.4.1 L'adaptation des simulations à la calibration en vol

L'adaptation des simulations se fait en plusieurs étapes. Nous commençons par prendre en compte l'ensemble des fichiers de calibration (CRDS) issues du commissioning que nous venons fournir en entrée du simulateur. Cela nous permet de reproduire les conditions de vol de MIRI et de garantir des simulations les plus réalistes possibles. À ce titre, nous incluons les données de vol concernant : le courant d'obscurité, le reset anomaly, le bruit de lecture, le masque des pixels défaillants, le champ plat, la fonction de dispersion des longueurs d'onde, les coefficients de distorsion de la trace, le niveau de saturation et les non-linéarités de la rampe. Cependant, contrairement à la calibration au sol, nous n'avons pas accès aux éléments de la chaîne de détection indépendamment les uns des autres, la calibration en vol nous donnant accès uniquement à un signal en sortie de la chaîne en DN. L'ensemble des sorties intermédiaires comme l'efficacité quantique, la transmission du détecteur, l'amplification, les différents gains de conversion des électrons en volts puis en DN sont inconnues. Nous devons donc appliquer le facteur de calibration absolue en $(\text{MJy sr}^{-1})/(\text{DN s}^{-1})$ issue du commissioning (Gordon, 2022), aux valeurs de flux en μJy en sortie d'ExoNood1e. Nous convertissons puis divisons ces valeurs de flux par l'angle solide sous-tendu par un pixel en sr dont la valeur est indiquée dans la Sect. 3.2.2 pour appliquer ce facteur et obtenir un flux en DN s^{-1} . Nous venons ensuite convertir ces valeurs de flux en $e^- \text{s}^{-1}$ à l'aide du gain électronique exprimé en $e^- \text{DN}^{-1}$. Enfin, les flux sont convertis en signal en e^- par échantillonnage temporel sous forme de rampes. La valeur clé dans ces conversions est celle du gain électronique qui nous permet de convertir les DN en électrons et dont la valeur impacte directement le bruit de photon associé aux simulations. Le commissioning de MIRIm a montré que la valeur du gain est plus faible que celle initialement mesurée au sol. Nous passons donc de 5,5 à 3,1 $e^- \text{DN}^{-1}$ (Kendrew, Bouwman et al., 2023, in prep.).

Le fond observationnel est également adapté à partir des observations en vol. La valeur initialement prise en compte est celle de 110 $e^- \text{s}^{-1}$, issue de calculs et appliquée uniformément sur l'ensemble du subarray LRS. Pour adapter le fond observationnel, nous utilisons une observation indépendante de fond acquise dans le cadre de l'observation de la cible de calibration BD+60-1753, le 26 mai 2022 (PID 1053). L'observation est un ensemble de 4 intégrations de 125 frames chacune pour lesquelles nous venons ajuster la pente pour obtenir un flux en DN s^{-1} . Nous calculons ensuite la valeur médiane sur les 4 images, ce qui nous permet d'obtenir une unique image de fond de 72 x 416 pixels. Cette image est ensuite intégrée et pour s'adapter à chaque scène observationnelle simulée. Par ailleurs, l'ajout des effets de persistance requiert également une adaptation aux données. Les données L168-9b présentent non pas une augmentation mais une diminution exponentielle au niveau de la trace du spectre. Cela signifie que le response drift, jusqu'ici pris en compte dans les simulations et correspondant à un déficit de flux en début d'observation, est dominé par un autre effet causant un surplus de signal. En effet, toute observation est précédée d'un cycle d'idles (voir Sect. 2.3 du Chap. 2) qui consiste à appliquer des resets consécutifs dont la conséquence directe est un surplus de signal en début d'observation qui diminue suivant une fonction exponentielle (ou idle recovery). Nous ajoutons donc l'idle recovery aux simulations en ajustant l'effet de persistance de la courbe de lumière blanche suivant l'Eq. 2.4 définie au Chap. 2. Cet ajustement nous permet d'obtenir une valeur pour le paramètre de temps d'idle Δt_I , qui correspond au temps passé à effectuer ces resets consécutifs. La valeur est ensuite injectée dans le modèle du package MIRISim-TSO et appliquée à tous les pixels de la trace, à différents niveaux de signal, suivant la méthodologie présentée dans la Sect. 2.3 du Chap. 2. Précisons que la version adaptée de MIRISim-TSO a été rendue publique et est disponible à la même adresse fournie au Chap. 2

3.4.2 Simuler la spectroscopie de transit de la cible L168-9b : comparaison aux données

Nous appliquons donc la nouvelle version des simulations à l’observation du transit de la super-Terre L168-9b avec le MIRI LRS. La Table 3.2 présente les propriétés de l’étoile et de la planète prises en compte pour produire les simulations, fournies en entrée d’`ExoNoodle`.

TABLE 3.2 – Paramètres d’entrée d’`exoNoodle` pour la simulation du transit de la cible L168-9b avec le MIRI LRS.

Parameter	Value	Source
T_{eff} (K)	3800 ± 70	Astudillo-Defru et al., 2020
$\log g$ (dex)	4.04 ± 0.49	Astudillo-Defru et al., 2020
Metallicity [Fe/H] (dex)	0.04 ± 0.17	Astudillo-Defru et al., 2020
R_{\star} (R_{\odot})	0.6 ± 0.022	Astudillo-Defru et al., 2020
M_{star} (M_{\odot})	0.62 ± 0.03	Astudillo-Defru et al., 2020
$R_{\text{p}}/R_{\text{star}}$	0.0233 ± 0.0007	Patel et Espinoza, 2022
M_{p} (M_{Jup})	0.0145 ± 0.0018	Astudillo-Defru et al., 2020
Distance (pc)	25.15 ± 0.0239	Stassun et al., 2019
P (days)	1.40150 ± 0.00018	Astudillo-Defru et al., 2020
i (deg)	85.5 ± 0.8	Astudillo-Defru et al., 2020
a (AU)	0.02091 ± 0.00024	Astudillo-Defru et al., 2020

Les coefficients de l’assombrissement centre-bord ont été calculés à l’aide du package `ExoTETHyS` (Morello, Claret et al., 2020) selon la prescription de Kipping, 2013. Il s’agit de coefficients quadratiques dont les valeurs obtenues sont de 0.07 et de 0.09. Le spectre stellaire intégré dans les simulations est un modèle `PHOENIX-ACES` (Husser et al., 2013) interpolé à la température et à la métallicité de l’étoile et couplé à une loi du corps noir pour les longueurs d’onde supérieures à $10 \mu\text{m}$. En considération des spécifications de choix de la cible énumérées à la Sect. 3.3, nous ne prenons pas en compte de modèle atmosphérique pour cette simulation. La planète est assimilée à un corps noir avec une température d’émission côté jour de $T_{\text{day}} = 1500 \text{ K}$ et une température d’émission côté nuit de $T_{\text{night}} = 500 \text{ K}$, calculées à partir de la température d’irradiation de l’étoile et en considérant une recirculation atmosphérique nulle. Nous échantillons les simulations avec un temps d’intégration de 1.431 s correspondant à la durée d’intégration des données auquel nous ajoutons la durée de 2 resets consécutifs. Nous produisons un ensemble de 9371 intégrations d’une durée totale égale à celle des observations. La Table 3.3 présente l’ensemble des paramètres fournis à `MIRISim`.

La Fig. 3.14 présente les résultats de simulations obtenus ainsi que la comparaison aux données. Afin de garantir des résultats comparables, nous appliquons les mêmes configurations et valeurs de paramètres que celles utilisées pour réduire et analyser les données à l’aide des packages `jwst` et `Eureka!`. La première ligne présente les résultats en sortie de l’étape 3 de l’analyse qui correspond à l’extraction d’une série temporelle de spectres 1D. La série temporelle de spectres est présentée sous la forme d’une image 2D du niveau de flux en DN s^{-1} montré en fonction du temps et de la longueur d’onde. La deuxième ligne présente 10 courbes de lumière normalisées parmi les 25 courbes de lumière extraites à l’étape 4 de l’analyse. Ces courbes permettent notamment d’observer la variation des effets de persistance en fonction du flux, le flux étant plus élevé aux courtes longueurs d’onde. Plus le flux est fort, plus l’amplitude de l’effet de persistance est élevée. La figure montre également l’accord entre les simulations et les données sur la prise en compte des effets de persistance. La quatrième ligne présente la courbe de lumière blanche, corrigée de toutes systématiques instrumentales. Les points ont été moyennés sur une durée de ~ 15 minutes dans un souci de lisibilité (points en noir). La courbe en rouge présente le modèle de transit ajusté sur la courbe de lumière dont la justesse

TABLE 3.3 – Paramètres d’entrée de MIRISim pour la simulation du transit de la cible L168-9b avec le MIRI LRS.

Parameter	Value
Observation mode	MIRI LRS slitless
Frame time (s)	0.159
Number of frames per integration	9
Integration time (s)	1.431
Number of integrations	9371
Number of exposures	1
Number of resets	2

est établie par la variance d’Allan (quatrième ligne de la figure). Le graphe de la variance d’Allan est établi ici pour la courbe de lumière blanche et montre une distribution gaussienne des résidus à la fois pour les simulations et pour les données. L’une des différences visuelles entre les simulations et les données est le décalage du temps de transit. En effet, nous ne prenons pas en compte le décalage du début l’observation. De fait, les simulations placent le temps de mi-transit comme étant le temps de mi-observation.

La Table 3.4 présente la comparaison des valeurs des paramètres libres obtenues après ajustement du modèle de transit sur la courbe de lumière blanche et celles fournies en entrée dans les simulations. L’ensemble des valeurs des paramètres orbitaux sont en accord à 3σ . La seule différence majeure concerne les coefficients d’assombrissement centre-bord. La distribution *a priori* considérée suivant une loi uniforme entre 0 et 1, les distributions *a posteriori* des paramètres sont corrélés entre elles et sont peu contraintes.

3.4.3 Analyse du rapport bruit-sur-signal

Nous pouvons à présent nous concentrer sur le rapport bruit-sur-signal que nous établissons à la fois pour les simulations et les données et que nous comparons. Le rapport bruit-sur-signal peut être considéré comme l’écart des points à la moyenne, normalisé par la moyenne, sur une zone de la courbe de lumière dite stabilisée, ou en d’autres termes, pour laquelle les variations temporelles des systématiques instrumentales ont été corrigées, le bruit corrélé temporellement étant donc nul. Précisons que plus nous prenons en compte de points dans le calcul de la dispersion, plus la précision sur la moyenne augmente. Nous avons donc tout intérêt à assurer une correction des variabilités instrumentales à grandes échelles temporelles. Nous appliquons le calcul du bruit-sur-signal à l’ensemble des courbes de lumière des 25 canaux spectroscopiques extraits à l’étape 4 sur une zone comprenant 1000 points hors transit, entre les intégrations 3000 et 4000. La comparaison des résultats obtenus entre simulations et données est présentée sur la Fig. 3.15.

Les deux courbes sont en accord entre 7 et 12 μm mais présentent une différence jusqu’à 50 % entre les simulations et les données entre 5 et 7 μm . Tout d’abord, nous confirmons la tendance observée par Bouwman et al., 2022 qui présente effectivement un excès de bruit-sur-signal à courtes longueurs d’onde. Le constat intéressant ici est que les simulations ne présentent pas cet excès. La question se pose alors de savoir si la cause de cette dispersion plus élevée est instrumentale ou liée aux méthodes de réduction et d’analyse employées. Pour ce faire, une solution consiste à appliquer une méthode indépendante de réduction et de comparer les résultats à la méthode officielle. Les points des courbes de lumière spectroscopiques étant issus de l’ajustement des rampes, la méthode utilisée consiste à contourner cette étape d’ajustement en considérant uniquement l’avant-dernière frame de la rampe, la dernière étant impactée par le last frame effect et rejetée du jeu de données (voir Sect. 2.2.5.4 du Chap. 2 et Sect. 3.2.1 de ce chapitre). Nous l’appliquons aux images spectrales non calibrées des données et des simulations de la cible L168-9b

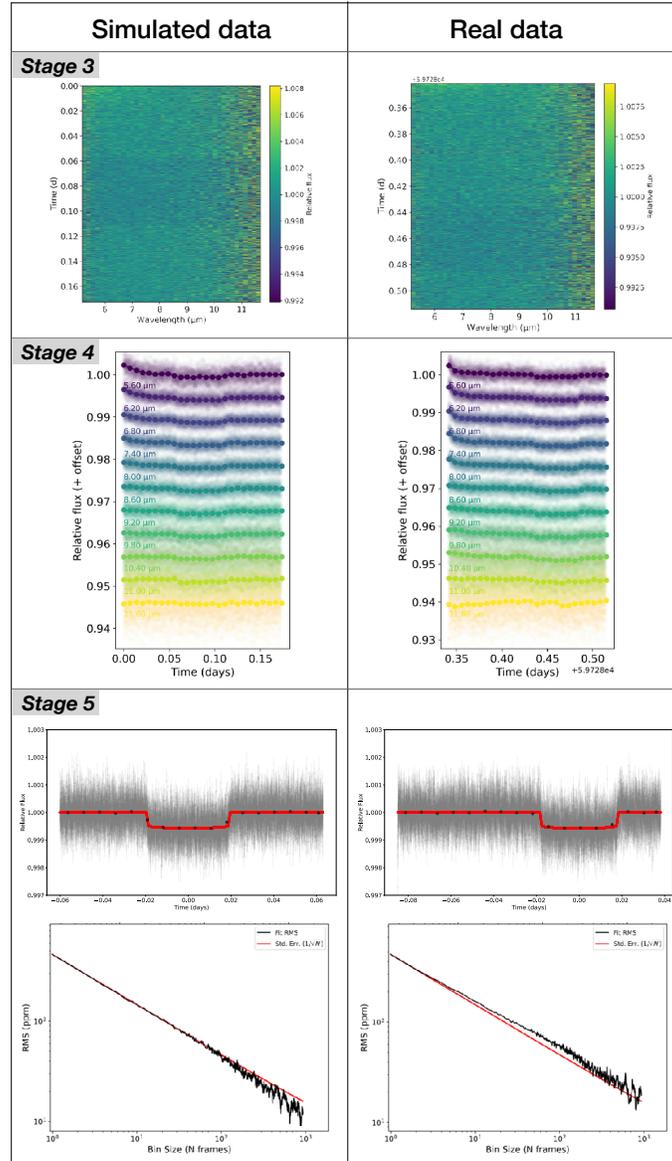
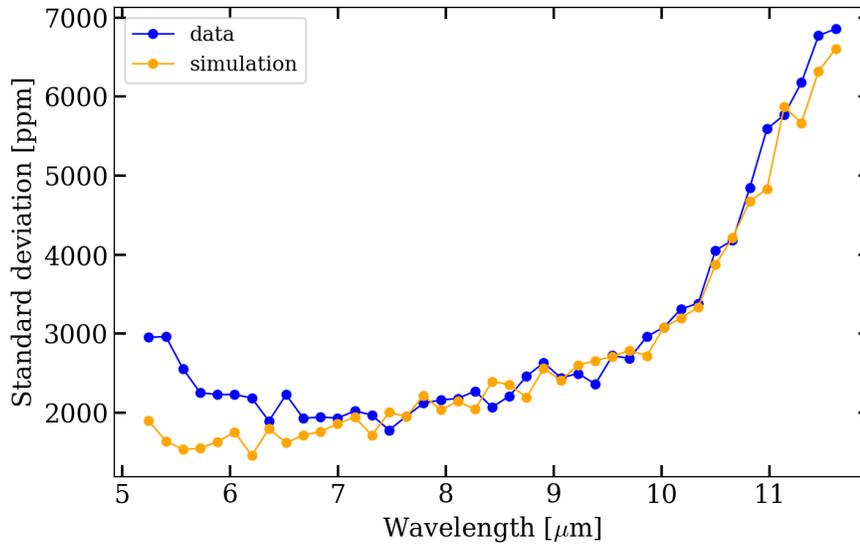


FIGURE 3.14 – Comparaison des simulations et des données de la cible L168-9b. *Première ligne* : Représentation à deux dimensions des séries temporelles de spectre 1D obtenues après extraction du spectre, correspondant à l'étape 3 de l'analyse des données. *Seconde ligne* : Présentation de 10 courbes de lumière spectrales, décalées entre elles dans un but de visibilité et obtenues en sortie de l'étape 4. Les deux images sont produites à l'aide du package *chromatic*. *Troisième ligne* : Courbes de lumière blanches corrigées des effets de persistance par ajustement de modèle (points en gris) moyennées sur une durée de ~ 15 minutes (points en noir) et sur lesquelles sont superposés les modèles de transit en sortie d'ajustement (courbes en rouge). *Quatrième ligne* : variance d'Allan (Howe, 1995) calculée sur les résidus d'ajustement.

TABLE 3.4 – Résultats d’ajustement des simulations de L168-9b comparés aux paramètres d’entrée d’ExoNoodle

Parameter	Input value	Retrieved value
R_p/R_{star}	0.0233 ± 0.0007	$0.023400^{+0.00026}_{-0.00025}$
P (days)	1.40150 ± 0.00018	$1.401499^{+0.000122}_{-0.000117}$
i (deg)	85.5 ± 0.8	$85.95^{+0.57}_{-0.55}$
a/R_{star}	$7.493^{+0.610}_{-1.640}$	$7.188^{+0.254}_{-0.253}$
u_1	0.0744906	$0.04^{+0.03}_{-0.02}$
u_2	0.09056845	$0.49^{+0.34}_{-0.32}$


FIGURE 3.15 – Estimation de la dispersion des points des courbes de lumière spectroscopiques pour les données (courbe en bleu) et les simulations (courbe en jaune) de L168-9b.

et appliquons les étapes suivantes :

1. La première frame de chaque rampe est à un niveau de signal que l’on peut considérer comme l’ordonnée à l’origine de la rampe, qui est une valeur positive que l’on appelle offset. Cette valeur doit être soustraite afin d’assurer une calibration correcte de la rampe. Puis, nous nous plaçons dans une région de l’image spectrale située dans le fond (en bas de l’image). Nous choisissons une zone rectangulaire allant des lignes 0 à 50 et des colonnes 35 à 38. Pour chaque rampe, nous calculons la moyenne sur la zone des valeurs des avant-dernières frame. Cela nous donne une valeur moyenne du fond observationnel que l’on pourra soustraire par la suite.
2. Dans un second temps, nous nous plaçons dans une zone rectangulaire correspondant à la trace, allant des lignes 155 à 391 et des colonnes 35 à 38. Nous sommes le signal sur chaque ligne pour obtenir une valeur par ligne. Après soustraction de l’offset, nous pouvons soustraire le fond. La sortie de cette étape correspond à

une série temporelle de spectres 1D dont les valeurs correspondent aux avant-dernières frames intégrées sur la durée d'observation correspondante.

3. Nous venons ensuite appliquer le procédé de *sigma-clipping* (expliqué dans la Sect. 3.2.3 du Chap. 3) afin de rejeter les points aberrants. Nous rejetons les points aberrants à 5σ de la médiane glissante sur 50 points.
4. Nous choisissons ensuite une partie stable de la courbe de lumière (entre les intégrations 3000 et 4000) puis nous calculons la moyenne du signal sur cette zone. Nous obtenons un spectre 1D en fonction de la ligne du détecteur, présenté sur l'image de gauche de la Fig. 3.16.

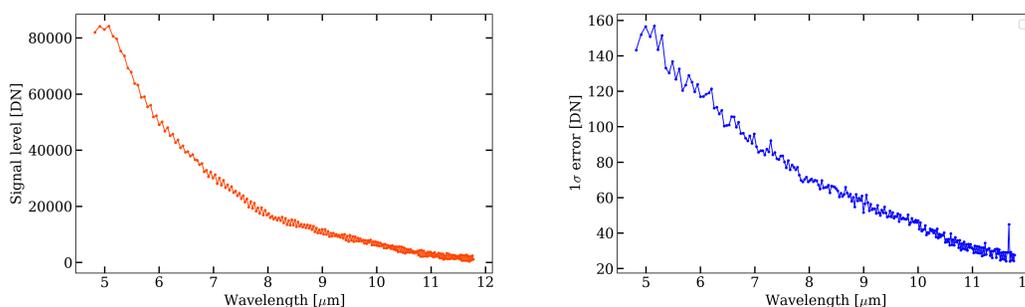


FIGURE 3.16 – *À gauche* : Extraction du spectre 1D des données L168-9b en prenant en compte uniquement l'avant-dernière frame de la rampe. *À droite* : Dispersion des points des courbes de lumière spectroscopiques des données L168-9b en prenant en compte uniquement l'avant-dernière frame de la rampe.

5. L'étape suivante consiste à évaluer la dispersion des points des courbes de lumière spectroscopiques à l'échelle du pixel. Nous n'appliquons pas ici d'extraction de canaux spectraux mais seulement un rejet des pixels aberrants à 5σ en appliquant une médiane glissante de 10 valeurs. L'image de droite de la Fig. 3.16 présente les valeurs de dispersion en fonction du numéro de la ligne du détecteur.
6. La dernière étape consiste à diviser la dispersion par la valeur moyenne du signal pour obtenir l'estimation du rapport bruit-sur-signal. Nous utilisons le fichier de calibration de dispersion issu du commissioning (voir Sect. 3.2 du Chap. 3).

La Fig. 3.17 montre les résultats obtenus pour les données et les simulations. De fait, les résultats obtenus avec cette méthode alternative ne montrent aucun excès de bruit-sur-signal à courtes longueurs d'onde, à la fois pour les données et les simulations, ce qui nous permet d'affirmer que cet excès est donc un **artéfact issu de la méthode de réduction des données** et non une systématique instrumentale.

Le travail suivant consiste à isoler la sous-étape en amont de l'ajustement de la pente pouvant être à l'origine de cet excès de bruit-sur-signal. Pour ce faire, nous menons une série de réductions de données indépendantes avec le pipeline *jwst* en incluant tour à tour les étapes suivantes : soustraction du courant d'obscurité, correction de la saturation, correction du reset anomaly, rejet des première et dernière frames, correction des non-linéarités, rejet des frames impactées par le RSCD et correction des rayons cosmiques. Cette étude montre que l'excès de bruit-sur-signal n'apparaît plus après activation de l'étape rejetant les frames impactées par le RSCD (Dyrek, Ducrot et al., 2023). La Fig. 3.18 présente les résultats obtenus après activation de cette étape pour les données et les simulations.

L'explication liée à cette augmentation de bruit-sur-signal aux courtes longueurs d'onde est complexe. À cet égard, commençons par rappeler le processus de détection des rayons cosmiques. Ce processus est basé sur le rejet de frames à partir d'un écart à la moyenne calculé sur les différences successives des frames, deux à deux (Anderson et Gordon, 2011). De manière générale, lorsque aucun rayon cosmique ou autre cause de cassure de la non-linéarité

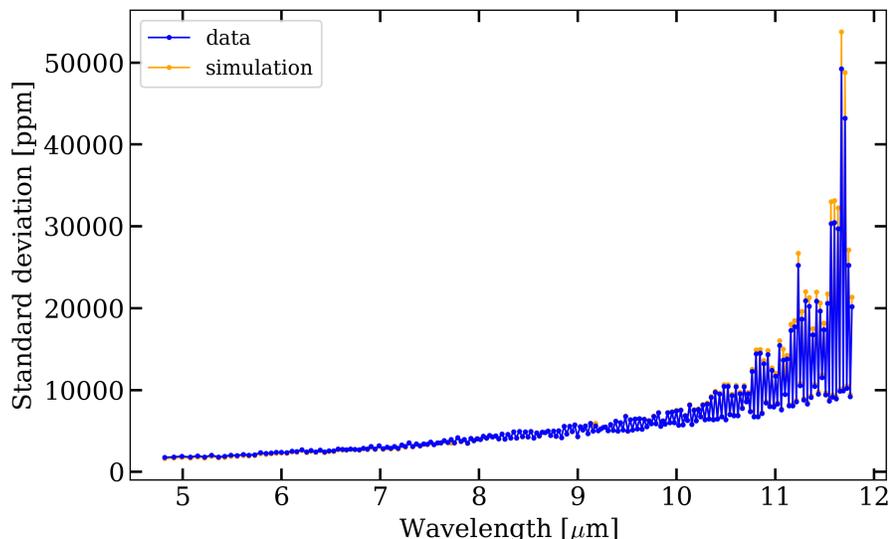


FIGURE 3.17 – Estimation du bruit-sur-signal des courbes de lumière spectroscopiques des données L168-9b en prenant en compte uniquement l'avant-dernière frame de la rampe.

impacte la rampe, l'allure des différences successives est une droite horizontale. En réalité, les rampes présentent un résidu de non-linéarité même après correction. À titre d'exemple, la Fig. 3.19 présente les 4 premières intégrations de l'observation de la cible L168-9b après correction des non-linéarités des rampes à l'étape 1 du pipeline `jwst`. La figure présente les rampes du pixel le plus brillant [389, 36] (graphe du haut) et celles d'un pixel à signal dit moyen [300, 36] (troisième graphe en partant du haut). Les graphes 2 et 4 présentent les différences successives des frames de ces 4 premières intégrations. Nous observons un **résidu de non-linéarité** allant jusqu'à 4% pour les signaux forts. Cette valeur est bien comprise dans les spécifications qui sont de 5% mais n'est pas suffisante pour l'observation de cibles brillantes.

De fait, l'étape de rejet des rayons cosmiques croit détecter des frames défaillantes et les exclut de l'étape d'ajustement des rampes. La majorité des frames exclues sont comprises entre les frames 1 et 5. En revanche, la première frame, impactée par le *first frame effect*, n'est jamais exclue du jeu de données car elle n'est pas prise en compte dans la méthode des différences successives pour le rejet de frames. La Fig. 3.20 présente le statut des 9 frames de 4 intégrations des observations de la cible L168-9b pour l'ensemble des pixels de la trace situés dans la colonne 36 (lignes allant de 300 à 390). Cette figure est faite à partir de la version 1.8.5 du pipeline `jwst`.

La fluctuation du nombre de frames rejetées par l'étape de détection des rayons cosmiques pour différentes intégrations implique une variabilité dans l'ajustement des rampes à fort flux. À moyen et faible flux, nous n'observons pas de rejet de frames par l'étape de détection des rayons cosmiques. La variabilité du rejet observée à fort flux peut être interprétée comme la source de l'excès de bruit-sur-signal à courtes longueurs d'onde (i.e. à forts flux). De fait, lorsque nous activons l'étape du RSCD, qui est appliquée en amont de la détection des rayons cosmiques, nous excluons systématiquement les 4 premières frames du jeu de données, limitant ainsi les variabilités de l'ajustement. Enfin, l'existence de résidus de non-linéarités à l'issue du calcul des différences successives, responsable d'un rejet variable de frames par l'étape de détection des rayons cosmiques, peut être effectivement dû à l'effet de RSCD, ou autres non-linéarités de la rampe.

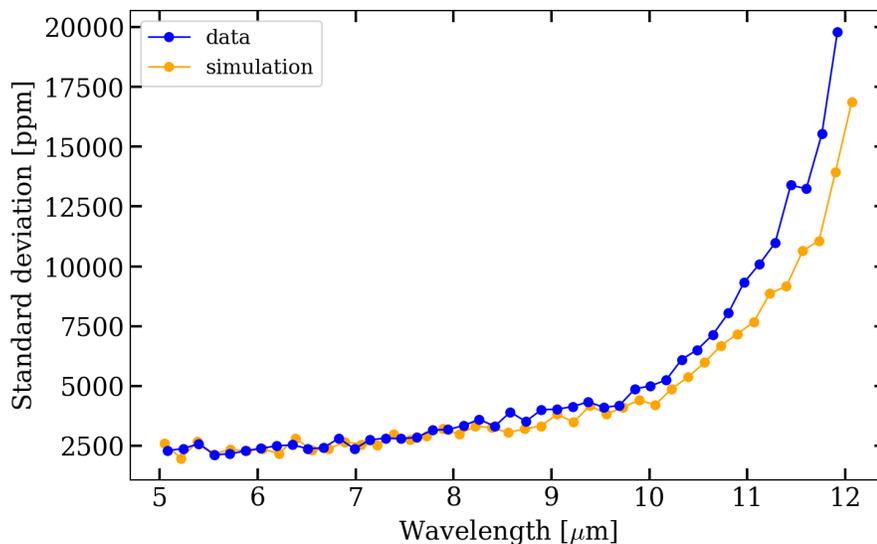


FIGURE 3.18 – Estimation du bruit-sur-signal des données et simulations de la cible L168-9b après activation de l'étape RSCD qui consiste à rejeter les 4 premières frames du jeu de données avant d'ajuster la rampe.

Par ailleurs, l'étape dite du RSCD n'était pas initialement incluse dans la première étape du pipeline `jwst`. La première réduction des données menée en juillet 2022 correspond à la version 1.5.3 du pipeline et à la version 0916 des fichiers de calibration en vol et ne présente aucune possibilité d'activer une étape liée au RSCD. La deuxième réduction des données, menée en novembre 2022 correspond à la version 1.8.0 du pipeline et à la version 1017 des fichiers de calibration en vol et offre la possibilité d'activer cette étape, mais ne connaissant pas l'impact de la détection des rayons cosmiques et ne voulant pas rejeter inutilement des frames du jeu de données, elle n'avait pas été activée. Nous avons donc activé cette étape en utilisant la version 1.8.5 du pipeline et les fichiers de calibration 1075 et apporté les résultats présentés ci-dessus, travail qui a mené à la mise en application de la version ultérieure du pipeline 1.10.2 (et fichiers CRDS 1089) qui réunit aujourd'hui les étapes de correction du reset et du courant d'obscurité dans une même étape et qui active systématiquement l'étape du RSCD (Morrison et al., 2023; Dyrek, Ducrot et al., 2023).

3.4.4 Des simulations pour préparer les futurs cycles d'observation

L'adaptation des simulations aux données de calibration en vol représente aujourd'hui un atout, car elle nous permet de fournir à la communauté des prédictions liées aux futures observations, soit pour le premier cycle d'observation du JWST, soit pour préparer les propositions d'observation des cycles suivants. Comme indiqué dans le Chap. 2, l'obtention de temps d'observation sur le JWST se fait par un système de sélection de propositions d'observations. Il est donc nécessaire de démontrer la faisabilité scientifique et instrumentale de l'observation proposée. Dans cette section, je présente une sélection de simulations réalisées pour répondre à différents objectifs. Le premier est de préparer l'arrivée de futures données, le second est d'aider à la conception d'une proposition de temps d'observation et le troisième est de contraindre les modèles d'atmosphère à partir des observations.

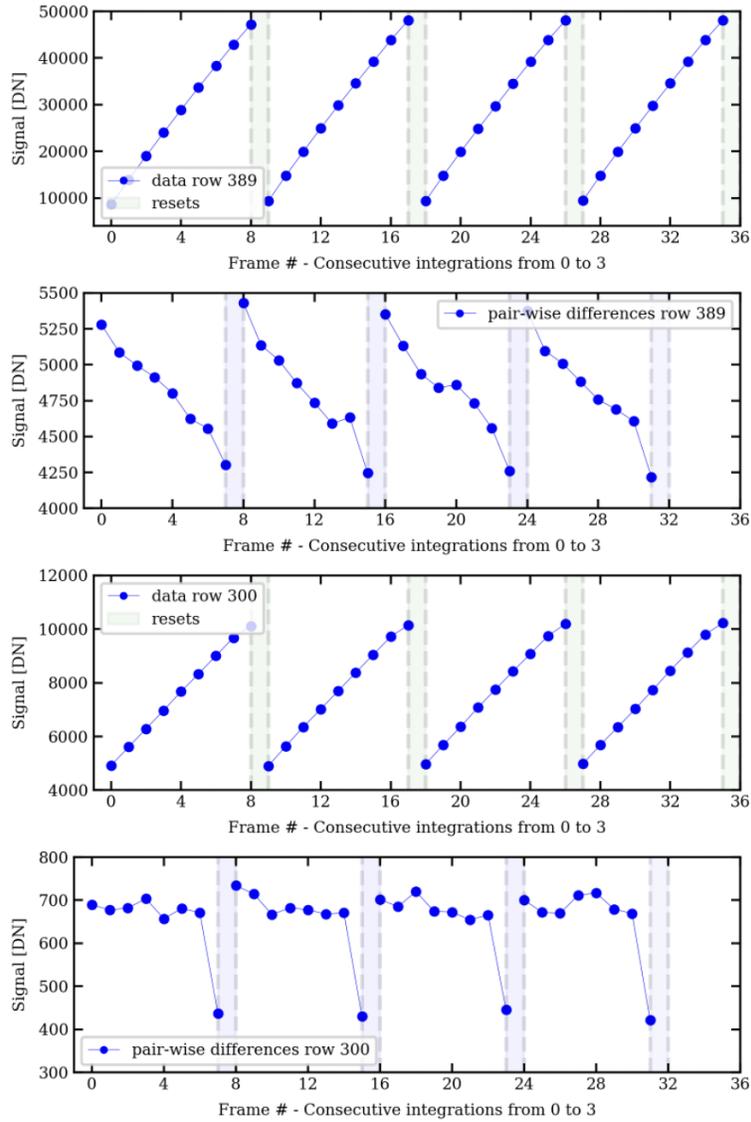


FIGURE 3.19 – Exemple des 4 premières intégrations des données de la cible L168-9b après application de la correction des non-linéarités, à l’aide du pipeline `jwst`. Les graphes 1 et 3 en partant du haut montrent les rampes des pixels [389, 36] et [300, 36] où 36 est la colonne brillante. Les deux lignes 389 et 300 sont représentatives d’un signal respectivement dit fort et moyen. Les graphes 2 et 4 montrent les différences successives des frames pour les deux rampes à signal fort et moyen pour lesquels des non-linéarités subsistent même après correction par le pipeline.

3.4.4.1 Inférer des contraintes sur l’atmosphère de L168-9b grâce aux simulations

Le dernier cas présenté ici est l’utilisation des simulations pour inférer des contraintes sur les atmosphères. L’exemple présenté ici est celui de la super-Terre L168-9b. Les prédictions de Astudillo-Defru et al., 2020 et la réduc-

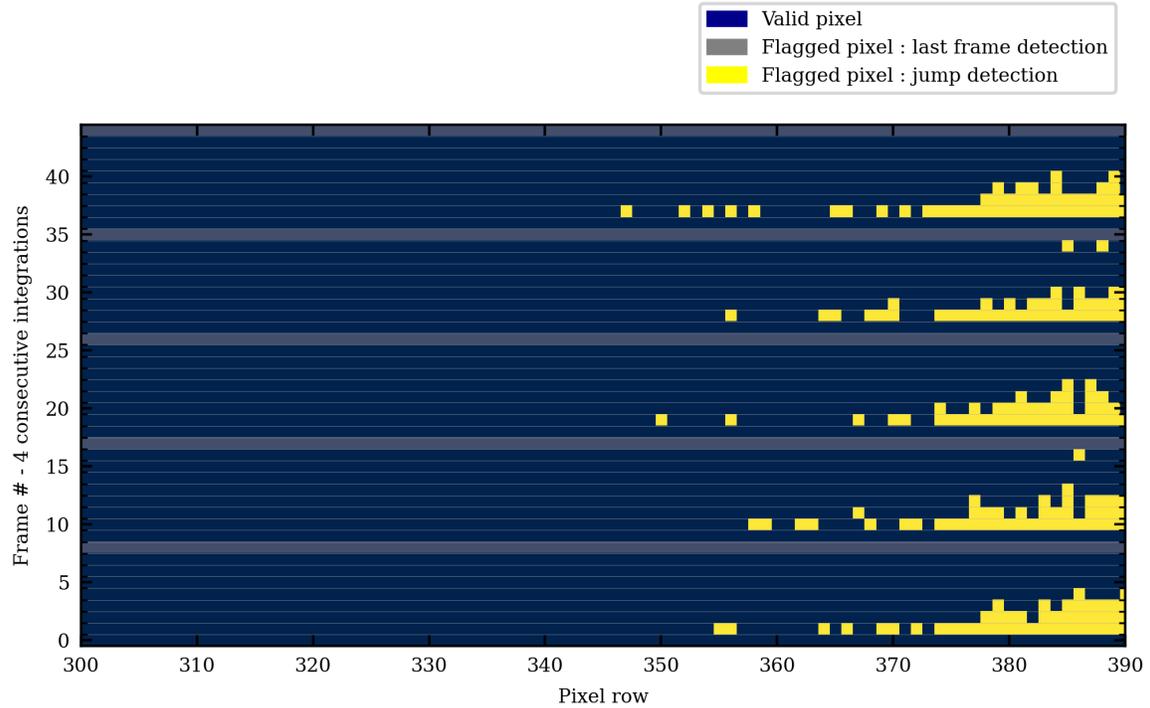


FIGURE 3.20 – Statut des frames pour 4 intégrations (en ordonnée) de la cible L168-9b pour l’ensemble des pixels de la trace de la colonne 36 (en abscisse). La couleur montre le statut de chacune des frames. Les frames en bleu sont valides et donc gardées dans le jeu de données pour l’étape d’ajustement de la rampe. Les frames en gris sont rejetés du jeu de données par l’étape de détection du *last frame effect*. Les frames en jaune sont issues de l’étape de détection des rayons cosmiques et sont rejetées du jeu de données. Ces frames sont situés au niveau des courtes longueurs d’onde (lignes de pixels allant de ~ 340 à 390 avec une forte concentration sur les pixels à forts flux). Ces frames sont également comprises entre 1 et 5, les frames entre 6 et 8 étant en général conservés dans le jeu de données. Figure présentée ici avec l’aimable autorisation de D. Simonian.

tion des données ont toutes deux montré une convergence vers un spectre dit *plat*. Le terme plat peut signifier deux choses : soit la planète n’a pas d’atmosphère, soit les signatures spectrales de l’atmosphère ne peuvent pas être détectées car elles sont perdues dans le bruit photonique de l’étoile. Les simulations peuvent donc nous permettre d’établir un critère de détectabilité en prenant plusieurs modèles d’atmosphères différents et en comparant les signatures moléculaires obtenues. Dans le cas de l’étude de la cible L168-9b, nous simulons donc deux scénarios d’atmosphères différents :

- Scénario 1 : une atmosphère étendue primitive, riche en hélium et en hydrogène (H-He);
- Scénario 2 : une atmosphère dense proche de la composition de celle de Vénus, ou *Venus-like*, avec 50% CO_2 and 15% CO mais une métallicité bien plus élevée (x1000).

Les modèles d’absorption moléculaires sont générés avec le package ATM0, un modèle 1D en équilibre hydrostatique (Tremblin, Amundsen et al., 2015; Tremblin, Chabrier, Baraffe et al., 2017). Ce modèle résout les équations de transfert radiatif pour un jeu d’opacité atmosphérique donné et fournit le profil pression-température qui satisfait l’équilibre hydrostatique et la conservation d’énergie. Ce modèle peut également prendre en compte une chimie hors équilibre en incluant les cinétiques de réaction (Venot et al., 2012). Dans le cas de nos simulations, nous ne

prenons en compte qu'une chimie à l'équilibre. La Fig. 3.21 présente les spectres en transmission obtenus pour les deux scénarios ainsi que les modèles d'absorption injectés en entrée. Le scénario H-He correspond à la courbe en bleue et le scénario *Venus-like* est montré en rouge. Nous ajoutons également les points issus de l'analyse des données (points en gris). Les deux courbes présentées en bas de la figure correspondent à l'écart $\sigma_{\text{data-simulation}}$ entre simulations et données pour les deux scénarios. Cet écart $\sigma_{\text{data-simulation}}$ se calcule par

$$\sigma_{\text{data-simulation}} = \frac{\Delta F_{\text{data}}(\lambda) - \Delta F_{\text{simulation}}(\lambda)}{\sqrt{\sigma_{\Delta F, \text{data}}^2 + \sigma_{\Delta F, \text{simulation}}^2}} \quad (3.9)$$

où $\Delta F_{\text{data}}(\lambda)$ et $\Delta F_{\text{simulation}}(\lambda)$ sont respectivement les valeurs des profondeurs de transit des données et des simulations. $\sigma_{\Delta F, \text{data}}$ et $\sigma_{\Delta F, \text{simulation}}$ sont respectivement les erreurs sur les profondeurs de transit des données et des simulations.

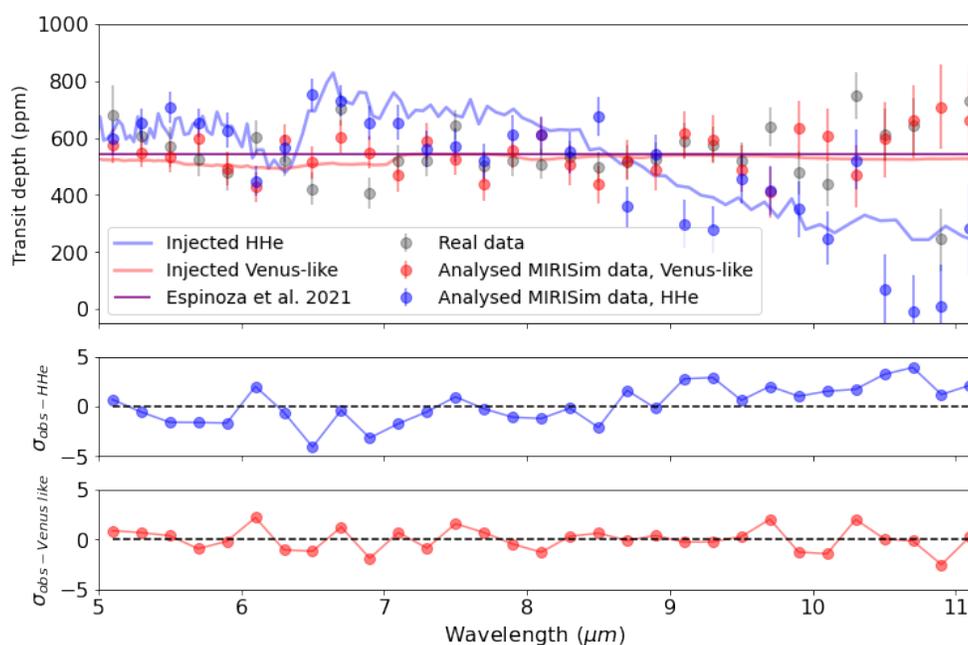


FIGURE 3.21 – *Courbe du haut* : Spectres en transmission obtenus par simulation pour les deux scénarios H-He (courbe en bleue) et celui proche d'une composition de Vénus (courbe en rouge). Nous ajoutons également les points issus de l'analyse des données (points en gris). *Courbe du milieu* : Différences entre les profondeurs de transit observées et simulées dans le cas du scénario d'une atmosphère dominée par H-He. *Courbe du bas* : Différences entre les profondeurs de transit observées et simulées dans le cas du scénario d'une atmosphère proche de la composition de celle de Vénus.

Les résultats obtenus démontrent l'absence d'une atmosphère étendue dominée par de l'hélium et de l'hydrogène, à 3σ , ce qui confirme les prédictions faites par Astudillo-Defru et al., 2020 et les données obtenues. En revanche, nous faisons le constat intéressant que la précision spectro-photométrique du MIRI LRS ne nous permet pas de distinguer une atmosphère dense *Venus-like*, d'une planète sans atmosphère. Nous ne pouvons donc pas discriminer un des deux cas par spectroscopie de transit. Un exemple concret est celui d'observation de la rocheuse tempérée TRAPPIST-1b pour laquelle nous ne pouvons pas discriminer à l'heure actuelle de scénarios atmosphériques à l'aide du MIRI LRS, faute de signal-sur-bruit nécessaire, mais pour laquelle il est possible de déterminer la

température de brillance et donc d'en déduire la présence ou non d'une atmosphère. Ces résultats sont expliqués plus en détail dans le Chap. 4.

3.4.4.2 La cible de l'Early Release Science : WASP-43b

Un des exemples concerne l'Early Release Science (ERS) exoplanetary transit team pour laquelle j'avais produit des simulations des cibles NGTS-10b et WASP-43b dans l'objectif de nous préparer à l'arrivée des premières données, simulations qui sont présentées dans le Chap. 2. Après adaptation des simulations aux données de calibration en vol, j'ai donc pu simuler à nouveau l'observation de la cible WASP-43b, retenue comme cible officielle. Cette observation avec MIRI LRS était prévue plus tard que celles des autres instruments (décembre 2022), ce qui m'a laissé le temps de fournir les nouvelles simulations à la communauté, ce qui a permis d'adapter les méthodes de réduction et d'analyse au mieux avant l'arrivée des données. En plus des simulations, j'ai eu l'opportunité de mener la réduction des données à partir de fin décembre 2022. La Fig. 3.22 présente la comparaison des courbes de lumière à $7.75 \mu\text{m}$ simulations (courbe en bleue) et des données (courbe en jaune) de la cible WASP-43b. Les courbes rouges et bleu foncé montrent le modèle issu du meilleur ajustement obtenu respectivement pour les données et les simulations. Les résultats démontrent l'excellent accord des données et les simulations, bien que les simulations aient, cette fois-ci, été produites en amont de la réception des données. De plus, la différence de courbe de phase entre données et simulations permet de raffiner le modèle d'atmosphère de WASP-43b et donc notre compréhension de la dynamique atmosphérique de cette exoplanète. Le modèle mentionné ici a été fourni par P. Cubillos et utilisé en entrée des simulations.

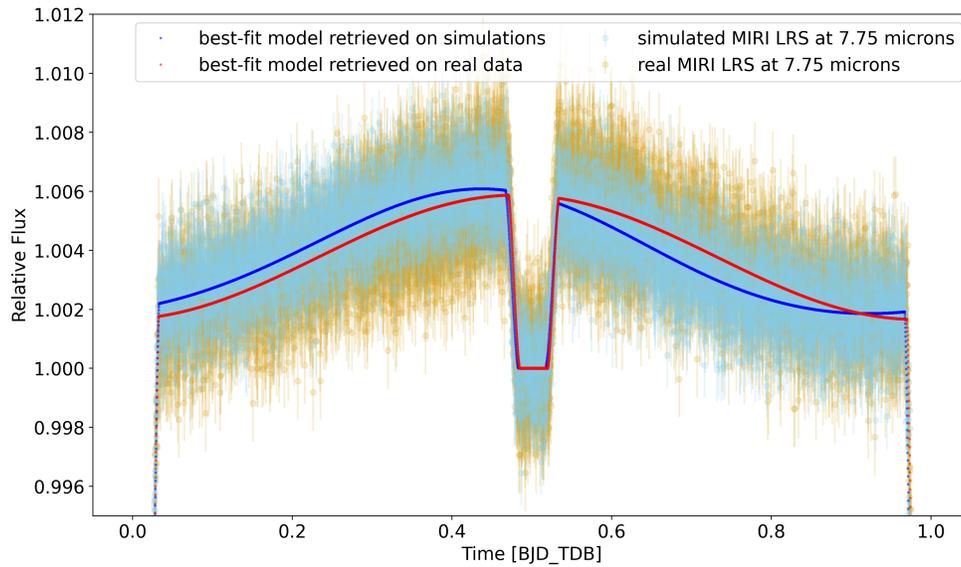


FIGURE 3.22 – Courbes de lumière à $7.75 \mu\text{m}$ des simulations et des données de la cible ERS, WASP-43b. La courbe en bleu claire montre les points des simulations et celle en jaune montre les points de données. Les courbes rouges et bleu foncé montrent le modèle issu du meilleur ajustement, obtenu respectivement pour les données et les simulations. Figure présentée ici avec l'aimable autorisation d'E. Ducrot.

3.4.4.3 Mesurer la température côté jour de la super-Terre AU Mic b

AU Mic b est une super-Terre de rayon $R_p = 0.374 R_{\text{Jup}}$ et de masse comprise entre 11 et 20 M_{\oplus} , orbitant autour de son étoile en ~ 8 jours (Plavchan et al., 2020). L'étoile AU Mic est une étoile M1 très active en pré-séquence principale, dont l'âge est de 24 ± 3 Myr (Bell, Mamajek et al., 2015). Elle est connue pour son disque de débris (Stauffer et al., 2010) ainsi que pour la présence de structures à grandes échelles observables à sa surface (Boccaletti, Sezestre et al., 2018). AU Mic b étant une planète transitante, elle peut nous donner un aperçu très précieux de la formation planétaire et de l'évolution de jeunes systèmes comme le sien. C'est dans cet objectif que j'ai contribué à la conception de la proposition d'observation de planète AU Mic b pour laquelle nous cherchons à mesurer la température côté jour, lorsque la planète est en configuration d'éclipse. L'étoile étant proche de nous (9.9 ± 0.1 pc, Gaia Collaboration, 2018), de magnitude $J = 5.4$ mag et très variable temporellement, l'observation de l'éclipse d'AU Mic b représente un défi à la fois scientifique et instrumental. J'ai donc simulé l'observation spectroscopique de l'éclipse d'AU Mic b avec le MIRI LRS. Cette simulation est un peu particulière, j'ai dû rejeter les flux à courtes longueurs d'onde du jeu de données car ils étaient susceptibles de saturer le détecteur, et ne garder que ceux aux longueurs d'onde supérieures à $8 \mu\text{m}$. Les résultats obtenus démontrent la possibilité de détecter l'éclipse d'AU Mic b en regroupant les longueurs d'onde avec un pas de $1 \mu\text{m}$. Ainsi, nous pourrions obtenir un maximum de 4 points, que nous pourrions combiner en 2 points pour augmenter le signal-sur-bruit. La Fig. 3.23 présente la courbe de lumière obtenue entre 9 et $10 \mu\text{m}$ de l'éclipse d'AU Mic b. Précisons que le temps de mi-éclipse est défini à partir du temps de transit annoncé dans l'article de Plavchan et al., 2020 et de la prise en compte des éphémérides pour simuler une observation pouvant avoir lieu fin 2023.

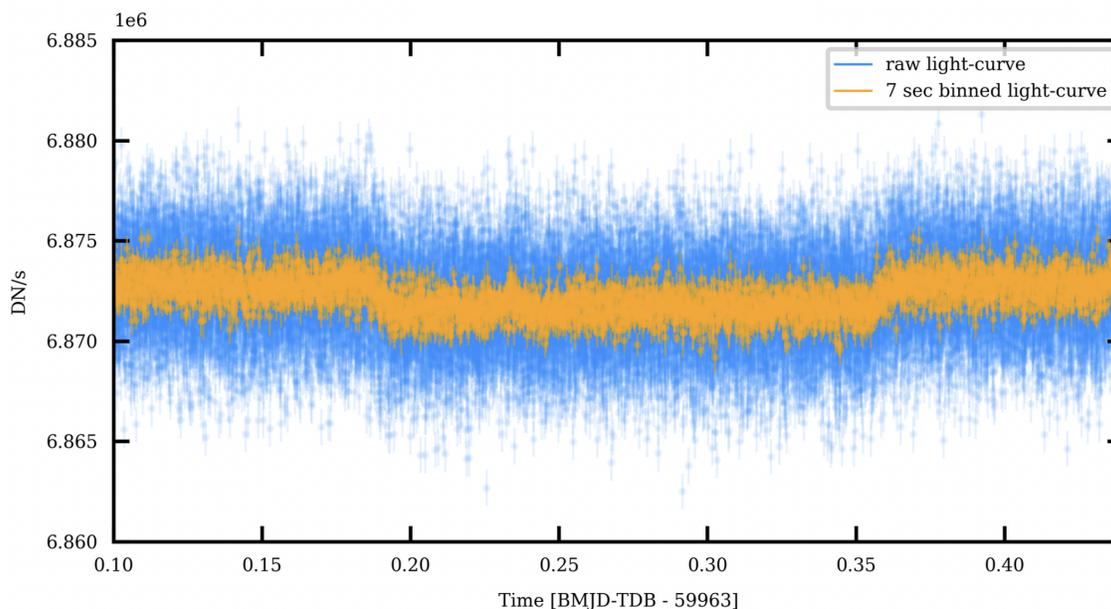


FIGURE 3.23 – Déteçtabilité de l'éclipse de la super-Terre AU Mic b entre 9 et $10 \mu\text{m}$ avec le MIRI LRS, en rejetant les longueurs d'onde inférieures à $8 \mu\text{m}$ et en combinant les longueurs d'onde supérieures avec un pas de $1 \mu\text{m}$. La courbe en bleue présente la totalité des points de la courbe de lumière et la courbe en orange montre les moyennes temporelles des points sur 7 secondes.

3.5 Étude des effets de persistance

Dans cette partie, je me concentre à nouveau sur les données pour étudier les effets de persistance affectant la stabilité des observations en séries temporelles. En effet, le temps d'observation du JWST est précieux et le facteur de pression est élevé. De fait, le JWST couvre de nombreux domaines d'observations dont les exoplanètes représentent $\sim 25\%$. L'observation d'exoplanètes avec le JWST relève donc d'un travail d'optimisation, qui s'avère d'autant plus important que les planètes étudiées en configuration de transit sont des observations coûteuses en temps. La problématique devient d'autant plus critique que les résultats d'ajustement de courbes de lumières montrent que les paramètres des effets de persistance peuvent être corrélés à ceux de la courbe de phase. Il n'existe à l'heure actuelle aucun modèle physique permettant de prédire le comportement du détecteur de MIRIm en début d'observation et de paramétrer la cause physique de ces effets de persistance. La seule solution que nous avons est d'étudier le comportement *a posteriori* des courbes de lumière et d'inférer des contraintes sur les effets de persistance. L'objectif de ce travail est d'établir une liste de **recommandations** de bonnes pratiques à appliquer en amont des observations MIRIm pour minimiser les effets de persistance sur les courbes de lumière.

A ce titre, nous ne pouvons pas nous permettre d'exclure la première heure d'observation de courbes de lumière impactée par les effets de persistance, seule solution disponible, mis à part l'ajustement par des modèles empiriques. Nous devons trouver un moyen de comprendre leur impact et de le corriger.

3.5.1 Établir l'allure des effets de persistance

Je me suis donc attelée à la tâche d'investiguer les effets de persistance et de caractériser leur impact sur les données du MIRI LRS. Dans un premier temps, je me suis intéressée à l'observation de la cible L168-9b dont la courbe de lumière blanche présente un effet de persistance global sous la forme d'une exponentielle décroissante, présentée sur la Fig. 3.11. Nous menons une première analyse qualitative sur les courbes de lumière de chacun des pixels du subarray. Pour ce faire, nous travaillons avec les fichiers en sortie de l'étape 2 de la réduction des données afin d'observer également le comportement des pixels du fond, avant leur soustraction. Contrairement au premier constat sur la courbe de lumière blanche, nous remarquons plusieurs types de comportements selon le niveau de flux et la localisation du pixel sur le détecteur. La Fig. 3.24 présente les courbes de lumières d'une sélection de pixels situés dans la trace et dans le fond.

Les pixels situés dans la trace présentent différents types d'effets. Les pixels les plus brillants (pixels 4, 5, 6 de la colonne du milieu), correspondant à un flux allant jusqu'à 32000 DN s^{-1} , présentent une décroissance exponentielle du flux en début d'observation. Les pixels de la colonne de droite, ayant un flux 38% moins élevé que le flux des pixels de la colonne du milieu ne présentent aucun changement de flux au début de l'observation. Au contraire, ceux situés à gauche de la colonne la plus brillante, ayant un flux moyen 57% moins élevé que le flux des pixels de la colonne du milieu, présentent une augmentation du flux au cours du temps. Par ailleurs, les pixels du fond ne semblent pas présenter d'effet de persistance visible. Les divergences entre ces comportements montrent que les effets de persistance dépendent fortement du flux dans le pixel pour lesquels nous mettons donc en évidence plusieurs régimes. Tout d'abord, les flux élevés, supérieurs à 30000 DN s^{-1} , sont affectés par l'idle recovery. Les flux inférieurs à 15000 DN s^{-1} semblent être affectés par le response drift uniquement, tout comme les flux ayant un ordre de grandeur de quelques dizaines de DN s^{-1} présentant des effets de très faibles amplitudes. L'allure de la courbe de lumière blanche étant majoritairement impactée par les pixels les plus brillants, l'idle recovery est donc l'effet dominant observé lors de l'analyse des données de la cible L168-9b.

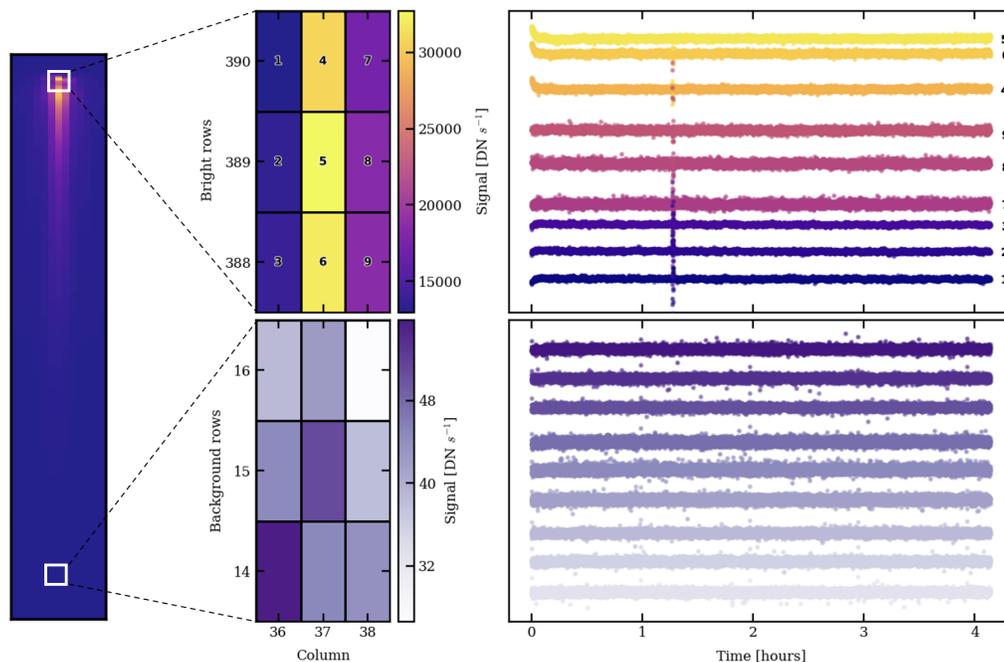


FIGURE 3.24 – Exemple d’effets de persistance observée dans les données de la cible L168-9b. *À gauche* : Image spectrale de la première intégration de L168-9b. *Au milieu* : Deux zones de 3 x 3 pixels sélectionnés pour observer les effets de persistance, une zone dans la trace spectrale et une autre dans le fond. *À droite* : Courbes de lumière correspondant aux 9 pixels de chacune des zones. Les pixels situés dans la trace présentent un effet de persistance visible pendant ~ 30 minutes. Les pixels situés dans le fond ne présentent aucun effet visible.

3.5.2 La télémétrie du JWST, un accès à l’historique de l’instrument

Comme présenté dans la Sect. 2.3 du Chap. 2, les effets de persistance ne sont que la conséquence de certains modes de fonctionnement du détecteur avant l’observation. Nous pouvons donc essayer de comprendre les comportements observés en analysant **l’histoire du détecteur**. Notre second objectif est donc de chercher le lien entre les effets de persistance observés et les utilisations précédentes du détecteur, ce qui pourrait nous permettre de déterminer les configurations optimales qui minimiseraient les effets pour différentes magnitudes de cibles. Nous nous intéressons en particulier à deux indicateurs : la position de la roue à filtres et le temps passé à appliquer des opérations d’idle avant l’observation. Le filtre en place avant l’observation, y compris celui de la *target acquisition* peut avoir un impact sur la bande passante de longueur d’onde observée et la quantité de flux reçu sur le détecteur et donc l’effet de response drift résultante. De manière similaire, le temps d’idle est directement lié à l’amplitude et la durée de dissipation de l’effet d’idle. Nous venons donc télécharger les indicateurs de télémétrie correspondant à ces deux critères. La Fig. 3.25 montre le comportement de la roue à filtre et du détecteur pendant les 48 heures précédant l’observation de L168-9b. Les résultats montrent que l’observation est précédée d’une série d’idle d’une durée de 9h13 et que la position de la roue à filtre passe par les filtres à 5,6 puis à 10 μm avant de rejoindre la position P_{750L} qui correspond à la position de l’assemblage du double prisme.

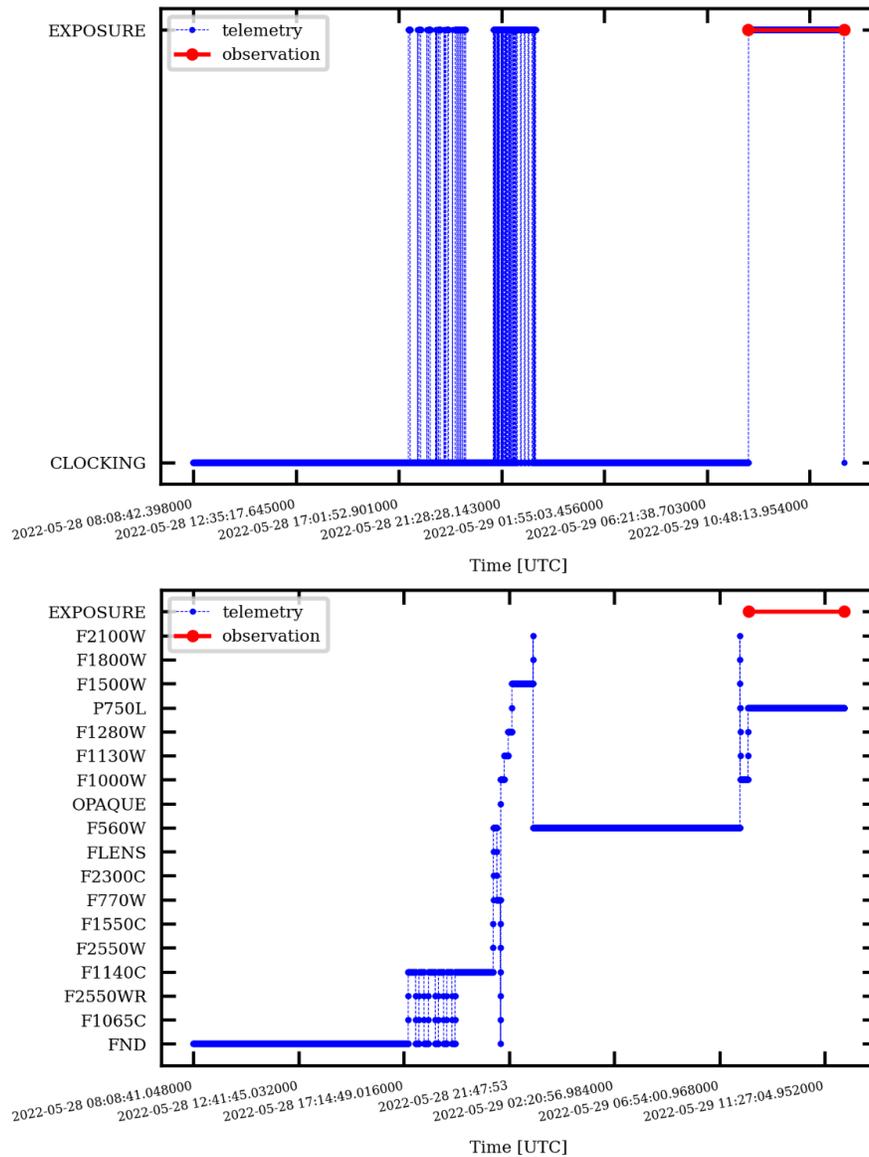


FIGURE 3.25 – Télémétrie de MIRI pendant les 48 heures précédant l’observation de L168-9b. *En haut* : État du détecteur, soit dans le mode *exposure* (ou observation), soit dans le mode *clocking* (ou en procédure d’idles répétés). L’observation est précédée d’une série d’idles d’une durée de 9h13. *En bas* : Position de la roue à filtre qui passe par les filtres à 5,6 puis à 10 μm avant de rejoindre sa position *P750L* qui correspond à la position de l’assemblage du double prisme, dans les 9 heures précédents l’observation.

3.5.3 Étendre l’analyse à l’ensemble des cibles MIRI LRS : l’outil MIRIPersistence

Nous ne pouvons établir des corrélations entre les indicateurs de télémétrie et les effets de persistance observés que si nous étendons notre étude à l’ensemble des cibles observées par le MIRI LRS. Nous en comptons 10 à l’heure

où j'écris ma thèse : HAT-P-12b (PID : 1281), WASP-43b (PID : 1366), WASP-107b (PID : 1280), WASP-80b (PID : 1177), WASP-39b (PID : 2783), GJ1214b (PID : 1803) et les observations de calibration issues du commissioning, en particulier celles des sources BD+60 1753 (PID : 1033 et 1536), HD167060 (PID : 1538), HD180609 (PID : 1536) et HD37962 (PID : 1538). Pour ce faire, j'ai créé le package *Open Source MIRIPersistence* codé intégralement en Python3, disponible sous Gitlab⁶ qui permet à l'utilisateur de caractériser les effets de persistance d'une observation en série temporelle donnée et de télécharger automatiquement la télémétrie associée sur une durée donnée. Ce package est aujourd'hui en cours d'optimisation et sera remis au STScI dans le cadre de l'étude globale des performances du MIRI LRS (Kendrew, Bouwman et al., 2023, in prep.).

À titre d'exemple, l'étude des données de l'observation de WASP-43b a révélé un cas d'effets de persistance très intéressant. Les effets observés sont non seulement dépendants du flux mais également de la position des pixels sur le détecteur. Les données montrent des passages abrupts entre idle recovery et response drift selon les zones du détecteur. La Fig. 3.26 présente l'image spectrale correspondant à la première intégration sur laquelle nous pouvons voir des zones claires et sombres très marquées spatialement. Cette image est superposée à la zone en haut à gauche du plan focal de MIRI, correspondant à la localisation du MIRI LRS slitless. La superposition nous démontre le lien direct entre les effets observés et les zones des coronographes correspondant aux filtres à 15,5 μm et à 23 μm . Les photons arrivant sur les pixels la zone entre les coronographes ne passant pas par les filtres des coronographes, leur énergie est différente et l'effet observé en est modifié. De plus, nous constatons la rémanence de l'effet dit de *glow stick* qui affecte toute arête du détecteur y compris les bords des masques coronographiques (Boccaletti, Cossou et al., 2022). Cet effet n'était pas prévu par calibration au sol et résulte de réflexions parasites de l'émission thermique du bouclier du JWST. L'observation de l'ensemble de ces effets sur les données de WASP-43b a conduit à l'écriture d'un premier article sur l'observation de cette cible, visant à avertir la communauté sur l'existence d'un lien direct entre la position des pixels et l'allure des courbes de lumière associées (Bell, Kreidberg et al., 2023).

3.6 Conclusion et perspectives

Dans ce chapitre, j'ai présenté de manière exhaustive l'ensemble de la méthodologie de la réduction et de l'analyse des données, allant du traitement des données brutes en sortie du détecteur du MIRI LRS à l'obtention d'un spectre atmosphérique entre 5 et 12 μm . J'ai également fourni l'analyse du premier transit exoplanétaire observé avec le MIRI LRS dans le cadre du commissioning du JWST en mai 2022. Les résultats obtenus après analyse de ce premier transit en infrarouge moyen sont excellents et démontrent la très grande qualité de la spectroscopie basse résolution avec MIRI et celle du télescope dans son ensemble. De fait, grâce aux performances de stabilité de pointage du JWST qui sont meilleures que prédites, de l'ordre de grandeur de ~ 1 mas, les observations en séries temporelles ne présentent que très peu de bruit corrélé temporellement. À ce titre, les méthodes de réduction et d'analyse sont extrêmement performantes et permettent l'obtention de résultats scientifiques dès les premiers mois d'exploitation du JWST. Par ailleurs, la nécessité d'investiguer les systématiques de deuxième ordre, comme l'excès de bruit-sur-signal observé à courtes longueurs d'onde dans les données, a conduit à la création d'une nouvelle version des simulations prenant en compte la calibration en vol de l'instrument. Ces nouvelles simulations nous permettent aujourd'hui de reproduire les données du premier cycle d'observation et de prédire les faisabilités de caractérisations atmosphériques pour les futurs cycles d'observations.

- Dans un premier temps, j'ai présenté la méthode de réduction des données faite à l'aide du package `jwst`, permettant de corriger les effets systématiques du détecteur et de convertir les rampes (en DN) en pentes (en DN s^{-1}). Dans un second temps, j'ai présenté le pipeline d'analyse *Eureka!* (Bell, Ahrer et al., 2022), permettant, entre autres, d'ajuster un modèle de transit d'exoplanète et un modèle de systématiques sur l'ensemble

6. Le package est disponible à l'adresse <https://gitlab.com/Achrene/miripersistence/-/tree/master/>

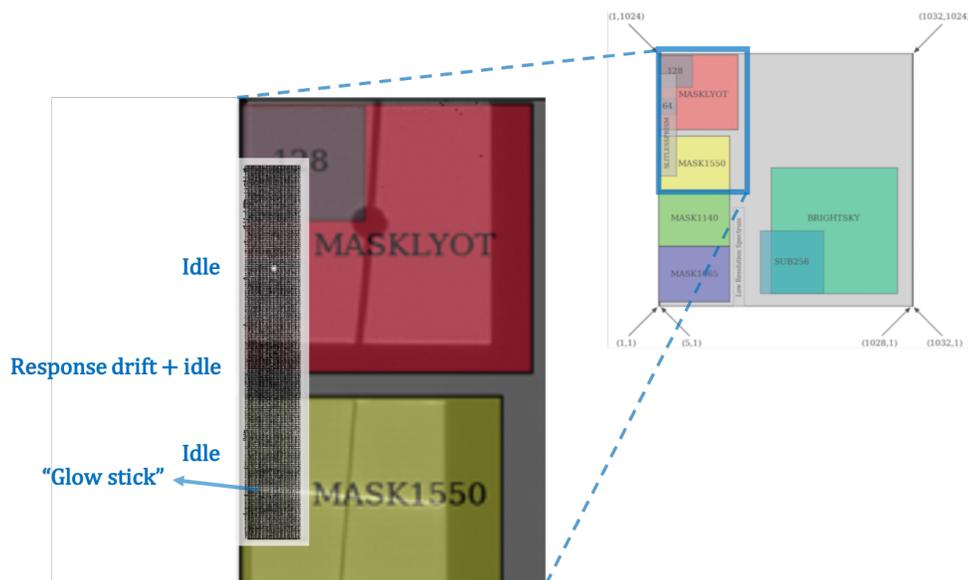


FIGURE 3.26 – Image spectrale correspondant à la première intégration de l’observation de WASP-43b, superposée à la zone du plan focal correspondant au LRS slitless de MIRI. Les effets de persistance observés sont directement liés aux zones des coronographes correspondant aux filtres à $15,5 \mu\text{m}$ et à $23 \mu\text{m}$, et les zones sans présence de masques coronographiques (Bell, Kreidberg et al., 2023). La rémanence due à l’effet de *glow stick* est également visible (Boccaletti, Cossou et al., 2022). Figure présentée ici avec l’aimable autorisation de T. J. Bell.

des courbes de lumière spectroscopiques issues de la réduction afin d’obtenir un spectre atmosphérique entre 5 et $12 \mu\text{m}$.

- J’ai présenté la réduction et l’analyse de la première courbe de lumière d’exoplanète observée avec le MIRI LRS, que j’ai menée suivant la méthodologie expliquée en début de chapitre. La cible choisie pour l’étude de ce premier transit est la super-Terre L168-9b, observée dans le cadre du commissioning (PID : 1033) pour déterminer les performances du LRS. Mon analyse a confirmé l’absence d’une atmosphère étendue et un excès de bruit-sur-signal à courtes longueurs d’onde (Bouwman et al., 2022). J’ai ensuite fourni, en collaboration avec le STScI (Dyrek, Ducrot et al., 2023), l’ensemble des étapes d’investigation de cet excès ainsi qu’une explication qui démontre que cet excès est lié à la méthode de réduction des données du pipeline `jwst` ;
- Dans ce contexte, j’ai adapté mes simulations aux données de calibration en vol, ce qui m’a permis non seulement de reproduire les observations de la cible L168-9b mais également d’analyser les performances du MIRI LRS (Dyrek, Ducrot et al., 2023). J’ai ensuite appliqué mes simulations sur la cible de l’Early Release Science (ERS) WASP-43b, que j’ai comparées *a posteriori* aux données afin de démontrer la robustesse des modèles atmosphériques. Mon travail a pu également être utilisé pour préparer les propositions d’observations du cycle 2 d’observation du JWST ;
- Enfin, j’ai mené l’analyse des effets de persistance observés sur la cible L168-9b pour laquelle j’ai démontré l’existence de plusieurs régimes d’effets dépendant du niveau de flux, de la localisation du pixel et de l’historique du détecteur.

Après ce travail approfondi d’analyse de performances en vol à la fois instrumentale et des méthodes de réduction des données du MIRI LRS, je me concentre sur l’étude scientifique des observations d’atmosphères d’exoplanètes.

En particulier, je m'intéresse à deux cibles très différentes : la super-Neptune WASP-107b, dont l'atmosphère étendue est idéale pour la caractérisation moléculaire, et la rocheuse tempérée TRAPPIST-1b, pour laquelle aucun des télescopes précédent le JWST, faute d'une sensibilité suffisante, n'a pu sonder la présence ou non d'une atmosphère.

Transiting exoplanets with JWST MIRI: from simulations to observations

A. Dyrek¹, E. Ducrot^{1*}, P-O. Lagage¹, P. Tremblin², S. Kendrew³, J. Bouwman⁴, and R. Bouffet¹

¹ Université Paris Cité, Université Paris-Saclay, CEA, CNRS, AIM, F-91191, Gif-sur-Yvette, France

² Université Paris-Saclay, UVSQ, CNRS, CEA, Maison de la Simulation, 91191, Gif-sur-Yvette, France

³ European Space Agency, Space Telescope Science Institute, 3700 San Martin Dr., Baltimore, MD 21218, USA

⁴ Max Planck Institute for Astronomy (MPIA), Königstuhl 17, D-69117 Heidelberg, Germany

June 8, 2023

ABSTRACT

Context. The James Webb Space Telescope (JWST) has now started its exploration of exoplanetary worlds. In particular, the Mid-InfraRed Instrument (MIRI) with its Low-Resolution Spectrometer (LRS) carries out transit, eclipse and phase-curve spectroscopy of exoplanetary atmospheres with an unprecedented precision in an almost uncharted wavelength range.

Aims. The precision and significance in the detection of molecules in exoplanetary atmospheres relies on a robust understanding of the instrument itself and on accurate data reduction methods. This paper aims to provide a strong understanding of instrumental systematics that affect transiting exoplanetary observations through the use of simulations.

Methods. We carry out realistic simulations of transiting exoplanet observations with the MIRI LRS instrument that include the exoplanetary system model, the telescope optical path, the MIRI detector performances as well as instrumental systematics and drifts that could alter the atmospheric features we are meant to detect in the data. Once our pipeline is introduced, we show its performance on the transit of L168-9b, a Super-Earth sized exoplanet observed during the commissioning of the MIRI instrument.

Results. This paper provides a better understanding of the data itself and of the best practices in terms of reduction and analysis, through comparisons between simulations and real data. We show that simulations validate the current data analyses methods. They also bring out instrumental effects that impact the accuracy of our current spectral extraction techniques. These simulations are proven to be essential in the preparation of JWST observation programs and help us to assess the detectability of various atmospheric and surface scenarios.

Key words. Space vehicles: instruments – Methods: data analysis – Techniques: spectroscopic – Planets and satellites: atmospheres – Infrared: planetary systems – Planets and satellites: terrestrial planets

1. Introduction

The long-awaited James Webb Space Telescope (JWST) was launched on the 25th of December 2021. Equipped with its four instruments NIRISS, NIRCам, NIRSpec and MIRI it has now started to provide its first observations in the infrared. Each instrument has different modes for photometry or spectroscopy and covers various region of the spectra, from 0.6 to 28 μm . In particular, the instrument that covers the longer wavelengths is the Mid-Infrared Instrument (MIRI).

The demands for observations with MIRI are plural and a significant part is dedicated to exoplanet observations either through direct or indirect observations. As a matter of fact, if we consider all the programs proposed for Early Release Science (ERS), Guaranteed Time Observation (GTO) and General Observations (GO), 67 distinct transiting exoplanets are being observed with the JWST. 15 of these 67 planets have or will be observed with the MIRI instrument including 9 with the Low Resolution Spectrometer (LRS) (Kendrew et al. 2015). These proposals with MIRI LRS are mainly focused on small planets, as it is the most suited instrument to observe the thermal emission of temperate rocky or sub-Neptune planets. The scientific impact of these observations is very high as no atmosphere has ever been probed around rocky temperate exoplanets. In that

context, the knowledge of the instrumental effects of MIRI LRS and its expected performance is key.

Although the quality of the first LRS data for transiting exoplanets is exquisite (Bouwman et al. 2022a), some instrumental effects remain poorly understood. In that regard, being able to create realistic simulated data that account for the specificity of the MIRI LRS data brings remarkable prospects in understanding these effects, in strengthening our data reduction methods, and in providing accurate spectra to characterise the physical and chemical composition of the atmospheres. More than that, simulations are able to depict the accuracy of complex retrieval methods. Indeed, the physical parameters that we expect to retrieve from the analysis of our simulations must be consistent with the ones that were injected. Besides, these simulations are very valuable for the community to confidently prepare upcoming observations, prove their feasibility, and therefore maximise their scientific outcomes.

This paper is structured as follows. In Sect. 2 we describe the simulation tool that we created and the detector modelling approach used in this work. In Sect. 3 we use our tool on the science case of the transiting Super-Earth L168-9b, an exoplanet observed as part of the MIRI LRS commissioning. Then, we compare our simulations with real data and show that we retrieve the same parameter values that we injected. In Sect. 4, we discuss how simulations can be used to identify unexpected behaviours

* Paris Region Fellow, Marie Skłodowska-Curie Action

in real data and provides a set of best practices to adopt for the reduction and analysis. Sect. 5 focuses on persistence effects that have a major impact on the stability and therefore the accuracy of transiting exoplanet observations. Finally, Sect. 6 summarises our results and provides further development axes.

2. Simulations

To create time series of MIRI LRS spectra we follow a four-stages process. First, we create the star-planet emission time series of 1D spectra with the `exoNoodle` package (Martin-Lagarde et al. 2020). Then, we use `MIRISim` (Klaassen et al. 2020) to convert the astrophysical signal into detector spectral images by considering both the telescope optical path and the MIRI instrument transmission coefficients. At this stage, we also simulate the detector behaviour and we add effects at the pixel scale, only over one non-destructive integration. However, transiting exoplanet simulations require another specific stage. Indeed, the search for very faint flux variations requires to consider faint detector persistence effects that may have an impact on atmospheric characterisation. In that respect, to include such features into simulations, we have created the `MIRISim-TSO` tool that adds low frequency detector persistence effects to time series observations (TSO). Once our simulations are complete, we proceed with the data reduction steps.

2.1. Star-planet system time series: `exoNoodle`

The first step is to simulate an astronomical scene that is the incoming light from a star-planet system as the exoplanet orbits around its host star. Light-curve simulation codes are quite numerous within the community. Mostly based on the Mandel & Agol (2002) and the Giménez (2006) analytic light curve and limb-darkening models, some tools compute exoplanetary transit light curves such as `PyTransit` (Parviainen 2015), the `TRIP` module of `ExoTETHyS` (Morello et al. 2020) and or even `PyPplusS` that computes transiting exoplanet with rings (Rein & Ofir 2019). Other packages are designed to perform fits of exoplanetary transits and radial velocity variations, including `TAP` (Gazak et al. 2012), `EXOFAST` (Eastman et al. 2013) and `JKTEBOP` (Popper & Etzel 1981; Southworth et al. 2004), created to fit light curves of eclipsing binary stars. More recently, new Python frameworks have been released and offer comprehensive models and fitting toolkits such as `exoplanet` (Foreman-Mackey et al. 2021) and `starry` (Luger et al. 2019). Both `batman` (Kreidberg 2015) and `PyLightcurve` (Tsias et al. 2016) provide exoplanetary transit and occultation light curves while `SPIDERMAN` (Louden & Kreidberg 2018) produces phase-curves in addition to occultations. Light-curve observations for atmospheric characterisation are highly sensitive to the limb darkening effect and in that matter all codes bring a peculiar attention to this. We mention here specific limb darkening computation codes that can be added to the long list given above: `ExoTIC-LD` (Laginja & Wakeford 2020), `exoCTK` (Bourque et al. 2021), `ExoTETHyS.SAIL` (Morello et al. 2020) and `LimbDark.jl` (Agol et al. 2020).

Each one of these simulation codes brings a different perspective to light curve modelling: either computing a transit, an occultation or a phase-curve based on the star-planet emission and atmospheric transmission. However, most of these codes simulate light curves in relative flux rather than absolute flux. In keeping with these models, Martin-Lagarde et al. (2020) investigated the feasibility of simulating time series of spectra and

developed the `exoNoodle`¹ tool. `exoNoodle` is a Python tool that generates time series of spectra in absolute flux as the exoplanet orbits around the star. The implemented model is based on the Mandel & Agol (2002) prescription. Simulating spectra over the orbital phase allows us to prepare any MIRI LRS time series observations in absolute flux.

To create such simulations, `exoNoodle` requires several inputs:

1. The star emission spectrum
2. Both the planet day side and night side emission spectrum.
3. The atmosphere transmission spectrum (i.e in a transit geometry) in units of $(R_p/R_\star)^2$.
4. The limb-darkening coefficients either as a quadratic or a 4-coefficient law. The limb-darkening coefficients may optionally be wavelength dependent.
5. The orbital parameters: the orbital period P , the semi-major axis a , the distance to the star d , the inclination of the orbit i and the star and planet masses and radii, respectively M_p , R_p and M_\star , R_\star .
6. Phase values corresponding to the start and end of observation (between -1 and 1).
7. The sampling time that corresponds to the interval between two spectra computations in the time series. In the simulations presented in this paper, we decided to use the MIRI detector integration time. We calculated the integration time knowing the detector saturation level, the brightness of the target and the LRS slitless frame time, taken from Ressler et al. (2015). We will discuss more extensively the MIRI LRS readout pattern and terminology in Sect. 2.2.
8. A constant wavelength bin size $\Delta\lambda$ based on the MIRI LRS wavelength dispersion model from 5 to 12 μm and the spectral resolution model $R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda}$ (Kendrew et al. 2015).

As an output `exoNoodle` creates a time series of spectra in μJy . The number of spectra we compute is based on the duration of the time series observation and the sampling we choose.

2.2. Telescope and instrument simulations: `MIRISim`

Once we have modelled time series of spectra with `exoNoodle`, we create spectral images of the observed scene with an instrument simulator. There are several tools that simulate detector images or spectra with a MIRI-like signal-to-noise ratio such as the `PandExo` tool from Batalha et al. (2017) and the `Exposure Time Calculator for JWST` (Pontoppidan et al. 2016). To create realistic simulations of time series observations we use the stable version 2.4.2 of the MIRI official simulator (Klaassen et al. 2020, `MIRISim`). `MIRISim` simulates almost all MIRI observation modes (except coronagraphy) including imaging, LRS and Medium-Resolution Spectrometer (MRS). The code itself is based on the use of calibration data products to mimic the telescope and the instrument behaviour. They include the telescope optics diffraction, the filter transmission coefficients and the detector dynamics. As input, this package takes the astronomical scene we produce with `exoNoodle` in μJy . The input spectral flux is then processed through the whole telescope path, including the instrument characteristics: the LRS subarray, the dispersion and the detector photon-electron conversion efficiency.

¹The code is available at <https://gitlab.com/mmartin-lagarde/exoNoodle-exoplanets>

2.2.1. The instrument model

Each spectrum is transformed into a spectral image as provided by the MIRI instrument's LRS in slitless mode. The light coming from the point source is diffracted by the telescope optics and dispersed over the LRS slitless subarray (called SLITLESSPRISM) located at the top left of the MIRI focal plane (Ressler et al. 2015). To simulate the dispersion of the diffraction pattern, a set of monochromatic normalised PSFs, $F_{\text{PSF}_{\text{norm}}}(\lambda)$, obtained from optical modelling and ground-based testing are positioned on the LRS slitless subarray following a wavelength-to-pixel dispersion law and a polynomial law of optical distortion. Then, the light coming from the point source is convolved with these normalised PSFs in order to get the PSFs in absolute flux. To summarise, the light coming from the source $F_{\oplus \text{ph}}(\lambda)$ and the absolute PSFs $F_{\text{PSF}}(\lambda)$ are related through the $\mathcal{P}(\lambda)$ transfer function:

$$F_{\text{PSF}}(\lambda) = \mathcal{P}(\lambda) * F_{\oplus \text{ph}}(\lambda), \quad (1)$$

where $\mathcal{P}(\lambda)$ is given by

$$\mathcal{P}(\lambda) = A T_{\text{T}}(\lambda) F_{\text{PSF}_{\text{norm}}}(\lambda), \quad (2)$$

$F_{\oplus \text{ph}}(\lambda)$ is the surface flux received by the telescope (in photon $\text{s}^{-1} \text{m}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$) subtended by the telescope entrance pupil area A (in m^2) and T_{T} is the dimensionless telescope transmission function.

As the diffraction pattern is sampled into a given numbers of pixels, each pixel receives a sub-amount of the overall absolute PSFs flux. The absolute PSFs flux can be described as the sum of the flux that arrives on each pixel

$$F_{\text{PSF}}(\lambda) = \sum_{i=1}^n F_{\text{pixel},i}(\lambda), \quad (3)$$

where n is the number of pixels that form the diffraction pattern.

The pixel input flux $F_{\text{pixel},n}(\lambda)$ is then converted into an electronic signal $S_{\text{pixel},n}(\lambda)$ and both quantities are related through the second transfer function $\mathcal{E}_n(\lambda)$

$$S_{\text{pixel},n}(\lambda) = \mathcal{E}_n(\lambda) \times F_{\text{pixel},n}(\lambda), \quad (4)$$

where $\mathcal{E}_n(\lambda)$ is given by

$$\mathcal{E}_n(\lambda) = \frac{\Delta\lambda t_{\text{frame}} \times tr_{\text{d}} \text{QE}(\lambda)}{g}, \quad (5)$$

$S_{\text{pixel},n}(\lambda)$ is obtained by integrating photons during a given interval of time t_{frame} (in s), within a range of wavelengths $\Delta\lambda$ (in μm). The $\text{QE}(\lambda) tr_{\text{d}}(\lambda)$ product is called the photon-electron conversion efficiency (PCE) (in $\text{e}^- \text{photon}^{-1}$) where $\text{QE}(\lambda)$ is the detector quantum efficiency (in $\text{e}^- \text{photon}^{-1}$) and $tr_{\text{d}}(\lambda)$ is the dimensionless transmission factor of the LRS double prism assembly (Kendrew et al. 2015). g is the electronic gain that converts electrons into digital numbers (DN), in $\text{e}^- \text{DN}^{-1}$. As a matter of fact, the in-flight measurement of $\mathcal{E}_n(\lambda)$ during commissioning is called the absolute flux calibration factor and is expressed in $(\text{MJy sr}^{-1})(\text{DN s}^{-1})^{-1}$ (Gordon et al. 2022).

According to Eq. 5, photons falling into a pixel are converted into electrons and then readout by the detector proximity electronics to be converted into DN. A readout pattern is a complete scheme of integrating light while doing multiple readings of a detector subarray. In the case of the MIRI detector, this scheme is called the FASTR1 non-destructive readout: the detector is readout non-destructively at regular intervals while integrating light,

until reaching a signal level close to saturation. After integrating light non-destructively, two resets are performed. This description is displayed on Fig. 1. The regular time interval between two readouts is called the frame time which is 0.159s for the LRS slitless subarray (Kendrew et al. 2015). This whole readout pattern composed of frames and two resets is called an integration or a ramp. The integration time and therefore the total number of frames within an integration is chosen based on two parameters: the brightness of the observed target in $\text{e}^- \text{s}^{-1}$ and the detector pixels saturation level in e^- . The whole observation is composed of several integrations and is called an exposure.

Although resets are performed to empty the pixel potential wells, there is a remaining amount of electrons that is responsible for an offset at the beginning of each ramp. Originally, only one reset was performed within the readout pattern (formerly called the FAST mode). Then, to minimise detector systematics linked to the reset step, a second reset was added in the readout pattern. As a consequence, the offset value was lowered from 10 000 DN to 3000 DN (Argyriou 2021). As MIRISim was coded based on the former FAST mode only, we made the required changes in the MIRISim code to reproduce the FASTR1 mode. The offset value was changed down to 3000 DN and timings were extended to include an extra reset of 0.159 s in the readout pattern.

2.2.2. The instrument settings

Simulations are made with the following MIRISim settings. As the observation mode is the LRS slitless mode, the focal plane subarray is set to SLITLESSPRISM. The filter parameter is set to P750L, which corresponds to the double prism assembly. Telescope parameters are fixed to a beginning-of-life configuration which is the telescope post-launch condition as determined during commissioning. Simulations include the following instrument settings:

1. A map of bad pixels (either hot or dead pixels) to be flagged as DO-NOT-USE in the simulations.
2. A dark current map in $\text{DN s}^{-1} \text{pixel}^{-1}$. Dark current is a random generation of electrons through heat in the depletion layer, when no photons are entering the detector. Decreasing the detector temperature is a way to limit the dark current (Glasse et al. 2015).
3. the flat-field map that is the relative response of pixels illuminated with a uniform source (Glasse et al. 2015).
4. the gain value in $\text{e}^- \text{DN}^{-1}$.
5. Non-linearities affecting the ramp (Ressler et al. 2015; Argyriou 2021).

Some effects that are newly witnessed in the data are not added to the simulations as no model has been released yet either from ground-based or in-flight testing. This is the case for the reset switch charge decay (RSCD) (Ressler et al. 2023; Morrison et al. 2023), caused by resetting the detector, that is not added in our simulations. No background and no noise are included at this stage of simulations. Plus, the readout noise in e^- caused by fluctuations in the readout amplifiers (McMurtry et al. 2005) is not added to the simulations as exoplanet observations are dominated by photon noise (Ressler et al. 2015).

2.2.3. The Calibration data products

MIRISim is based on the use of Calibration Data Products (CDPs) that were initially created from ground-based testing campaigns. In-flight calibration of the instrument made during

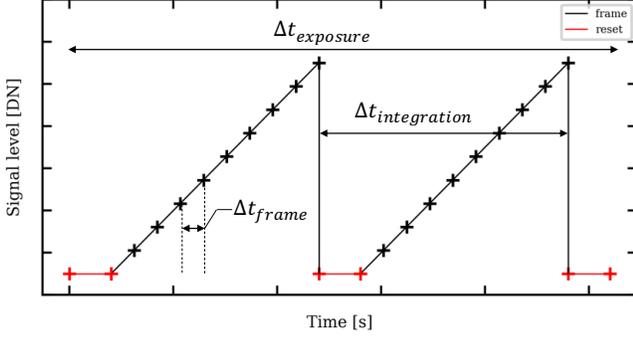


Fig. 1. Non-destructive FASTR1 readout pattern for the MIRI Low Resolution Spectrometer. Two consecutive integrations are displayed here. Each integration is composed of two resets and a series of frames. The number of frames is determined with the magnitude of the source and the detector pixels’ saturation level. An exposure is a set of several integrations. Adapted from [Ressler et al. \(2015\)](#).

commissioning provided a new set of files. These files are meant to be used by the STScI `rwst` reduction pipeline². To create up-to-date simulations, CDPs are adapted to be compatible with `MIRISim`. They are taken from the `rwst` STScI pipeline Calibration Reference Data System³ (CRDS). CDPs of MIRI LRS taken from commissioning include non-linearity coefficients, dark map, readnoise map, bad pixel mask, flat-field map, absolute flux calibration coefficients, spectral dispersion coefficients, gain value and pixel area value. Only the monochromatic PSF file comes from former optical modelling and ground-based calibration, as no in-flight calibration file is available. Commissioning revealed that the electronic gain value that converts electrons into DN is lower than expected. Simulations therefore include a gain of $3.1 \text{ e}^- \text{ DN}^{-1}$, instead of $5.5 \text{ e}^- \text{ DN}^{-1}$. This electronic gain value remains under investigation.

2.3. Detector persistence effects: `MIRISim-TSO`

In this section, we discuss the impact of detector persistence effects on the flux level over the whole exposure and how we include them in our simulations. Detector effects that are previously added in our simulations such as the dark current or the readout noise are additive and only depend on the pixel location on the detector. Non-linearities also affect the signal level but only over one integration. In the end, `MIRISim` applies these effects on each integration independently. However, detectors feature low frequency drifts that evolve over several integrations and could affect the whole exposure ([Teams 2021](#)). These drifts account for 1 to 2 % of the absolute flux, and have the same order of magnitude, or could even be greater than the atmospheric feature amplitude that we are meant to detect in our observations. As a matter of fact, these temporal drifts may have different origins. It could be either a deviation of the proximity electronics temperature stability, or a telescope pointing deviation, known as jitter. Jitter is known to have a low impact on the MIRI detector outputs as commissioning confirmed a pointing stability better than expected of $\approx 1 \text{ mas}$ ([Rigby et al. 2022](#)). As the pointing stability is excellent and the PSF is well sampled from 5 to 12

²The `rwst` pipeline documentation is available at https://jwst-pipeline.readthedocs.io/en/latest/getting_started/install.html

³The CRDS files are available at <https://jwst-crds.stsci.edu/>

μm and above, no intra-pixel noise is measured. This intra-pixel noise was known to be one of the most problematic issues for Spitzer data reduction ([Ingalls et al. 2012](#); [Morello et al. 2016](#)). In the peculiar case of MIRI, we believe that detector persistence effects may also affect the flux stability. Indeed, some tests performed on the MIRI detector test model in 2018 by the Jet Propulsion Laboratory and presented in [Martin-Lagarde \(2020\)](#), show the presence of different kind of persistence effects over an exposure. These data consist of photometric time series obtained by illuminating the detector with a set of blackbodies at different temperatures. The use of different blackbodies provided a set of light curves at different flux levels expressed in DN s^{-1} . The independent fit of these light curves reveals that persistence effects are flux-dependent. Using these test data, we identified and modelled these persistence effects, including them in our simulations. As a matter of fact, ulterior analysis of the commissioning data revealed the presence of these effects. Sect. 5 broadly discusses their nature and the quantification of their impact on time series observations.

2.3.1. The `MIRISim-TSO` tool

Persistence effects are induced by previous uses of the detector, therefore they depend on its history. These previous operations tend to modify the detector behaviour at the beginning of an exposure. The direct consequence of such modifications is that the output flux level is altered and no longer corresponds to its expected value. The JPL tests of 2018 revealed the presence of three persistence effects in the data: the response drift, the anneal recovery and the idle recovery ([Martin-Lagarde 2020](#)). Each one of these effects is described more extensively in Appendix A. As a consequence, the `MIRISim-TSO` tool was created to add these effects to the simulations.

All three persistence effects are described using an exponential model and are implemented in that form in `MIRISim-TSO`. For all effects, the time variable t varies between t_0 set to 0, the beginning of an observation, and $t_0 + n_{\text{int}}\Delta t_{\text{int}}$, $n_{\text{int}} \in \mathbb{N}$, where n_{int} is the number of integrations and Δt_{int} is the integration time. First, the response drift effect was tested for fluxes within the $[0 \text{ DN/s}; 5000 \text{ DN/s}]$ range. It can be expressed as follows:

$$S_{\text{RD}}(t) = S_0 + a_1(S_0) \exp\left(-\frac{t}{\alpha_1(S_0)}\right) + a_2(S_0) \exp\left(-\frac{t}{\alpha_2(S_0)}\right), \quad (6)$$

where S_0 is the expected flux level in DN s^{-1} , $a_1(S_0)$ and $a_2(S_0)$ are the amplitudes of the two exponentials in DN s^{-1} and $\alpha_1(S_0)$ and $\alpha_2(S_0)$ are the time constants in seconds.

Anneal recovery has a similar aspect to the idle recovery one. As soon as the annealing process is stopped and the detector is cooled down again, anneal recovery starts, that could be prior to the beginning of an observation. Time variable is therefore expressed as follows: $t+t_A$ where t_A is a negative value that refers to the starting time of the anneal recovery. Anneal recovery is expressed as follows:

$$S_A(t) = S_0 + b_1 \exp\left(-\frac{t+t_A}{\beta_1}\right) + b_2 \exp\left(-\frac{t+t_A}{\beta_2}\right), \quad (7)$$

S_0 is the expected flux level in DN s^{-1} , b_1 and b_2 are the amplitudes of the two exponentials in DN s^{-1} and β_1 and β_2 are the time constants in seconds.

The idle recovery effect is also expressed with an exponential. Its amplitude depends on the time spent resetting before the observation. Idle recovery is expressed as follows:

$$S_1(t) = S_0 + c(S_0, \Delta t_1) \exp\left(-\frac{t}{\gamma(S_0)}\right), \quad (8)$$

where S_0 is the expected flux level in DN s⁻¹, $c(S_0, \Delta t_1)$ is the amplitude of the exponential in DN s⁻¹ and $\gamma(S_0)$ is the time constant in seconds.

The input format of MIRISim-TSO is compatible with MIRISim outputs that is a series of integrations of 3D arrays in DN. The first two dimensions are the LRS slitless subarray's dimensions (72 x 416 pixels) and the third one is the number of frames within one integration. To add persistence effects to the input data, Eq. 6, 7 and 8 are integrated between t and $t + \Delta t_{\text{frame}}$ where Δt_{frame} is the frame time. Effects are therefore added frame per frame in DN. This operation is applied to each pixel independently. This way, the effects' flux-dependency is taken into account at the pixel scale.

2.3.2. Adding the background into simulations

To include the background into simulations, we use the background observation acquired on the 26th of May 2022 on the calibration target BD+60-1753. It consists of 4 LRS slitless integrations of 125 frames each. The flux level in DN s⁻¹ is then computed by fitting the slope over the integration time. To add the background in our simulations, we create a unique background image from all four integrations by taking the median value of the four images. Bad pixels are masked using the Data Quality flags (DQ)⁴. These flags are meant to report any pixel issue that could be related to an unreliable behaviour of the detector. For example, flags report bad pixels, hot pixels or saturated ones. The slope values in DN s⁻¹ is integrated over the frame time to match the ramp structure of the data, at a pixel scale. For each simulated target, the background image is scaled to match the observational background.

2.3.3. Adding the photon noise to the simulations

Photon noise is applied to the simulations following two steps. First, the signal S at the frame level in DN is converted into electrons using the electronic gain. Then, samples are drawn from a Poisson distribution and applied to the difference between pairs of frames. As a matter of fact, the number N of photons (or electrons in our case) received by a detector over a given time interval is described by the standard Poisson distribution

$$\Pr(N = k) = \frac{e^{-Sg} (Sg)^k}{k!}, \quad (9)$$

where the Sg product is the expected number of electrons, g being the electronic gain. The variance $\text{Var}[N]$ of such a distribution is:

$$\text{Var}[N] = Sg, \quad (10)$$

Photon noise in DN is therefore the standard deviation of the Poisson distribution and varies as the square root of the signal

$$\sigma = \frac{\sqrt{S_{\text{diff}} g}}{g}, \quad (11)$$

⁴Data Quality flags are explained more extensively at https://jwst-pipeline.readthedocs.io/en/latest/jwst/dq_init/index.html

where S_{diff} is the signal value in DN of the difference between pairs of frames at the pixel scale.

The output files of MIRISim-TSO are then combined into files of 2 Go that correspond to the official segmented raw data products of JWST provided by STScI⁵. These segmented files are 4D datasets which have the same structure as the raw data products. The first two dimensions are the LRS slitless subarray's dimensions (72 x 416 pixels), the third one is the number of integrations and the last one the number of frames within one integration. This way the simulation output files are fully compatible with the STScI jwst reduction pipeline.

3. The case of L168-9b

In this section we perform simulations of the transiting exoplanet L168-9b. JWST observed L168-9 as part of the MIRI LRS slitless commissioning, under program ID 1033. The aim of this program was to test the time-series observation mode including the spectro-photometric stability. L168-9 is a bright M1V star located 25 pc away orbited by a warm Super-Earth initially announced by Astudillo-Defru et al. (2020). L168-9b has a radius of $R_p = 1.39 R_{\oplus}$ and a mass of $M_p = 4.6 M_{\oplus}$. This target was selected to meet the objectives of this calibration program because of its low probability of showing strong atmospheric features. Indeed, the planet is expected to have an equilibrium temperature between 668 K and 965 K, and has been found to be free from any primordial hydrogen-helium envelope (Astudillo-Defru et al. 2020). The outcomes of this program are presented in details in Bouwman et al. (2022a). L168-9b was observed on the 29th of May 2022 for ≈ 4.2 hours. The full observation is composed of 9371 integrations and represents ≈ 6 Gb of data.

We chose to reproduce the observation of L168-9b with the MIRI LRS slitless mode lays to fulfil two main purposes. First, our objective is to improve our simulations and make them as realistic as possible in order to robustly prepare for future observation cycles. Then, our goal is to understand the origin of systematics residuals witnessed in the data after reduction with the jwst pipeline (Bouwman et al. 2022a). As a matter of fact, reduction pipelines are still under optimisation for time-series observations and play a part in the spectro-photometric precision that we obtain. This is why reliable synthetic data can be used to improve reduction methods. In this section, we present our simulations of L168-9b and their comparison to real data.

3.1. Building the simulations

To be as realistic as possible we use exactly the same setup for our simulations as in the real observations. We simulate the observation of a transit of L168-9b following the approach detailed in Sect. 2.

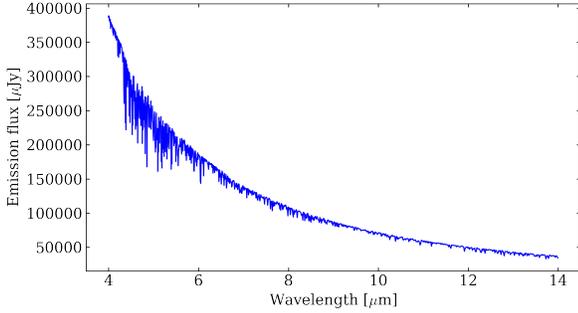
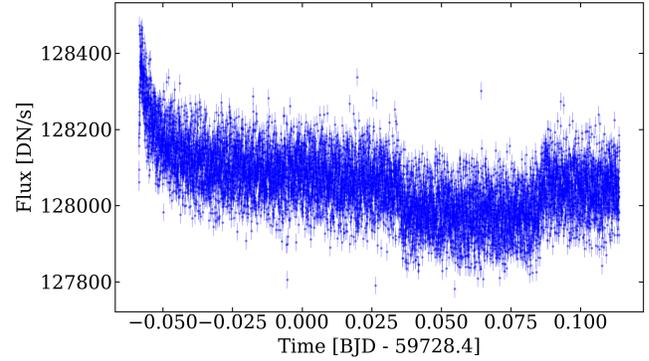
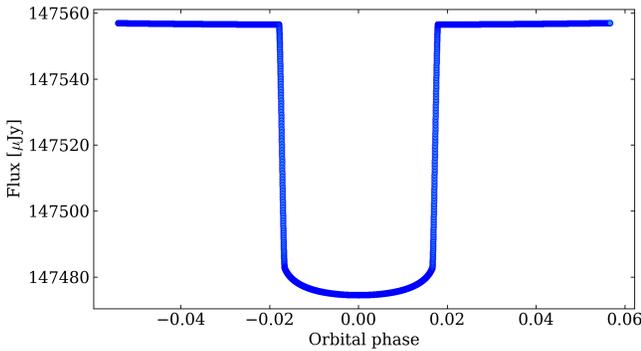
As inputs for exoNoodle we use a synthetic PHOENIX stellar spectrum (Husser et al. 2013) interpolated into the appropriate temperature and metallicity. Fig. 2 shows the stellar emission spectrum of L168-9. The planet parameters are derived from the literature (Astudillo-Defru et al. 2020; Patel & Espinoza 2022) and Table 1 summarises all inputs parameters used for exoNoodle.

For the sake of consistency with real data, the same integration time is used to sample the simulated time series with

⁵The structure is the same as the uncalibrated *_uncal.fits* data files available on MAST <https://mast.stsci.edu/portal/Mashup/Clients/Mast/Portal.html>.

Table 1. Input parameters for exoNoodle to simulate a transit observation of L168-9b with the MIRI LRS slitless mode.

Parameter	Value	Source
T_{eff} (K)	3800 ± 70	Astudillo-Defru et al. (2020)
$\log g$ (dex)	4.04 ± 0.49	Astudillo-Defru et al. (2020)
metallicity [Fe/H] (dex)	0.04 ± 0.17	Astudillo-Defru et al. (2020)
R_p/R_{star}	0.0233 ± 0.0007	Patel & Espinoza (2022)
M_p (M_{Jup})	0.0145 ± 0.0018	Astudillo-Defru et al. (2020)
P (days)	1.40150 ± 0.00018	Astudillo-Defru et al. (2020)
i (deg)	85.5 ± 0.8	Astudillo-Defru et al. (2020)
a (AU)	0.02091 ± 0.00024	Astudillo-Defru et al. (2020)


Fig. 2. L168-9 emission spectrum modelled with PHOENIX (Husser et al. 2013), interpolated into the appropriate temperature and metallicity.

Fig. 4. L168-9b white light-curve extracted from the MIRI LRS data.

Fig. 3. L168-9b primary transit light curve in absolute flux modelled with exoNoodle.

exoNoodle. Fig. 3 shows the associated white light curve in absolute flux computed with exoNoodle. This white light curve as well as the whole spectral time series is then provided to MIRISim. MIRISim is ran using the LRS slitless mode, with 9 frames and 2 resets per integration. The total number of integrations matching the data sampling on purpose, we obtain 9371 integrations. The MIRISim setup is detailed in Table 2. Using MIRISim-TSO, we add the background, the photon-noise and persistence effects at the pixel and frame scale.

Indeed, as mentioned in Sect. 2.3, we found evidence of the presence of persistence effects in the data that show an amplitude up to 1 to 2 % of the absolute flux. Fig 4 shows the overall aspect of the white light-curve of time series observation of L168-9b. We notice a strong presence of an exponential decay in flux at the beginning of the observation. Based on the telemetry, several resets were performed prior to the observation which means that the persistence effect visible in the white data is likely to be the idle recovery. To add the idle recovery to the simulations

that comply with the real data, we fit the real white light-curve to derive the idle time parameter depicted in Eq. 8. Then we apply this idle formula to all pixels at different signal level. We discuss more extensively the persistence effects witnessed in the real data in Sect. 5. As mentioned in Sect. 2.3, no jitter is added to the simulations, as JWST stability is confirmed to be better than expected (Rigby et al. 2022). This hypothesis is indeed verified in the real data where no changes in position caused by pointing stability are reported.

The results of our simulations are displayed in Fig. 5. The left panel shows a spectral image produced by simulation and the right one shows its comparison to a real uncalibrated image. Even though the two are really similar, the real image displays some features that do not appear in the simulation. In the real data, we notice a hot pixels column on the left that is fully saturated (a small part of it is encircled in orange). The upper part of the trace shows two distinct zones. The top part, indicated with the blue arrow shows a spectral contamination (Bouwman et al. 2022a; Bouchet et al. 2022) that remains under investigation. In fact, the corresponding pixels are below the MIRI LRS dispersion range, between 4 and 5 μm . We choose not to replicate these features as they are systematically removed during reduction steps.

3.2. Data reduction and analysis

Once the spectra are simulated we proceed to their reduction with the exact same methods as the ones used on real data. In order to compare the results of our simulations, we also re-process the real data to verify our approach. For the sake of consistency, we use the same tools and compare the outcomes at different

⁶The Astronomer’s proposal tool can be found at <https://www.stsci.edu/scientific-community/software/astronomers-proposal-tool-apt>.

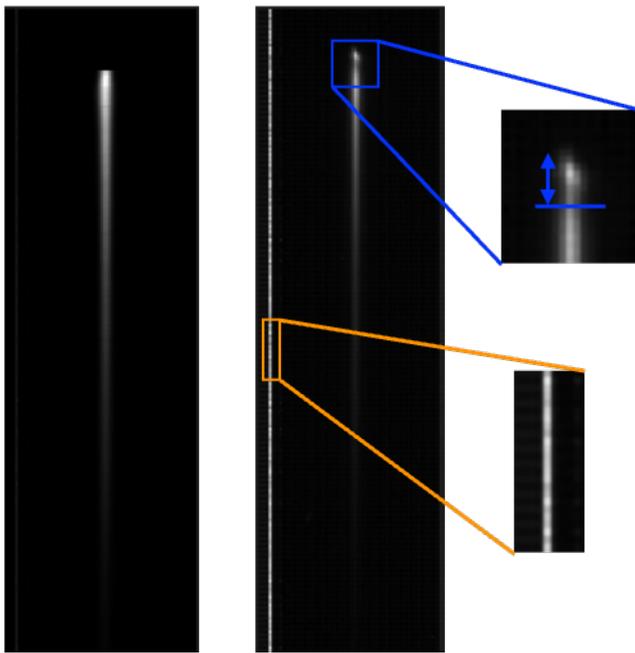


Fig. 5. MIRI LRS slitless subarray 416 x 72 pixels, cut at pixel 155 at the bottom of the spectra. L168-9b raw simulations and comparison to uncalibrated real data. The left panel shows the simulated spectral image and the right one is taken from the uncalibrated data. Both images are the last (9th) frame of the first integration. Both vertical and horizontal directions are pixels, the vertical axis is the spectral dispersion direction and is related to wavelengths. Thus, pixels with high fluxes are located in top part of the vertical axis, at short wavelengths. Then, flux level decreases as wavelength increases along the vertical axis. Real data display a hot pixels column on the left that is fully saturated (a small part of it is encircled in orange). The upper part of the trace shows two distinct zones. The top part, indicated with the blue arrow shows a spectral contamination (Bouwman et al. 2022a; Bouchet et al. 2022) that remains under investigation.

Table 2. L168-9b observations parameters used in MIRISim. All parameters come from the observational setup of L168-9b validated by the Astronomer’s proposal tool⁶.

Parameter	Value
Observation mode	MIRI LRS slitless
Frame time (s)	0.159
Number of frames per integration	9
Integration time (s)	1.431
Number of integrations	9371
Number of exposures	1
Number of resets	2

stages of the data reduction and analysis. The two main tools are the `jwst` pipeline (Bushouse et al. 2023), version 1.8.5 under CRDS context

for the data reduction steps and the `Eureka!` Python package (Bell et al. 2022) for the analysis. This process is divided into five stages. The two first stages focus respectively on detector-level corrections and calibration. The second stage also includes background subtraction. Spectral extraction is performed on Stage 3 and spectroscopic light curves are extracted on Stage 4. Last stage is the light curves fitting with an astrophysical model and

systematics detrending. Stages 1 and 2 are ran with a slightly modified version from the default setup of the 1.8.5 version of the `jwst` pipeline whereas stages 3 to 5 follow the steps defined in the `Eureka!` pipeline. In this section we describe our approach for both the data reduction (Stages 1 and 2) and the data analysis (Stages 3 to 5).

3.2.1. Stages 1 and 2

Stages 1 and 2 from the `jwst` pipeline are meant to remove and correct from detector’s systematics. Stage 1 operates at the pixel and frame level to extract the mean count rate out of the non-destructive readouts of the detector. To do so, Stage 1 is initialised using the DQ flags. Then, flagged pixels are used to generate a mask which is applied to the whole subarray and ensures that no unreliable pixels would be included into further calculations. Next step is to apply the dark current correction by subtracting a 4D map of dark current, interpolated towards the dimensions of the dataset. Some effects do not benefit from corrections yet: the first frame effect, the last frame effect, the reset switch charge decay (RSCD) for at least the four first frames (Argyriou 2021) and saturated pixels at the end of the ramp. Whenever a pixel is impacted by these effects, it is just flagged a DO-NOT-USE pixel. In that respect, first and last frames are systematically rejected instead of being corrected. Once correction steps and flagging steps are applied, cosmic rays are detected and replaced using the two-points difference method (Anderson & Gordon 2011).

The main function of Stage 1 is to fit the ramp in order to derive a mean count rate, which is the slope of the ramp. A least-square minimisation method is applied to fit the ramp. The default ramp-fitting algorithm uses an optimal weighting of the ramp that gives an additional weight to the first and last frames of the ramp based on the number of frames (Robberto 2013).

As non-linearities may distort the ramp, a non-linearity correction is applied before fitting the ramp. The output of Stage 1 is a 3D time series of spectral images. The resulting quantity is the mean count rate which is a flux of DN_s that is a number of DN_s per second crossing the section of a pixel (DN s⁻¹ pixel⁻¹). This physical quantity can be directly related to a flux of photons after applying absolute flux calibration, which is the main goal of Stage 2.

Indeed, Stage 2 uses as input a set of mean count rates in DN s⁻¹ at the pixel level and converts them into MJy sr⁻¹, applying a calibration factor determined during commissioning. In the peculiar case of transiting exoplanets, absolute flux calibration is skipped. As planetary flux variations are always relative to the stellar flux, light curves are normalised, therefore no absolute calibration is required. Before calibration, each spectral image is divided by the flat-field reference image. Last step of Stage 2 is to subtract the background from each spectral image. Indeed, as there is no slit to isolate the point source, slitless spectroscopy integrates also background flux over time that can be removed. Background is subtracted following the methodology explained in Bouwman et al. (2022a). Two columns on the left and on the right sides of the trace are selected and replicated to create a background image. This image is then subtracted from the spectral image. As each spectral image goes along with its own background, this process has the benefit of removing any time variable instrumental features from the data (except for persistence effects). A spatial filter of outlier detection is then applied to remove any hot pixels that would have been left in the subarray. Finally, the spectrum is cut at pixel 395, around 4.5 μm to avoid scatter light at short wavelengths.

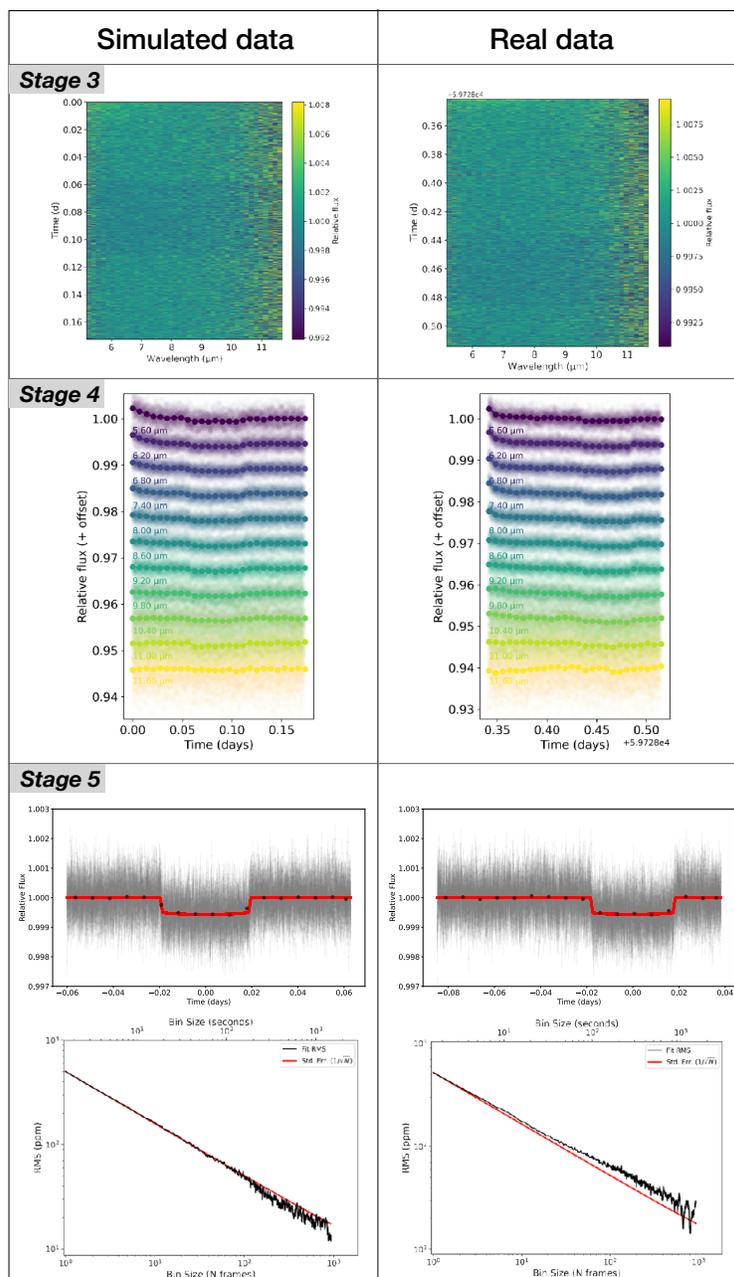


Fig. 6. Comparison between real and simulated data at difference stages of the reduction and analysis using Eureka! (Bell et al. 2022). *Top-panel:* waterfall plots from Stage 3. *Centre-panel:* transit light curve as a function of wavelength, offset for clarity and produced with the `chromatic`⁷ visualisation tool. *Bottom-panel:* white light curve and best-fit model resulting for the optimisation performed in Stage 5 with the Allan plot showing the evolution of the RMS of the light curve as a function of the binning size. The photon noise limit is almost reached in both cases, attesting to the Gaussianity of the residuals.

The `jwst` pipeline relies on the use of reference and calibration files that are managed by the Calibration Reference Data System (CRDS). To reduce our simulations and data, we use the latest in-flight version of these files. Only the electronic gain file is modified from $5.5 \text{ e}^- \text{ DN}^{-1}$ to $3.1 \text{ e}^- \text{ DN}^{-1}$ to comply with the value inferred during commissioning. The gain reference file has not been updated yet in the CRDS system and as such, the

error arrays returned by the calibration pipeline currently underestimate the true noise.

3.2.2. Stage 3 to 5

For stages 3 to 5, we used the Eureka! pipeline (Bell et al. 2022). The entry of Stage 3 are `.calints` files which are spectral

⁷The `chromatic` package is available at <https://github.com/zkbt/chromatic>.

images produced by the `jwst` pipeline Stage 2. In Stage 3 the 1D spectrum is extracted from each image. Similarly to [Bouman et al. \(2022a\)](#), we choose a rectangular selection from pixel 155 to pixel 385 (height) and from pixel 13 to pixel 64 (width). We use a half-width source aperture of 4 pixels. The resulting waterfall plots from Stage 3 for both real and simulated data are shown on the top-panel of Fig. 6. The top panel shows the temporal evolution over the whole exposure represented on the y axis in days of each 1D spectrum displayed along the x axis in μm . The colour bar refers to the level of normalised flux as a function of wavelength and time. The horizontal strip between 0.06 and 0.11 days on the left panel and the one between 0.44 and 0.48 days on the right panel is darker than the rest of the time series. As a matter of fact, this deficit of flux corresponds to the planetary transit. The transit is well centred for simulations but slightly offset in time for real data as some small uncertainties in the ephemeris of the planet existed when the commissioning observation were planned (in May 2022). Besides, the flux scatter is higher at larger wavelengths in general, and at the beginning of the exposure at short wavelengths in particular. This is discussed in more details in Sect. 4.

The main purpose of Stage 4 is to produce a set of light curves stemmed from spectral binning that increases the spectral signal-to-noise ratio. To do so, we divide our dataset into 25 spectral bins, from 5 to 12.2 μm with a step of 0.145 μm . A sub-sample of 11 normalised light curves obtained from Stage 4 among the 25 extracted ones is shown on the centre-panel of Fig. 6 for both simulated and real data. Each light curve corresponds to the time series of a given spectral bin. The second step of Stage 4 is to apply a temporal sigma clipping of each light curve to remove the outliers. Indeed, the `jwst` pipeline currently does not correctly handle dark current subtraction for segmented files; we therefore reject the first integrations of each segment from the dataset. Also, in the particular case of the L168-9b observations, some data points are affected by the HGA move. Fig. 7 shows the outliers witnessed in the real data. Each black vertical line marks the first integrations of a segmented file and the red line shows the High Gain Antenna (HGA) move during the exposure. We clip the light curves using a box-car filter of 100 integrations wide with a maximum of 10 iterations and a rejection threshold of 5σ to reject these outliers.

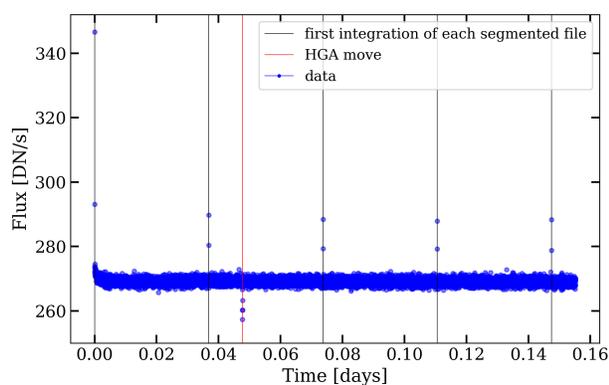


Fig. 7. White light-curve over the whole MIRI LRS slitless subarray of L168-9b real observation. Outliers are detected among the whole time series data points. The black lines mark the position of each segmented file first integrations and the red line shows the timing of the High Gain Antenna (HGA) move during the exposure.

Stage 5 fits both astrophysical and systematics models to infer the transit parameters' distributions. Our fit is made using the No-U-Turn Sampler (NUTS) described in [Hoffman & Gelman \(2011\)](#) which is an extension of an Hamiltonian Monte Carlo algorithm that automatically tunes the step size and the number of steps per sample to avoid a random walk behaviour. The transit is modelled using the `starry` package ([Luger et al. 2019](#)). Instrumental systematics are modelled with a double exponential ramp and a linear polynomial model in time. The jump parameters are the following:

1. The radius ratio R_p/R_\star , assuming a Normal prior $\mathcal{N}(0.02, 0.01^2)$ (the most recent value reported by [Patel & Espinoza \(2022\)](#) being $R_p/R_\star = 0.0233$).
2. The re-parameterised quadratic limb-darkening coefficients (u_1, u_2) defined by [Kipping & Sandford \(2016\)](#), with uniform priors allowing them to vary between 0 and 1, $\mathcal{U}(0, 1)$.
3. The parameters of the two decaying exponential used to correct from the persistence effect r_0, r_1, r_3, r_4 . The model of systematics is expressed as:

$$S_{\text{persistence}} = c_0 + r_0 e^{(-r_1 t)} + r_3 e^{(-r_4 t)}, \quad (12)$$

where t is the time. We use loose Normal priors derived from a preliminary least square fit on the white light curve for c_0, r_0, r_1, r_3, r_4 . These priors are reported in Table 3.

Table 3. Priors used for the systematics detrending at Stage 5 of Eureka! at a preliminary least square optimization.

Parameter	Prior distribution
c_0 (DN s ⁻¹)	$\mathcal{N}(1, 0.1^2)$
r_0 (DN s ⁻¹)	$\mathcal{N}(-0.01, 0.005^2)$
r_1 (s ⁻¹)	$\mathcal{N}(75, 30^2)$
r_3 (DN s ⁻¹)	$\mathcal{N}(-0.008, 0.0005^2)$
r_4 (s ⁻¹)	$\mathcal{N}(350, 50^2)$

The following parameters are first fitted on the white light curve and then fixed for the analysis per wavelength to avoid variations that would be non-physical.

1. The time of mid-transit t_0 , with a Normal prior of $\mathcal{N}(59728.4603, 0.005^2)$ BMJD_{TDB}.
2. The orbital period P , with a Normal prior based on the value reported by [Astudillo-Defru et al. \(2020\)](#) $\mathcal{N}(1.40150, 0.00018^2)$.
3. The inclination i , with a Normal prior based on the value reported by [Astudillo-Defru et al. \(2020\)](#) $\mathcal{N}(85.5, 0.7^2)$
4. The eccentricity e , with a Normal prior $\mathcal{N}(0., 0.1^2)$ taken arbitrary from the unique known constraint that is $e < 0.21$ ([Astudillo-Defru et al. 2020](#)).

Using the probabilistic programming framework `pymc3` that features a NUTS sampler, we ran 3 chains with a number of iterations to tune set to 2000 and a number of draws set to 2000. On the bottom panel of Fig. 6 we show the resulting best fit of the white light curve from both real and simulated data using NUTS. The RMS of the de-trended white light curve are 501 ppm and 519 ppm for simulated and real data respectively. Finally, Stage 6 produces a transmission spectrum for both simulated and real data. Fig. 8 shows the transmission spectra obtained from the analysis for the simulated and real data and Table 4 shows the comparison between the input parameters and the retrieved ones

for the simulations. We demonstrate that simulations replicate the data with similar scatter and error bars, thus leading up to a mean transit depth of 569 ± 92 ppm for the real data and 531 ± 90 ppm for the simulated one.

Table 4. Retrieved parameters from the white light-curve fit and comparison to the *exoNoodle* input parameters

Parameter	Input value	Retrieved value
R_p/R_{star}	0.0233 ± 0.0007	$0.023400^{+0.00026}_{-0.00025}$
P (days)	1.40150 ± 0.00018	$1.401499^{+0.000122}_{-0.000117}$
i (deg)	85.5 ± 0.8	$85.95^{+0.57}_{-0.55}$
a/R_{star}	$7.493^{+0.610}_{-1.640}$	$7.188^{+0.254}_{-0.253}$
u1	0.0744906	$0.04^{+0.03}_{-0.02}$
u2	0.09056845	$0.49^{+0.34}_{-0.32}$

To confirm our result, we perform parallel analysis with two other sampling methods: *emcee* (Foreman-Mackey et al. 2013) and *dynesty* (Speagle 2020) and we obtain very consistent results, meaning that the transmission spectrum is not dependent on the sampling method.

3.3. Resulting transmission spectra and noise-to-signal ratio

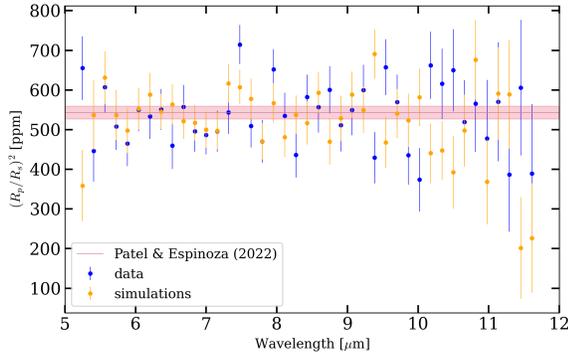


Fig. 8. Transmission spectrum of L168-9b obtained from simulated and real data.

Fig. 9 shows the evolution of the noise-over-signal (*NSR*) estimate of the spectral light-curves for both simulations and real data. The *NSR* is calculated based on the standard deviation of an out-of-transit part of the normalised light curves (between integrations 3500 and 4000). This *NSR* computation method is equivalent to the one used in Bouwman et al. (2022a) that plots the errorbars obtained after the spectral fits, as there is no correlated red noise in the residuals. The Allan plots of the residuals for spectral bins between 5 and 7 μm are showed in Appendix B. In Fig. 9, we observe that the simulation mimics the real data very well except at short wavelengths where real data show an excess of *NSR* up to 30% between 5 and 7 μm . We do not expect such a difference between the two datasets. This same behaviour of the real data noise estimate is seen in Bouwman et al. (2022a). This extra *NSR* at short wavelengths does not have any known physical interpretation, nevertheless it results in larger error bars for the transmission spectrum at shorter wavelengths and may consequently weaken future atmospheric retrievals. In Sect. 4, we investigate this extra *NSR* and provide a correction for it.

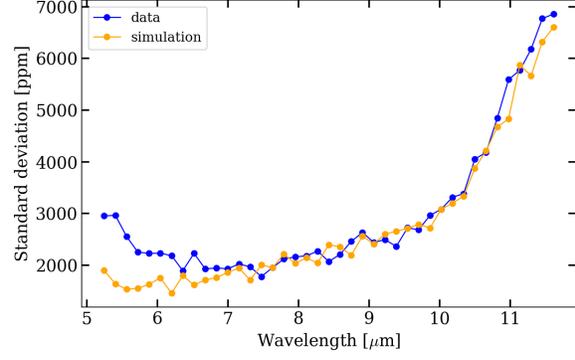


Fig. 9. Noise-over-signal estimates of the spectral light-curves of L168-9b for both simulations and real data. The blue curve shows the data noise-over-signal estimate and the orange one shows the simulations noise-over-signal estimate.

4. On the noise-to-signal ratio

In this Section, we investigate the extra *NSR* based on the differences we note between real data and simulations in order to find a correction for it. As a matter of fact, we first focus on targeting the origin of this extra *NSR* to understand whether it is intrinsically present in the uncalibrated data or it is linked to the data reduction methods.

4.1. An alternative data reduction

To understand whether this excess of *NSR* measured at short wavelengths is an intrinsic feature of the data or not, we use an independent reduction method and compare our results to the ones obtained with the *jwst* pipeline (version 1.8.5, CRDS context 1075). This reduction method is intentionally simpler than the one offered by the pipeline. It is based on the use of the second-last frame value of the ramp only, instead of fitting the whole ramp as performed in Stage 1. The methodology of this alternative reduction and the results are given in Appendix C. The standard deviation computation shows that there is no extra *NSR* at short wavelengths in the L168-9b data after using this alternative data reduction, displayed in Fig. C.3. This confirms that the extra *NSR* is not a feature coming from the data itself, either from the source nor the instrument, but from the data reduction methodology that is applied.

4.2. Investigating the *jwst* pipeline steps

To conduct our analysis, we focus on the Stage 1 of the pipeline and isolate each step to test its impact on the output *NSR*. This way, we include alternately all the steps before fitting the ramp: dark subtraction, corrections of saturation, reset anomaly, first-frame effect, last-frame effect, non-linearities, reset switch charge decay (RSCD), cosmic rays, and finally gain scaling. Among these steps, the last-frame effect, the first frame effect and the RSCD are not corrected but the impacted frames are flagged and excluded from any other step. This work shows that after activating the RSCD step, the L168-9b data *NSR* does not exhibit any increase at short wavelengths anymore. Fig. 10 shows the *NSR* estimate for both the observations and simulations. We observe that there is no more excess of *NSR* between 5 and 7 μm .

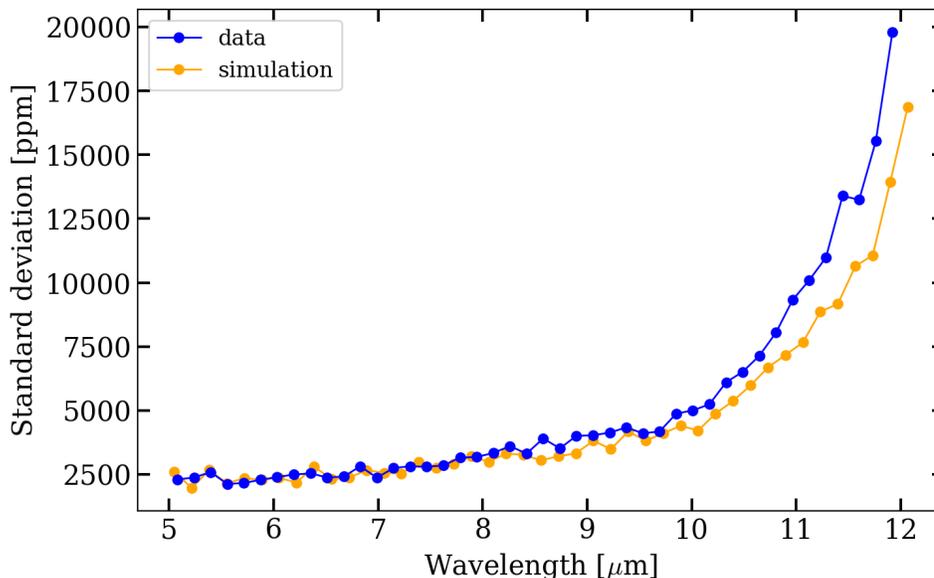


Fig. 10. Noise-over-signal estimates of both the L168-9b observation and simulation after removing the first 4 frames of each integration of the exposure before fitting the ramp using the `jwst` pipeline Stage 1. No extra *NSR* at short wavelengths is witnessed anymore.

To provide more of context, RSCD is caused by resetting the detector (Ressler et al. 2023) and generates non-linearities at the beginning of the ramp that appear starting from the second integration. Morrison et al. (2023) investigated this effect on dark exposures and concluded that the RSCD displays two features. The fast decay appears on the second integration where an extra signal at the beginning of the ramp decays exponentially. The first integration does not exhibit such a decay as the preceding detector idling prevent any signal from accumulating in the detector traps. The second decay is a slope difference between integrations and depends on the number of frames. It appears that shorter integrations display larger differences that become even larger for the LRS subarray. The RSCD effect does not benefit from any correction in the pipeline, but the corresponding RSCD step flags the impacted four first frames. In other word, by activating the RSCD step, we remove the first four frames from the dataset.

The RSCD step was not originally included in the pipeline. The first data reduction applied to the L168-9b data on July 7th 2022 corresponding to pipeline version 1.5.3 and CRDS context 0916 did not mention any RSCD step correction nor frame flagging steps related to the RSCD effect in the header. Prior to this work, reprocessed data with pipeline version 1.8.0 and CRDS context 1017 on November 21st 2022 did include a RSCD step in the header but this step was not activated. This work is based on pipeline version 1.8.5 and CRDS context 1075 where RSCD step does exist as well but still inactive. We activated it and demonstrated that the extra *NSR* is now corrected when flagging the related frames. Our work contributed to the latest version of the pipeline 1.10.2 under CRDS context 1089 where the dark subtraction step and the reset anomaly correction are now applied within the same step, and the RSCD flagging step is automatically active for all targets (Morrison et al. 2023). In comparison to the simulations, the RSCD effect was not applied to the ramp therefore no excess of *NSR* was witnessed at short wavelengths.

This extra *NSR* has not been seen in any other LRS dataset to date including photon-noise dominated targets such as WASP-43, GJ1214 and WASP-107 observations from program ID 1366, 1803 and 1280 (Bell et al. 2023; Kempton et al. 2023), and calibration target BD+60-1753, program ID 1053. The major difference between these targets and L168-9 is the apparent magnitude. L168-9 is much brighter, taking only 9 frames before saturating the detector. In comparison, the other targets display a large number of frames from 40 to more than 100. Our work raises the question of bright targets associated to a low amount of frames requiring a peculiar attention in terms of data reduction.

5. Investigating persistence effects

In this Section, we present a comprehensive investigation of persistence effects found in the L168-9b data based on a quantitative analysis of their amplitude, time constant and flux dependency. As presented in Sect. 2.3, persistence effects are a deficit or a surplus of signal at the beginning of a time-series observation and they are due to previous operations of the detector. In order to quantify the impact of such effects on exoplanet time-series observed with the MIRI LRS slitless mode, we compute the light-curve of each pixel of the slitless subarray. Depending on the location of the pixel in the subarray and therefore the amount of flux it receives, we witness different kind of persistence effects in the data.

Fig. 11 shows the light-curves of a set of pixels taken from the slitless subarray. The top left panel shows a rectangular selection of 9 pixels located in the spectral trace, at the highest flux levels. The top right panel shows the corresponding time-series. Pixel number 5, and therefore the column amid the selection (depicted in yellow) is the brightest one in the subarray, with a flux level up to $32\,000\text{ DN s}^{-1}$. The columns on the right (in light purple) and on the left (in dark purple) receive, in average, respectively 38 % and 57 % less flux than the one in the middle. The difference of flux between the column on the left and on

the right points out an asymmetry of the PSF that is centred on columns 37 and 38. The loss of signal at 1.2 hours of observation that is visible in the light-curves is due to the HGA move during the exposure. The bottom left panel shows a selection of pixels located in the background. All pixels display a really low but yet similar amount of flux between 30 and 50 DN s⁻¹. The corresponding time-series are displayed in the bottom right panel and remarkably no significant persistence effect is visible for these pixels.

As a matter of fact, persistence effects are only visible on the top right panel at the beginning of each time-series, approximately during less than 30 minutes. Each column shows a different behaviour of these persistence effects. Indeed, the light-curves of pixels located in the brightest column display a decay of flux whereas the ones from the left column display an increase of flux over time. The ones from the right column display no change in flux, at the beginning of the observation. The ones from the background do not seem to show any persistence effect at all. The discrepancies between persistence effects show that they are highly flux-dependent. We therefore point out several flux regimes. First, high fluxes above 30 000 DN s⁻¹ are impacted by the idle effect, introduced in Sect. 2.3. Then, as the LRS slitless subarray receives background flux even when not observing a target the response drift has less impact than during a first complete illumination. Therefore, fluxes between 15 000 and 30 000 DN s⁻¹ must be in an equilibrium state between idle and response drift. Fluxes lower than 15 000 DN s⁻¹ seem to be affected by the response drift effect that occurs when illuminating the subarray after a pause of observation. Finally, fluxes that have an order of magnitude of a few tens, generally coming from the observational background, are only affected by a very low amplitude response drift.

The overall aspect of the light-curves after spectral binning between 5 and 12 μm , displayed in Fig. 6 shows mainly a decay rather than an increase of flux, except at the highest wavelengths. Idle effect therefore oversteps the response drift in the trace. As discussed in Sect. 3.1, this justifies the use of the idle effect only in our simulations.

6. Perspectives

6.1. Test of several atmospheric models

In Sect. 3.2 we have demonstrated that we are able to produce realistic MIRI LRS slitless simulations. In this section we simulate MIRI LRS data for two atmospheric scenario for L168-9b:

- Scenario 1: a Hydrogen and Helium-rich atmosphere
- Scenario 2: a thick Venus-like atmosphere with a metallicity X 1000, 50% CO₂ and 15% CO

The atmospheric absorption model is generated using ATMO, a 1D-2D radiative-convective equilibrium model for planetary atmospheres (Tremblin et al. 2015, 2017). It solves the radiative transfer equation for a given set of opacities and computes the P-T profile that satisfies hydrostatic equilibrium and conservation of energy. It can compute equilibrium and non-equilibrium chemical abundances with the kinetic network of Venot et al. (2012). Here, for the two atmospheric scenarios we assume an equilibrium chemistry.

Similarly to section 3.1 we use exoNoodle and MIRISim TSO to create two sets of MIRI LRS slitless simulations for each atmospheric scenarios, which we then analyse using Eureka! as described in section 3.2.2. Fig. 12 shows the injected and retrieved transmission spectra for the two scenarios (top panel). We

confirm that we retrieve the expected molecular features in the case of an H/He-rich atmosphere. We compare the spectra from the two simulated scenarios with the one obtained from the real JWST observation (see section 3.3) and significantly confirm that L168-9 b does not have an H/He-dominated atmosphere, as expected from previous studies (Astudillo-Defru et al. 2020; Bouwman et al. 2022b). Yet we observe that the current spectrophotometric precision is insufficient to disentangle between an airless planet and an high mean-molecular thick atmosphere scenario for L168-9b.

6.2. Future work on bright targets data reduction

The impact of the RSCD effect, depicted in Sect. 4 on the extra *NSR* of L168-9b data is still under investigation and whether this effect could impact future observations is a prominent question. An extra *NSR* has a direct consequence on the transmission features errorbars and baseline that we obtain after data reduction. One possible way of investigating this, is to work on up-the-ramp non-linearities that could impact the ramp fitting step. Indeed, the ramp is fitted by a least square minimisation algorithm (Robberto 2013) that provides the slope value and its variance estimate. As a matter of fact, a high variance could lead to higher errorbars and therefore an extra *NSR*. Before fitting the ramps, a non-linearity correction step is applied. This step includes cosmic ray correction and up-the-ramp non-linearities correction within a 5% error margin specification (Rieke 2007; Rieke et al. 2015). The ramp-fitting of bright targets may become more critical as the fit is performed on a poor amount of frames. Plus, if the signal level in a pixel becomes superior to 10 000 DN, the last frames are likely to be impacted by the brighter fatter effect that introduces non-linearities as well, altering not only on the signal level but also the size of the PSF (Argyriou et al. 2023). As presented by Morrison et al. (2023), the RSCD effect also includes non-linearities at the beginning of the ramp. A correction of the RSCD effect may therefore be needed to remove the resulting non-linearity behaviour and to keep the impacted frames into the dataset to provide more frames for the fit. Thus, correcting from all non-linearities in general may become crucial the provide a linear ramp to fit and to keep all the frames within the dataset. Finally, next step is to dive into all the LRS Slitless observations that are available to date including calibration data acquired during commissioning on HD167060, HD180609 and HD37962 to get correlations between the non-linearity behaviour and the number of frames as much as correlations between non-linearities and both signal and flux levels in a pixel. We expect the outcome of this work to provide key insights on both the extent of non-linearities and correction methods that are currently at stake.

6.3. Future work on persistence effects

As presented in Sec. 5, persistence effects witnessed in the L168-9b data are flux dependent and have an impact on the spectral time-series. The only way to remove them from the dataset is to fit them with a model made of one or two exponentials or even with a polynomial function. As persistence effects occur at the beginning of an exposure, they can be easily fitted or removed from transit or eclipse observations. Indeed, as shown in Bouwman et al. (2022a), residuals of the L168-9b transit fitting do not show any excess of red noise. However, phase-curve modulations are strongly correlated to persistence effects and fitting them is therefore highly degenerate. Bell et al. (2023) shows the

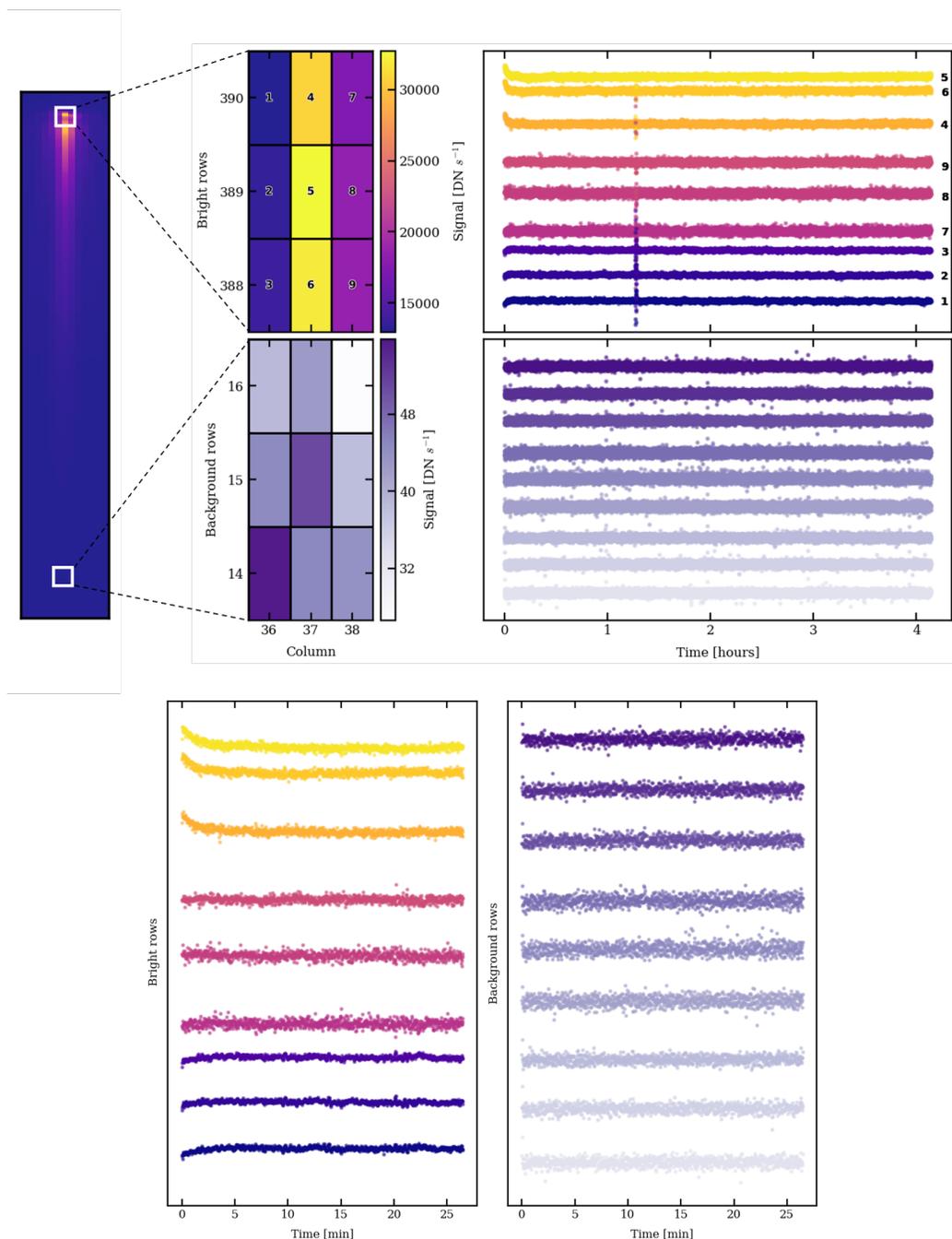


Fig. 11. Depiction of persistence effects in the L168-9b data. Upper part: full light-curves. Bottom part: zoom on the beginning of the light-curves up to half and hour. *Top left panel:* rectangular selection of 9 pixels located in the spectral trace, at the highest flux levels. *Top right panel:* corresponding time-series. Persistence effects are visible at the beginning of each time-series, approximately during less than 30 minutes. *Bottom left panel:* selection of pixels located in the background. All pixels display a really low but yet similar amount of flux between 30 and 50 DN s^{-1} . *Bottom right panel:* corresponding time-series where no persistence effect is visible for these pixels.

strong impact of persistence effects in the MIRI LRS Stitless phase-curve observation of the ERS target WASP-43b. Not only they are strongly correlated to the phase-curve parameters and they also follow the same regimes of idle effect and response drift that found out in the L168-9b data in Sect. 5 and Bell et al. (2023) shows that persistence effects are not only flux-dependant but they are also resultant from the pixel location on the subarray. As the LRS slitless subarray overlaps with the MIRI coron-

agraphs (Boccaletti et al. 2015) and receives observational background constantly, the persistence effect may depend on the filter position prior to the observation. As a matter of fact, long wavelengths filters are likely to increase the observational background. To characterise the persistence effects, one way is to pull down the telemetry of the MIRI LRS slitless subarray to find correlations between these effects and both the filter wheel position and the time spent idling prior to the observation.

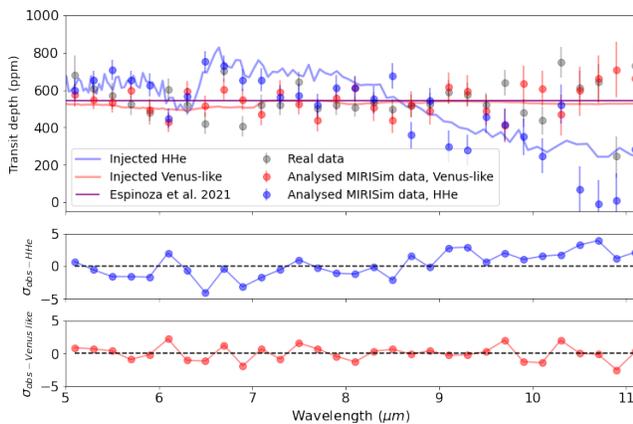


Fig. 12. *Top:* Resulting transmission spectrum of L168-9b from the analysis of simulated data with MIRISim-TSO for two atmospheric scenarios, Venus-like (red dots) and H/He-dominated (blue dots) as well as from real commissioning data (grey dots). *Middle:* Differences between the observed transit depth and the simulated transit depth for an Hydrogen-Helium dominated atmosphere, where $\sigma = \frac{\text{depth}_{\text{obs}}(\lambda) - \text{depth}_{\text{HHe}}(\lambda)}{\sqrt{\text{err}_{\text{depth,obs}}^2 + \text{err}_{\text{depth,HHe}}^2}}$. *Bottom:* Same as middle panel but for the observed transit depth and the simulated transit depth for a Venus-like atmosphere.

7. Conclusions

In this paper we introduce realistic simulations of transiting exoplanets with the MIRI LRS stitless mode. In particular, we simulate the observation of L168-9b, a Super-Earth sized exoplanet chosen to meet the requirements of the instrumental stability calibration program conducted during the commissioning on the LRS mode of the MIRI instrument. To make our simulations comply with real data, we refine and adapt altogether the detector set-up, the systematics and the persistence effects, thus conforming to the in-flight calibration. Finally, we demonstrate that simulations replicate the data with similar scatter and errorbars.

Our simulations provide key insights in the understanding of instrumental systematics of MIRI LRS. First, we establish that activating the RSCD step that flags the first four frames in the jwst Stage 1 is way to eliminate the extra noise-to-signal ratio at short-wavelengths, originally witnessed by Bouwman et al. (2022a). Our work conducted to a systematic removal of the 4 first frames for all datasets in the latest version of the jwst pipeline Stage 1, version 1.10.2 under CRDS context 1089, before fitting the ramp (Morrison et al. 2023).

This paper also complies in terms of persistence effects with the first results by Bell et al. (2023) on the phase-curve observation of WASP-43b. Indeed, our work shows the presence of two persistence effects' regimes in the L168-9b data, either the idle effect or the response drift. Although persistence effects in the WASP-43b data show a higher amplitude and take more time to vanish, their structure is the same as the ones witnessed in the L168-9b data. A pioneering work on understanding these effects and correcting them has to be done to ensure reliable spectral retrievals without any degeneration with the phase-curve models.

Most of all, we validate the data reduction and data analysis methods, as we are able to retrieve a posterior distribution of parameters centred on the same values as the ones injected in our simulations. We use this capacity to confirm that the Super-Earth L168-9b is not dominated by a H/He-rich atmosphere but

is more likely to have either a high-mean molecular atmosphere or no atmosphere.

Acknowledgements. E. D acknowledges support from the innovation and research Horizon 2020 program in the context of the Marie Skłodowska-Curie subvention 945298. PT would like to acknowledge and thank the ERC for funding this work under the Horizon 2020 program project ATMO (ID: 757858). P.O.L. acknowledges funding support from CNES. This work uses observations made with the NASA/ESA/CSA James Webb Space Telescope. The data were obtained from the Mikulski Archive for Space Telescopes at the Space Telescope Science Institute, which is operated by the Association of Universities for Research in Astronomy, Inc., under NASA contract NAS 5-03127 for JWST. These observations are associated with calibration program 1033. This work is based [in part] on observations made with the NASA/ESA/CSA James Webb Space Telescope. The data were obtained from the Mikulski Archive for Space Telescopes at the Space Telescope Science Institute, which is operated by the Association of Universities for Research in Astronomy, Inc., under NASA contract NAS 5-03127 for JWST. These observations are associated with program 1280. MIRI draws on the scientific and technical expertise of the following organisations: Ames Research Center, USA; Airbus Defence and Space, UK; CEA-Irfu, Saclay, France; Centre Spatial de Liège, Belgium; Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Spain; Carl Zeiss Optronics, Germany; Chalmers University of Technology, Sweden; Danish Space Research Institute, Denmark; Dublin Institute for Advanced Studies, Ireland; European Space Agency, Netherlands; ETCA, Belgium; ETH Zurich, Switzerland; Goddard Space Flight Center, USA; Institut d'Astrophysique Spatiale, France; Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial, Spain; Institute for Astronomy, Edinburgh, UK; Jet Propulsion Laboratory, USA; Laboratoire d'Astrophysique de Marseille (LAM), France; Leiden University, Netherlands; Lockheed Advanced Technology Center (USA); NOVA Opt-IR group at Dwingeloo, Netherlands; Northrop Grumman, USA; Max-Planck Institut für Astronomie (MPIA), Heidelberg, Germany; Laboratoire d'Etudes Spatiales et d'Instrumentation en Astrophysique (LESIA), France; Paul Scherrer Institut, Switzerland; Raytheon Vision Systems, USA; RUAG Aerospace, Switzerland; Rutherford Appleton Laboratory (RAL Space), UK; Space Telescope Science Institute, USA; Toegepast-Natuurwetenschappelijk Onderzoek (TNO-TPD), Netherlands; UK Astronomy Technology Centre, UK; University College London, UK; University of Amsterdam, Netherlands; University of Arizona, USA; University of Bern, Switzerland; University of Cardiff, UK; University of Cologne, Germany; University of Ghent; University of Groningen, Netherlands; University of Leicester, UK; University of Leuven, Belgium; University of Stockholm, Sweden; Utah. We would like to thank the following National and International Funding Agencies for their support of the MIRI development: NASA; ESA; Belgian Science Policy Office; Centre Nationale d'Etudes Spatiales (CNES); Danish National Space Centre; Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR); Enterprise Ireland; Ministerio De Economía y Competitividad; Netherlands Research School for Astronomy (NOVA); Netherlands Organisation for Scientific Research (NWO); Science and Technology Facilities Council; Swiss Space Office; Swedish National Space Board; and UK Space Agency. *Software:* numpy (Harris et al. 2020), matplotlib (Hunter 2007), scipy (Virtanen et al. 2020), astropy (Collaboration et al. 2022), nuts (Hoffman & Gelman 2011), emcee (Foreman-Mackey et al. 2013), dynesty (Speagle 2020), starry (Luger et al. 2019), exoNoodle (Martin-Lagarde et al. 2020), MIRISim (Klaassen et al. 2020), eureka! (Bell et al. 2022), pipeline_parallel (https://gitlab.com/jwst_fr/pipeline_parallel/-/tree/master/) and jwst (<https://jwst-pipeline.readthedocs.io/en/latest/>).

References

- Agol, E., Luger, R., & Foreman-Mackey, D. 2020, *The Astronomical Journal*, 159, 123, arXiv:1908.03222 [astro-ph]
- Anderson, R. E. & Gordon, K. D. 2011, *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 123, 1237, arXiv:1109.2626 [astro-ph]
- Argyriou, I. 2021
- Argyriou, I., Lage, C., Rieke, G. H., et al. 2023, *The Brighter-Fatter Effect in the JWST MIRI Si:As IBC detectors I. Observations, impact on science, and modelling*
- Astudillo-Defru, N., Cloutier, R., Wang, S. X., et al. 2020, *Astronomy & Astrophysics*, 636, A58, arXiv:2001.09175
- Batalha, N. E., Mandell, A., Pontoppidan, K., et al. 2017, *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 129, 064501
- Bell, T. J., Ahler, E.-M., Brande, J., et al. 2022, *Eureka! : An End-to-End Pipeline for JWST Time-Series Observations*, arXiv:2207.03585 [astro-ph]
- Bell, T. J., Kreidberg, L., Kendrew, S., et al. 2023, *A First Look at the JWST MIRI/LRS Phase Curve of WASP-43b*, arXiv:2301.06350 [astro-ph]
- Boccaletti, A., Lagage, P.-O., Baudoz, P., et al. 2015, *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 127, 633, arXiv:1508.02352 [astro-ph]

- Bouchet, P., Gastaud, R., Lagage, P.-O., et al. 2022, in *Space Telescopes and Instrumentation 2022: Optical, Infrared, and Millimeter Wave*, Vol. 12180 (SPIE), 404–411
- Bourque, M., Espinoza, N., Filippazzo, J., et al. 2021, Zenodo, aDS Bibcode: 2021zndo...4556063B
- Bouwman, J., Bell, T. J., & Kendrew, S. 2022a
- Bouwman, J., Kendrew, S., Greene, T. P., et al. 2022b, Spectroscopic time series performance of the Mid-Infrared Instrument on the JWST, arXiv:2211.16123 [astro-ph]
- Bushouse, H., Eisenhamer, J., Dencheva, N., et al. 2023, JWST Calibration Pipeline
- Collaboration, T. A., Price-Whelan, A. M., Lim, P. L., et al. 2022, The Astropy Project: Sustaining and Growing a Community-oriented Open-source Project and the Latest Major Release (v5.0) of the Core Package, arXiv:2206.14220 [astro-ph]
- Eastman, J., Gaudi, B. S., & Agol, E. 2013, *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 125, 83, number: 923 arXiv:1206.5798 [astro-ph]
- Foreman-Mackey, D., Hogg, D. W., Lang, D., & Goodman, J. 2013, arXiv:1202.3665 [astro-ph, physics:physics, stat], arXiv: 1202.3665
- Foreman-Mackey, D., Luger, R., Agol, E., et al. 2021, *Journal of Open Source Software*, 6, 3285, number: 62 arXiv:2105.01994 [astro-ph]
- Gazak, J. Z., Johnson, J. A., Tonry, J., et al. 2012, *Advances in Astronomy*, 2012, 1, arXiv:1102.1036 [astro-ph]
- Giménez, A. 2006, *Astronomy & Astrophysics*, 450, 1231, number: 3
- Glasse, A., Rieke, G. H., Bauwens, E., et al. 2015, *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 127, 686
- Gordon, K. D., Bohlin, R., Sloan, G. C., et al. 2022, *The Astronomical Journal*, 163, 267, arXiv:2204.06500 [astro-ph]
- Harris, C. R., Millman, K. J., van der Walt, S. J., et al. 2020, *Nature*, 585, 357, number: 7825 Publisher: Nature Publishing Group
- Hoffman, M. D. & Gelman, A. 2011, *The No-U-Turn Sampler: Adaptively Setting Path Lengths in Hamiltonian Monte Carlo*, arXiv:1111.4246 [cs, stat]
- Hunter, J. D. 2007, *Computing in Science & Engineering*, 9, 90, conference Name: Computing in Science & Engineering
- Husser, T.-O., von Berg, S. W., Dreizler, S., et al. 2013, *Astronomy & Astrophysics*, 553, A6, arXiv:1303.5632 [astro-ph]
- Ingalls, J. G., Krick, J. E., Carey, S. J., et al. 2012, in *Space Telescopes and Instrumentation 2012: Optical, Infrared, and Millimeter Wave*, Vol. 8442 (SPIE), 693–705
- Kempton, E. M.-R., Zhang, M., Bean, J. L., et al. 2023, *Nature*, 1, publisher: Nature Publishing Group
- Kendrew, S., Scheithauer, S., Bouchet, P., et al. 2015, *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 127, 623, arXiv:1512.03000 [astro-ph]
- Kipping, D. M. & Sandford, E. 2016, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 463, 1323
- Klaassen, P. D., Geers, V. C., Beard, S. M., et al. 2020, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 500, 2813, number: 3 arXiv:2010.15710 [astro-ph]
- Kreidberg, L. 2015, *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 127, 1161, number: 957 arXiv:1507.08285 [astro-ph]
- Laginja, I. & Wakeford, H. 2020, *Journal of Open Source Software*, 5, 2281, number: 51
- Louden, T. & Kreidberg, L. 2018, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 477, 2613, number: 2
- Luger, R., Agol, E., Foreman-Mackey, D., et al. 2019, *The Astronomical Journal*, 157, 64, aDS Bibcode: 2019AJ....157...64L
- Mandel, K. & Agol, E. 2002, *The Astrophysical Journal*, 580, L171, number: 2
- Martin-Lagarde, M. 2020, PhD thesis
- Martin-Lagarde, M., Morello, G., Lagage, P.-O., Gastaud, R., & Cossou, C. 2020, *The Astronomical Journal*, 160, 197, number: 5
- McMurtry, C. W., Forrest, W. J., & Pipher, J. L. 2005, in *Focal Plane Arrays for Space Telescopes II*, Vol. 5902 (SPIE), 45–57
- Morello, G., Claret, A., Martin-Lagarde, M., et al. 2020, *The Astronomical Journal*, 159, 75, number: 2 arXiv:1908.09599 [astro-ph]
- Morello, G., Waldmann, I. P., & Tinetti, G. 2016, *The Astrophysical Journal*, 820, 86
- Morrison, J. E., Dicken, D., Argyriou, I., Ressler, M. E., & Gordon, K. D. 2023
- Oblakowska-Mucha, A. 2017, *Acta Physica Polonica B*, 48, 1707
- Parviainen, H. 2015, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 450, 3233, number: 3 arXiv:1504.07433 [astro-ph]
- Patel, J. A. & Espinoza, N. 2022, *The Astronomical Journal*, 163, 228, arXiv:2203.05661 [astro-ph]
- Pontoppidan, K. M., Pickering, T. E., Laidler, V. G., et al. 2016, in *Observatory Operations: Strategies, Processes, and Systems VI*, 44, arXiv:1707.02202 [astro-ph]
- Popper, D. M. & Etzel, P. B. 1981, *The Astronomical Journal*, 86, 102, aDS Bibcode: 1981AJ....86..102P
- Rein, E. & Ofir, A. 2019, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 490, 1111, number: 1 arXiv:1910.12099 [astro-ph]
- Ressler, M. E., Colbert, J. W., Laine, S., & Morrison, J. E. 2023
- Ressler, M. E., Sukhatme, K. G., Franklin, B. R., et al. 2015, *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 127, 675
- Rieke, G. 2007, *Annual Review of Astronomy and Astrophysics*, 45, 77, eprint: https://doi.org/10.1146/annurev.astro.44.051905.092436
- Rieke, G. H., Ressler, M. E., Morrison, J. E., et al. 2015, *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 127, 665, arXiv:1508.02362 [astro-ph]
- Rigby, J., Perrin, M., McElwain, M., et al. 2022, *The Science Performance of JWST as Characterized in Commissioning*, Tech. rep., publication Title: arXiv e-prints ADS Bibcode: 2022arXiv220705632R Type: article
- Robberto, M. 2013
- Southworth, J., Maxted, P. F. L., & Smalley, B. 2004, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 351, 1277, number: 4 arXiv:astro-ph/0403572
- Speagle, J. S. 2020, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 493, 3132, aDS Bibcode: 2020MNRAS.493.3132S
- Teams, I. I. A. I. S. 2021, publisher: IPAC
- Tremblin, P., Amundsen, D. S., Mourier, P., et al. 2015, *The Astrophysical Journal*, 804, L17, arXiv:1504.03334 [astro-ph]
- Tremblin, P., Chabrier, G., Baraffe, I., et al. 2017, *The Astrophysical Journal*, 850, 46, aDS Bibcode: 2017ApJ...850...46T
- Tsiaras, A., Waldmann, I. P., Rocchetto, M., et al. 2016, *The Astrophysical Journal*, 832, 202, number: 2 arXiv:1511.07796 [astro-ph]
- Venot, O., Hébrard, E., Agúndez, M., et al. 2012, *Astronomy & Astrophysics*, 546, A43, arXiv:1208.0560 [astro-ph]
- Virtanen, P., Gommers, R., Oliphant, T. E., et al. 2020, *Nature Methods*, 17, 261, number: 3 Publisher: Nature Publishing Group

Appendix A: Persistence effects description

In the 2018 test data we obtained from JPL ([Martin-Lagarde 2020](#)) of the MIRI detector, three persistence effects have been identified: the response drift, the anneal recovery and the idle recovery.

Response drift occurs when the detector gets suddenly illuminated after a given time without receiving any flux. The output signal is not stabilised and slowly increases towards its expected value following a smooth slope ([Rieke et al. 2015](#)). The stronger the flux in a pixel, the quicker the effect vanishes over time.

Anneal recovery is induced by a previous heating of the detector. In an arsenic-doped silicon (Si:As) detector, such as the MIRI detector ([Rieke et al. 2015](#)), collisions between charged particles like cosmic rays and silicon atoms may damage the crystal structure. This is called the radiation damage ([Oblakowska-Mucha 2017](#)). Detector anneals are therefore performed to recover from this damage. The detector is heated up 15 to 20 K higher than the nominal temperature and then cooled down back to 7 K. As a consequence, at the beginning of an observation, the output signal is higher than the nominal value and smoothly goes down towards its expected value. This effect is called the anneal recovery and is completely independent from the flux value in a pixel.

Idle recovery is the last persistence effect that is identified. Between two observing phases, the detector is still illuminated with the observational background. The longer the detector waits, the more background it acquires. To prevent the detector from acquiring signal, consecutive resets are performed. This is called an idle ([Argyriou 2021](#)). As soon as the observation starts, the output signal level is higher than expected because of these resets and slowly goes down towards its nominal value. This effect depends on the flux in a pixel and on the time during which idle has been performed.

Appendix B: Correlated noise computation

The L168-9b data fit shows minimum correlated noise in the residuals of the white light-curve as well as in the residuals of all spectroscopic light-curves. A selection of the first 9 plots of the Allan variance computation is displayed in [Fig. B.1](#). The first 9 channels refer to the wavelength range between 5 and 7 μm where the excess of noise-over-signal is presented in [Bouwman et al. \(2022a\)](#).

Appendix C: Methodology of the alternative method to ramp fitting

Starting from the L168-9b uncalibrated spectral images, we apply an alternative methodology to data reduction:

1. First, each ramp starts with an offset value that has to be removed from all ramps of the spectrum. To do so, we choose a region located in the lower part of the trace that corresponds to the background zone. We choose a rectangular selection from row 0 to row 50 and from column 35 to 38. For each ramp, we select the second-last frame and we compute the mean over the whole region of this signal level. The reason why we do not use the last frame is because it is impacted by the last frame effect which is strongly non-linear.
2. The second step is to get the signal over the spectrum. We select a region from row 155 to row 391 and from column 35 to column 38 that corresponds to the trace. For each row, we sum the signal over the three columns to get a unique value

of the signal per row. Then, we choose the second-last frame of each ramp and subtract the offset value. This way, each row is assigned with a unique signal value that evolves over time.

3. Then, each light-curve is cleaned by applying a temporal sigma clipping with a running mean of 50 values and a rejection threshold of 5σ .
4. The 4th step is to get the mean value of the signal over time, only taking into account the stable part of the observation, after integration 8900. This step provides a spectrum as a function of the detector row presented in [Fig C.1](#).
5. Next step is to evaluate the noise. This is made by estimating the standard deviation of each light-curve. To remove outliers, a spectral sigma clipping is applied with a running mean of 10 rows and a rejection threshold of 5σ . The outcome of this step is presented in [Fig C.2](#).
6. Final step is to divide the noise by the signal to get the noise-over-signal estimate as a function of the row. To present a proper result, we use the pixel-to-wavelength dispersion file made during commissioning thus getting the noise-over-signal estimate as a function of wavelength.

The results are displayed in [Fig C.3](#) for both the real data and simulations.

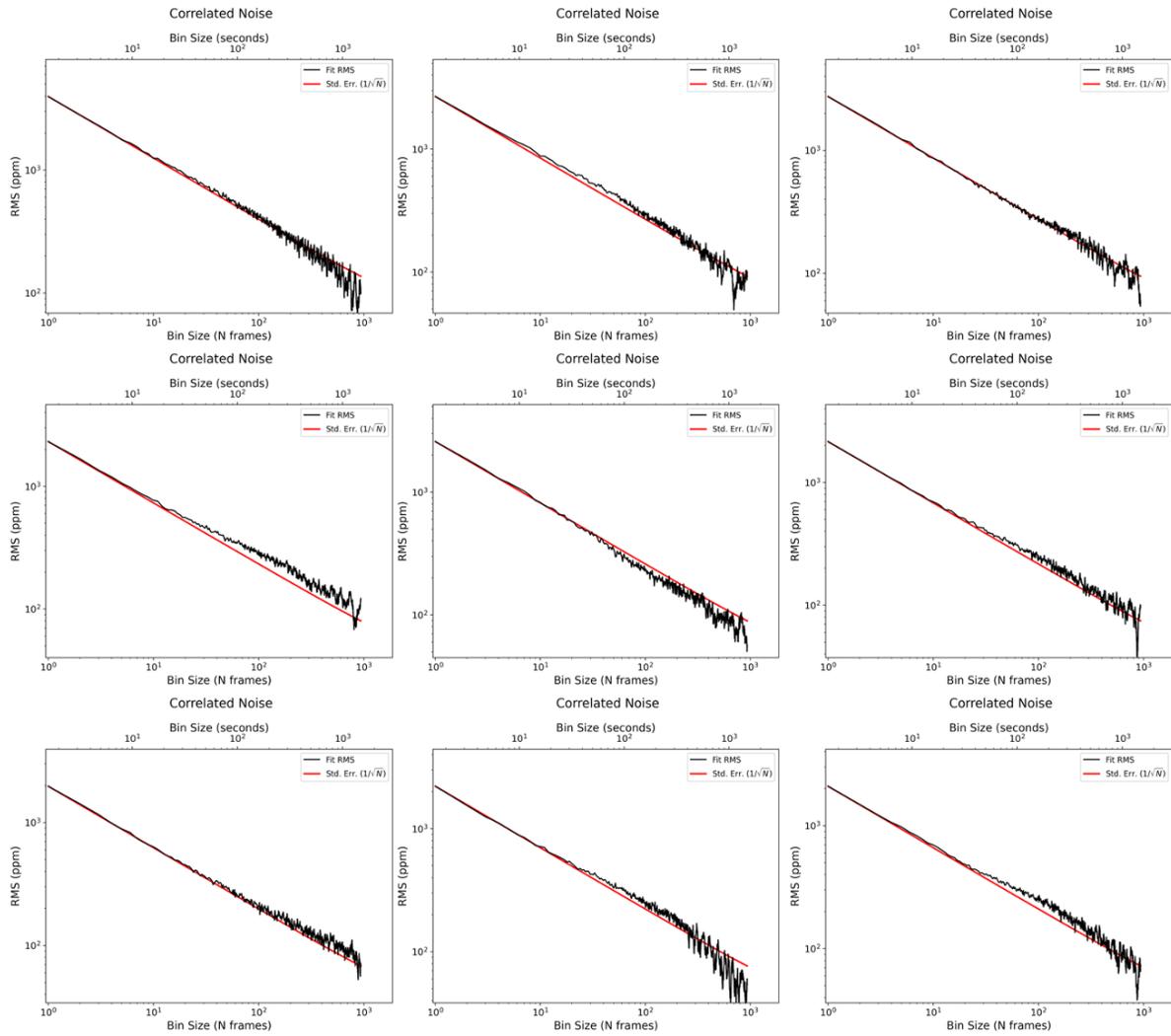


Fig. B.1. Allan plots of the 9 first spectral bins of the L168-9b data between 5 and 7 μm . All plots show minimum correlated noise in the residuals of the fit.

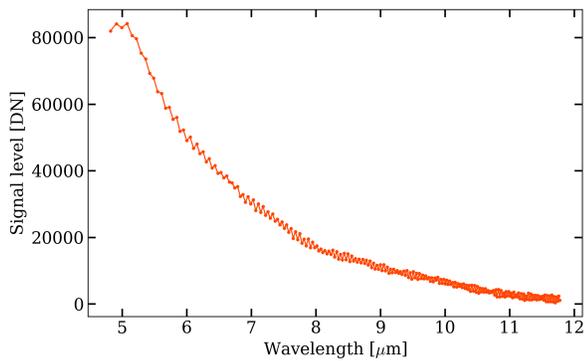


Fig. C.1. L168-9b spectrum in DN extracted using the second-last frame of the ramp only. No ramp-fitting is applied.

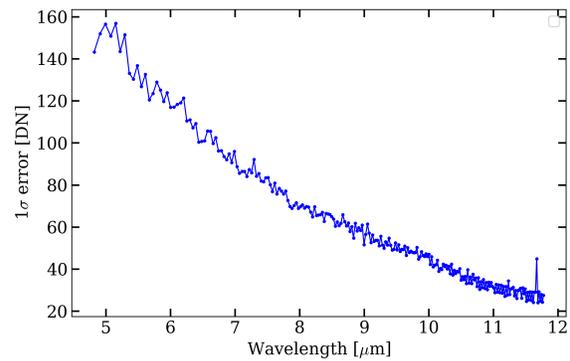


Fig. C.2. Noise estimate in DN of the L168-9b observation extracted using the second-last frame of the ramp only.

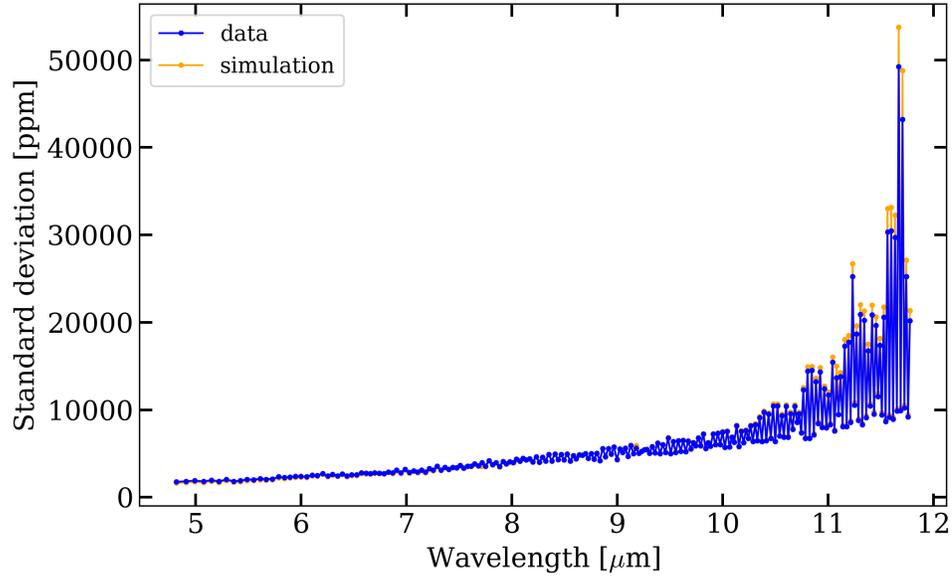


Fig. C.3. Noise-over-signal estimate for the L168-9b data between 5 and 12 μm , using only the second-last frame of the ramp to compute the signal, instead of fitting the ramp. The blue curve shows the data noise-over-signal estimate and the orange one shows the simulations noise-over-signal estimate.

CHAPITRE 4

De la composition des atmosphères : l'analyse scientifique des données JWST

Sommaire

4.1	Introduction	168
4.2	De la composition moléculaire de la super-Neptune WASP-107b	169
4.2.1	Le spectre en infrarouge moyen : réduction et analyse des données	169
4.2.2	Déterminer la composition moléculaire à partir des données : le rôle du <i>free retrieval</i>	171
4.2.3	L'interprétation des résultats par des modèles atmosphériques	174
4.2.4	WASP-39b, un second exemple de détection de SO ₂ par le MIRI LRS	178
4.3	L'émission thermique de la rocheuse tempérée TRAPPIST-1b	179
4.3.1	La détection de l'éclipse de TRAPPIST-1b : réduction et analyse de données	181
4.3.2	Mesurer la température côté jour de TRAPPIST-1b	182
4.3.3	Contraindre la présence ou non d'une atmosphère	184
4.4	La courbe de phase de la super-Terre GJ1214b	186
4.4.1	Analyse des données et ajustement de modèles de transit et de courbe de phase	187
4.4.2	Inférer l'albédo de Bond de la planète	188
4.5	Conclusion et perspectives	189

“Mardi 7 [décembre] : Nous prenons la route vers Mana depuis Cayenne. Je prends le volant d’un des vans. Nous empruntons l’unique route qui permet de rejoindre le nord de la Guyane. Elle passe par Kourou et contourne le centre spatial, jusqu’à Sinnamari. Le centre spatial est immense et s’étend sur 700 km². Sinnamari est un petit village à la limite de l’enceinte nord du centre spatial, où sont lancées les fusées Soyouz [ce n’est plus le cas aujourd’hui]. La route est très agréable, en plein milieu de la végétation, il n’y a personne. Pour une fois, il fait grand soleil. Je fonce, c’est un plaisir de conduire. A midi, nous nous arrêtons pour manger un bout à Sinnamari. Je goûte des travers de porc boucanés à la sauce chien, c’est excellent ! Après le repas, nous nous baladons. Le ciel est dégagé et le soleil me brûle. Je ne pensais pas dire cela un jour mais je préfère les nuages ! Nous décidons de repartir. Je passe le volant à Mathilde pour le reste du voyage. Il nous reste le tronçon Sinnamari - Mana à faire. Sur la route, nous passons par le tout petit village d’Iracoubo où on nous ordonne de faire une halte à un poste de douane. Il s’agit d’un checkpoint placé sur la route qui sert à limiter les trafics et la contrebande entre le nord et le sud. Je n’ai jamais passé de checkpoint de ma vie. C’est impressionnant. Nous arrivons à Mana en fin de journée. [...] Vendredi 10 [décembre] : nous prenons la route depuis Mana, nous avons rendez-vous à l’école primaire Yamanalé à Awala. Awala est un village de populations amérindiennes dont nous allons découvrir la culture aujourd’hui. Je commence à avoir l’habitude des discussions avec les classes et je prends de plus en plus de plaisir à parler aux enfants et à leur présenter mon métier. Les enfants posent toujours des questions inattendues et je ne m’ennuie jamais. Je suis surtout impressionnée par leurs connaissances. Après le déjeuner, nous allons sur le stade de foot pour faire des animations et lancer des fusées à poudre avec les enfants. La tribu des Kali’na nous reçoit et passe l’après-midi avec nous. Je passe un excellent moment à courir avec les enfants pour aller chercher les morceaux de fusées qui retombent. Nous sommes même accompagnés par un petit chien qui nous suit partout. En fin de journée, nous rangeons et faisons un saut dans la maison du chef de la tribu pour lui rendre des tables pliables qu’il nous avait prêtées. Je prends le temps de rester et de parler avec lui. Il m’explique que les populations amérindiennes d’Awala vivent de la chasse, de la pêche et de la construction. Ils habitent dans des maisons ou des carbets construits sur la partie sablonneuse de la ville. Le sable absorbe l’eau des pluies diluviennes. D’autres villages amérindiens vers Saint-Laurent ne sont pas construits sur du sable mais sur une terre rouge, pas très absorbante, ce qui crée de nombreuses inondations. Dans d’autres villes comme à Mana ou à Kourou, je n’ai pas vu de sable non plus. Il me laisse entrer et visiter sa maison. Elle est très simple. Dans la pièce centrale un grand hamac qui doit servir de canapé et de lit à la fois, une télévision et un four à micro-ondes. Les murs sont blancs et au sol on fait brûler quelque chose. L’odeur me rappelle celle de l’encens d’Arménie, si bien que j’ai cru qu’il s’agissait là d’un produit naturel propre à sa tribu. Il se lève, attrape un petit paquet posé sur le micro-onde et me montre alors une boîte de produit anti-moustique venant de Chine et visiblement acheté dans une supérette. Un silence s’installe puis nous explosons de rire. Je remarque des tatouages sur sa main gauche et son épaule. Un scorpion sur sa main droite pour être précise. Il me raconte alors avoir gagné les jeux Kali’na (de leur tribu) quatre fois. Ces jeux se déroulent chaque année sur le bord de mer et regroupent énormément de monde y compris des personnes venant du Canada, du Suriname et du Brésil. Il m’explique quelques règles du jeux nécessitant l’usage de pirogues mais je ne comprends pas tout. De manière générale, les membres de la tribu ont conservé leur langue (appelé le Kali’na également) et ces jeux sont un héritage culturel passé de génération en génération. Cela me fait penser à mon propre héritage arménien. Je rentre satisfaite de ma journée.”

— Extrait de mon Journal de bord “La Guyane vers les étoiles”, *La tribu des Kali’na à Awala*, 10 décembre 2021

4.1 Introduction : caractériser les atmosphères d'exoplanètes avec JWST MIRI

L'un des objectifs principaux de l'observation d'exoplanètes avec le JWST est la caractérisation de la composition moléculaire et atomique de leur atmosphère. Sa très grande sensibilité couplée à la gamme de longueurs d'onde couverte par MIRI en spectroscopie basse résolution constituent les avancées instrumentales majeures. Il est donc possible non seulement d'étudier spectralement les atmosphères de planètes gazeuses, mais également de sonder celles des planètes de plus faibles rayons et masses, les rocheuses (Beichman et al., 2014; Greene, Line et al., 2016; Mollière, Van Boekel et al., 2017; Batalha, Lewis et al., 2018). L'intérêt scientifique de l'instrument MIRI se décline en trois axes :

- L'observation inédite de certaines **molécules** qui sont plus facilement détectables en infrarouge moyen, dans la gamme de longueurs d'onde comprise entre 5 et 12 μm . Je fais référence ici par exemple à l'ammoniac NH_3 , à la phosphine PH_3 , au dioxyde de carbone CO_2 , au monoxyde de carbone CO , au méthane CH_4 ou encore aux monoxyde et dioxyde de silicium SiO et SiO_2 (Herbort et al., 2020; Owens et al., 2020). Une liste d'exemples est présentée dans les articles de Tinetti, Encrenaz et al., 2013 et Encrenaz, 2014.
- L'observation d'une même molécule dans différentes gammes de longueurs d'onde allant du proche au moyen infrarouge afin de contraindre les **profils de pression-température** (par résolution de l'équation de transfert radiatif, Madhusudhan et Seager, 2009; Heng et Marley, 2018). Nous pouvons citer en plus des molécules présentées ci-dessus, la molécule d'eau H_2O , pour laquelle nous avons des observations complémentaires du HST STIS en infrarouge proche (Tinetti, Tennyson et al., 2012; Deming, Wilkins et al., 2013; Huitson et al., 2013; Birkby et al., 2013; Kreidberg, Bean, Désert, Line et al., 2014; Line, Stevenson et al., 2016; Stevenson, 2016). Nous pouvons également mentionner la possible **observation de nuages et de brumes** de silicates qui présentent des signatures spectrales en infrarouge moyen comme spécifié dans la Sect. 1.2.3.2 du Chap. 1, (Marley, Ackerman et al., 2013; Evans, Pont et al., 2013; Parmentier, Showman et Lian, 2013; Demory, De Wit et al., 2013; Marley et Robinson, 2015; Shporer et Hu, 2015; Muñoz et Isaak, 2015; Sing, Fortney et al., 2016; Helling et al., 2016; Madhusudhan, Agúndez et al., 2016; Stevenson, 2016; Drummond, Mayne et al., 2018; Parmentier, Showman et Fortney, 2020).
- L'observation de l'**émission thermique** entre 5 et 12 μm d'exoplanètes ayant une température d'équilibre inférieure à ~ 600 K, dont le pic d'émission est dans la gamme spectrale couverte par MIRI, en considérant une loi du corps noir.

Dans ce contexte, la première année d'observation du JWST a permis des avancées majeures en la matière, dont je présenterai ici trois exemples significatifs, qui démontrent tous les trois l'étendue des capacités de l'instrument MIRI pour l'étude d'atmosphères d'exoplanètes. De manière générale, j'ai étudié les données de 6 cibles différentes balayant un spectre très large de rayons, de masses et de températures planétaires qui sont : les Jupiter chaudes WASP-43b (Hellier, Anderson, Cameron, Gillon, Jehin et al., 2011) et WASP-39b (Faedi et al., 2011), la sub-Saturne HAT-P-12b (Hartman et al., 2009), la super-Neptune WASP-107b (Anderson, Collier Cameron et al., 2017), la super-Terre GJ1214b (Charbonneau, Berta et al., 2009) et la rocheuse tempérée TRAPPIST-1b (Gillon, Triaud, Demory et al., 2017). J'ai mené la réduction et l'analyse des données de l'ensemble de ces cibles dans le cadre des collaborations internationales de l'Early Release Science (ERS), du Temps Garanti d'Observation (GTO) et du temps Général d'Observation (GO) du JWST. A la suite de la réduction et l'analyse des données, j'ai travaillé à l'interprétation scientifique des résultats, travaux qui ont mené à la détection de la première courbe de phase spectroscopique en infrarouge moyen de la Jupiter chaude WASP-43b (Bell, Crouzet et al., 2023) et de la super-Terre GJ1214b (Kempton et al., 2023), à la première détection de l'émission thermique de la rocheuse tempérée TRAPPIST-1b (Greene, Bell et al., 2023), à la détection de dioxyde de soufre dans l'atmosphère de la super-Neptune WASP-107b (Dyrek, Min et al., 2023) et de la Jupiter chaude WASP-39b (Powell et al., 2023 in prep.) et enfin, à la détection de nuages de silicates dans l'atmosphère de la super-Neptune WASP-107b (Dyrek, Min et al., 2023). Dans ce chapitre, je me concentrerai

sur trois contributions majeures de ma thèse en termes de réduction, d'analyse et d'interprétation scientifique. Je commencerai par présenter les travaux menés sur l'observation de la super-Neptune WASP-107b, données à partir desquelles nous avons détecté du dioxyde de soufre SO_2 et des nuages de silicates, premières détections en infrarouge moyen. Dans un second temps, je me concentrerai sur l'observation de la rocheuse tempérée TRAPPIST-1b, données à partir desquelles nous avons détecté l'éclipse de la planète et mesuré la température côté jour et ainsi inféré des contraintes sur la présence ou non d'une atmosphère. Enfin, je présenterai les travaux liés à l'observation de la super-Terre GJ1214b pour laquelle nous avons caractérisé la courbe de phase en infrarouge moyen et inféré des contraintes sur l'albédo de Bond.

4.2 De la composition moléculaire de la super-Neptune WASP-107b

WASP-107b est une super-Neptune ayant une masse similaire à celle de Neptune, $M_p = 30.5 \pm 1.7 M_\oplus$ (soit 1.8 fois la masse de Neptune), mais avec un rayon très étendu, proche de celui de Jupiter $R_p = 0.94 \pm 0.02 R_{\text{Jup}}$ (Anderson, Collier Cameron et al., 2017; Piaulet et al., 2021). Il s'agit donc d'une planète très peu dense et surtout très enflée, composée majoritairement d'hélium et d'hydrogène. Elle est située très proche de son étoile et orbite autour d'elle en $P = 5.7214$ jours (Anderson, Collier Cameron et al., 2017). L'étoile est une naine K6, de masse $M_\star = 0.69 M_\odot$, située à 64.7 pc de nous et dont l'âge a été contraint par astérosismologie à $\sim 3.4 \pm 0.3$ milliard d'années (Piaulet et al., 2021; Bailer-Jones et al., 2018; Hejazi et al., 2023). La métallicité et le ratio C/O de l'étoile sont proches de ceux de notre Soleil : $[\text{Fe}/\text{H}] = +0.02 \pm 0.09$ dex et $\text{C}/\text{O} = 0.50 \pm 0.10$ (Piaulet et al., 2021). Des observations au sol prises par le spectromètre proche infrarouge NIRSPEC du télescope KECK II ont montré que la planète perd peu à peu l'hélium de son atmosphère, phénomène que nous appelons échappement atmosphérique (Spake, Sing et al., 2018). Ainsi, l'existence de cette planète de faible masse si proche de son étoile soulève de nombreuses questions quant aux théories de formation et d'évolution qui régissent la possibilité pour une planète comme WASP-107b de subsister sur une telle orbite (Lee et Chiang, 2016; Lee, 2019; Piaulet et al., 2021). Des observations antérieures faites par le HST STIS en infrarouge proche ont montré la présence d'eau sous forme de gaz dans son atmosphère, détection à 6.5σ , faite par Kreidberg, Line et al., 2018. L'amplitude des signatures spectrales obtenues est cependant plus faible qu'attendue pour une atmosphère sans nuages, suggérant ainsi la présence de nuages (voir Sect. 1.2.3.2 du Chap. 1). La température d'équilibre estimée pour cette planète étant relativement faible, autour de ~ 740 K (Anderson, Collier Cameron et al., 2017; Estrela et al., 2022; Močnik et al., 2017). Kreidberg, Line et al., 2018 suggère également la présence de méthane dans l'atmosphère mais dont la signature spectrale en infrarouge proche empiète sur celle de l'eau, rendant sa détection incertaine.

4.2.1 Le spectre en infrarouge moyen : réduction et analyse des données

Dans le cadre du Temps Garanti d'Observation (PID : 1280), nous avons observé le transit de WASP-107b avec le mode d'observation *SLITLESSPRISM* du MIRI LRS pendant une durée totale de ~ 9 heures, les 19 et 20 janvier 2023. L'observation est constituée de 4546 intégrations de 40 frames chacune, ce qui correspond à une durée d'intégration de 6.36 s auquel nous ajoutons 2 resets d'une durée équivalente à une frame (0.159 s). Les données sont réparties en 10 fichiers, soit un total d'environ 13 Go. La réduction des données est faite en appliquant le pipeline *jwst* et les données sont analysées à l'aide de trois outils indépendants : *Eureka!*, *CASCADE* et *TEATRO*, suivant la méthodologie présentée dans la Sect. 3.2 du Chap. 3. La Fig. 4.1 présente la courbe de lumière blanche obtenue entre 5 et 12 μm après réduction et analyse des données avec *Eureka!*. Nous pouvons souligner la remarquable stabilité temporelle du JWST dont les données en séries temporelles de WASP-107b ne requièrent que très peu de corrections de bruit corrélé temporellement. L'effet de persistance liée à l'idle recovery (voir les Sect. 2.3 et 3.5 des Chap. 2 et 3) est visible en début d'observation.

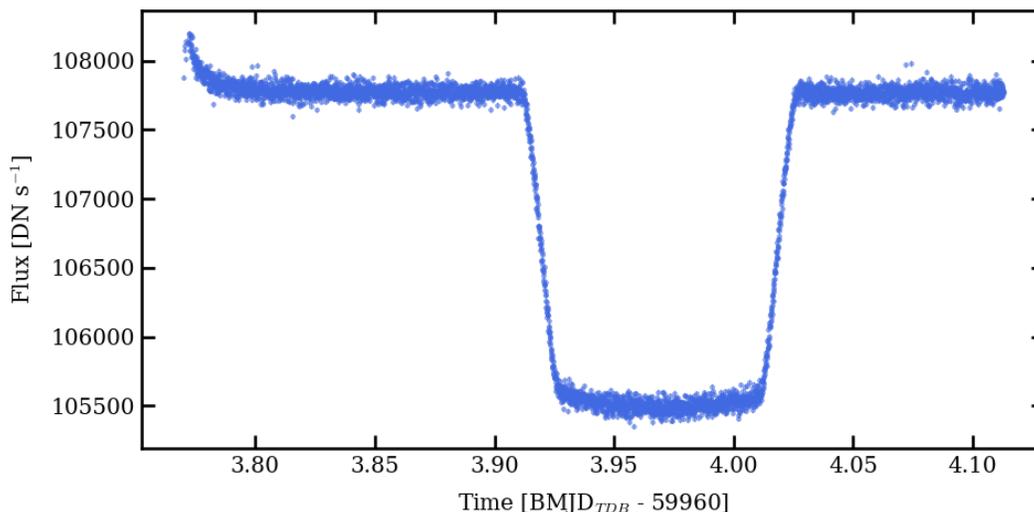


FIGURE 4.1 – Courbe de lumière blanche de la cible WASP-107b obtenue avec le MIRI LRS entre 5 et 12 μm . L’effet de persistance liée à l’idle recovery est visible en début d’observation. Figure obtenue après analyse des données avec le package *Eureka!* (Bell, Ahrer et al., 2022).

L’ensemble des étapes de réduction et d’analyse étant présentées dans le Chap. 3, je me concentrerai ici sur la comparaison des résultats issus des différentes méthodes utilisées. Dans un premier temps, les rampes issues de la première étape de la réduction présentent des non-linéarités non corrigées. Cette non-linéarité résiduelle peut être expliquée par plusieurs effets dont la correction n’est pas encore prise en compte dans le pipeline. L’un des effets est le RSCD (voir Chap. 3) et le second effet est le *brighter-fatter effect* qui est un phénomène de fuite inter-pixels à partir d’un certain niveau de signal de la rampe (Argyriou, Lage et al., 2023). Nous procédons donc à une linéarisation manuelle des rampes en dérivant un ensemble de coefficients polynomiaux spécifiques pour toutes les rampes des pixels du subarray. La méthodologie appliquée ainsi que le fichier sont publics et disponibles sur un dépôt *GitLab*¹ *Open Source*. Les réductions de données *TEATRO* et *CASCADE* font appel à une version récente du pipeline *jwst*, 1.9.4 (CRDS 1030), qui combine les étapes de correction du reset anomaly et du courant d’obscurité en une seule étape et donc en un seul fichier CRDS. Cette nouvelle étape n’est pas optimale et nécessite également une correction manuelle. La méthode d’analyse *Eureka!* fait volontairement appel à une version antérieure du pipeline (version 1.8.5) pour détecter d’éventuels biais introduits par la version ultérieure. La précision spectro-photométrique atteinte est de ~ 80 ppm à 7.5 μm , avec une résolution spectrale de $R = 50$ à 7.5 μm . La profondeur de transit moyenne sur la gamme spectrale est de 20463 ± 39 ppm, valeur qui est en accord avec la profondeur de transit mesurée par HST STIS en infrarouge proche (Kreidberg, Line et al., 2018).

À partir des séries temporelles des spectres 1D issues de l’étape 3 de l’analyse, nous procédons à l’extraction de 51 courbes de lumière spectroscopiques entre 4.6 et 12.1 μm , avec un pas 0.15 μm . Les canaux spectraux à courtes longueurs d’onde ($< 7 \mu\text{m}$), qui reçoivent le maximum du flux montrent des effets de persistance dont les amplitudes sont élevées, en accord avec le comportement observé dans les données du transit de la cible d’études des performances L168-9b (voir Sect. 3.3 du Chap. 3). Nous ajustons ensuite un modèle de transit et de systématiques instrumentales sur les courbes de lumière spectroscopiques et dérivons les distributions *a posteriori* du rayon planétaire normalisé R_p/R_* , des paramètres d’assombrissement centre-bord $\theta_{(u_1, u_2)}$ et des paramètres de systématiques ins-

1. Le dépôt est disponible à l’adresse suivante <https://gitlab.com/jbouwman/CASCADE>

trumentales $\theta_{\text{systematics}}$ (voir Chap. 3). Nous procédons également à l’ajustement de la courbe de lumière blanche en fixant la période orbitale à $P = 5,7214$ jours (Anderson, Collier Cameron et al., 2017). Nous dérivons les distributions *a posteriori* du demi-grand axe normalisé a/R_* , de l’inclinaison i et du temps de mi-transit t_0 . Pour chacune des courbes de lumière ajustées, les résidus présentent un niveau minimal de bruit corrélé temporellement, et sont donc distribués selon une loi normale centrée réduite. Les trois spectres de transmission obtenus sont présentés sur la Fig. 4.2.

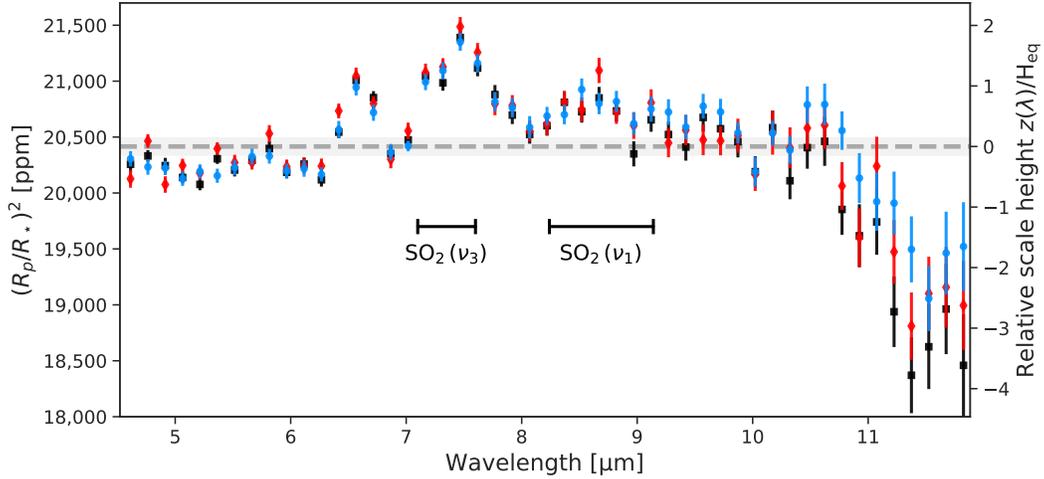


FIGURE 4.2 – Spectres en transmission avec le MIRI LRS entre 5 et 12 μm de la cible WASP-107b obtenus par trois méthodes d’analyse différentes Eureka! (points en vert), CASACDe (points en bleu) et TEATRO (points en noir). La ligne grise en pointillé indique la profondeur de transit moyenne obtenue ainsi que l’intervalle de confiance à 95%. Les deux barres horizontales indiquent les bandes de vibration d’élongations symétrique ν_3 et asymétrique ν_1 du SO_2 (voir Sect. 4.2.2).

Les résultats obtenus par les trois méthodes d’analyses sont en accord à 3σ . Les quelques différences observées peuvent être attribuées aux différents modèles de systématiques instrumentales employés pour ajuster les effets de persistance. Les trois spectres présentent une variation spectrale significative du rayon apparent de la planète, suggérant ainsi la présence de molécules absorbant dans les longueurs d’onde comprises entre 5 et 12 μm . Les analyses menées sur ces spectres (voir Sect. 4.2.2 et 4.2.3) démontrent, entre autres, la présence de dioxyde de soufre SO_2 dans l’atmosphère de WASP-107b dont les bandes d’absorption sont indiquées par les deux barres noires sur la figure. Lors de l’absorption du rayonnement infrarouge de l’étoile, les molécules de SO_2 passent d’un état fondamental à un niveau d’énergie plus élevé correspondant à une transition de rotation-vibration. De fait, les deux pics observés dans le spectre à 7.35 et 8.69 μm correspondant respectivement aux bandes de vibration d’élongations symétrique ν_3 et asymétrique ν_1 du SO_2 , l’élongation étant un mouvement relatif des atomes dans l’axe de leur liaison (Herzberg, 1966).

4.2.2 Déterminer la composition moléculaire à partir des données : le rôle du *free retrieval*

La détermination de la composition moléculaire et de la structure atmosphérique se fait par la méthode dite du *atmospheric retrieval* ou modèle inversé en français. Les modèles atmosphériques classiques dits *forward* résolvent les équations de transfert radiatif pour un jeu d’opacité atmosphérique donné et fournissent le profil pression-

température qui satisfait l'équilibre hydrostatique et la conservation d'énergie (Madhusudhan et Seager, 2009; Tremblin, Chabrier, Baraffe et al., 2017; Heng et Marley, 2018; Al-Refaie et al., 2021). Les modèles prennent en compte un jeu de paramètres ϕ incluant les rayons et masses planétaire et stellaire, la température, la pression et l'altitude ainsi qu'un ensemble de molécules et d'atomes et leur opacité associée afin de produire un spectre atmosphérique. Le *retrieval* consiste à produire un spectre à l'aide d'un modèle *forward* donné, paramétrisé par le jeu de paramètres ϕ et de l'ajuster par inférence bayésienne sur les données spectroscopiques issues de la réduction et de l'analyse. L'ajustement nécessite un très grand nombre d'itérations (de 10000 à 10 millions) qui permettent de converger vers le spectre observé et d'extraire les distributions *a posteriori* des paramètres en entrée du modèle. La Fig. 4.3 présente une schématisation du processus de *retrieval*.

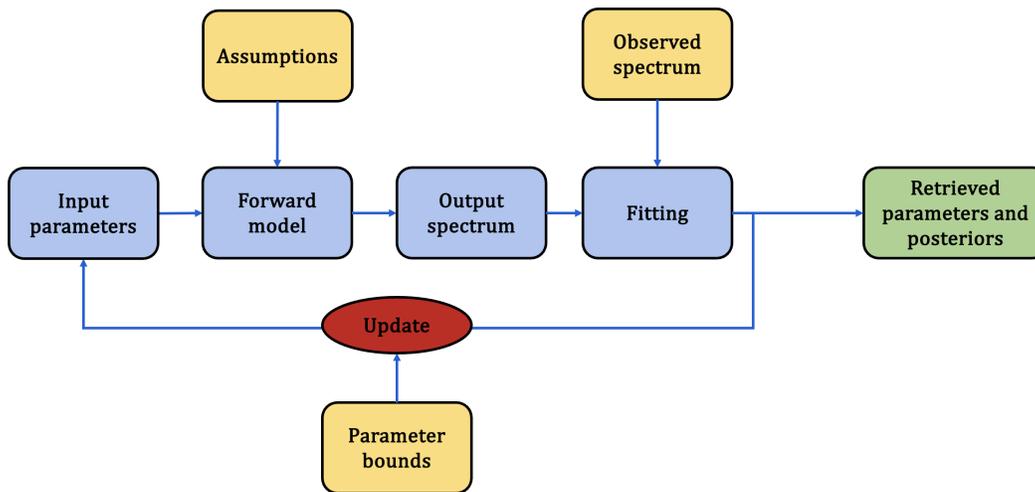


FIGURE 4.3 – Méthodologie du *retrieval* atmosphérique. Le *retrieval* consiste à produire un spectre à partir de paramètres d'entrée (input parameters) suivant un modèle donné (forward model) et d'ajuster ce spectre par inférence bayésienne (fitting) sur les données spectroscopiques issues de la réduction et de l'analyse (observed spectrum). L'ajustement converge en N itérations (update) vers le spectre observé et extrait les distributions *a posteriori* des paramètres en entrée du modèle (retrieved parameters and posteriors). Figure présentée ici avec l'aimable autorisation de Q. Chageat.

Dans ce contexte, le *free retrieval* consiste à poser le minimum de contraintes possibles sur les équations physiques et chimiques régissant la structure et la dynamique de l'atmosphère. De fait, les abondances moléculaires et atomiques sont ajustées indépendamment les unes des autres de manière à introduire le minimum d'hypothèse sur leurs interactions. L'objectif du *free retrieval* est de déterminer les **contraintes apportées par les données** sur les distributions des paramètres atmosphériques. Par opposition au *free retrieval*, le *self-consistent retrieval* également fondé sur une paramétrisation du profil de température (comme le *free retrieval*) mais prend en compte un certain nombre d'hypothèses physique liées à l'équilibre chimique (ou déséquilibre chimique) de l'atmosphère dans les modèles, imposant ainsi la nature des interactions moléculaires et atomiques ainsi que les cinétiques de réaction (Venot et al., 2012; Venot, 2014). Par exemple, le transfert radiatif peut être couplé à l'advection, ou transfert de chaleur par mouvements horizontaux de l'atmosphère ou à l'*Eddy diffusion*, encore appelé mélange vertical (Guillot, 2010b; Tremblin, Chabrier, Mayne et al., 2017a) et d'imposer ainsi les processus de transport de chaleur dans les atmosphères.

Dans le cas de la planète WASP-107b, nous n'avons pas de contraintes liées à la physique et à la chimie de l'atmosphère, nous optons donc pour une méthodologie dite *data-driven*. Nous appliquons deux méthodes indépen-

dantes de *free retrieval*, ARCiS (Min et al., 2020b) et petitRADTRANS (Mollière, Wardenier, van Boekel et al., 2019b) en considérant uniquement l'absorption moléculaire dans l'équation de transfert radiatif, hypothèse usuelle en configuration de transit. La structure de température est paramétrée en supposant un rapport $d \log T / d \log P$ constant (dans le cas du code ARCiS) et une atmosphère isotherme (dans le cas du code pRT). Les espèces moléculaires absorbantes sont les suivantes : H_2O , CO , CO_2 , CH_4 , C_2H_2 , SO_2 , SO , H_2S , SiO , HCN , NH_3 et PH_3 . Le reste de l'atmosphère est considéré comme chimiquement neutre et est constitué d'hélium et d'hydrogène. Afin d'imposer les meilleures contraintes sur les modèles, les ajustements sont effectués sur la combinaison des données du MIRI LRS et celles du HST STIS en infrarouge proche (Kreidberg, Line et al., 2018). Les modèles prennent en compte la présence potentielle de nuages de silicates MgSiO_3 , SiO_2 , et SiO ce qui permet de raffiner l'ajustement sur les points de données aux longueurs d'onde supérieures à $9 \mu\text{m}$. Ces nuages sont sous forme de particules condensées de taille constante, avec une opacité propre et indépendante des autres espèces moléculaires de l'atmosphère. Les différents modèles testés sont comparés deux à deux par le facteur de Bayes, qui s'exprime comme le rapport des vraisemblances marginales (voir Sect. 3.2.4.1 du Chap. 3) et qui permet de quantifier la qualité de l'ajustement de deux modèles différents sur les mêmes données (Benneke et Seager, 2013). Nous déduisons de l'analyse du facteur de Bayes le modèle permettant le meilleur ajustement des données, présenté sur la Fig. 4.4 pour les codes de *retrieval*.

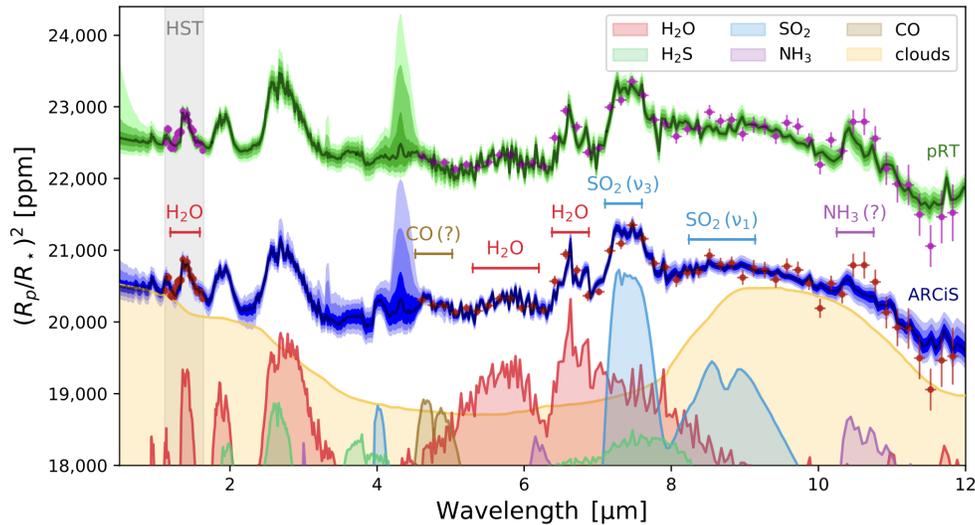


FIGURE 4.4 – Ajustement des modèles atmosphériques aux spectres de transmission JWST MIRI et HST STIS de WASP-107b présentant les principales contributions des espèces moléculaires. Les points de données sont les points en rose et rouge. Les meilleurs modèles issus de l'ajustement ARCiS (Min et al., 2020b) et petitRADTRANS (Mollière, Wardenier, van Boekel et al., 2019b) sont présentés respectivement en vert et en bleu, avec un décalage de 2000 ppm entre les deux résultats pour plus de clarté. Les intervalles de confiance à 1, 2 et 3σ sont présentés sur chacun des modèles obtenus. Les contributions moléculaires ainsi que la contribution des nuages de silicates sont présentées en bas de la figure.

Les résultats obtenus démontrent la présence de SO_2 à $\sim 9\sigma$ et de H_2O à 12σ . Les deux codes détectent également la présence de nuages de silicates en haute altitude à $\sim 9\sigma$ dont la prise en compte dans les modèles est favorisée à $\sim 7\sigma$ par rapport à des configurations de nuages plus simples ou des configurations sans nuages. Nous obtenons également des tentatives de détection de H_2S ($3-4\sigma$), de NH_3 (2σ) et de CO ($1-3\sigma$). En revanche, contrairement à ce que nous pourrions prédire pour une atmosphère ayant une température d'équilibre faible à $\sim 740 \text{ K}$ (Kreidberg, Line et al., 2018), le CH_4 n'est pas détecté dans notre analyse. La Table. 4.1 présente l'ensemble des détections et leur

significativité.

TABLE 4.1 – Significativité des détections avec les codes ARCiS et petitRADTRANS

Component	Significance [σ]		$\log_{10}(\text{VMR})$	
	ARCiS	pRT	ARCiS	pRT
H ₂ O	13.2	12.5	$-2.19^{+0.42}_{-0.26}$	$-3.81^{+0.38}_{-0.29}$
SO ₂	8.8	9.1	$-5.03^{+0.33}_{-0.18}$	$-6.72^{+0.30}_{-0.23}$
H ₂ S	4.7	3.5	$-2.65^{+0.49}_{-0.38}$	$-3.88^{+0.41}_{-0.33}$
NH ₃	2.3	3.4	$-5.47^{+0.34}_{-0.66}$	$-6.04^{+0.30}_{-0.25}$
CO	2.8	2.3	$-2.41^{+0.29}_{-0.28}$	$-4.58^{+0.40}_{-0.59}$
PH ₃	–(b)	–(a)	$-6.29^{+1.29}_{-2.24}$	$-7.60^{+0.89}_{-1.39}$
HCN	–(b)	–(a)	$-9.26^{+1.73}_{-1.63}$	$-9.19^{+1.20}_{-1.15}$
C ₂ H ₂	–(b)	–(a)	$-9.08^{+1.73}_{-1.73}$	$-9.19^{+1.19}_{-1.14}$
SiO	–(b)	–(a)	$-6.08^{+1.90}_{-3.34}$	$-9.03^{+1.47}_{-1.40}$
CH ₄	–(b)	–(b)	$-8.52^{+2.09}_{-2.09}$	$-8.83^{+1.25}_{-1.23}$
CO ₂	–(b)	–(b)	$-8.05^{+2.46}_{-2.37}$	$-8.49^{+1.79}_{-1.70}$
SO	–(b)	–(c)	$-7.38^{+2.76}_{-2.74}$	
Silicate Clouds	7.2	7.1		

(a) Inclus dans le modèle, mais non pris en compte pour le calcul de significativité, la distribution *a posteriori* suivant une loi uniforme entre 0 et 1.

(b) non favorisé par l'ajustement (Facteur de Bayes < 2).

(c) non inclus dans le modèle.

Je présente donc dans cette thèse la première détection en infrarouge moyen de SO₂ et de nuages de silicates dans l'atmosphère d'une exoplanète (Dyrek, Min et al., 2023). Une première détection de SO₂ a été confirmée en infrarouge proche à 4.05 μm (observation faite par l'instrument NIRSpec du JWST en 2022), dans l'atmosphère de la Jupiter chaude très irradiée WASP-39b dont la température d'équilibre est de ~ 1200 K (Rustamkulov et al., 2023; Alderson et al., 2023). La détection de SO₂ dans l'atmosphère de WASP-107b est donc la deuxième faite par le JWST et permet d'étendre la gamme des températures planétaires pour lesquelles elle est observée. La présence du SO₂ dans l'atmosphère d'une exoplanète ayant une température bien plus faible que WASP-39b soulève des questions quant aux conditions de température et d'irradiation ainsi qu'aux mécanismes chimiques permettant de le former. L'étape suivante consiste donc à élaborer des modèles atmosphériques dits *forward* permettant de confirmer la présence de SO₂ ainsi que l'absence de méthane dans l'atmosphère de WASP-107b et ainsi d'interpréter les résultats obtenus.

4.2.3 L'interprétation des résultats par des modèles atmosphériques

De manière générale, les modèles *forward* prennent en compte deux types de processus physiques et chimiques : les processus dits à l'*équilibre* chimique et ceux dits en *déséquilibre* qui prennent en compte les cinétiques des réactions en jeu. Deux processus principaux conduisent au déséquilibre chimique et sont susceptibles de modifier les abondances des espèces présentes dans l'atmosphère, la **photochimie** et le **quenching** induit par transport de matière. La photochimie résulte de l'absorption des rayonnements de l'étoile en haute atmosphère. Le *quenching* a lieu lorsque les processus de transport comme la convection ou l'*Eddy diffusion* prédominent sur la cinétique de

réaction (Stevenson, Harrington, Nymeyer et al., 2010; Venot et al., 2012; Moses, 2014; Venot, 2014; Drummond, Hébrard et al., 2020; Ranjan et al., 2022).

L'abondance mesurée du SO_2 dans l'atmosphère de WASP-107b ($\log_{10}(\text{SO}_2) = -5.2 \pm 0.15$) est de plusieurs ordres de grandeur plus élevée que celle attendue pour une atmosphère en équilibre chimique. En effet, les modèles de chimie à l'équilibre prédisent la présence de soufre non pas sous forme de SO_2 mais sous forme de sulfure d'hydrogène H_2S (Tsai, Malik et al., 2021), forme la plus stable des molécules soufrées. En considérant une chimie en déséquilibre grâce à l'introduction de photochimie dans les modèles, nous cherchons à prédire la formation et donc la détectabilité du SO_2 dans l'atmosphère de WASP-107b, la photochimie étant le processus à l'oeuvre dans l'atmosphère de WASP-39b (Tsai, Lee et al., 2023).

4.2.3.1 Description du modèle d'atmosphère considéré

Le modèle considéré est un modèle 1D qui résout l'équation de transfert radiatif en considérant l'absorption moléculaire et le profil de pression-température établi par Guillot, 2010a. Les paramètres planétaires et stellaires sont les suivants : le rayon de l'étoile $R_* = 0.676R_\odot$, le rayon de la planète $R_p = 0.94R_{\text{Jup}}$ et la masse de la planète $M_p = 30.51M_\oplus$ (Hejazi et al., 2023). La température d'équilibre considérée est $T_{\text{eq}} = 740$ K et la température intrinsèque de la planète est fixée à $T_{\text{int}} = 400$ K. Nous prenons en compte deux modèles distincts, un avec photochimie et l'autre sans. Dans le cas du modèle avec photochimie, le modèle de cinétique chimique pris en compte est celui du code VULCAN² (Tsai, Malik et al., 2021). Nous spécifions le flux stellaire en ultraviolets et en rayons X reçu en haute atmosphère. Les valeurs prises en compte sont obtenues à l'aide d'observations complémentaires. L'émission en proche ultraviolet de WASP-107 est mesurée avec le télescope spatial *Neil Gehrels Swift*, simultanément aux observations du JWST et l'émission en rayons X est mesurée par des observations avec le télescope spatial *XMM-Newton* faites en 2018 (Webb et al., 2020; Foster et al., 2022; Spinelli et al., 2023).

4.2.3.2 Confirmer la détection du SO_2 dans l'atmosphère de WASP-107b

L'oxygène et le soufre sont des éléments dits métalliques dont les abondances dans les atmosphères contribuent à la métallicité atmosphérique. À ce titre, le SO_2 pourrait être envisagé comme un traceur de la métallicité dans les atmosphères irradiées et réciproquement, il est possible d'ajuster la métallicité atmosphérique dans les modèles pour contraindre son abondance. Afin de déterminer les processus de formation et les conditions d'observabilité du SO_2 , nous explorons une gamme de métallicité allant de 0 à 10. La Fig. 4.5 présente les abondances obtenues avec et sans photochimie pour 4 valeurs distinctes de métallicité, ainsi que le profil de pression-température associé. Les résultats obtenus démontrent que le processus permettant de former du SO_2 en quantité détectable dans l'atmosphère de WASP-107b est la photochimie, processus schématisé sur la Fig. 4.6. WASP-107b étant une planète à très faible densité dont l'atmosphère est très enflée, les processus photochimiques peuvent opérer efficacement malgré sa faible température d'équilibre. Le SO_2 devient détectable uniquement pour des métallicités super-solaires pour lesquelles son abondance augmente. À partir d'une métallicité de 10, l'abondance du SO_2 dépasse la valeur maximale permettant d'obtenir l'amplitude de la signature spectrale observée dans les données. Ce résultat est en accord avec celui obtenu par Tsai, Lee et al., 2023 pour l'atmosphère de WASP-39b. Enfin, les modèles nous permettent d'exclure l'hypothèse d'une métallicité solaire pour l'atmosphère de WASP-107b, cas pour lequel le SO_2 n'est pas détectable dans la bande d'absorption entre 5 et 12 μm .

2. Le modèle est disponible à l'adresse suivante https://github.com/exoclimate/VULCAN/blob/master/thermo/SNCHO_photo_network.txt

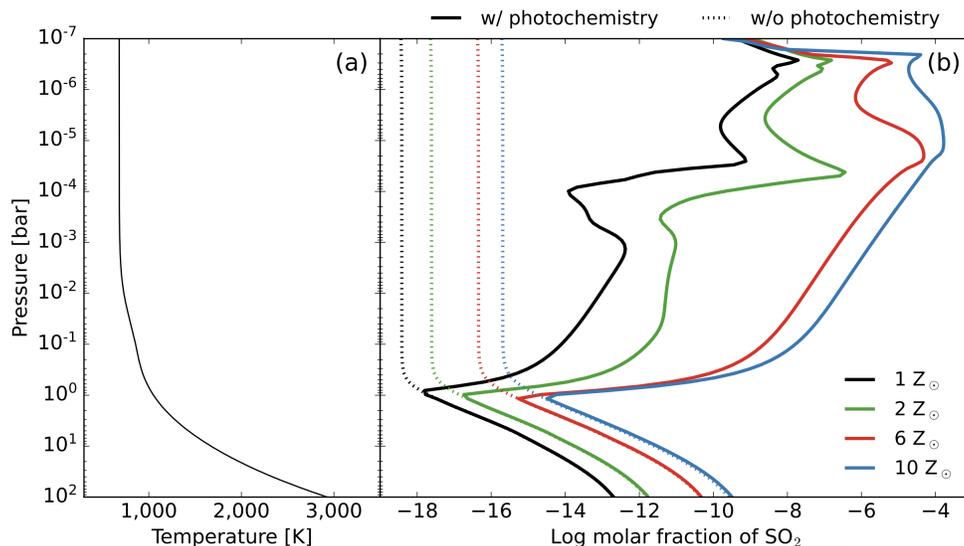


FIGURE 4.5 – Prédiction des abondances de SO_2 par modèle 1D avec et sans photochimie, pour une température intrinsèque de 400 K et un rapport C/O solaire. *À gauche* : Profil pression-température obtenu. *À droite* : Prédictions des abondances du SO_2 avec et sans photochimie, (respectivement les lignes en trait plein et les lignes en pointillés) pour quatre valeurs de métallicité (1, 2, 6, et $10 \times$ solaires; respectivement en noir, bleu clair, vert et orange).

4.2.3.3 Expliquer la non-détection de CH_4 : les hypothèses envisagées

Le second résultat majeur issu des *retrievals* est la non-détection de méthane dans la gamme de longueurs d'onde comprise entre 5 et 12 μm . Les modèles décrits ci-dessus prédisent cependant une abondance détectable de méthane en haute atmosphère (à 7.8 μm) pour une température d'équilibre de ~ 740 K et des métallicités super-solaires. Nous devons donc déterminer le ou les processus permettant d'expliquer l'absence du méthane aux altitudes sondées par les observations. Nous envisageons deux possibilités : le méthane n'est présent qu'en très faibles quantités dans l'atmosphère de WASP-107b, voire même absent; le méthane est présent dans les quantités effectivement prédites par les modèles mais dans des couches profondes de l'atmosphère et donc non détectables par nos observations (détectable à des pressions inférieures à 10^{-5} bar). Les deux paramètres qui pourraient nous permettre d'investiguer ces deux hypothèses sont le C/O et la température intrinsèque T_{int} , la température intrinsèque correspondant au flux interne de la planète (Fortney, 2018). Dans le cas où l'atmosphère serait intrinsèquement dominée par l'atome d'oxygène et non par l'atome de carbone (par formation par exemple), le C/O serait sub-solaire (Kreidberg, Line et al., 2018). Nous explorons donc une gamme de rapports C/O allant de 0.55 (valeur solaire) à 0.1 (Khorshid et al., 2022) pour déterminer les abondances de méthane associées. La seconde hypothèse est liée à l'impact de l'irradiation subie par WASP-107b sur les propriétés thermodynamiques de son atmosphère (Cooper et Showman, 2006; Showman, Fortney et al., 2009; Drummond, Hébrard et al., 2020).

L'âge de la planète étant estimée à $\sim 3.4 \pm 0.3$ Gyr (Piaulet et al., 2021) et sa masse étant relativement faible ($\sim 30.5 M_{\oplus}$), les modèles d'évolution séculaire prédisent un refroidissement rapide de la planète et donc une température intrinsèque inférieure à ~ 150 K (Baraffe, Chabrier et Barman, 2010). L'atmosphère de WASP-107b étant cependant fortement enflée, l'atmosphère profonde pourrait présenter des températures significativement plus élevées que celles prédites par les modèles conventionnels (Sarkis et al., 2021). Le mécanisme responsable d'un tel chauffage est encore un sujet de débat au sein de la communauté (Showman et Guillot, 2002; Burrows et al., 2007; Cha-

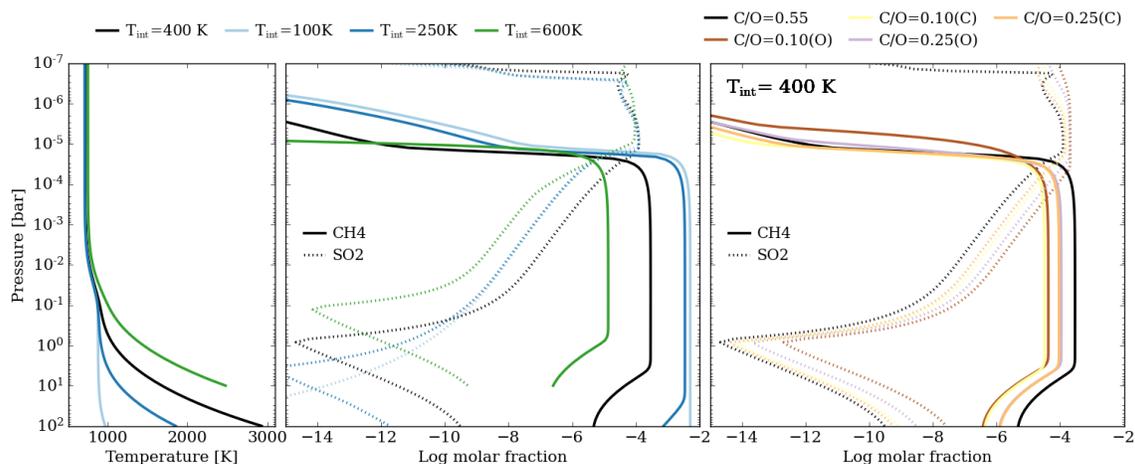


FIGURE 4.7 – Impact de la température intrinsèque et du rapport C/O sur les abondances prédites de SO_2 et de CH_4 dans l’atmosphère de WASP-107b. Le modèle de référence ($T_{\text{int}} = 400$ K, un rapport C/O solaire, une métallicité de 10x solaire) et présenté sur la Fig. 4.5 est en noir sur l’ensemble des graphes. *A gauche* : Profils pression-température pour des températures intrinsèques de 100, 250, 400 et 600 K (bleu clair, bleu foncé, noir et vert) et abondances prédites de SO_2 (en trait plein) et de CH_4 (en ligne pointillée) pour les différentes structures P-T présentées à gauche. *A droite* : Abondances prédites de SO_2 et de CH_4 pour différents rapports C/O. Comparaison avec les prédictions pour un rapport C/O solaire (de 0.55, ligne noire) pour lequel l’abondance atomique du carbone ou de l’oxygène est modifiée (indiquée par “C” ou “O” entre parenthèses).

plus élevées dans les couches profondes de l’atmosphère, un rapport C/O sub-solaire serait donc un facteur supplémentaire contribuant à la réduction de son abondance. Précisons que, contrairement au SO_2 , le méthane est détruit photochimiquement à hautes altitudes. En revanche, il pourrait subsister sous la couche de nuages de silicate en haute atmosphère. Des observations en proche infrarouge, où la couche nuageuse est plus transparente, pourraient nous aider à sonder la présence du méthane dans les couches atmosphériques plus profondes.

4.2.4 WASP-39b, un second exemple de détection de SO_2 par le MIRI LRS

En parallèle de l’étude de WASP-107b, je me suis également intéressée à des observations en infrarouge moyen faite avec le MIRI LRS de la Jupiter chaude WASP-39b. Comme évoqué précédemment, la première détection de SO_2 dans l’atmosphère d’une exoplanète a été faite en infrarouge proche (détection de la bande de combinaison $\nu_1 + \nu_3$ à $4.05 \mu\text{m}$) à l’aide des instruments NIRSpec et NIRCам du JWST, dans le cadre du programme de l’Early Release Science (ERS) du JWST en août 2022 (Alderson et al., 2023; Rustamkulov et al., 2023; Tsai, Lee et al., 2023). Cette détection étant inattendue, du temps discrétionnaire dit DDT (Director’s Discretionary Time) a été accordé par le directeur du STScI en janvier 2023 pour observer cette planète en infrarouge moyen et ainsi confirmer la détection de SO_2 . Dans le cadre de ma collaboration avec l’ERS, j’ai mené la réduction et l’analyse des données suivant la méthodologie expliquée dans le Chap. 3. La Fig. 4.8 présente le spectre obtenu. Les résidus de l’ajustement des données par le modèle de transit et un modèle de systématiques instrumentales ne présentent plus de bruit corrélé temporellement et suivent une loi normale centrée réduite. La Fig. 4.9 présente la variance d’Allan (Howe, 1995) des résidus de l’ajustement de la courbe de lumière blanche.

L’interprétation du spectre obtenu se fait suivant la méthodologie explicitée dans les Sect. 4.2.2 et 4.2.3 à l’aide de *free retrievals* et de modèles *forward*. Nous identifions trois signatures spectrales, une bande large d’absorption de

l'eau ($< 10\mu\text{m}$), et celles du SO_2 centrées en 7.7 et $8.5\mu\text{m}$ à $>3\sigma$. La détection du SO_2 à 7.7 et $8.5\mu\text{m}$ confirme les prédictions faites à partir des spectres à plus courtes longueurs d'onde et de modèles de photochimie (Tsai, Lee et al., 2023). Le spectre présente une diminution abrupte de la profondeur de transit à $10\mu\text{m}$ dont la cause est inconnue. Il est possible que la cause soit le *brighter-fatter effect* (Argyriou, Lage et al., 2023) qui a pour effet d'élargir la PSF (élargissement résultant d'une fuite inter-pixel) combiné à des effets de persistance susceptibles de présenter des changements abrupts autour de $\sim 10\mu\text{m}$. Une décorrélation de la variabilité de la position en x et y du centroïde ainsi que de la variabilité de la largeur à mi-hauteur de la PSF pourrait donc aider à diminuer les effets du *brighter-fatter effect*. Les effets de persistance quant à eux doivent être analysés bien plus en profondeur. Bien que le spectre soit très probablement impacté par ces effets, la détection du SO_2 est confirmée. Ces travaux sont aujourd'hui en cours et font l'objet d'un article en préparation (Powell et al., 2023 in prep.).

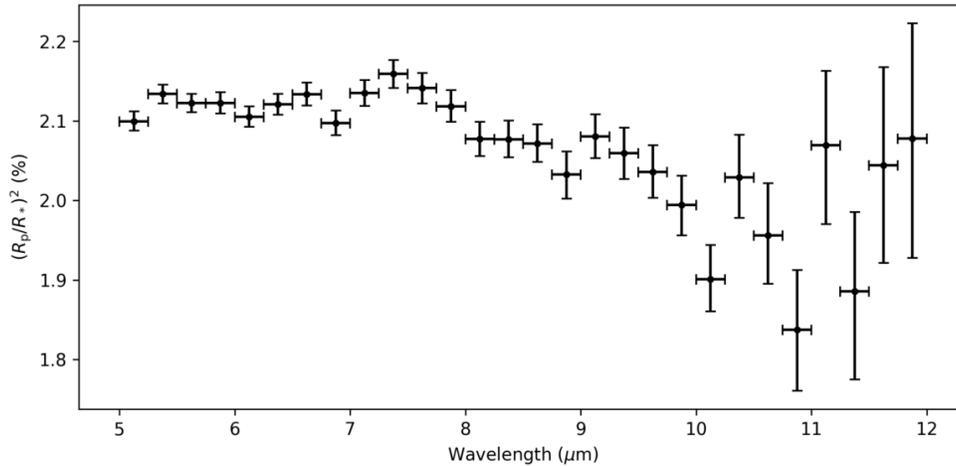


FIGURE 4.8 – Spectre en transmission de la planète WASP-39b observée avec le MIRI LRS obtenu après ajustement des 25 courbes de lumières spectrales extraites par réduction et analyse des données à l'aide des pipelines *JWST* et *Eureka!* (Bell, Ahner et al., 2022) et suivant la méthodologie explicitée dans le Chap. 3.

4.3 L'émission thermique de la rocheuse tempérée TRAPPIST-1b

Les planètes rocheuses, d'une taille équivalente à celle de la Terre, constituent un défi observationnel. Dans le cas des étoiles de type solaire, les ratios des rayons planétaire et stellaire sont très faibles, la probabilité de détection d'un transit est donc proche de 0 ($\sim 0.01\%$). L'une des solutions observationnelles est l'étude de planètes rocheuses en transit devant des étoiles de faibles masses comme les naines M dont les rayons sont un ordre de grandeur plus petit que celui du Soleil. Le transit d'une rocheuse de la taille de la Terre devant une étoile naine devient donc détectable, l'ordre de grandeur de la probabilité de détection du transit passant de ~ 0.01 à $\sim 1\%$. Les naines M les plus tardives, aussi appelées **naines ultra-froides**, sont actuellement les hôtes les plus favorables pour la caractérisation d'exoplanètes rocheuses et sont très nombreuses dans l'environnement proche de notre galaxie (Cruz et al., 2003). C'est dans l'objectif de détecter des exoplanètes rocheuses orbitant des étoiles ultra-froides que l'Université de Liège fonde le projet *SPECULOOS* (Search for habitable Planets Eclipsing ULtra-cOOL Stars) en 2011. Le premier système découvert dans le cadre de ce programme de recherche est le système TRAPPIST-1, un ensemble de 7 planètes rocheuses dont les rayons, masses et densités moyennes sont semblables à celles de la Terre (Gillon, Triaud, Demory

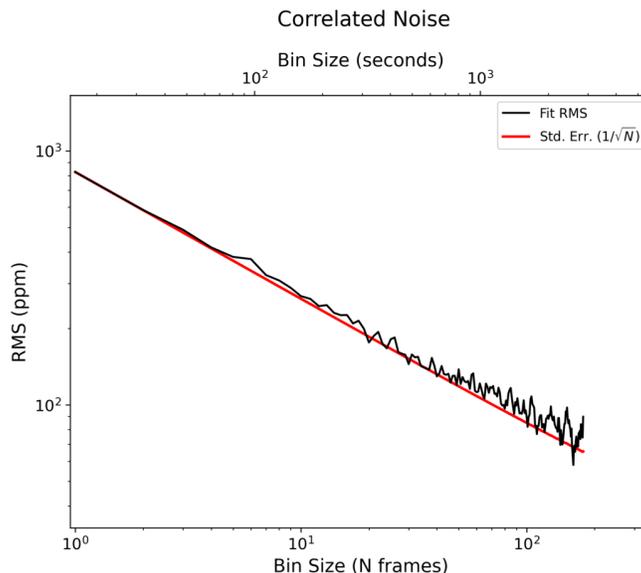


FIGURE 4.9 – Variance d’Allan (Howe, 1995) des résidus de l’ajustement de la courbe de lumière blanche de WASP-39b. Les résidus ne présentent pas de bruit corrélé temporellement après ajustement.

et al., 2017). Trois d’entre elles sont situées dans la zone habitable de l’étoile (De Wit et al., 2018). Les 7 planètes orbitent autour d’une naine ultra-froide ($T_{\text{eff}} = 2566 \text{ K}$, $M_* = 0.09 M_{\odot}$), située dans notre environnement proche (à 12 pc) et dont l’âge est de 7.6 ± 2.2 milliards d’années (Burgasser et Mamajek, 2017b). Le système est extrêmement compact, la 7^e planète orbitant l’étoile en 18 jours seulement. À titre d’exemple, l’ensemble du système pourrait tenir au sein de l’orbite de Mercure. Les planètes sont en chaîne de résonance de Laplace trois par trois, leurs périodes orbitales sont synchronisées (Gillon, Triaud, Demory et al., 2017), elles subissent donc des effets de marées considérables (Bolmont et al., 2020). La pré-séquence principale des naines M évoluées dure environ un milliard d’années et ces étoiles sont très actives en séquence principale, nous observons très fréquemment de nombreuses éruptions solaires et éjections de masse coronale à haute énergie (Baraffe, Chabrier, Allard et al., 1998; Roettenbacher et Kane, 2017; Paudel et al., 2018). Dans ces conditions, des **atmosphères** peuvent-elles subsister sur les planètes de ce système? De fait, nous nous attendons à de fortes pertes d’eau par évaporation et donc à la présence de processus de photodissociation entre les particules énergétiques de l’étoile et les molécules de l’atmosphère conduisant à un échappement atmosphérique (Luger et Barnes, 2015; Bolmont et al., 2020; Tilley et al., 2019; Airapetian et al., 2020). Nous pouvons également nous attendre à l’existence d’une atmosphère secondaire due à une activité planétaire forte comme du dégazage ou du volcanisme (Grayver et al., 2022; Krissansen-Totton et Fortney, 2022), ainsi qu’à une augmentation de la température intrinsèque des planètes par chauffage de marées. Les planètes sont toutes verrouillées par les effets de marée, ce qui peut conduire à de forts contrastes de températures jour et nuit, températures dépendant de la présence ou non d’une atmosphère et de sa nature.

De nombreuses études théoriques sur la possibilité de l’existence d’atmosphères sur ces planètes ont été menées, en considérant des atmosphères libres de toute enveloppe primitive d’hydrogène et d’hélium qui sont donc ténues ou très denses, composées d’eau, de dioxygène, de diazote ou encore de dioxyde de carbone ainsi que des processus chimiques de dessiccation (ou déshydratation) ou de réduction (Turbet, Bolmont, Leconte et al., 2018; Lincowski et al., 2018; Turbet, Bolmont, Bourrier et al., 2020; Krissansen-Totton et Fortney, 2022). En revanche, les observations photométriques ont uniquement mené à la détection des transits de ces planètes par plusieurs observatoires dont

Spitzer (Ducrot et al., 2020) mais aucune éclipse n'a jamais été détectée, faute d'observatoires ayant la sensibilité suffisante ainsi que la gamme de longueur d'onde adéquate pour sonder la présence d'éventuelles atmosphères.

4.3.1 La détection de l'éclipse de TRAPPIST-1b : réduction et analyse de données

De fait, nous pouvons nous pencher sur la question de la présence d'atmosphères sur ces planètes en étudiant la planète la plus proche : TRAPPIST-1b. En effet, TRAPPIST-1b reçoit un flux stellaire 4 fois plus élevé que la Terre n'en reçoit du Soleil, sa température d'équilibre est estimée à $T_{\text{eq}} = 391 \text{ K}$ (Koll, 2022) et son émission thermique pourrait donc être mesurable par observation avec le JWST (Acuña et al., 2023). Dans le cadre du Temps Garanti d'Observation, deux programmes (PID 1279³ et PID 1177⁴) sont dédiés à l'étude de l'émission thermique de TRAPPIST-1b par observation de l'éclipse de la planète. Les observations sont prévues non pas en spectroscopie mais en photométrie à bande large avec l'imageur de MIRI respectivement à $12.8 \mu\text{m}$ et à $15 \mu\text{m}$. L'objectif de ces deux programmes est non seulement de détecter l'émission de cette exoplanète rocheuse tempérée mais de sonder la présence de CO_2 (Lustig-Yaeger et al., 2019a). Le signal-sur-bruit pour détecter l'éclipse étant très faible, nous avons besoin de superposer 5 courbes de lumière par programme d'observation. L'ensemble des deux programmes consiste donc à étudier 10 éclipses de TRAPPIST-1b à deux longueurs d'onde différentes, de détecter l'éclipse dans les deux bandes et d'inférer des contraintes sur la température de brillance de la planète et sur l'éventuelle présence d'une atmosphère. Les observations sont échelonnées de novembre 2022 à juillet 2023 avec la réception des 5 courbes de lumière à $15 \mu\text{m}$ entre novembre et décembre 2022 et les 5 à $12.8 \mu\text{m}$ entre novembre 2022 et juillet 2023 (une en novembre et quatre en juillet). Dans cette section je me concentre sur les résultats obtenus par l'étude des observations à $15 \mu\text{m}$, le programme à $12.8 \mu\text{m}$ n'étant pas complet à l'heure où j'écris cette thèse.

Chaque jeu de données d'une observation consiste en un ensemble de 377 intégrations composées de 14 frames chacune, la durée d'une frame étant de 2.77504 s, plus élevée que celle du LRS. La durée totale de l'observation est de 4 heures, ce qui constitue un ensemble de 10 Go de données. La réduction des données issues de l'imageur est la même que celle appliquée aux données du LRS. J'ai donc mené la réduction à l'aide du pipeline `jwst` suivant la méthodologie expliquée au Chap. 3 et extrait les flux en DN s^{-1} . La Fig. 4.10 présente la première image de la courbe de lumière du 21 novembre 2022 observée avec l'imageur de MIRI.

L'analyse de données est menée à l'aide du package `Eureka!` (Bell, Ahrer et al., 2022) et suit l'ensemble des étapes décrites au Chap. 3. La méthodologie est toutefois un peu différente de celle appliquée pour les données du LRS car il s'agit ici d'extraire une série temporelle d'une unique PSF et non d'un ensemble de PSF, par photométrie d'ouverture. La soustraction du fond se fait en considérant un anneau sombre au-delà du premier anneau de la tâche de diffraction, allant des pixels 12 à 30, 0 étant le pixel le plus brillant. Cette soustraction est appliquée à chaque intégration indépendamment pour éliminer toutes variabilités temporelles du fond qui pourraient porter atteinte à la stabilité de l'observation. Les pixels défectueux sont masqués et les pixels aberrants sont filtrés à l'aide de la méthode du *sigma-clipping*, définie au Chap. 3. La PSF est ensuite extraite en considérant une ouverture optimale de 9 pixels (*full-width* ou en diamètre) contenant la tâche d'Airy. La courbe de lumière obtenue est ensuite filtrée temporellement par *sigma-clipping* également.

L'ajustement de chaque courbe de lumière individuelle est fait à l'aide du modèle d'éclipse `starry` (Luger, Agol et al., 2019), d'un modèle de systématiques instrumentales et d'une décorrélation de la variabilité de la position en x et y du centroïde ainsi que de la variabilité de la largeur à mi-hauteur de la PSF (variabilité induite par le *brighter-fatter effect* (Argyriou, Lage et al., 2023), voir Sect. 4.2.1). L'échantillonneur utilisé est le `no-u-turn` de l'algorithme `nuts` (Hoffman et Gelman, 2011). Les distributions *a priori* des paramètres suivent une loi normale centrée sur les valeurs suivantes (Agol, Dorn et al., 2021) : $R_p/R_* = 0.08590$, $R_* = 0.1192 R_\odot$, $F_p/F_* = 0 \pm 0.01$, $P = 1.5108794$ jours, $t_0 = 59890.5150313 \pm 0.005$ (BJD_TDB), $i = 89.728^\circ$, $a/R_* = 20.843$, et $e = 0$.

3. Le programme d'observation JWST 1279 est disponible ici : <https://www.stsci.edu/jwst/phase2-public/1279.pdf>

4. Le programme d'observation JWST 1177 est disponible ici : <https://www.stsci.edu/jwst/phase2-public/1177.pdf>

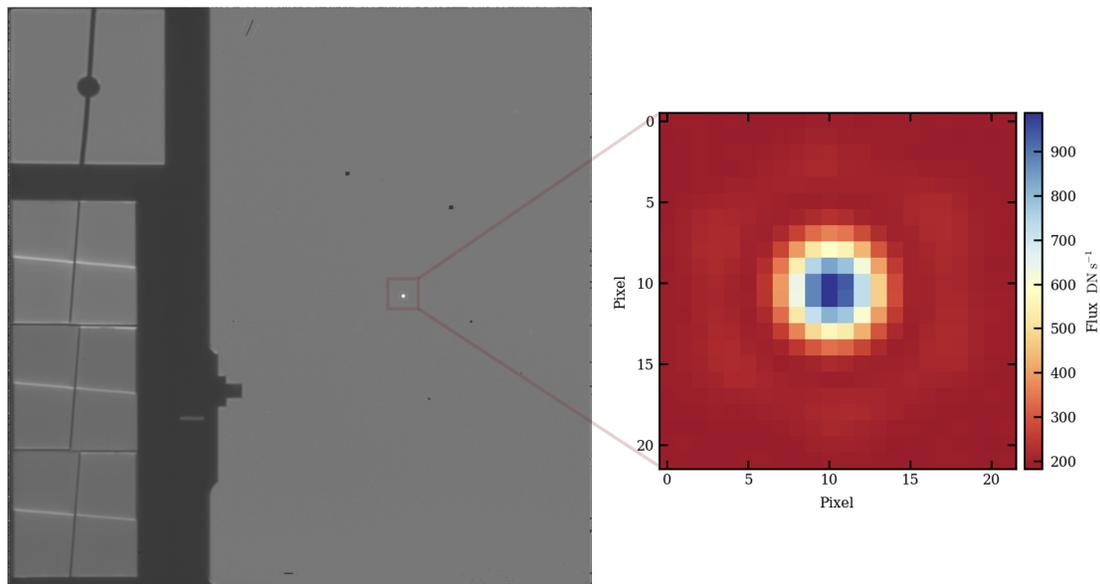


FIGURE 4.10 – Première image de TRAPPIST-1 obtenue par MIRI à $15 \mu\text{m}$ correspondant au flux de la première intégration de l’observation du 21 novembre 2022 en DN s^{-1} . *A gauche* : Image complète à $15 \mu\text{m}$, l’étoile TRAPPIST-1 étant au centre de l’image encadrée par le rectangle rouge. *A droite* : Agrandissement permettant de voir la PSF à $15 \mu\text{m}$ de TRAPPIST-1.

Les cinq ajustements indépendants de la profondeur d’éclipse F_p/F_* donnent les résultats suivants : 790 ± 210 ppm, 510 ± 210 ppm, 950 ± 170 ppm, 820 ± 220 ppm, and 829 ± 200 ppm dont la moyenne est de 795 ppm. Nous procédons ensuite à un ajustement dit joint ou *joint fit* en anglais, qui permet d’inférer des contraintes sur la profondeur d’éclipse et le temps de mi-transit t_0 à partir non pas des courbes de lumière indépendamment les unes des autres mais des 5 courbes de lumière simultanément, ce qui permet de diminuer l’incertitude de la mesure d’un facteur $\sqrt{5}$. Cet ajustement est également fait à l’aide du modèle d’éclipse *starry* (Luger, Agol et al., 2019) et de l’échantillonneur no-u-turn de l’algorithme *nuts* (Hoffman et Gelman, 2011). La Fig. 4.11 présente les 5 courbes de lumières brutes ainsi que les résultats du *joint fit*.

Le *joint fit* a permis de contraindre le temps de mi-transit avec une précision de l’ordre de la dizaine de seconde, $t_0 = 2459891.01487704778 \pm 0.00042$, et la profondeur d’éclipse avec une précision de l’ordre de la centaine de ppm, 861 ± 99 ppm. Les ajustements individuels sont moins performants et biaisent la valeur moyenne de profondeur d’éclipse qui est donc plus faible que la valeur issue du *joint fit*. La Fig. 4.12 présente la combinaison des 5 courbes de lumière ainsi que le modèle du *joint fit* corrigée des systématiques instrumentales, et correspond donc à la première détection de l’éclipse d’une rocheuse tempérée (Greene, Bell et al., 2023).

4.3.2 Mesurer la température côté jour de TRAPPIST-1b

L’étape suivante consiste à convertir la profondeur d’éclipse mesurée en une valeur de flux, correspondant au flux émis par le côté jour de la planète dans la bande passante du filtre à $15 \mu\text{m}$ ($\Delta\lambda = 3 \mu\text{m}$). Pour ce faire, nous devons estimer la valeur absolue du flux stellaire F_* . Nous activons donc l’étape de calibration absolue du pipeline *jwst* (étape 2, voir Chap. 3) et obtenons une valeur moyenne de flux stellaire $F_* = 2.589 \pm 0.078$ mJy. Le flux émis par le côté jour de la planète vaut donc $F_p = 2.229 \pm 0.263$ μJy . À partir de la loi de Planck, en considérant

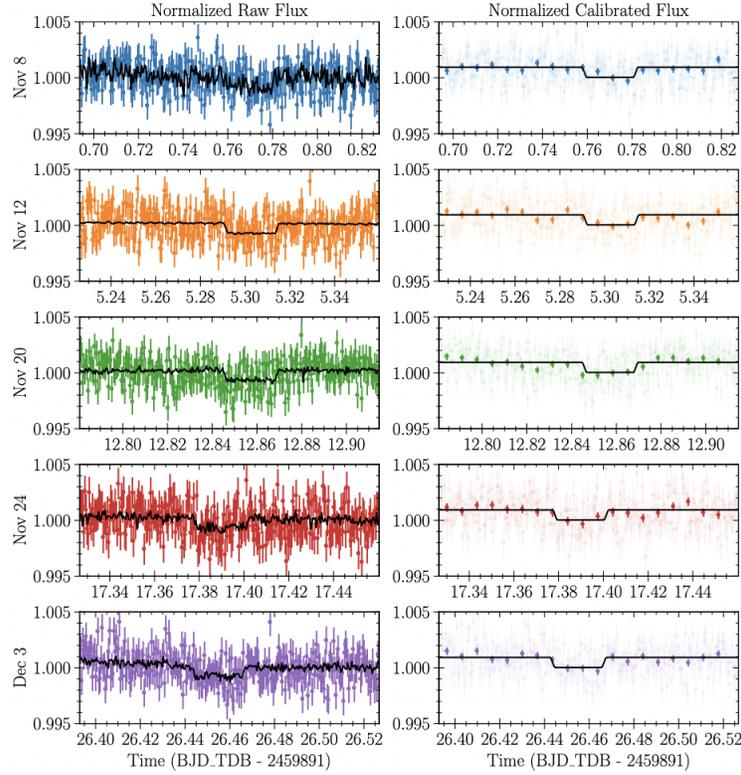


FIGURE 4.11 – 5 courbes de lumière de TRAPPIST-1b obtenue avec l’imageur de MIRI à $15 \mu\text{m}$. *A gauche* : Les courbes de lumière brutes de chacune des cinq visites (courbes en couleur) et les modèles du *joint fit* (courbes noires) qui incluent une décorrélation de la variabilité de la position en x et y du centroïde ainsi que de la variabilité de la largeur à mi-hauteur de la PSF. *A droite* : Les courbes de lumière de chacune des cinq visites moyennées sur 9 minutes (courbes en couleur) et les modèles corrigés des systématiques instrumentales. Figure venant de Greene, Bell et al., 2023.

le côté jour de la planète comme un corps noir, nous en déduisons la température de brillance $T_B = 503^{+26}_{-27}$ K.

La mesure de la température de brillance doit maintenant être comparée à la valeur théorique de la température côté jour de la planète qui s’établit à partir de l’irradiation de l’étoile, l’albédo (qui peut être interprétée comme la capacité de la planète à réfléchir le rayonnement reçu) et l’efficacité de recirculation de chaleur d’une éventuelle atmosphère entre le côté jour et le côté nuit (voir Chap. 1 pour plus de précisions sur les définitions des températures planétaires). En faisant l’hypothèse d’une absence de recirculation atmosphérique et d’un albédo nul, nous pouvons contraindre la borne haute de la température côté jour (Cowan et Agol, 2011a) de TRAPPIST-1b qui s’exprime comme

$$T_d = \left[\frac{2}{3}(1 - A) \right]^{\frac{1}{4}} T_0 \quad (4.1)$$

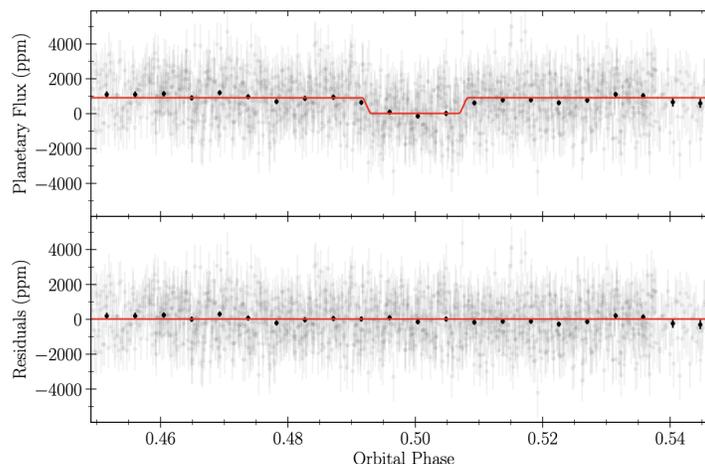


FIGURE 4.12 – *En haut* : Combinaison des 5 courbes de lumière de TRAPPIST-1b obtenue avec l’imageur de MIRI à $15 \mu\text{m}$. Les points de données sont moyennés sur 9 minutes (points noirs) et le modèle du *joint fit* est corrigée des systématiques instrumentales (courbe en rouge). La profondeur d’éclipse obtenue après ajustement est de $F_p/F_\star = 861 \pm 99$ ppm. *En bas* : Résidus de l’ajustement. Figure venant de Greene, Bell et al., 2023.

où T_0 est la température au point sub-stellaire et s’exprime comme

$$T_0 = T_{\text{eff}} \left(\frac{R_\star}{a} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.2)$$

A est l’albédo de Bond, a est le demi grand-axe, R_\star est le rayon stellaire et T_{eff} est la température effective de l’étoile (Cowan et Agol, 2011a; Agol, Dorn et al., 2021). La borne haute de la température de jour de TRAPPIST-1b est donc de $T_d = 508$ K. Cette valeur est très proche la température mesurée T_B , ce qui apporte des contraintes quant à la présence ou non d’une atmosphère, contraintes que nous discutons dans la section suivante.

4.3.3 Contraindre la présence ou non d’une atmosphère

La profondeur d’éclipse que nous mesurons est dépendante de la présence ou non d’une atmosphère et le cas échéant, de sa composition et de sa dynamique. Nous pouvons donc émettre des hypothèses relatives à la présence ou non d’une atmosphère et déterminer celles qui seraient compatibles avec la détection d’une profondeur d’éclipse de $F_p/F_\star = 861 \pm 99$ ppm et d’une température de brillance de $T_B = 503^{+26}_{-27}$ K dans la bande passante du filtre à $15 \mu\text{m}$ de MIRI. La Table 4.2 présente la compatibilité entre 7 modèles différents et les données. Nous calculons la température de brillance que nous obtiendrions en considérant ces modèles et la différence en nombres de σ avec celle effectivement mesurée. Plus la valeur σ est proche de 0, plus la compatibilité est grande.

Une atmosphère de CO_2 : Une atmosphère constituée majoritairement de CO_2 présenterait une forte signature spectrale à $15 \mu\text{m}$ (Lincowski et al., 2018; Lustig-Yaeger et al., 2019b) et abaisserait considérablement la profondeur de transit et donc la température de brillance associée à des valeurs comprises entre 290 et 303 K. Ces températures sont incompatibles avec celle mesurée qui est ~ 100 K plus élevée. Ces températures pourraient être encore plus

TABLE 4.2 – Compatibilités entre 7 modèles atmosphériques de TRAPPIST-1b et la profondeur d'éclipse mesurée.

Atmospheric Model	Source	P_{surf} (bar)	Predicted $T_{\text{B}}^{(1)}$ (K)	Difference ² (σ)
96.5% CO ₂	Lustig-Yaeger et al., 2019b	10, 92	290	-6.7
95% O ₂ + 0.5 bar CO ₂	Lustig-Yaeger et al., 2019b	10, 100	303	-6.4
Isotropic T_{eq}	Gillon, Triaud, Demory et al., 2017	N/A	400	-3.6
Gray $\tau = 1.0$	Koll, 2022	1	445	-2.1
Gray $\tau = 0.1$	Koll, 2022	0.1	495	-0.3
0 redistribution	Cowan et Agol, 2011a	0	508	0.2
0 redistrib. + internal	Krissansen-Totton et Fortney, 2022	<0.1	534	1.2

(1) Température de brillance dans la bande passante du filtre à 15 μ m de MIRI.

(2) Différence entre le flux mesuré et la prédiction selon les modèles en nombre de σ .

faibles si nous considérons une recirculation de chaleur et donc une uniformisation de la température entre le côté jour et le côté nuit.

Une redistribution uniforme de chaleur : Sans considérer la présence d'espèces absorbantes dans la bande passante des observations, la profondeur d'éclipse mesurée est dans tous les cas incompatible avec une redistribution uniforme de la chaleur, correspondant à la température d'équilibre de la planète qui vaut $T_{\text{eq}} = 400\text{K}$, $\sim 100\text{K}$ plus faible que la température mesurée.

Une paramétrisation de la distribution de chaleur : Suivant la prescription de Koll, 2022, nous considérons également une paramétrisation de la redistribution de chaleur f que nous exprimons en fonction de la pression de surface P_S , la profondeur optique τ , de la température d'équilibre de la planète T_{eq} et d'un terme générique k qui rend compte de la gravité et de la masse moléculaire moyenne et dont la valeur est proche de 1 (suivant l'Eq. 10 de l'article de Koll, 2022). De fait, l'Eq. 10 fournit les conditions limites de redistribution de chaleur, $f \rightarrow 2/3$, $P_S \rightarrow 0$ correspond au cas sans redistribution et $f \rightarrow 1/4$, $P_S \rightarrow \infty$ correspond au cas d'une distribution uniforme de chaleur. Nous considérons deux jeux de pression de surface et de profondeur optique, ($P_S = 0.1\text{bar}$; $\tau = 0.1$) et ($P_S = 1\text{bar}$; $\tau = 1$) pour lesquels nous calculons la recirculation atmosphérique, puis la température planétaire associée. Les résultats sont présentés dans la Table 4.2, respectivement Gray $\tau = 0.1$ et Gray $\tau = 1$. Les températures prédites sont respectivement de 495 et de 445 K, démontrant que nos observations sont bien plus cohérentes avec une atmosphère mince et peu de distribution de chaleur (soit le cas $\tau = 0.1$ et $P_S = 0.1$ bar).

Chauffage de marée et chauffage interne : Un modèle de couplage entre intérieur planétaire et atmosphère permet de prendre en compte le chauffage interne et le chauffage de marée en plus du chauffage par irradiation de l'étoile dans le calcul de la température de surface au point sub-stellaire T_0 (Krissansen-Totton et Fortney, 2022), à l'aide du modèle d'évolution PACMAN⁵. La moyenne des températures de surface obtenues pour différentes paramétrisations de conditions de pression de surface ($P_S < 0.1\text{bar}$) et d'albédo est de 446 K (Krissansen-Totton et Fortney, 2022). En considérant une redistribution atmosphérique nulle, la conversion de la température de surface en une température de jour nous permet d'obtenir la borne haute valant $T_{\text{day}} = 534$ K (suivant l'Eq. 4.1). Ce ré-

5. Le code est disponible sur le dépôt GitLab suivant <https://github.com/joshuakt/Trappist-evolution>

sultat démontre que la température de brillance mesurée est compatible avec une température de surface incluant du chauffage interne et du chauffage de marée mais reste inférieure à cette borne maximale.

L'émission de surface : Dans le cas où TRAPPIST-1b n'aurait pas d'atmosphère ou une atmosphère très mince et transparente, nous pourrions avoir accès à l'émission thermique des roches de surface comme le basalte et les roches silicatées : l'anorthite, l'olivine, l'enstatite, le pyroxène, le quartz et la saponite. L'émission thermique de ces roches suit une loi du corps noir dans la bande passante du filtre à $15 \mu\text{m}$ dont la température pourrait correspondre à la température de brillance mesurée (Lustig-Yaeger et al., 2019b). Des observations en spectroscopie pourraient apporter des contraintes supplémentaires sur la nature de la surface de TRAPPIST-1b.

La Fig. 4.13 présente les différents spectres correspondant aux hypothèses proposées ci-dessus. De fait, la température de brillance mesurée est élevée et à ce titre, l'hypothèse privilégiée est celle d'une planète sans atmosphère (ou *bare rock* en anglais) dont le spectre d'émission suit une loi du corps noir correspondant à une température côté jour de $T_B = 508 \text{ K}$ (courbe verte). Ce résultat n'élimine pas la possibilité de l'existence d'une atmosphère très fine et les observations complémentaires à $12.8 \mu\text{m}$ pourraient apporter de nouvelles contraintes à ce sujet.

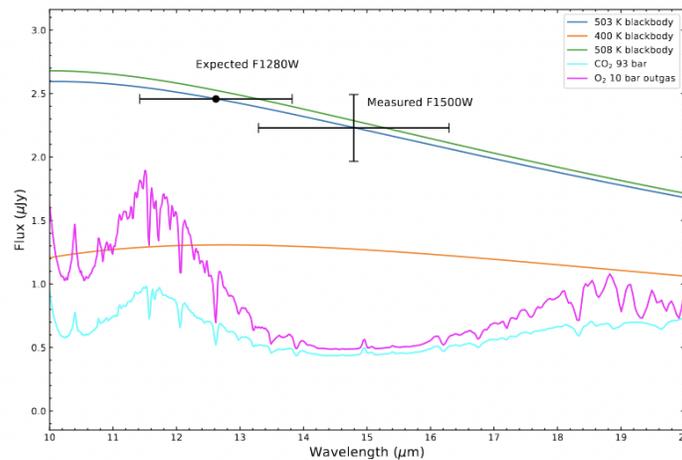


FIGURE 4.13 – Flux mesuré de TRAPPIST-1b obtenu avec l'imageur de MIRI à $15 \mu\text{m}$. Les courbes suivant une loi du corps noir sont celles correspondant à la température de brillance mesurée $T_B = 503 \text{ K}$ (courbe bleu foncée), à la température de jour prédite pour une redistribution de chaleur nulle et sans chauffage interne $T_B = 508 \text{ K}$ (courbe verte) et à la température d'équilibre $T_{\text{eq}} = 400 \text{ K}$ pour une redistribution uniforme du chauffage de l'étoile (courbe orange). En supposant que la planète émette suivant une loi du corps noir à $T_B = 503 \text{ K}$, nous prédisons également le point photométrique attendu à $12.8 \mu\text{m}$. En considérant une atmosphère de CO_2 à 93 bar et une atmosphère d' O_2 dégazé à 10 bar et de CO_2 à 0.5 bar, nous obtenons les spectres rose et bleu clair (Lincowski et al., 2018; University of Washington, 2018). Figure venant de Greene, Bell et al., 2023.

4.4 La courbe de phase de la super-Terre GJ1214b

L'émission thermique côté jour est la plus accessible par observation dans le cas des planètes verrouillées par les effets de marée. La seule connaissance de cette émission thermique côté jour ne nous permet pas d'estimer les valeurs des paramètres qui régissent la dynamique atmosphérique. De fait, comment la chaleur se redistribue-t-elle? Quelle

quantité du rayonnement de l'étoile est-elle réfléchiée par la planète ? La réponse à ces questions réside dans l'étude des émissions thermiques côté jour et côté nuit, nous permettant d'établir le bilan radiatif de la planète et d'inférer des contraintes sur les paramètres d'albédo et d'efficacité de recirculation. Pour ce faire, nous devons observer la courbe de phase de l'exoplanète. Le maximum de la courbe de phase (niveau de flux juste avant ou juste après l'éclipse) nous donne l'émission côté jour et le minimum de la courbe de phase (niveau de flux juste avant ou juste après le transit) nous renseigne sur l'émission thermique côté nuit (Parmentier et Crossfield, 2018). Enfin, la profondeur d'éclipse nous permet d'obtenir le flux de l'étoile seul. De plus amples détails sur l'étude des courbes de phase sont fournis dans le Chap. 1.

Dans le cadre du programme d'observation 1803⁶, le JWST a observé la courbe de phase de la super-Terre GJ1214b à l'aide du MIRI LRS. L'étude de cette exoplanète est extrêmement intéressante car il s'agit d'une planète de taille intermédiaire, $R_p = 2.742R_{\oplus}$ que l'on appelle super-Terre ou sub-Neptune. Les statistiques de population montrent que les planètes de taille intermédiaire se divisent en deux catégories en fonction de leur rayon, les super-Terres et les sub-Neptunes (Howard et al., 2012). La catégorie des planètes ayant un rayon plus grand (les sub-Neptunes) se distinguerait par une atmosphère dominée par l'hydrogène et l'hélium, contrairement aux super-Terres (Fulton et al., 2017) mais peu de preuves observationnelles permettent de discriminer ces deux catégories via l'étude de leur atmosphère. Dans ce contexte, GJ1214b a été observée de manière extensive en spectroscopie de transit pour déterminer sa composition atmosphérique. Cependant, aucune signature spectrale n'a jamais été détectée en raison de la présence d'aérosols de haute altitude dans l'atmosphère de la planète qui atténuent considérablement l'amplitude des signatures moléculaires visibles en proche infrarouge (Bean, Kempton et al., 2010; Croll et al., 2011; Bean, Désert et al., 2011; Désert, Kempton et al., 2011; Berta et al., 2012; Fraine et al., 2013; Kreidberg, Bean, Désert, Benneke et al., 2014; Van Eylen et al., 2018; Bean, Raymond et al., 2021; Orell-Miquel et al., 2022; Spake, Oklopčić et al., 2022). L'objectif du programme d'observation 1803 est donc d'apporter des contraintes sur la composition chimique de l'atmosphère en infrarouge moyen, sur ses propriétés d'émission et de réflexion ainsi que sur la dynamique atmosphérique.

4.4.1 Analyse des données et ajustement de modèles de transit et de courbe de phase

La courbe de phase complète de GJ1214b est observée du 20 au 22 juillet 2022. La durée totale d'observation est de ~ 41 heures, ce qui consiste en un ensemble de 21600 intégrations de 42 frames chacune. Les données ont été réduites et analysées suivant la méthodologie explicitée dans le Chap. 3. Les 550 premières intégrations présentent de forts effets de persistance avec des forts contrastes entre les différentes courbes de lumière. À ce titre, aucun ajustement de systématique n'est appliqué à cette portion de la courbe de lumière et les points sont omis de l'étape d'ajustement. Un modèle de courbe de lumière, combinant un modèle de transit et un modèle de courbe de phase incluant l'éclipse, et un modèle de systématiques instrumentales sont ajustés sur la courbe de lumière blanche et sur 14 canaux spectraux entre 5 et 12 μm issus de l'étape 4 de l'analyse. Le modèle de transit est issu du package `batman` (Kreidberg, 2015) et l'émission thermique de la planète est modélisée par une décomposition en série de Fourier (voir Sect. *Methods* de l'article de Kempton et al., 2023) que nous exprimons comme

$$F_p = E + C_1[\cos(\omega t) - 1] + D_1 \sin(\omega t) + C_2[\cos(2\omega t) - 1] + D_2 \sin(2\omega t) \quad (4.3)$$

où E est la profondeur d'éclipse qui s'exprime comme le ratio de l'émission côté jour de la planète et de celle de l'étoile $F_{p,\text{jour}}/F_*$, $w = 2\pi/P$, t est la variable de temps, o étant le temps de mi-éclipse. L'émission thermique de la planète vaut E à $t = o$. La Table 4.3 présente les propriétés de l'étoile et de la planète prise en compte pour l'analyse des données. La Fig. 4.14 présente la courbe de lumière blanche obtenue après réduction et analyse des données sur laquelle nous voyons le transit (phase 0), les éclipses (phases -0.5 et 0.5) et la modulation de la courbe de phase

6. Les détails du programme sont disponibles <https://www.stsci.edu/jwst/phase2-public/1803.pdf>

(agrandie sur le graphe du milieu). Les points en rouge présentent un moyennage en phase de 5 degrés pour plus de visibilité.

TABLE 4.3 – Paramètres stellaires et planétaires de la cible GJ1214b pris en compte pour l'analyse des données du MIRI LRS.

Parameter	Value	Source
T_{eff} (K)	3250 ± 100	Cloutier et al., 2021
$\log g$ (dex)	5.026 ± 0.040	Cloutier et al., 2021
Metallicity [Fe/H] (dex)	$+0.29 \pm 0.12$	Cloutier et al., 2021
R_{\star} (R_{\odot})	0.215 ± 0.008	Cloutier et al., 2021
M_{star} (M_{\odot})	0.178 ± 0.010	Cloutier et al., 2021
R_{p} (R_{\oplus})	$2.742^{+0.050}_{-0.053}$	Cloutier et al., 2021
M_{p} (M_{\oplus})	8.17 ± 0.43	Cloutier et al., 2021
P (days)	$1.58040433 \pm 0.00000013$	Cloutier et al., 2021
Distance (pc)	14.6427 ± 0.0372	Stassun et al., 2019
i (deg)	88.7 ± 0.1	Cloutier et al., 2021
a (AU)	0.01490 ± 0.00026	Cloutier et al., 2021
e	< 0.063	Cloutier et al., 2021

4.4.2 Inférer l'albédo de Bond de la planète

L'une des contributions majeures de ce travail est l'étude de l'albédo de Bond de la planète. L'albédo de Bond A permet de quantifier l'énergie totale réfléchiée par un corps soumis à une irradiation donnée, à toutes les longueurs d'onde et dans toutes les directions. Il est peut-être déterminé en considérant la planète en équilibre radiatif, hypothèse valable après évolution séculaire et en l'absence de flux interne. En équilibre radiatif, la quantité de flux absorbée par la planète est égale à la quantité de flux émise

$$F_A = F_E . \quad (4.4)$$

où F_A et F_E sont respectivement le flux absorbé et le flux émis. Le flux absorbé par la planète est égal au flux stellaire reçu F_{\star} modulé par le coefficient d'absorption total que l'on peut écrire comme étant $1 - A$. De plus, l'observation de la courbe de phase complète permet de mesurer les émissions côté jour $F_{\text{p,jour}}/F_{\star}$ et côté nuit $F_{\text{p,nuit}}/F_{\star}$ nous donnant ainsi une contrainte sur l'émission planétaire globale. Ainsi, l'équation d'équilibre radiatif s'exprime comme

$$(1 - A)F_{\star} = F_{\text{p,jour}} + F_{\text{p,nuit}} . \quad (4.5)$$

ce qui nous permet de contraindre la valeur de l'albédo de Bond grâce aux observations. La valeur résultante est 0.51 ± 0.06 . En comparaison, les Jupiter chaudes présentent un albédo de Bond très faible, entre ~ 0.01 et ~ 0.1 (Rowe et al., 2008; Stevenson, Desert et al., 2014; Brandeker et al., 2022). La connaissance des émissions côté jour et côté nuit nous permet également de contraindre la température de brillance côté jour et côté nuit de la planète (voir Sect. 4.3.2). En faisant l'hypothèse que la planète émet suivant une loi du corps noir, la température de brillance mesurée côté jour vaut $553 \pm 9\text{K}$, et est en excellent accord avec les mesures précédentes issues du télescope *Spitzer* qui prédisaient une valeur de 545^{+40}_{-45}K (Gillon, Demory et al., 2014). De fait, les données issues du JWST permettent de réduire les incertitudes sur la température de brillance d'environ un ordre de grandeur.

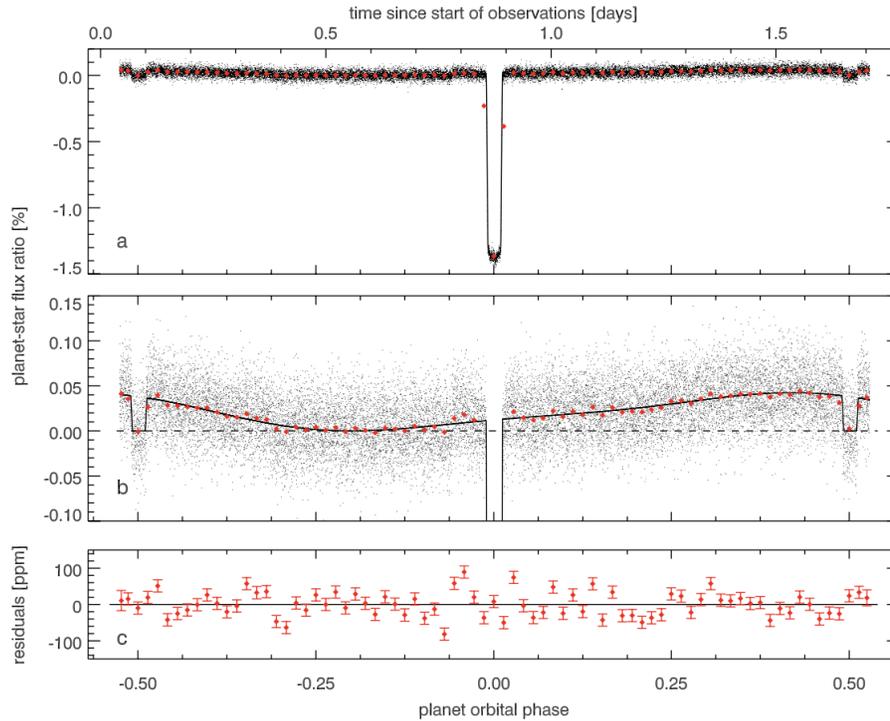


FIGURE 4.14 – Courbe de phase en lumière blanche de GJ 1214b observée avec le MIRILRS. *En haut* : Courbe de phase intégrée entre 5 et 12 μm après réduction et analyse de données. Le transit et les deux éclipses sont visibles respectivement aux phases 0 et ± 0.5 . Les points rouges correspondent à des moyennes de 5 degrés (en phase). La courbe noire est le meilleur modèle issu de l’ajustement du modèle de courbe de phase sur les données. *Au milieu* : Agrandissement de la modulation de la courbe de phase. La ligne noire en pointillé est le flux stellaire supposé constant en l’absence de toute émission de la planète. *En bas* : Résidus de l’ajustement des données par le modèle de courbe de phase. Figure venant de Kempton et al., 2023.

4.5 Conclusion et perspectives

Dans ce chapitre, j’ai présenté les résultats scientifiques obtenus pour quatre cibles distinctes : la super-Neptune très enflée WASP-107b, la rocheuse tempérée de la taille de la Terre TRAPPIST-1b, la super-Terre GJ1214b et la Jupiter chaude WASP-39b. Les résultats présentés dans ce chapitre sont issus d’observations de courbes de lumière en infrarouge moyen faite avec l’instrument MIRI du JWST, à la fois en spectroscopie et en photométrie, obtenus dans le cadre du Temps Garanti d’Observation (GTO) et de l’Early Release Science (ERS).

- Dans un premier temps, j’ai présenté l’analyse des données de la super-Neptune WASP-107b pour laquelle j’ai mené un travail de réduction minutieux me permettant de produire un des 3 spectres, qui sont en accord à 3σ . Nous avons ensuite mis en évidence la présence de SO_2 à $\sim 12\sigma$ et de nuages de silicate à $\sim 9\sigma$ grâce à des analyses de *retrievals* atmosphériques. Enfin, nous avons pu expliquer la présence du SO_2 formé par photochimie à l’aide de modèles de chimie hors équilibre et inférer des hypothèses quant à la non-détection du méthane (CH_4). Ce travail fait l’objet d’un article de consortium (Dyrek, Min et al., 2023) accepté dans la revue *Nature*;

- Dans ce contexte, j'ai également analysé les données en spectroscopie de transit de la Jupiter chaude WASP-39b pour laquelle du SO_2 avait déjà été détecté en infrarouge proche à l'aide du JWST. Mes travaux ont permis de détecter la signature spectrale du SO_2 en infrarouge moyen $>3\sigma$ et ainsi confirmer la détection en infrarouge proche. Ce travail fait l'objet d'un article en cours de rédaction (Powell et al., 2023 in prep.), qui sera soumis à la revue *Nature*;
- J'ai présenté les résultats du programme d'observation GTO de la planète rocheuse et tempérée TRAPPIST-1b. Le travail collaboratif a permis d'analyser les courbes de lumière de 5 éclipses de la planète et de détecter son éclipse d'une profondeur de 861 ± 99 ppm. L'observation de l'éclipse nous permet de contraindre l'émission thermique côté jour de la planète, ou en d'autres termes, le flux de photons émis par la planète seule. La connaissance de l'émission thermique nous renseigne sur la température de brillance côté jour ($T_B = 508^{+26}_{-26}$) et nous permet d'inférer des hypothèses sur la présence ou non d'une atmosphère. De fait, l'hypothèse privilégiée est celle d'une planète sans atmosphère dont le spectre d'émission suit une loi du corps noir correspondant à la température de brillance côté jour, résultat qui n'exclut pas la possibilité de l'existence d'une atmosphère très fine. Ce travail est pionnier, aucune émission thermique de rocheuse tempérée n'avait été détectée avant le JWST (Greene, Bell et al., 2023);
- J'ai mené l'une des analyses des données de la super-Terre GJ1214b pour laquelle nous avons pu détecter les modulations de la courbe de phase en infrarouge moyen. La connaissance des émissions thermiques côté jour et côté nuit nous ont permis d'établir le bilan radiatif de la planète et ainsi d'inférer des contraintes sur l'albédo de Bond dont la valeur est de 0.51 ± 0.06 . Ce travail ouvre la voie de l'étude de planètes de masse intermédiaire pour lesquelles peu de contraintes observationnelles avaient pu être inférées avant le JWST (Kempton et al., 2023).
- Enfin, j'ai contribué à la réduction des premières courbes de phase spectroscopiques en infrarouge moyen de la Jupiter chaude WASP-43b (Bell, Crouzet et al., 2023).

SO₂, silicate clouds, but no CH₄ detected in a warm Neptune

Achrène Dyrek^{1,*†}, Michiel Min^{2,†}, Leen Decin^{3,†}, Jeroen Bouwman⁴, Nicolas Crouzet⁵, Paul Mollière⁴, Pierre-Olivier Lagage⁶, Thomas Konings³, Pascal Tremblin⁷, Manuel Güdel^{8,4,9}, John Pye¹⁰, Rens Waters^{11,12,2}, Thomas Henning⁴, Bart Vandenbussche³, Francisco Ardevol Martinez^{13,2,14,15}, Ioannis Argyriou³, Elsa Ducrot⁶, Linus Heinke^{3,14,15}, Gwenael Van Looveren⁸, Olivier Absil¹⁶, David Barrado¹⁷, Pierre Baudoz¹⁸, Anthony Boccaletti¹⁸, Christophe Cossou¹⁹, Alain Coulais^{6,20}, Billy Edwards², René Gastaud¹⁹, Alistair Glasse²¹, Adrian Glauser⁹, Thomas P. Greene²², Sarah Kendrew²³, Oliver Krause⁴, Fred Lahuis², Michael Mueller¹³, Goran Olofsson²⁴, Polychronis Patapis⁹, Daniel Rouan¹⁷, Pierre Royer³, Silvia Scheithauer⁴, Ingo Waldmann²⁵, Niall Whiteford²⁶, Luis Colina¹⁷, Ewine F. van Dishoeck⁵, Göran Östlin²⁷, Tom P. Ray²⁸, Gillian Wright²⁹

[†]Equal contribution is indicated by shared first-authorship.

¹Université Paris Cité, Université Paris-Saclay, CEA, CNRS, AIM, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

²SRON Netherlands Institute for Space Research, Niels Bohrweg 4, 2333 CA Leiden, the Netherlands

³Institute of Astronomy, KU Leuven, Celestijnenlaan 200D, 3001 Leuven, Belgium

⁴Max-Planck-Institut für Astronomie (MPIA), Königstuhl 17, 69117 Heidelberg, Germany

⁵Leiden Observatory, Leiden University, P.O. Box 9513, 2300 RA Leiden, the Netherlands

⁶Université Paris-Saclay, Université Paris Cité, CEA, CNRS, AIM, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

⁷Université Paris-Saclay, UVSQ, CNRS, CEA, Maison de la Simulation, 91191, Gif-sur-Yvette, France.

⁸Department of Astrophysics, University of Vienna, Türkenschanzstrasse 17, 1180 Vienna, Austria

⁹ETH Zürich, Institute for Particle Physics and Astrophysics, Wolfgang-Pauli-Strasse 27, 8093 Zürich, Switzerland

¹⁰School of Physics & Astronomy, Space Research Centre, Space Park Leicester, University of Leicester, 92 Corporation Road, Leicester, LE4 5SP, UK

¹¹Department of Astrophysics/IMAPP, Radboud University, PO Box 9010, 6500 GL Nijmegen, the Netherlands

¹²HFML - FELIX. Radboud University PO box 9010, 6500 GL Nijmegen, the Netherlands

¹³Kapteyn Institute of Astronomy, University of Groningen, Landleven 12, 9747 AD Groningen, the Netherlands

¹⁴Centre for Exoplanet Science, University of Edinburgh, Edinburgh, EH9 3FD, UK

¹⁵School of GeoSciences, University of Edinburgh, Edinburgh, EH9 3FF, UK

¹⁶STAR Institute, Université de Liège, Allée du Six Août 19c, 4000 Liège, Belgium

38 ¹⁷*Centro de Astrobiología (CAB), CSIC-INTA, ESAC Campus, Camino Bajo del Castillo s/n,*
39 *28692 Villanueva de la Cañada, Madrid, Spain*

40 ¹⁸*LESIA, Observatoire de Paris, CNRS, Université Paris Diderot, Université Pierre et Marie Curie,*
41 *5 place Jules Janssen, 92190 Meudon, France*

42 ¹⁹*Université Paris-Saclay, CEA, Département d'Electronique des Détecteurs et d'Informatique*
43 *pour la Physique, 91191, Gif-sur-Yvette, France.*

44 ²⁰*LERMA, Observatoire de Paris, Université PSL, Sorbonne Université, CNRS, Paris, France*

45 ²¹*UK Astronomy Technology Centre, Royal Observatory, Blackford Hill, Edinburgh EH9 3HJ,*
46 *UK*

47 ²²*Space Science and Astrobiology Division, NASA's Ames Research Center, M.S. 245-6, Moffett*
48 *Field, 94035, CA, USA*

49 ²³*European Space Agency, Space Telescope Science Institute, Baltimore, MD, USA*

50 ²⁴*Department of Astronomy, Stockholm University, AlbaNova University Center, 10691 Stock-*
51 *holm, Sweden*

52 ²⁵*Department of Physics and Astronomy, University College London, Gower Street, WC1E 6BT,*
53 *UK*

54 ²⁶*Department of Astrophysics, American Museum of Natural History, New York, NY 10024, USA*

55 ²⁷*Department of Astronomy, Oskar Klein Centre, Stockholm University, 106 91 Stockholm, Swe-*
56 *den*

57 ²⁸*School of Cosmic Physics, Dublin Institute for Advanced Studies, 31 Fitzwilliam Place, Dublin,*
58 *D02 XF86, Ireland*

59 ²⁹*UK Astronomy Technology Centre, Royal Observatory Edinburgh, Blackford Hill, Edinburgh*
60 *EH9 3HJ, UK*

61 **WASP-107b is a warm (~ 740 K) transiting planet with a Neptune-like mass of $\sim 30.5 M_{\oplus}$**
62 **and Jupiter-like radius of $\sim 0.94 R_{\text{J}}$ ^{1,2} whose extended atmosphere is eroding³. Previous**
63 **observations showed evidence for water vapour and a thick high-altitude condensate layer**
64 **in WASP-107b's atmosphere^{4,5}. Recently, photochemically produced sulphur dioxide (SO_2)**
65 **was detected in the atmosphere of a hot ($\sim 1,200$ K) Saturn-mass planet from transmission**
66 **spectroscopy near $4.05 \mu\text{m}$ ^{6,7}, but for temperatures below $\sim 1,000$ K sulphur is predicted to**
67 **preferably form sulphur allotropes instead of SO_2 ⁸⁻¹⁰. Here we report the 9σ -detection of**
68 **two fundamental vibration bands of SO_2 , at $7.35 \mu\text{m}$ and $8.69 \mu\text{m}$, in the transmission spec-**
69 **trum of WASP-107b using the Mid-Infrared Instrument (MIRI) of the JWST. This discov-**
70 **ery establishes WASP-107b as the second irradiated exoplanet with confirmed photochem-**
71 **istry, extending the temperature range of exoplanets exhibiting detected photochemistry**
72 **from $\sim 1,200$ K down to ~ 740 K. Additionally, our spectral analysis reveals the presence of**
73 **silicate clouds, which are strongly favoured ($\sim 7\sigma$) over simpler cloud setups. Furthermore,**
74 **water is detected ($\sim 12\sigma$), but methane is not. These findings provide evidence of disequilib-**
75 **rium chemistry and indicate a dynamically active atmosphere with a super-solar metallicity.**

76 WASP-107b was observed with JWST MIRI on 19–20 January 2023. The SLITLESS–
77 PRISM subarray of the low-resolution spectrometer was used, offering a spectral resolution rang-

78 ing from 30 and 100 over a wavelength span of 4.61 to 11.83 μm . We performed three independent
79 data reductions using the `CASCADE`¹¹, `Eureka!`¹², and `TEATRO` packages; see Supplementary
80 Information (SI). Each method extracted 51 spectroscopic light curves. For all channels, we ob-
81 tained a minimal level of correlated noise in the residuals, consistent with normally distributed
82 noise. The 1σ error displayed a minimum of 80 ppm at 7.5 μm . The transmission spectra derived
83 from the different reductions, shown in Figure 1 and tabulated in Extended Data Table 1, are within
84 3σ agreement and 95% of the points within 2σ ; see SI.

85 We performed atmospheric retrievals using two independent frameworks, `ARCIS`¹³ and
86 `petitRADTRANS` (`pRT`)¹⁴, including both our JWST data and previous near-infrared (1.121 –
87 1.629 μm) HST data⁴. Free abundance retrievals were run including the following species: H_2O ,
88 CO , CO_2 , CH_4 , C_2H_2 , SO_2 , SO , H_2S , SiO , HCN , NH_3 , and PH_3 . The remaining atmosphere
89 consisted of H_2 and He . A variety of cloud models were tested, ranging from cloud-free to more
90 complex models, the latter focusing mostly on silicate clouds (MgSiO_3 , SiO_2 , and SiO); see SI.

91 Figure 2 shows the best fit to the data, including main contributions from molecular species
92 and clouds to the spectrum. The figure presents the results based on the `CASCADE` package, but
93 our conclusions are consistent across the three data reductions. Both retrieval codes detect SO_2
94 at $\sim 9\sigma$, H_2O at $\sim 12\sigma$, and the presence of high-altitude clouds at $\sim 9\sigma$, with a $\sim 7\sigma$ preference
95 for silicate clouds over more simple cloud setups. We also tentatively detect H_2S ($\sim 4\sigma$), NH_3
96 ($\sim 2 - 3\sigma$), and CO ($\sim 2 - 3\sigma$), although the CO detection relies on the first three spectral points and
97 requires confirmation at shorter wavelengths. CH_4 is not detected, with an upper limit of its volume
98 mixing ratio (VMR) being a few times 10^{-6} . Table 1 presents the detection significance and VMR
99 for each species. Due to differences in cloud structure setups, the absolute VMRs are different
100 between the two retrieval codes. We therefore focus the discussion on the detection significance
101 and relative abundances.

102 The MIRI data of WASP-107b presents the mid-infrared discovery of SO_2 in an exoplanet
103 atmosphere. Both the ν_1 symmetric stretch and the ν_3 asymmetric stretch vibration bands of SO_2
104 (with fundamental frequency at 8.69 μm and 7.35 μm , respectively¹⁵) are detected (Figure 1 and
105 Figure 2). Recently, the ($\nu_1 + \nu_3$) combination band of SO_2 was assigned as carrier of a spectral
106 feature near 4.05 μm detected in the JWST NIRspec spectrum of WASP-39b^{6,16}, a hot ($\sim 1,200$ K)
107 irradiated Saturn-mass exoplanet. The MIRI detection of SO_2 in WASP-107b extends the range of
108 exoplanet temperatures with detected SO_2 from $\sim 1,200$ K down to ~ 740 K.

109 The measured VMR of SO_2 in WASP-107b (see Table 1) is several orders of magnitude
110 higher than expected for chemical equilibrium, which predicts H_2S to be the dominant sulphur-
111 bearing molecule for Neptune-like planets⁹. Disequilibrium processes can drive abundances con-
112 siderably away from chemical equilibrium, with photochemistry and atmospheric transport being
113 the dominant mechanisms¹⁷. Notably, the SO_2 feature observed in WASP-39b has been attributed
114 to photochemical processes occurring within its atmosphere¹⁰. Indeed, UV irradiation initiates
115 the photodissociation of H_2O , yielding H and OH radicals. These OH radicals are key for oxidis-
116 ing sulphur that is liberated from H_2S ¹⁰. However, these models¹⁰ predict that SO_2 would not be
117 detectable using JWST MIRI for a planet with an equilibrium temperature of ~ 740 K. This is in

118 contrast with our detection of SO₂ in the atmosphere of WASP-107b.

119 To unravel the production paths of SO₂ in WASP-107b, we computed a grid of disequilib-
120 rium models (see SI). To ensure an accurate consideration of the upper-atmosphere chemistry, we
121 observed – contemporaneously with the JWST observations – the Near-Ultraviolet (NUV) emis-
122 sion of the host star WASP-107 with *Neil Gehrels Swift*. Additionally, we reanalysed the 2018
123 X-ray emission observed with *XMM-Newton* (see SI). Figure 3 provides evidence that only models
124 incorporating photochemistry in combination with a super-solar metallicity predict a detectable
125 level of SO₂ in WASP-107b. Key disparities from prior predictions^{10,17} stem from UV radiation
126 and gravity. Previous models adopted a gravity of 1,000 cm/s²¹⁰ and 2,140 cm/s²¹⁷, while WASP-
127 107b’s gravity is ~ 260 cm/s². Moreover, the NUV flux is a factor ~ 200 lower for WASP-107b than
128 for WASP-39b, and a factor $\sim 100 - 1,000$ lower in the FUV (see SI). A lower gravity, an overall
129 decreased UV flux, and a low FUV/NUV ratio collectively contribute to the increased formation
130 of SO₂; see Extended Data Figure 1.

131 The overarching scenario that unfolds is that the initiating pathways for SO₂ formation in
132 WASP-107b are twofold. First, H₂O photodissociation in upper layers at pressures $\lesssim 10^{-5}$ bar
133 generates atomic H and OH radicals, leading to sequential oxidation of sulphur liberated from H₂S.
134 Second, in the pressure range of $\sim 10^{-5} - 1$ bar, photolysis of various abundant molecules – beyond
135 just H₂O – provides free atoms and radicals, partially redistributed through eddy diffusion. This
136 initiates a cascade of thermochemical reactions that progressively yield sufficient OH radicals for
137 SO₂ oxidation. Given the fact that a large fraction of these reactions are temperature-independent
138 and barrierless, the equilibrium temperature is not the sole determinant for SO₂ formation. As long
139 as the UV irradiation and FUV/NUV ratio remain moderate and the gravity is low, these processes
140 lead to detectable SO₂ levels even at the low equilibrium temperature of WASP-107b.

141 The sensitivity to metallicity can be attributed to the larger abundance of sulphur and OH
142 radicals at higher metallicities. At a metallicity of $6\times$ solar, the SO₂ spectral features contribute
143 partially to the $7.8\ \mu\text{m}$ feature and dominate at $\gtrsim 10\times$ solar (see Extended Data Figure 2). For
144 metallicities $\geq 6\times$ solar, the gas-phase photochemical models predict a SO₂ VMR above $\sim 5\times 10^{-7}$
145 at pressures between $10^{-7} - 10^{-4}$ bar (see Figure 3). This result is corroborated by the retrieval
146 outcomes, which show that the spectral contribution of SO₂ predominantly comes from the region
147 above the high-altitude cloud layer (situated at pressures of a few times 10^{-5} bar; see Extended
148 Data Figure 4). This establishes SO₂ as a key diagnostic for the atmospheric metallicity in exo-
149 planet atmospheres.

150 At super-solar metallicity, our models also predict a detectable CH₄ feature (see Extended
151 Data Figure 2). The confirmation of the HST CH₄ non-detection⁴ in the MIRI wavelength range
152 raises questions regarding the predicted predominance of CH₄ in the atmosphere^{18,19}. One po-
153 tential reason for the non-detection of CH₄ is that it is hidden by the high-altitude cloud layer.
154 In contrast to SO₂, CH₄ is photochemically destroyed at high altitudes, i.e. above the cloud layer
155 (see Extended Data Figure 3). Another explanation for the non-detection of CH₄ is the influence
156 of the strong irradiation experienced by WASP-107b, which can significantly impact the thermo-
157 dynamical properties of its atmosphere^{20–22}. WASP-107b is highly inflated, pointing to a deep

158 atmosphere that has significantly higher temperatures^{23–26} than those predicted by conventional
159 models. The latter suggest an intrinsic heat flux (σT_{int}^4 , with σ the Boltzmann constant and T_{int} the
160 intrinsic temperature) with corresponding T_{int} of 150 K²⁷. We computed chemical models with
161 different intrinsic temperatures ranging from 250–600 K to reproduce a hot deep atmosphere (see
162 Extended Data Figure 3). Our results show that the CH_4 molar fraction in the atmospheric lay-
163 ers probed by our MIRI observations is reduced by more than 3 orders-of-magnitude when we
164 increase T_{int} from 250 to 600 K. Interestingly, the SO_2 abundance in the detectable upper atmo-
165 sphere is almost unaffected since sulphur species do not quench in deep regions⁹ (see Extended
166 Data Figure 3). Lowering the C/O ratio from solar ($=0.55$) to 0.10 yields an additional decrease
167 of the CH_4 abundance by a factor ~ 15 (see Extended Data Figure 3).

168 The presence of silicate clouds in the atmospheres of strongly irradiated planets has been
169 predicted for a long time²⁸. Although a hint of silicate emission has been claimed for one single
170 object²⁹, clear observational evidence has been lacking. Recently, silicate clouds were detected in
171 a young, self-luminous planet at large separation from its host star³⁰. The MIRI data of WASP-
172 107b present the detection of the $10\ \mu\text{m}$ Si-O stretching mode of solid silicate particles. The
173 retrieval models favour a high-altitude cloud layer composed of small (sub-micron) amorphous
174 silicate particles. At the pressure levels and temperatures where we find the cloud layer, gas phase
175 SiO can nucleate and condensate efficiently to form small solid state mineral particles³¹. However,
176 according to the traditional picture on cloud formation, these particles would eventually rain down
177 to deeper, hotter layers of the atmosphere, depleting the relatively cold upper atmosphere from gas
178 phase SiO. In the deeper, hotter layers, the particles evaporate, allowing the gas phase material to
179 mix and serve as building blocks for new nucleation/condensation cycles. Thus, we can conclude
180 that the presence of silicate clouds at such high altitudes in a relatively cold part of the atmosphere
181 is another indication of strong mixing from either a hot inner atmosphere (similar to the finding
182 related to CH_4) or potentially from the intensely irradiated hot dayside.

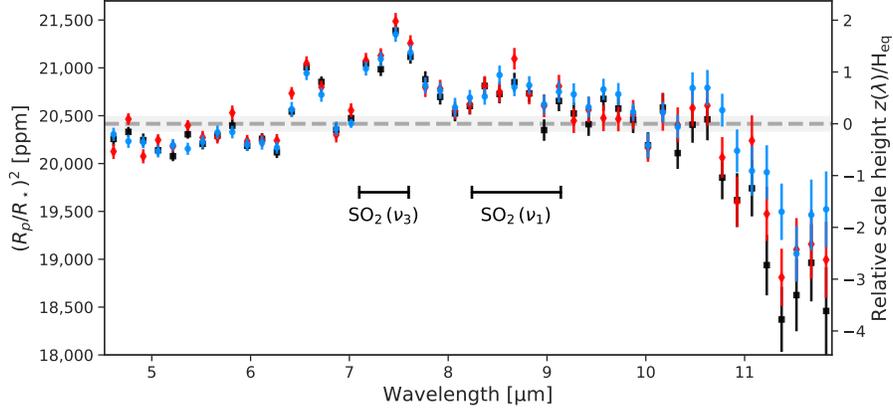


Figure 1: **JWST MIRI transmission spectrum of WASP-107b.** Comparison of the JWST MIRI transmission spectra obtained from the three independent reductions considered in this work (coloured points, with $1\text{-}\sigma$ error bars). The blue dots show the results from the `CASCADE` code, the red dots using the `Eureka!` package and the black dots are from the `TEATRO` routines. The thick dashed grey line indicates the band-averaged transit depth from the `CASCADE` analysis at 20,463 ppm and the shaded area the 95% confidence interval of 39 ppm. The right y-axis gives the planetary spectrum in units of atmospheric scale height of the planetary atmosphere, assuming a hydrogen dominated atmosphere. The spectra have a constant wavelength bin width, corresponding to a spectral resolution of 50 at $7.5\ \mu\text{m}$. The two horizontal bars indicate the ν_1 symmetric stretch and ν_3 asymmetric stretch vibration bands of SO_2 .

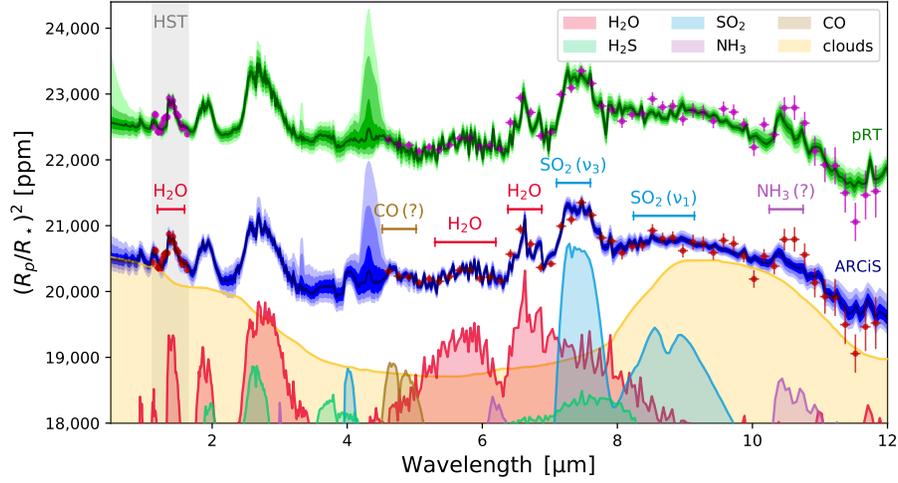


Figure 2: **Transmission spectrum of WASP-107b with key contributions.** The (red and pink) points with $1\text{-}\sigma$ error bars correspond to the measured JWST MIRI CASCAde transit depths of the spectrophotometric light curves at different wavelengths. The (red and pink) points in the area indicated by the grey band are from HST. The median spectrum model predicted from ARCIS¹³ retrievals is shown in blue and from petitRADTRANS (pRT)¹⁴ in green (offset by 2,000 ppm for clarity). The shaded regions of the model spectra correspond to the 1-,2-,3- σ credibility envelopes predicted by the retrievals. The bottom part of the figure shows the silicate cloud and molecular contributions for those gases inferred by our analysis of WASP-107b's spectrum.

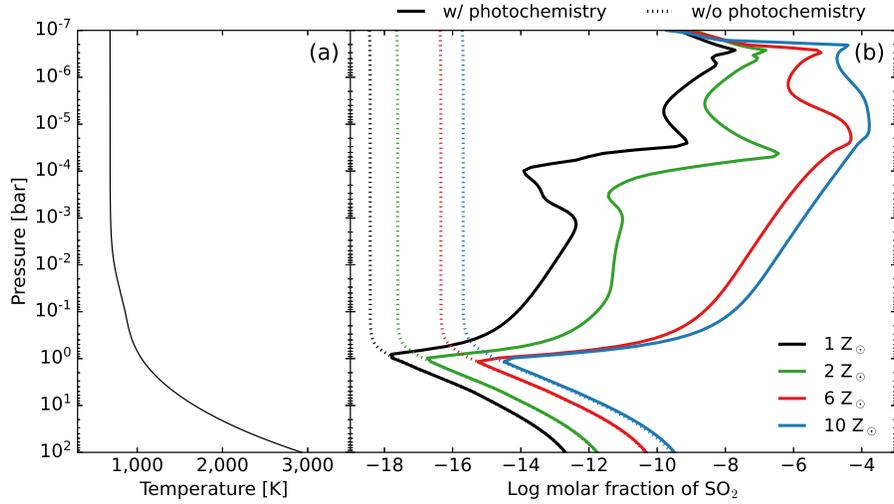


Figure 3: **Predicted SO_2 molar fraction.** Panel (a): Adopted temperature-pressure (T - P) profile for WASP-107b following the analytical equation of ref. ³²; see SI. Panel (b): Predicted SO_2 molar fraction for four values of the metallicity (1, 2, 6, and $10 Z_{\odot}$; in black, green, red, and blue, respectively) for models with (full line) and without (dotted line) the inclusion of photochemistry. Predictions are calculated for a model with an intrinsic temperature of 400 K, a solar C/O ratio, and a $\log_{10}(K_{zz}, \text{cgs}) = 10$.

Table 1: **Outcome of the retrieval analyses.** Given are the detection significance and volume mixing ratios (VMR) of the various components in the ARCiS and petitRADTRANS (pRT) retrieval analysis.

Component	Significance [σ]		$\log_{10}(\text{VMR})$	
	ARciS	pRT	ARciS	pRT
H ₂ O	13.2	12.5	-2.19 ^{+0.42} _{-0.26}	-3.81 ^{+0.38} _{-0.29}
SO ₂	8.8	9.1	-5.03 ^{+0.33} _{-0.18}	-6.72 ^{+0.30} _{-0.23}
H ₂ S	4.7	3.5	-2.65 ^{+0.49} _{-0.38}	-3.88 ^{+0.41} _{-0.33}
NH ₃	2.3	3.4	-5.47 ^{+0.34} _{-0.66}	-6.04 ^{+0.30} _{-0.25}
CO	2.8	2.3	-2.41 ^{+0.29} _{-0.28}	-4.58 ^{+0.40} _{-0.59}
PH ₃	-(^b)	-(^a)	-6.29 ^{+1.29} _{-2.24}	-7.60 ^{+0.89} _{-1.39}
HCN	-(^b)	-(^a)	-9.26 ^{+1.73} _{-1.63}	-9.19 ^{+1.20} _{-1.15}
C ₂ H ₂	-(^b)	-(^a)	-9.08 ^{+1.73} _{-1.73}	-9.19 ^{+1.19} _{-1.14}
SiO	-(^b)	-(^a)	-6.08 ^{+1.90} _{-3.34}	-9.03 ^{+1.47} _{-1.40}
CH ₄	-(^b)	-(^b)	-8.52 ^{+2.09} _{-2.09}	-8.83 ^{+1.25} _{-1.23}
CO ₂	-(^b)	-(^b)	-8.05 ^{+2.46} _{-2.37}	-8.49 ^{+1.79} _{-1.70}
SO	-(^b)	-(^c)	-7.38 ^{+2.76} _{-2.74}	
Silicate Clouds	7.2	7.1		

(^a) included in retrieval, but not tested for detection significance because posterior indicates an upper limit.

(^b) not favoured (Bayes factor < 2).

(^c) not included.

184 **Supplementary Information** is linked to the online version of the paper at www.nature.com/nature.

185 **Data availability** The JWST MIRI data presented in this paper are part of the JWST MIRI GTO program
186 (Program identifier (PID) 1280; P.I. P.O. Lagage). The JWST data will be publicly available in the Barbara
187 A. Mikulski Archive for Space Telescopes (MAST; <https://archive.stsci.edu/>) after January
188 20, 2024, and can be found either using the program identifier or using the Data Object Identifier (DOI):
189 <https://doi.org/10.17909/as3s-x893>. The DOI link can also be used to retrieve the publicly
190 available HST WFC3 data used in this paper from MAST. The NUV data are in an online publicly-accessible
191 archive: <https://heasarc.gsfc.nasa.gov/cgi-bin/W3Browse/swift.pl>. The HST data
192 are available in the MAST archive and can be found using DOI: <https://doi.org/10.17909/as3s-x893>.
193 The XMM X-ray data archive is available at [https://nxsa.esac.esa.int/nxsa-web](https://nxsa.esac.esa.int/nxsa-web/#search)
194 [#search](https://nxsa.esac.esa.int/nxsa-web/#search).

195 **Code availability** The codes used in this publication to extract, reduce, and analyse the data are as follows.
196 The data reduction pipeline `JWST` can be found at [https://jwst-pipeline.readthedocs.io](https://jwst-pipeline.readthedocs.io/en/latest/)
197 [/en/latest/](https://jwst-pipeline.readthedocs.io/en/latest/). The data analysis codes Eureka!, CASCADE, and TEATRO can be found respectively
198 at <https://eurekadocs.readthedocs.io/en/latest/>, <https://gitlab.com/jbouwman/CASCADE>, and <https://github.com/ncrouzet/TEATRO>. The CASCADE-filtering,
199 and CASCADE-jitter sub-packages can be found, respectively, at <https://gitlab.com/jbouwman/CASCADE-filtering>, and <https://gitlab.com/jbouwman/CASCADE-jitter>.
200 The atmospheric model codes used to fit the data can be found at <https://www.exoclouids.com/>
201 for the ARCiS-code¹³ and at <https://petitradtrans.readthedocs.io/en/latest/> for
202 the petitRADTRANS-code¹⁴. The XSPEC package³³ is available at [https://heasarc.gsfc.n](https://heasarc.gsfc.nasa.gov/xanadu/xspec/)
203 [asa.gov/xanadu/xspec/](https://heasarc.gsfc.nasa.gov/xanadu/xspec/). The HEASoFT package (including the Swift UVOT tools) is available at
204 <https://heasarc.gsfc.nasa.gov/lheasoft/download.html> (version 6.31.1 was used
205 in our work). The NUV *Swift*-project pipeline is available at [https://swift.gsfc.nasa.gov/qu](https://swift.gsfc.nasa.gov/quicklook/swift_process_overview.html)
206 [icklook/swift_process_overview.html](https://swift.gsfc.nasa.gov/quicklook/swift_process_overview.html). The VULCAN chemical network can be found at
207 [https://github.com/exoclimate/VULCAN/blob/master/thermo/SNCHO_photo_netw](https://github.com/exoclimate/VULCAN/blob/master/thermo/SNCHO_photo_network.txt)
208 [ork.txt](https://github.com/exoclimate/VULCAN/blob/master/thermo/SNCHO_photo_network.txt).
209
210

211 **Inclusion & Ethics** All authors have committed to upholding the principles of research ethics & inclusion
212 as advocated by the Nature Portfolio journals.

213 **Acknowledgments** This work is based on observations made with the NASA/ESA/CSA JWST. The data
214 were obtained from the Mikulski Archive for Space Telescopes at the Space Telescope Science Institute,
215 which is operated by the Association of Universities for Research in Astronomy, Inc., under NASA con-
216 tract NAS 5-03127 for JWST. These observations are associated with program 1280. MIRI draws on the
217 scientific and technical expertise of the following organisations: Ames Research Center, USA; Airbus De-
218 fence and Space, UK; CEA-Irfu, Saclay, France; Centre Spatial de Liège, Belgium; Consejo Superior de
219 Investigaciones Científicas, Spain; Carl Zeiss Optronics, Germany; Chalmers University of Technology,
220 Sweden; Danish Space Research Institute, Denmark; Dublin Institute for Advanced Studies, Ireland; Eu-
221 ropean Space Agency, Netherlands; ETCA, Belgium; ETH Zurich, Switzerland; Goddard Space Flight

222 Center, USA; Institut d’Astrophysique Spatiale, France; Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial, Spain;
223 Institute for Astronomy, Edinburgh, UK; Jet Propulsion Laboratory, USA; Laboratoire d’Astrophysique de
224 Marseille (LAM), France; Leiden University, Netherlands; Lockheed Advanced Technology Center (USA);
225 NOVA Opt-IR group at Dwingeloo, Netherlands; Northrop Grumman, USA; Max-Planck Institut für As-
226 tronomie (MPIA), Heidelberg, Germany; Laboratoire d’Etudes Spatiales et d’Instrumentation en Astro-
227 physique (LESIA), France; Paul Scherrer Institut, Switzerland; Raytheon Vision Systems, USA; RUAG
228 Aerospace, Switzerland; Rutherford Appleton Laboratory (RAL Space), UK; Space Telescope Science
229 Institute, USA; Toegepast Natuurwetenschappelijk Onderzoek (TNO-TPD), Netherlands; UK Astronomy
230 Technology Centre, UK; University College London, UK; University of Amsterdam, Netherlands; Univer-
231 sity of Arizona, USA; University of Bern, Switzerland; University of Cardiff, UK; University of Cologne,
232 Germany; University of Ghent; University of Groningen, Netherlands; University of Leicester, UK; Univer-
233 sity of Leuven, Belgium; University of Stockholm, Sweden; Utah. The following National and International
234 Funding Agencies funded and supported the MIRI development: NASA; ESA; Belgian Science Policy Of-
235 fice (BELSPO); Centre Nationale d’Etudes Spatiales (CNES); Danish National Space Centre; Deutsches
236 Zentrum für Luftund Raumfahrt (DLR); Enterprise Ireland; Ministerio De Economalia y Competividad;
237 Netherlands Research School for Astronomy (NOVA); Netherlands Organisation for Scientific Research
238 (NWO); Science and Technology Facilities Council; Swiss Space Office; Swedish National Space Agency;
239 and UK Space Agency. C.C., A.D. P.-O.L. R.G. A.C. acknowledge funding support from CNES. O.A.
240 I.A. B.V. and P.R. thank the European Space Agency (ESA) and the Belgian Federal Science Policy Of-
241 fice (BELSPO) for their support in the framework of the PRODEX Programme. D.B. is supported by
242 Spanish MCIN/AEI/10.13039/501100011033 grant PID2019-107061GB-C61 and and No. MDM-2017-
243 0737. L.D. acknowledges funding from the KU Leuven Interdisciplinary Grant (IDN/19/028), the European
244 Union H2020-MSCA-ITN-2019 under Grant no. 860470 (CHAMELEON) and the FWO research grant
245 G086217N. I.K. acknowledges support from grant TOP-1 614.001.751 from the Dutch Research Council
246 (NWO). O.K. acknowledges support from the Federal Ministry of Economy (BMWi) through the German
247 Space Agency (DLR). J.P.P. acknowledges financial support from the UK Science and Technology Facilities
248 Council, and the UK Space Agency, and acknowledges the advice of the *Swift* project team, and especially
249 Kim Page (UK Swift Science Data Centre at University of Leicester) in planning and analysis of the *Swift*
250 observations. G.O. acknowledge support from the Swedish National Space Board and the Knut and Alice
251 Wallenberg Foundation. P.T. acknowledges support by the European Research Council under Grant Agree-
252 ment ATMO 757858. I.P.W. acknowledges funding from the European Research Council (ERC) under the
253 European Union’s Horizon 2020 research and innovation programme (grant agreement No 758892, ExoAI),
254 from the Science and Technology Funding Council grants ST/S002634/1 and ST/T001836/1 and from the
255 UK Space Agency grant ST/W00254X/1. F.A.M. has received funding from the European Union’s Horizon
256 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement no. 860470.
257 E.D. has received funding from the European Union’s Horizon 2020 research and innovation programme un-
258 der the Marie Skłodowska-Curie actions Grant Agreement no 945298-ParisRegionFP. G.V.L. acknowledges
259 that some results of this work were partially achieved at the Vienna Scientific Cluster (VSC). L.H. has re-
260 ceived funding from the European Union’s Horizon 2020 research and innovation program under the Marie
261 Skłodowska-Curie grant agreement no. 860470. T.K. acknowledges funding from the KU Leuven Interdisci-
262 plinary Grant (IDN/19/028). L.C. acknowledges support by grant PIB2021-127718NB-100 from the Span-
263 ish Ministry of Science and Innovation/State Agency of Research MCIN/AEI/10.13039/501100011033.
264 E.vD. acknowledges support from A-ERC grant 101019751 MOLDISK. T.P.R. acknowledges support from
265 the ERC 743029 EASY. G.O. acknowledges support from SNSA. P.P. thanks the Swiss National Science
266 Foundation (SNSF) for financial support under grant number 200020_200399. O.A. is a Senior Research As-

267 sociate of the Fonds de la Recherche Scientifique - FNRS. We thank Luis Welbanks for a fruitful discussion
268 on the significance of the retrieval results. We thank Olivia Venot for sharing with us the new sulphur photo-
269 absorption cross-sections and Robin Baeyens for implementing them and the VULCAN thermo-chemical
270 network in our full chemical network. We thank the MIRI instrument team and the many other people who
271 contributed to the success of JWST.

272 **Author Contributions** All authors played a significant role in one or more of the following: development
273 of the original proposal, management of the project, definition of the target list and observation plan, anal-
274 ysis of the data, theoretical modelling and preparation of this paper. Some specific contributions are listed
275 as follows. P.-O.L. is PI of the JWST MIRI GTO European consortium program dedicated to JWST ob-
276 servations of exoplanet atmospheres; R.W. is co-lead of this JWST MIRI GTO European consortium. L.D.
277 and N.C. provided overall program leadership and management of the WASP-107b working group. P.-O.L.,
278 J.B., T.H., R.W., T.G. and L.D. made significant contributions to the design of the observational program
279 and contributed to the setting of the observing parameters. A.D., J.B. and N.C. generated simulated data
280 for prelaunch testing of the data reduction methods. J.B., A.D., and N.C. reduced the data, modelled the
281 light curves and produced the planetary spectrum. P.T., T.K., and L.D. generated theoretical model grids
282 for comparison with the data. M.Mi. and P.M. fitted the generated spectrum with retrieval models. J.P. led
283 the associated *Swift* observing programme and performed the analysis of the *Swift* data. M.G. led the data
284 reduction and the analysis of the *XMM-Newton* X-ray data. L.D., M.Mi, J.B., and A.D. led the writing of the
285 manuscript. L.D., A.D., M.Mi., P.M., J.B., N.C., T.K., J.P., M.G., R.W., P.T., and P.-O.L. made significant
286 contributions to the writing of this paper. T.K., M.Mi., J.B., and P.M. generated figures for this paper. G.W.
287 is the European PI of the JWST MIRI instrument, P.-O.L., T.H., M.G, B.V., L.C., E.vD., T.R., and G.O. are
288 European co-PI, and L.D., R.W., O.A., I.K., O.K., J.P., G.O. and D.B. are European co-I of the JWST MIRI
289 instrument. A.G. led the MIRI instrument testing and commissioning effort.

290 **Rights and permissions** Open Access This article is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0
291 International Licence, which permits use, sharing, adaptation, distribution and reproduction in any medium
292 or format, as long as you give appropriate credit to the original author(s) and the source, provide a link to
293 the Creative Commons licence, and indicate if changes were made. The images or other third party material
294 in this article are included in the article's Creative Commons licence, unless indicated otherwise in a credit
295 line to the material. If material is not included in the article's Creative Commons licence and your intended
296 use is not permitted by statutory regulation or exceeds the permitted use, you will need to obtain permission
297 directly from the copyright holder. To view a copy of this licence, visit <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>.

299 **Author Information** *Correspondence and requests for materials should be addressed to achrene.dyrek@cea.fr.

300 **Competing Interests** The authors declare that they have no competing financial interests.

302 **References**

- 303 1. Anderson, D. R. *et al.* The discoveries of WASP-91b, WASP-105b and WASP-107b: Two
304 warm Jupiters and a planet in the transition region between ice giants and gas giants. *Astron.*
305 *Astrophys.* **604**, A110 (2017).

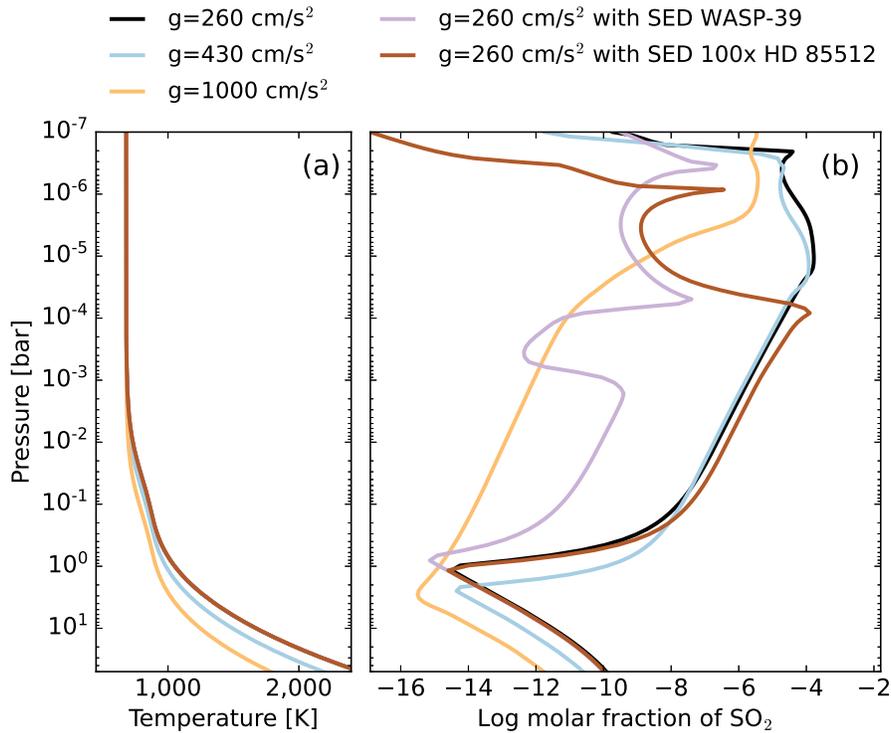
- 306 2. Piaulet, C. *et al.* WASP-107b’s Density Is Even Lower: A Case Study for the Physics of
307 Planetary Gas Envelope Accretion and Orbital Migration. *Astron. J.* **161** (2), 70 (2021).
- 308 3. Spake, J. J. *et al.* Helium in the eroding atmosphere of an exoplanet. *Nature* **557**, 68-70 (2018).
- 309 4. Kreidberg, L. *et al.* Water, High-altitude Condensates, and Possible Methane Depletion in the
310 Atmosphere of the Warm Super-Neptune WASP-107b. *Astrophys. J.* **858** (1), L6 (2018).
- 311 5. Edwards, B. *et al.* Exploring the Ability of HST WFC3 G141 to Uncover Trends in Popula-
312 tions of Exoplanet Atmospheres Through a Homogeneous Transmission Survey of 70 Gaseous
313 Planets. *Astrophys. J.*, (2022).
- 314 6. Rustamkulov, Z. *et al.* Early Release Science of the exoplanet WASP-39b with JWST NIR-
315 Spec PRISM. *Nature* **614** (7949), 659–663 (2023).
- 316 7. Alderson, L. *et al.* Early Release Science of the exoplanet WASP-39b with JWST NIRSpec
317 G395H. *Nature* **614** (7949), 664–669 (2023).
- 318 8. Zahnle, K. *et al.* Photolytic Hazes in the Atmosphere of 51 Eri b. *Astrophys. J.* **824** (2), 137
319 (2016).
- 320 9. Tsai, S. M. *et al.* A Comparative Study of Atmospheric Chemistry with VULCAN. *Astrophys.*
321 *J.* **923** (2), 264 (2021).
- 322 10. Tsai, S. M. *et al.* Photochemically produced SO₂ in the atmosphere of WASP-39b. *Nature*
323 **617** (7961), 483-487 (2023).
- 324 11. Bouwman, J. *et al.* Spectroscopic Time Series Performance of the Mid-infrared Instrument on
325 the JWST. *Publ. Astron. Soc. Pacific* **135** (1045), 038002 (2023).
- 326 12. Bell, T.J. *et al.* Eureka!: An End-to-End Pipeline for JWST Time-Series Observations. *The*
327 *Journal of Open Source Software* **7** (79), 4503 (2022).
- 328 13. Min, M. *et al.* The ARCiS framework for exoplanet atmospheres. Modelling philosophy and
329 retrieval. *Astron. Astrophys.* **642**, A28 (2020).
- 330 14. Mollière, P. *et al.* petitRADTRANS. A Python radiative transfer package for exoplanet char-
331 acterization and retrieval. *Astron. Astrophys.* **627**, A67 (2019).
- 332 15. Herzberg, G. Molecular spectra and molecular structure. Vol.3: Electronic spectra and elec-
333 tronic structure of polyatomic molecules. *Van Nostrand Reinhold Company*, (1966)
- 334 16. Jakobsen, P. *et al.* The Near-Infrared Spectrograph (NIRSpec) on the James Webb Space
335 Telescope. I. Overview of the instrument and its capabilities. *Astrophys. J.* **661**, A80 (2022).
- 336 17. Polman, J. *et al.* H₂S and SO₂ detectability in hot Jupiters. Sulphur species as indicators of
337 metallicity and C/O ratio. *Astron. Astrophys.* **670**, A161 (2023).

- 338 18. Madhusudhan, N. C/O ratio as a Dimension for Characterizing Exoplanetary Atmospheres.
339 *Astrophys. J.* **758** (1), 36 (2012).
- 340 19. Benneke, B. *et al.* A sub-Neptune exoplanet with a low-metallicity methane-depleted atmo-
341 sphere and Mie-scattering clouds. *Nature Astronomy* **3** (9), 813–821 (2019).
- 342 20. Cooper, C. S. & Showman, P. Dynamics and Disequilibrium Carbon Chemistry in Hot Jupiter
343 Atmospheres, with Application to HD 209458b. *Astrophys. J.* **649** (2), 1048-1063 (2006).
- 344 21. Showman, A.P *et al.* Atmospheric Circulation of Hot Jupiters: Coupled Radiative-Dynamical
345 General Circulation Model Simulations of HD 189733b and HD 209458b. *Astrophys. J.*
346 **699** (1), 564-584 (2009).
- 347 22. Drummond, B. *et al.* Implications of three-dimensional chemical transport in hot Jupiter
348 atmospheres: Results from a consistently coupled chemistry-radiation-hydrodynamics model
349 *Astron. Astrophys.* **636** (1), A68 (2020).
- 350 23. Showman, A. P. & Guillot, T. Atmospheric circulation and tides of “51 Pegasus b-like” planets.
351 *Astron. Astrophys.* **385** (1), 166-180 (2002).
- 352 24. Sainsbury-Martinez, F. *et al.* Idealised simulations of the deep atmosphere of hot Jupiters.
353 Deep, hot adiabats as a robust solution to the radius inflation problem. *Astron. Astrophys.*
354 **632** (1), A114 (2019).
- 355 25. Sarkis, P. *et al.* Evidence of three mechanisms explaining the radius anomaly of hot Jupiters.
356 *Astron. Astrophys.* **645** (1), A79 (2021).
- 357 26. Schneider, A.D. *et al.* No evidence for radius inflation in hot Jupiters from vertical advection
358 of heat. *Astron. Astrophys.* **666** (1), L11 (2022).
- 359 27. Baraffe, I., Chabrier, G. & Barman, T. The physical properties of extra-solar planets. *Reports*
360 *on Progress in Physics* **73** (1), 016901 (2010).
- 361 28. Seager, S., Whitney, B. A. & Sasselov, D. D. Photometric Light Curves and Polarization of
362 Close-in Extrasolar Giant Planets. *Astrophys. J.* **540**, 504-520 (2000)
- 363 29. Richardson, L. *et al.* A spectrum of an extrasolar planet. *Nature* **445** (7130), 892-895 (2007).
- 364 30. Miles, B. E. *et al.* The JWST Early-release Science Program for Direct Observations of Exo-
365 planetary Systems II: A 1 to 20 μm Spectrum of the Planetary-mass Companion VHS 1256-
366 1257 b. *Astrophys. J. L.* **946** (1), L6 (2023).
- 367 31. Nuth, J. A. & Ferguson, F. T. Silicates Do Nucleate in Oxygen-rich Circumstellar Outflows:
368 New Vapor Pressure Data for SiO. *Astrophys. J.* **649** (2), 1178-1183 (2006).
- 369 32. Guillot, T. On the radiative equilibrium of irradiated planetary atmospheres. *Astron. Astrophys.*
370 **520** (1), A27 (2010).

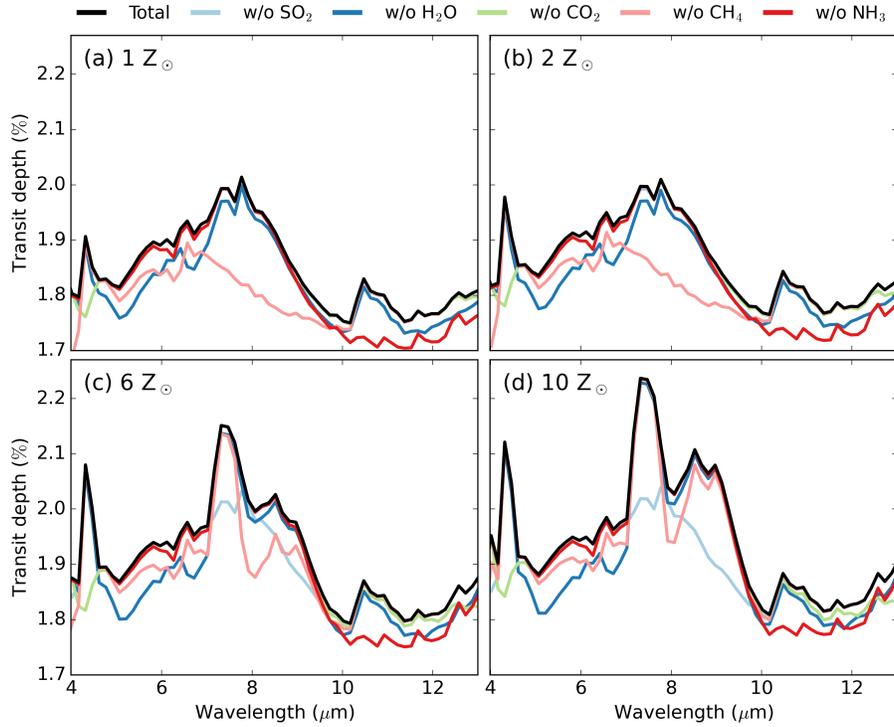
- 371 33. Arnaud, K. A. XSPEC: The First Ten Years. *Astronomical Society of the Pacific* **101** (1), 17
372 (1996).
- 373 34. Loyd, R. O. P. *et al.* The MUSCLES Treasury Survey. III. X-Ray to Infrared Spectra of 11 M
374 and K Stars Hosting Planets. *Astrophys. J.* **824** (2), 102 (2016).

Extended Data – Table 1: **Measured transit depth of WASP-107b.** First and fifth column list the wavelength, and the other columns the transit depths as obtained with Eureka!, CASCADE and TEATRO. Each wavelength bin has a full width of $0.15 \mu\text{m}$.

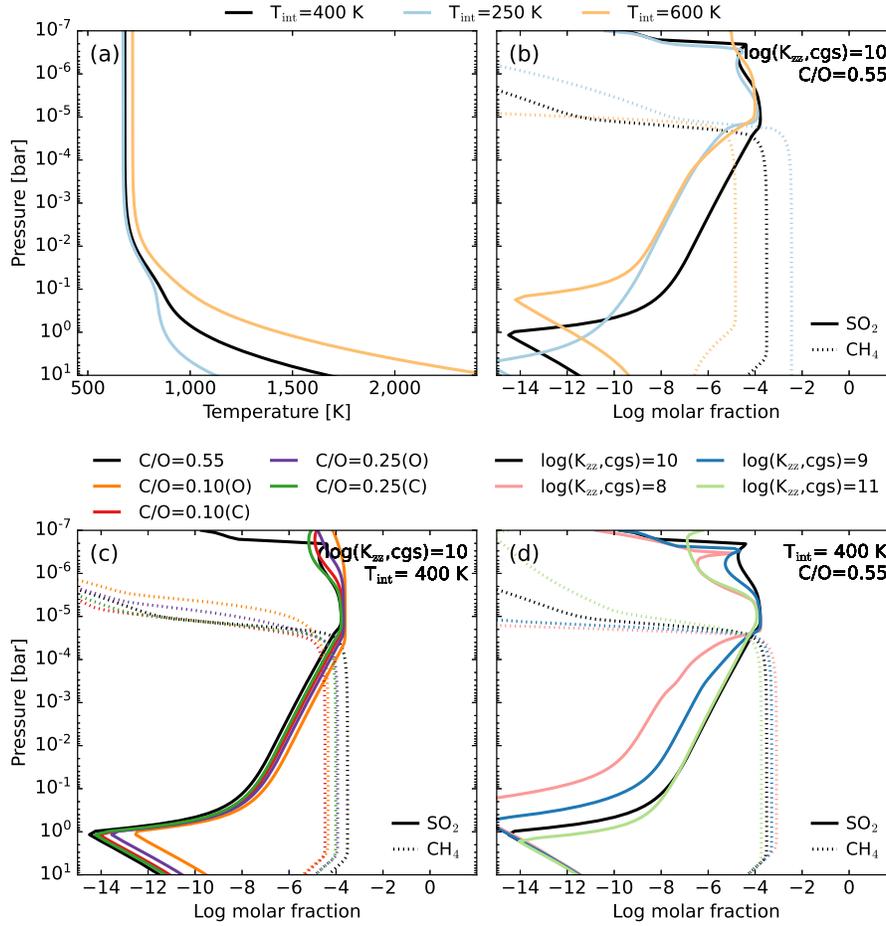
λ			λ				
	Transit depth			Transit depth			
Eureka!	CASCADE	TEATRO	Eureka!	CASCADE	TEATRO		
(μm) (ppm)	(ppm)	(ppm)	(μm) (ppm)	(ppm)	(ppm)		
4.61	20,126 \pm 80	20,305 \pm 69	20,257 \pm 73	8.37	20,813 \pm 100	20,701 \pm 87	20,811 \pm 93
4.76	20,464 \pm 60	20,233 \pm 70	20,331 \pm 52	8.52	20,745 \pm 106	20,925 \pm 99	20,727 \pm 98
4.91	20,075 \pm 73	20,223 \pm 63	20,245 \pm 70	8.67	21,095 \pm 112	20,800 \pm 96	20,850 \pm 99
5.06	20,245 \pm 60	20,128 \pm 64	20,139 \pm 53	8.82	20,725 \pm 108	20,818 \pm 96	20,733 \pm 95
5.21	20,178 \pm 60	20,192 \pm 64	20,077 \pm 52	8.97	20,603 \pm 118	20,620 \pm 100	20,350 \pm 112
5.36	20,396 \pm 55	20,154 \pm 63	20,306 \pm 46	9.12	20,807 \pm 118	20,750 \pm 114	20,654 \pm 107
5.51	20,272 \pm 69	20,227 \pm 70	20,206 \pm 58	9.27	20,447 \pm 125	20,724 \pm 114	20,523 \pm 114
5.67	20,274 \pm 65	20,326 \pm 72	20,292 \pm 53	9.42	20,562 \pm 132	20,590 \pm 110	20,411 \pm 122
5.82	20,530 \pm 76	20,329 \pm 67	20,396 \pm 65	9.57	20,475 \pm 137	20,775 \pm 111	20,676 \pm 127
5.97	20,234 \pm 64	20,196 \pm 66	20,186 \pm 55	9.72	20,466 \pm 127	20,725 \pm 117	20,574 \pm 122
6.12	20,243 \pm 68	20,217 \pm 72	20,258 \pm 59	9.87	20,512 \pm 149	20,537 \pm 94	20,460 \pm 141
6.27	20,240 \pm 66	20,166 \pm 64	20,118 \pm 61	10.02	20,166 \pm 148	20,190 \pm 134	20,190 \pm 139
6.42	20,733 \pm 66	20,567 \pm 78	20,544 \pm 55	10.17	20,539 \pm 174	20,535 \pm 110	20,584 \pm 154
6.57	21,045 \pm 77	20,945 \pm 73	21,006 \pm 65	10.32	20,404 \pm 186	20,384 \pm 125	20,109 \pm 165
6.72	20,799 \pm 67	20,720 \pm 74	20,853 \pm 58	10.47	20,580 \pm 192	20,789 \pm 164	20,406 \pm 189
6.87	20,301 \pm 79	20,364 \pm 74	20,351 \pm 73	10.62	20,606 \pm 213	20,792 \pm 186	20,462 \pm 219
7.02	20,555 \pm 72	20,420 \pm 47	20,475 \pm 65	10.77	20,062 \pm 208	20,558 \pm 172	19,853 \pm 226
7.17	21,076 \pm 78	20,993 \pm 73	21,044 \pm 69	10.92	19,600 \pm 266	20,133 \pm 223	19,618 \pm 282
7.32	21,128 \pm 76	21,093 \pm 77	20,985 \pm 71	11.07	20,239 \pm 262	19,923 \pm 260	19,742 \pm 294
7.47	21,486 \pm 88	21,351 \pm 79	21,390 \pm 77	11.22	19,474 \pm 278	19,909 \pm 282	18,938 \pm 316
7.62	21,257 \pm 83	21,160 \pm 83	21,117 \pm 73	11.37	18,810 \pm 295	19,496 \pm 295	18,371 \pm 339
7.77	20,797 \pm 100	20,817 \pm 86	20,880 \pm 85	11.52	19,101 \pm 328	19,057 \pm 291	18,625 \pm 378
7.92	20,782 \pm 93	20,762 \pm 87	20,697 \pm 81	11.68	19,157 \pm 363	19,464 \pm 369	18,963 \pm 404
8.07	20,554 \pm 90	20,587 \pm 101	20,524 \pm 83	11.83	18,994 \pm 397	19,522 \pm 396	18,459 \pm 457
8.22	20,617 \pm 98	20,688 \pm 82	20,601 \pm 89	–	–	–	–



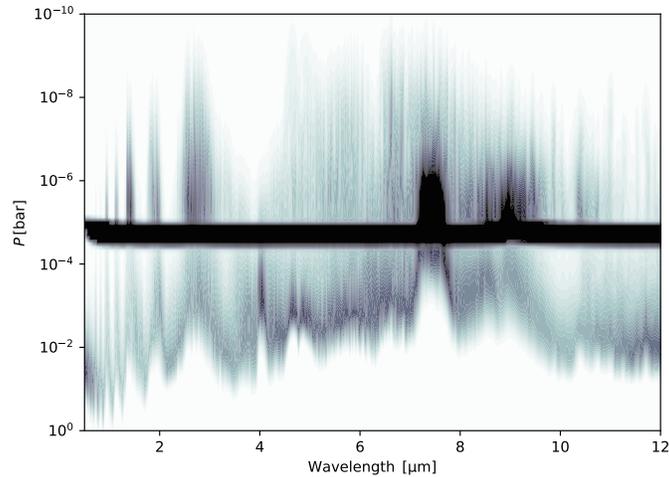
Extended Data – Figure 1: **Impact of gravity and UV irradiation on predicted SO₂ molar fraction.** The base model (shown in black in each panel) has an intrinsic temperature of 400 K, a solar C/O ratio, a metallicity of $10\times$ solar, a $\log_{10}(K_{zz}, \text{cgs}) = 10$, and uses the SED of HD 85512³⁴ – used as a proxy for WASP-107 – as input stellar spectrum (see SI). Panel (a): Temperature-pressure (T - P) profile for a gravity g of 2.6 m/s^2 (black, purple and brown), 4.3 m/s^2 (blue), and 10 m/s^2 (orange). Panel (b): Predicted SO₂ molar fractions for different gravity values with colours corresponding to panel (a). While the black curve uses the HD 85512 SED as input spectrum, the purple curve uses the WASP-39 SED instead (see SI), and the brown curve the HD 85512 SED scaled with a factor 100.



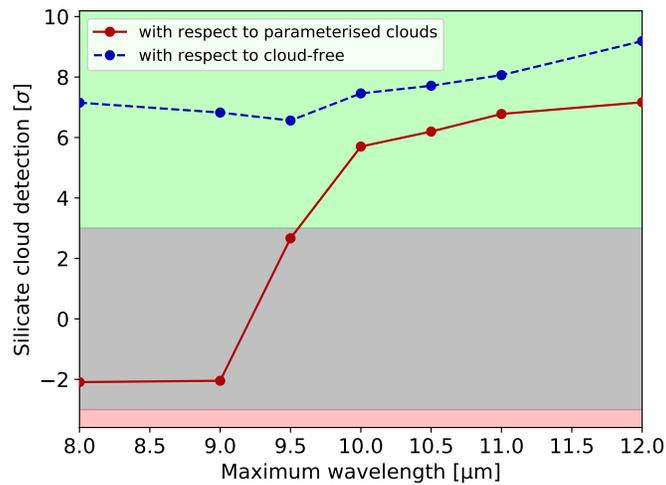
Extended Data – Figure 2: **Predicted transit depth for WASP-107b assuming a cloudless atmosphere.** The four panels display for a metallicity of 1, 2, 6, and 10 Z_{\odot} , the total transit depth (in black) and the transit depth without relative contributions of SO_2 (light blue), H_2O (dark blue), CO_2 (light green), CH_4 (pink) and NH_3 (orange). Predictions are calculated for a model with an intrinsic temperature of 400 K, a solar C/O ratio, and a $\log_{10}(K_{zz}, \text{cgs}) = 10$.



Extended Data – Figure 3: **Sensitivity of SO_2 and CH_4 molar fractions to various input parameters.** Shown are the impact of the intrinsic temperature, C/O ratio and eddy diffusion coefficient on predicted SO_2 and CH_4 molar fractions. The base model (shown in black in each panel) has an intrinsic temperature of 400 K, a solar C/O ratio, a metallicity of $10\times$ solar, and a $\log_{10}(K_{zz, \text{cgs}})=10$. Panel (a): Temperature-pressure (T - P) profile for intrinsic temperatures of 250, 400, and 600 K (light blue, black, and orange, respectively). Panel (b): Predicted SO_2 (full line) and CH_4 (dotted line) molar fractions for different T - P structures (and hence intrinsic temperatures), with colours corresponding to panel (a). Panel (c): Predicted SO_2 and CH_4 molar fraction for different C/O ratios. Comparison with predictions for a solar C/O ratio (of 0.55, black line) for which either the carbon or oxygen atomic abundance has been adapted (indicated by 'C' or 'O' between parenthesis, respectively). Panel (d): Predicted SO_2 and CH_4 molar fraction for different values of the eddy diffusion coefficient K_{zz} .



Extended Data – Figure 4: **Contribution function for the atmosphere as retrieved by ARCiS.** Shown in the contour colours are the relative contributions of various layers in the atmosphere to the transit spectrum as a function of wavelength. The dark horizontal line in this plot is located at the geometrically thin cloud layer, dominating the spectrum at all wavelengths. The spectral variation on top of this baseline predominantly comes from below the cloud layer at the wavelengths where water features are present, while it is dominated by regions above the cloud layer for the spectral features of SO_2 . This is consistent with the pressures where we expect SO_2 to be abundant in the atmosphere from our photochemical modelling (see Figure 3). The molecular contribution to the spectral variation in the $9.5 - 11 \mu\text{m}$ region is significantly fainter than at other wavelengths. This is the region where the silicate feature is most prominent and thus also the spectral variation is dominated by the cloud layer.



Extended Data – Figure 5: **Silicate cloud detection significance.** The detection significance, measured in σ , of the silicate cloud model is presented in comparison to both the cloud-free model (indicated by the blue dashed curve) and the parameterised cloud model (represented by the red solid line) as a function of the maximum wavelength used in the analysis. Even when limiting the analysis to wavelengths below $10 \mu\text{m}$, the silicate cloud remains favoured, at a significance of 5.7σ , over the parameterised cloud configuration.

Supplementary information

1. JWST MIRI observations and data processing

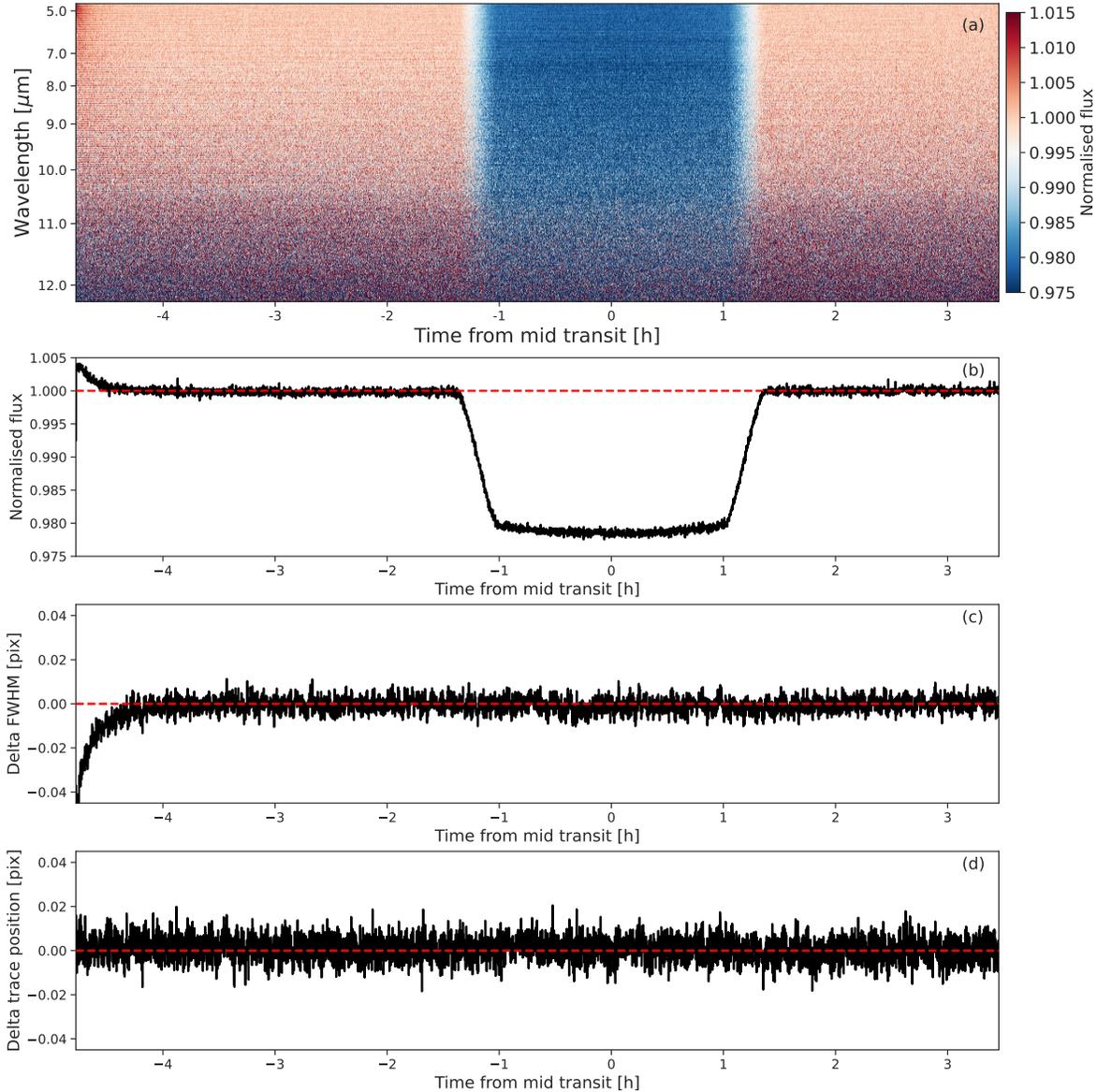
WASP-107b was observed with the Low-Resolution Spectrometer (LRS³⁵) of the Mid-Infrared Instrument (MIRI³⁶) on board the JWST on the 19–20 January 2023. The data is part of the GTO program under program identifier (PID) 1280 (P.I. P.O. Lagage). The observation started on 19 January at 18:25 UT, in a time-series of 4546 integrations lasting 8h14m, starting approximately 4h50m before the centre of the WASP-107b transit. This total time duration includes the out-of-transit time, ~ 30 min of detector settling time, and additional time to accommodate scheduling flexibility.

The data was acquired using the SLITLESSPRISM subarray and the FASTR1 readout mode^{35,37}. The integrations consisted of 40 groups (or frames as the MIRI instrument uses 1 frame per group). With this particular number of frames, a maximum signal level of about 75% of the saturation level is reached, ensuring that a photon-noise limited signal is measured while still avoiding the strongest non-linearity effects occurring for signals approaching saturation.

The data processing began with the uncalibrated raw data products retrieved from the Barbara A. Mikulski Archive for Space Telescopes (MAST; <https://archive.stsci.edu/>). In order to ensure results that are not influenced by the calibration or potential uncorrected instrumental systematics, we performed three independent data reductions and light curve analyses. In short, our reductions are based on the CASCADE reduction package¹¹, that was used both for the JWST MIRI and the HST/WFC3 data (Sect. 1.1), the Eureka! package¹² (Sect. 1.2) and the TEATRO package (see Sect. 1.3). To ensure a correct relative flux calibration, we derived and applied a specific non-linearity correction of the ramps (see Sect. 1.4). The outcomes of the three data reduction methods are compared in Sect. 1.5.

Each method extracted 51 spectroscopic light curves between 4.61 and 11.83 μm with a 0.15 μm bin width. Suppl. Inf. Figure 1 shows the CASCADE MIRI/LRS transit observation of WASP-107b. The shorter wavelength channels ($< 7 \mu\text{m}$) show the strongest (downward) drift at the start of the spectral time series, consistent with the behaviour observed in the MIRI/LRS data of the transit of L168-9b¹¹. At the longest wavelengths ($> 11 \mu\text{m}$), a slight upward drift can be observed, although at a much lower amplitude compared to the short wavelength channels. Note that longward of 10 μm , the noise substantially increases due to a decreasing response of the instrument.

The SLITLESSPRISM subarray covers parts of 3 distinctive regions on the MIRI imager detector. For wavelengths shorter than 10.5 μm the spectra fall within the Lyot coronagraphic



Suppl. Inf. – Figure 1: **Band-average time series of the JWST MIRI/LRS observations of the WASP-107b transit.** Panel (a): Normalised spectral time series data. Panel (b): Normalised light curve of the WASP-107b transit integrated between $4.61 \mu\text{m}$ to $11.83 \mu\text{m}$. Panel (c): Change in full-width half maximum (FWHM) in the spectral trace between detector rows 280 and 390, corresponding to the shortest wavelengths. Panel (d): Change in cross-dispersion position of the spectral trace. The red dashed lines are drawn to indicate the value to expect in case of no variations in values of the plotted data.

34 subarray. For wavelengths between $10.5 \mu\text{m}$ and about $11 \mu\text{m}$ the LRS spectra fall on an area of
 35 the detector covered by the focal plane mask, and at longer wavelengths in the subarray of one

36 of the 4 quadrant phase mask coronagraphs. Prior operations of the MIRI imager detector (i.e.
 37 Exposures with different duration and filter wheel position or idling operation), may impact the
 38 detector in the specific regions differently⁴⁰, and could create calibration offsets and extra noise.
 39 However, we find no such effects in our data.

40 Each spectroscopic light-curve as well as the band-averaged light-curve were fitted by a
 41 transit model. We fixed the orbital period $P = 5.7214$ days¹ and derived the semi-major axis, in-
 42 clination and mid-transit time from fitting the band-averaged light curve. The free parameters for
 43 the spectral light curve fitting were the ratio of the planet radius over the stellar radius, R_p/R_* , the
 44 instrumental systematics parameters and the limb-darkening coefficients. The transit ephemeris
 45 were taken from ref. ⁴², other system parameters from ref. ⁴³, and quadratic limb-darkening coef-
 46 ficients computed with the EXOTETHYS package⁴⁴, using the parameterised quadratic parameters
 47 from ref. ⁴⁵. The parameters retrieved from the band-averaged light curve fitting are presented in
 48 Suppl. Inf. Table 1.

Suppl. Inf. – Table 1: **Parameters retrieved from the band-averaged light curve fitting.** Listed are the values retrieved with the Eureka! and TEATRO reduction methods. CASCADE uses the TEATRO output parameters. The mid-transit timing T_0 is the Barycentric Modified Julian date / Temps Dynamique Barycentrique (BMJD_TDB) time system.

Parameter	Eureka!	TEATRO
Orbital period [d]	5.7214742 ^(a)	5.7214904 ^(b)
Planetary radius R_p [R_*]	$0.14336^{+6.55154 \times 10^{-5}}_{-6.75549 \times 10^{-5}}$	0.14341 ± 0.00011
Semi-major axis a [R_*]	$18.10815^{+0.00710}_{-0.00712}$	$18.0249^{(c)}$
Inclination i [deg]	$89.59059^{+0.00837}_{-0.00851}$	89.516 ± 0.016
Mid-transit timing T_0 [d]	$59963.9687968^{+1.30 \times 10^{-5}}_{-1.27 \times 10^{-5}}$	$59963.968763 \pm 1.6 \times 10^{-5}$
Limb-darkening coefficient u_1	$0.095^{+0.0017}_{-0.0015}$	0.089 ± 0.014
Limb-darkening coefficient u_2	$0.017^{+0.059}_{-0.053}$	0.042 ± 0.029

(a) Fixed².

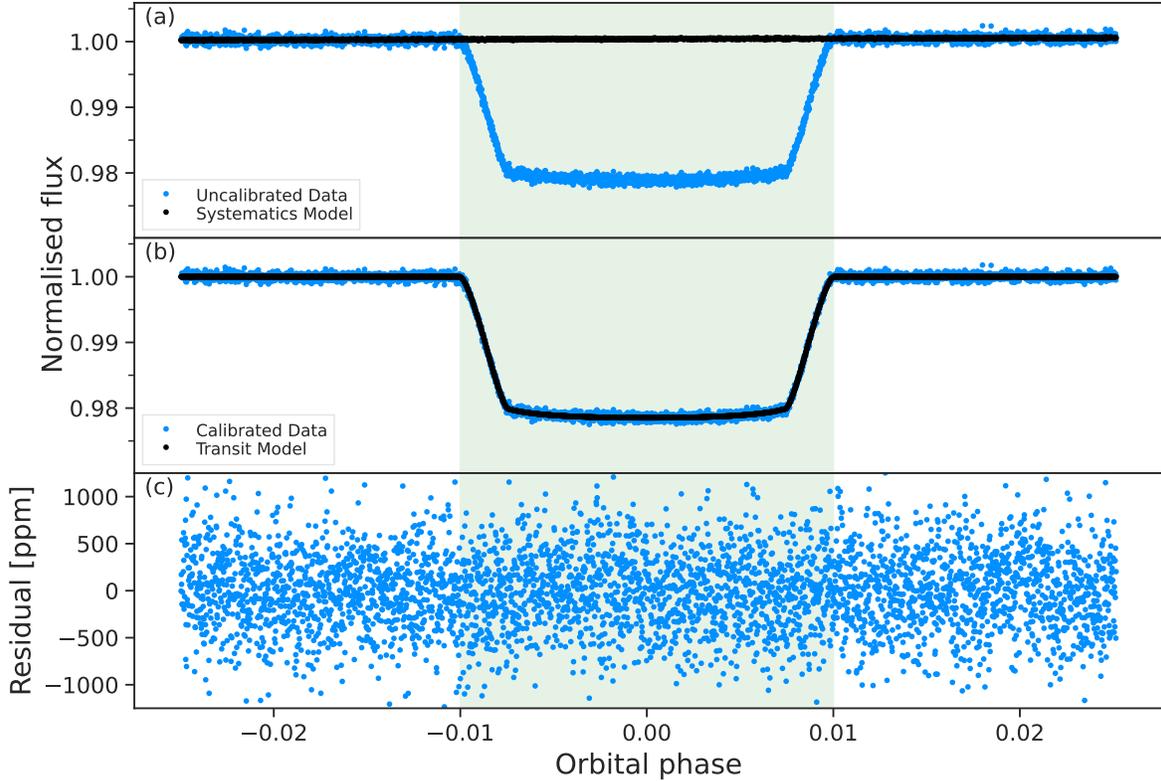
(b) Fixed⁴².

(c) Fixed, computed from the orbital period⁴² and the stellar mass and radius¹.

49 1.1. CASCADe data reduction setup

50 The first method for spectral extraction and time series analysis was based on the Calibration of
51 trAnsit Spectroscopy using CAusal Data (CASCADe) data reduction package developed within the
52 *Exoplanet Atmosphere New Emission Transmission Spectra Analysis* (EXOPLANETS-A) Horizon-
53 2020 program and described in detail in ref. ¹¹. For the basic data calibration and spectral extrac-
54 tion, we used the `jwst` calibration pipeline version 1.9.4 and reference files from the JWST Cali-
55 bration Reference Data System (CRDS) using context 1030. We followed the procedure described
56 in ref. ¹¹ with a few exceptions. We found that the dark correction applied in context version 1030
57 was not optimal, as it introduced an excess scatter on the detector ramps. We, therefore, overrode
58 the dark reference file with a custom one, which we derived by taking the standard CRDS dark
59 file and running a median smoothing (or running median) to remove the observed excess scatter
60 in the dark estimate. For a complete discussion on our linearity correction we refer to Sect. 1.4.
61 Secondly, we used the reset switch charge decay (RSCD) step in the Detector1 pipeline stage that
62 flags the first 4 groups of each integration as ‘do not use’. Though this decreases the effective
63 integration time, the linearity and stability of the detector signals are improved in a substantial
64 way, resulting in increased signal-to-noise ratios of the final extracted spectra. Note that also the
65 last group of each integration is standard flagged as ‘do not use’, as this group is strongly affected
66 by the detector reset (see also ref. ⁴⁷). The infrared background emission was removed by deter-
67 mining a median background per detector row and integration using detector columns 12 to 19
68 (starting from 0) and 52 to 59. We used the `CASCADe-filtering` package version 1.0.2 to
69 identify any bad pixels or cosmic ray hits not identified in the Detector1 pipeline stage. We then
70 used this package to clean all pixels flagged as ‘do not use’ before spectral extraction. We used the
71 `CASCADe-jitter` package version 0.9.5 to determine the spectral trace to be able to precisely
72 position the extraction aperture. The time averaged polynomial coefficients of the spectral trace
73 are 35.29, 4.313×10^{-3} , 5.947×10^{-6} and -9.484×10^{-8} from zero to third order, respectively. We
74 extracted the 1D spectral time series data from the spectral images using the `extract1d` pipeline
75 step. In this step we used the polynomial coefficients from the trace fit listed above to centre a
76 constant width extraction aperture of 8 pixels at the exact source position for all wavelengths. The
77 spectral flux values are calculated by summing the signal on the detector within the region defined
78 by the extraction aperture and wavelength bins. Suppl. Inf. Figure 1 shows the time series of the
79 extracted LRS spectra. Also shown in that figure is the derived movement of the spectral trace in
80 the cross dispersion direction and the full-width at half maximum (FWHM) of the spectral trace at
81 the shortest wavelengths. Apart from the first half an hour, no substantial photometric or positional
82 drifts can be observed, showing the exquisite stability of the MIRI instrument.

83 For the light curve fitting, we used the identical procedure as described in ref. ¹¹ using the
84 `CASCADe`-package version 1.2.2. We omitted the first 744 integrations (about 1.3 hours) to avoid
85 the response drifts seen in Suppl. Inf. Figure 1. Before the spectral light curve fitting, we binned
86 the spectra to a uniform wavelength grid with a $0.15 \mu\text{m}$ bin width. For the systematics model (see
87 ref. ⁴⁸ for details), we used as additional regression parameters the time, the FWHM of the spectral



Suppl. Inf. – Figure 2: **CASCADe band average light curve analysis.** Panel (a): The band-averaged JWST MIRI/LRS light curve data of the transit of WASP-107b and the fitted systematics model. Panel (b): The systematics corrected band-averaged light curve with the fitted transit model. Panel (c): The band-averaged residuals after subtracting the best-fit light curve model. The shaded area indicates the orbital phases during which the transit occurs. Note that the first 744 integrations have been removed from the light curves shown in this figure.

88 trace, and the trace position as plotted in Suppl. Inf. Figure 1. The orbital parameters of WASP-
 89 107b were fixed to the values derived in the band-averaged light curve analysis from the TEATRO
 90 data reduction (see Suppl. Inf. Table 1). Limb-darkening coefficients for each spectral channel
 91 were calculated using the EXOTETHYS-package⁴⁴ (see Suppl. Inf. Table 1). The CASCADe band-
 92 averaged results from our spectral light curve analysis are presented in Suppl. Inf. Figure 2 and the
 93 CASCADe transmission spectroscopy results are provided in Extended Data Table 1 and shown in
 94 Figure 1. The error estimates on the transit depths were derived by performing a bootstrap analysis.

95 1.2. Eureka! data reduction setup

96 Data reduction was conducted using the STScI `jwst` pipeline version 1.8.5 under CRDS context
 97 1030. At the ramp and pixel scale, the first four frames corresponding to the ones affected by

98 the RSCD effect⁴⁹ were flagged and ramp non-linearity correction was performed using a custom
99 correction file (Suppl. Inf. 1.4). Contrary to the *CASCADE* and *TEATRO* data reductions, no
100 custom dark file is needed as pipeline version 1.8.5 uses different correction which did not show
101 an excess scatter. Cosmic rays were flagged with a rejection threshold of 5σ and the ramps were
102 fitted using a least-squared minimisation algorithm. To comply with the JWST MIRI spectroscopic
103 performances of time-series observations¹¹, the electronic gain value was lowered from 5.5 to 3.1
104 $e^- \text{ DN}^{-1}$. The background was subtracted following the same method as in ref. ¹¹. In particular,
105 7 columns on the left and 7 on the right sides of the trace (column 36) were selected, a median
106 value was taken and then subtracted from the spectral image. A spatial filter of outlier detection
107 was then applied to remove any hot pixel that would have been left in the subarray. An optimal
108 spectral extraction with a half-width extraction aperture of 4 pixels was then performed using the
109 *Eureka!* package¹². We extracted 51 spectroscopic light curves between 4.61 and 11.83 μm with
110 a 0.15 μm bin width, ran a sigma-clipping of 20 integrations with a rejection threshold of 5σ , and
111 trimmed the 250 first integrations to get rid of strong persistence effects. Light curves were then
112 fitted using the MCMC *emcee* sampler⁵⁰, the *batman* transit model⁵¹ and both an exponential
113 and a second order polynomial model for systematics. We used the band-averaged light curve fit to
114 refine the mid-transit timing, the ratio of the semi-major axis over the stellar radius, and inclination
115 parameters (see Suppl. Inf. Table 1). The ratio of the planet radius over the stellar radius, the limb-
116 darkening coefficients and the systematics parameters were then used as free parameters for all
117 spectroscopic channels (see Suppl. Inf. Table 1). The *Eureka!* transmission spectroscopy results
118 are provided in Extended Data Table 1 and shown in Figure 1.

119 1.3. *TEATRO* data reduction setup

120 We processed the data using the Transiting Exoplanet Atmosphere Tool for Reduction of Observa-
121 tions (*TEATRO*) that runs the *jwtst* package, extracts and cleans the stellar spectra and light curves,
122 and runs light curve fits. In the *jwtst* Detector1 pipeline, we use the same dark and linearity cor-
123 rections as in *CASCADE* by overriding the default reference files. We subtracted the background
124 per integration and per detector row and corrected for flagged pixels. We extracted the stellar spec-
125 tra by summing the flux in a 12 pixel wide aperture, summed them between 4.61 – 11.83 μm to
126 obtain the band-averaged light flux, and binned them in 51 wavelength bins from 4.61 to 11.83 μm
127 (bin width of 0.15 μm) to obtain the spectroscopic light curves. We discarded the first 1.4 hr that
128 show a decay caused by persistence effects, normalised the light curves by the out-of-transit flux,
129 and removed outliers. We fitted the light curves by a transit light curve model computed with the
130 *exoplanet* package^{52,53} and a linear trend. We fitted that model to the data using a MCMC
131 procedure based on the *PyMC3* package as implemented in *exoplanet*^{52,53}. We refined the mid-
132 transit time, planet-to-star radius ratio, and inclination from a band-averaged light curve fit (Suppl.
133 Inf. Table 1), and let only the planet-to-star radius ratio and a linear trend as free parameters for
134 the spectroscopic light curve fits. The limb-darkening coefficients for each spectral channel were
135 fixed to the values used in the *CASCADE* reduction. We used the median of the posterior distribu-
136 tions as final parameters, and computed the transit depth uncertainties by a quadratic sum of the

137 standard deviations of the residuals of the in- and out-of-transit points divided by the square root
138 of their respective number of points, because it gives more conservative uncertainties than those
139 obtained from the MCMC posterior distributions. The TEATRO transmission spectroscopy results
140 are provided in Extended Data Table 1 and shown in Figure 1.

141 1.4. Data non-linearity correction

142 The adopted readout pattern for all JWST instruments, including those of the MIRI instrument, is
143 the so-called MULTIACCUM readout pattern. The MIRI pixels are read non-destructively (charges
144 are read but not reset) at a constant rate until a final read followed by two resets to clear the
145 accumulated charges. An integration thus consists of a number of samples of the accumulating
146 detector signal, resulting in a ramp, that, when fitted, yields a measure of the flux per pixel. For a
147 detailed discussion of the MIRI focal plane arrays and read out patterns we refer to ref. ³⁷.

148 The MIRI detector ramps show several non-ideal behaviours, influencing the slope derivation
149 and thus the flux estimates. We refer to ref. ⁴⁷ for a review of all detector effects influencing the
150 sampling of the detector ramps and their mitigation in the JWST data reduction pipeline. The two
151 main non-linearity effects which are important for transit observations are the reset switch charge
152 decay ⁴⁷ and the debiasing effect in combination with a diffusion of electrons to neighbouring
153 pixels ^{47,54}. While the former affects mainly the first few reads of the detector ramps, and can be
154 mitigated by not using the affected reads when determining the slope of the detector ramps, the
155 latter effects need to be corrected before the slope of the detector ramps can be correctly measured.
156 For a detailed discussion on the detector voltage debiasing and related effects, see ref. ⁵⁴. In brief,
157 a detector circuit as used in MIRI can be seen as a resistor-capacitor circuit. Charge accumulation
158 at the integration capacitors reduces the net bias voltage, which in turn leads to a lower response
159 of the detector as it causes the width of the depletion region to shrink below the active layer width,
160 and a smaller fraction of the produced photoelectrons are guided to the pixels. The diffusion of
161 photo-excited electrons in the undepleted region of a (near) saturated pixel to the depleted region
162 at neighbouring pixels – dubbed the brighter-fatter effect ⁵⁴ – can be observed in the WASP-107b
163 data but only at a low level, as the maximum observed signal level of the detector ramps remains
164 well below the saturation limit. The main effect of the electron diffusion in the WASP-107b data
165 is an additional loss of electrons in the central pixels of the spectral point spread function (PSF),
166 in combination with a small gain of electrons in the neighbouring pixels in the wing of the PSF.
167 **As we will show in the following, parametric model can still be used for this data set to**
168 **derive an effective debiasing of the detector pixels and properly linearize the detector ramps,**
169 **mitigating the combined effects of detector debiasing plus electron diffusion.** We, therefore,
170 ignored the electron diffusion effect in our analysis, and focused on correcting the main detector
171 ramp non-linearity due to debiasing.

172 The standard correction for the non-linearity of the detector ramps due to the debiasing effect,

173 implemented in the `linearity` step of the JWST data reduction pipeline, is derived by fitting a
 174 cubic polynomial to the detector ramps of dedicated calibration data, and using the linear term as
 175 an estimate of the linearised signal of the detector ramp. A functional relation is then determined
 176 between linearised signal and observed signal using a fourth-order polynomial. The polynomial
 177 coefficients from this fit are stored in the CRDS calibration file for the `linearity` pipeline step.
 178 Note that the standard linearity correction implements an identical correction for all detector pixels
 179 in the MIRI/LRS subarray. Also note that the standard correction was derived using data from an
 180 spatially extended illumination source, which results in data not influenced by electron diffusion
 181 as there is no significant electrical field differences between neighbouring pixels.

182 To test the default linearity correction (pmap version 1030), we checked the behaviour of
 183 the detector ramps by creating pair-wise differences of the readouts (frames or groups in case of
 184 MIRI). In case of a perfect linear ramp, the pair-wise differences of a detector ramp for a single
 185 detector pixel should have a constant value. Panels a, d, g, j and m (the left column) of Suppl. Inf.
 186 Figure 3 displays the pair-wise differences of the uncalibrated data (`uncal` data product), clearly
 187 showing non-constant values for those pixels receiving the highest photon flux. Note that the slope
 188 change of the first few differences is dominated by the RSCD, and the last pair by the last-frame
 189 effect. Applying the default linearity correction substantially improves the linearity of the ramps
 190 but a slope can still be seen when plotting the pair-wise differences in panels b, e, h, k and n (the
 191 second column) of Suppl. Inf. Figure 3, indicating that the default correction is not yet optimal.
 192 As non-linearity effects can have a substantial impact on the derived transit depth, we derived an
 193 alternative linearity correction based on the data itself. We fitted the following **parametric model**
 194 to the detector ramps

$$S_{ij}(t) = a_{ij,0} + \tau_{ik,1} \cdot a_{ij,1} \cdot \left(1 - e^{\frac{-t}{\tau_{ij,1}}}\right) - \tau_{ij,2} \cdot a_{ij,2} \cdot e^{\frac{-t}{\tau_{ij,2}}}$$

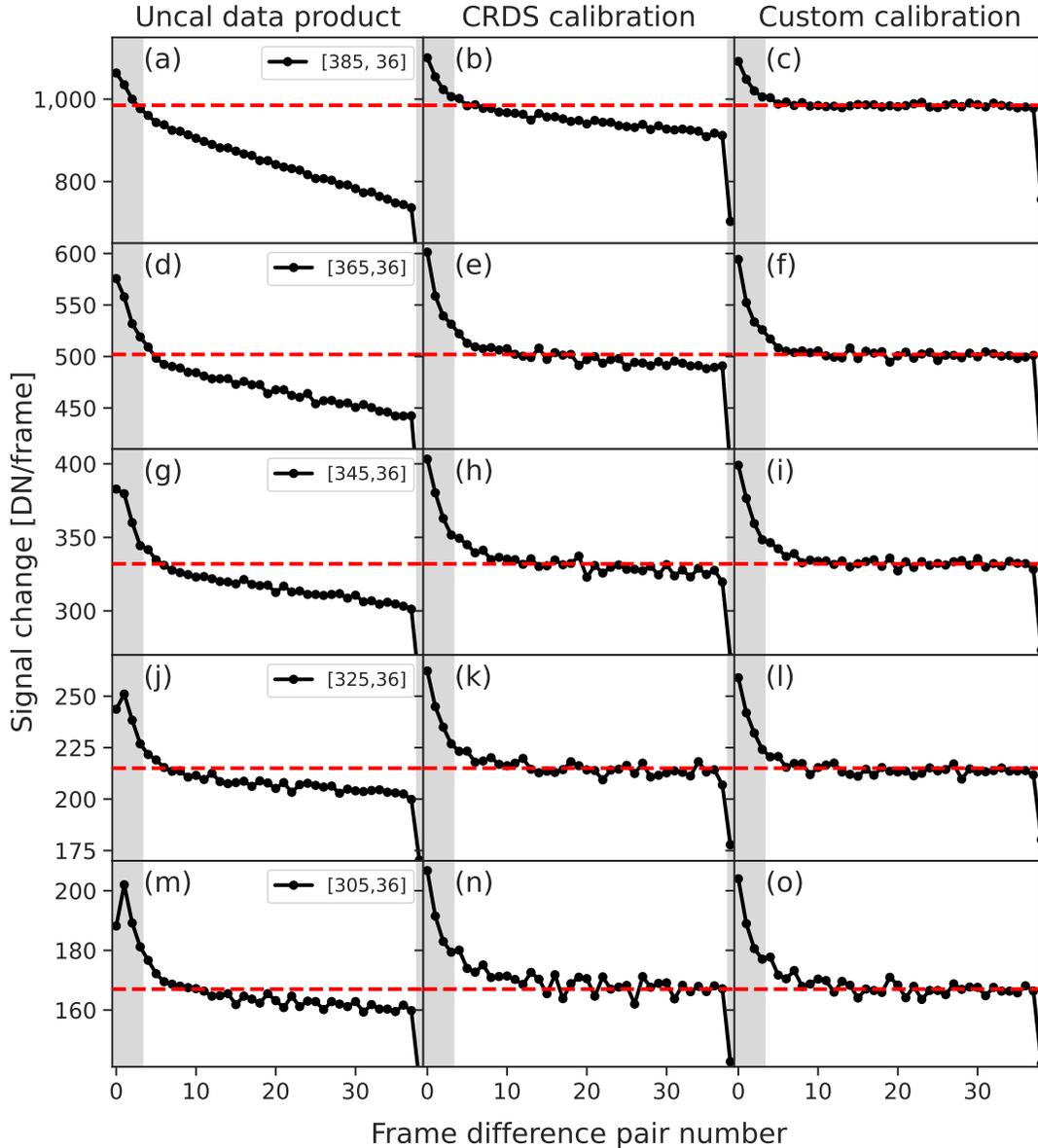
$$i \in \{0, \dots, 415\}, \quad j \in \{0, \dots, 72\}, \quad 0 \leq t \leq T_{\text{int}}$$

195 In this equation, t is the time between 0 and the duration of a single integration T_{int} . The
 196 first term represents the debiasing effect, with $a_{ij,0}$ the reset level for a single pixel with detector
 197 row index i and column index j , $a_{ij,1}$ and $\tau_{ik,1}$ the linearised slope of the detector ramp and **the**
 198 **time constant combined effects of the detector debiasing plus electron diffusion**, respectively.
 199 The second term models the RSCD effects with $a_{ij,2}$ and $\tau_{ij,2}$ the amplitude and time constant
 200 for the estimate of the RSCD effect. Though we will not use the fitted contribution of the RSCD
 201 effect in this study, we included the term in the fit to ensure we obtained an unbiased estimate of
 202 the **combined debiasing and electron diffusion effects**. Using this model, we fitted the detector
 203 ramps after applying the `reset` pipeline step, for all integrations after the transit. Using the
 204 fitted estimate of the linearised signal, we followed the procedure described in ref. ⁴⁷ to derive a
 205 custom non-linearity correction used in the `linearity` pipeline step. Panels c, f, i, l and o (the
 206 right column) of Suppl. Inf. Figure 3 show the slope estimates of the linearised ramps using our

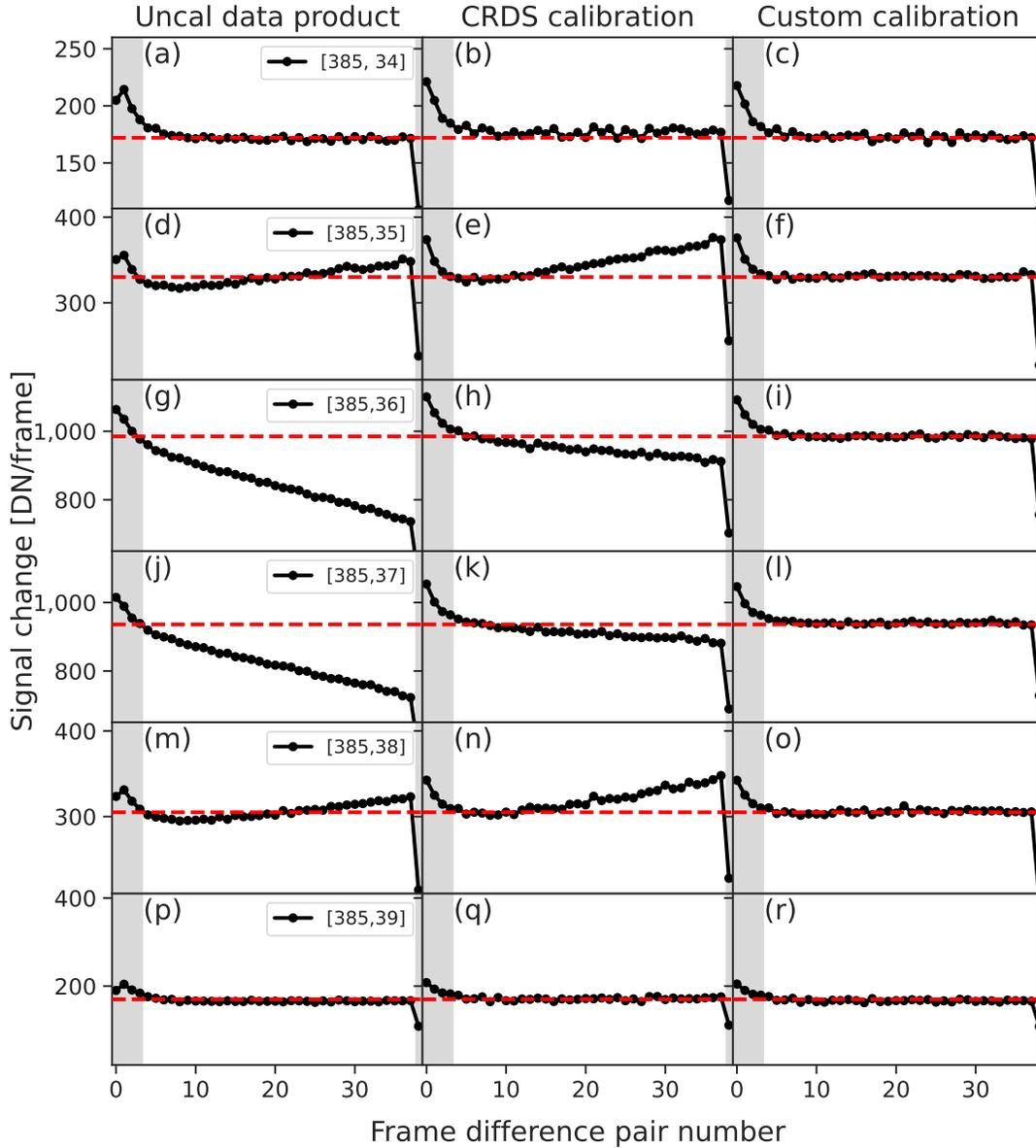
207 custom non-linearity procedure. One can see that our custom linearisation improves the linearity
208 of the detector pixels in the detector column at the centre of the spectral trace. To check the
209 linearisation in the of the detector signals in the direction across the spectral trace, we show in
210 Suppl. Inf. Figure 4 our results for several detector columns across the spectral PSF for detector
211 row 385, which corresponds to the shortest wavelengths in our spectra. Comparing our results
212 shown in this latter figure to the linearised ramps using the standard calibration, one can observe
213 again a substantial improvement in the linearity of the ramps. Note that for detector pixels with
214 a row number below 305 (equivalent to wavelengths beyond approximately $8 \mu\text{m}$), which see a
215 sufficiently low signal, no differences can be observed between our calibration and the standard
216 CRDS linearisation. This is expected, as the detector ramps for those pixels are expected to be
217 (near) linear.

218 Another test to check the non-linearity correction of the detector ramps is to look at the
219 FWHM of the spectral trace. As the central detector pixels in the spectral trace see a stronger signal,
220 they will be subject to a stronger non-linearity, leading to a broadening of the point spread function
221 of the individual readouts of the detector ramps during an integration⁵⁴. Suppl. Inf. Figure 5 shows
222 our estimates of the FWHM of the spectral trace for frame difference pairs along the detector
223 ramp. Panels (a) and (c) show the average FWHM of the spectral trace for frame difference pairs 5
224 to 10, which are the first samples not substantially influenced by the RSCD effects, and the frame
225 difference pairs 34 to 38, respectively. The data calibrated using the standard calibration (panel (a))
226 clearly shows a broadening of the point spread function (PSF) during an integration. The custom
227 calibrated data, however, shows no such effect (lower left panels). Panels (b) and (d) of Suppl.
228 Inf. Figure 5 show the average FWHM as a function of frame difference pair for the detector rows
229 382 to 386, which sample the shortest wavelengths and receive the highest photon flux from the
230 target. Again, the detector data calibrated with the standard calibration shows a broadening of the
231 PSF during the sampling up the ramp (panel (b)) while no such effect can be observed for the data
232 calibrated with our custom calibration (panel (d)). The shaded grey regions in the right panels
233 indicate the data not used in the final determination of the slopes of the detector ramps, as those
234 points are strongly affected by the RSCD and last-frame effects.

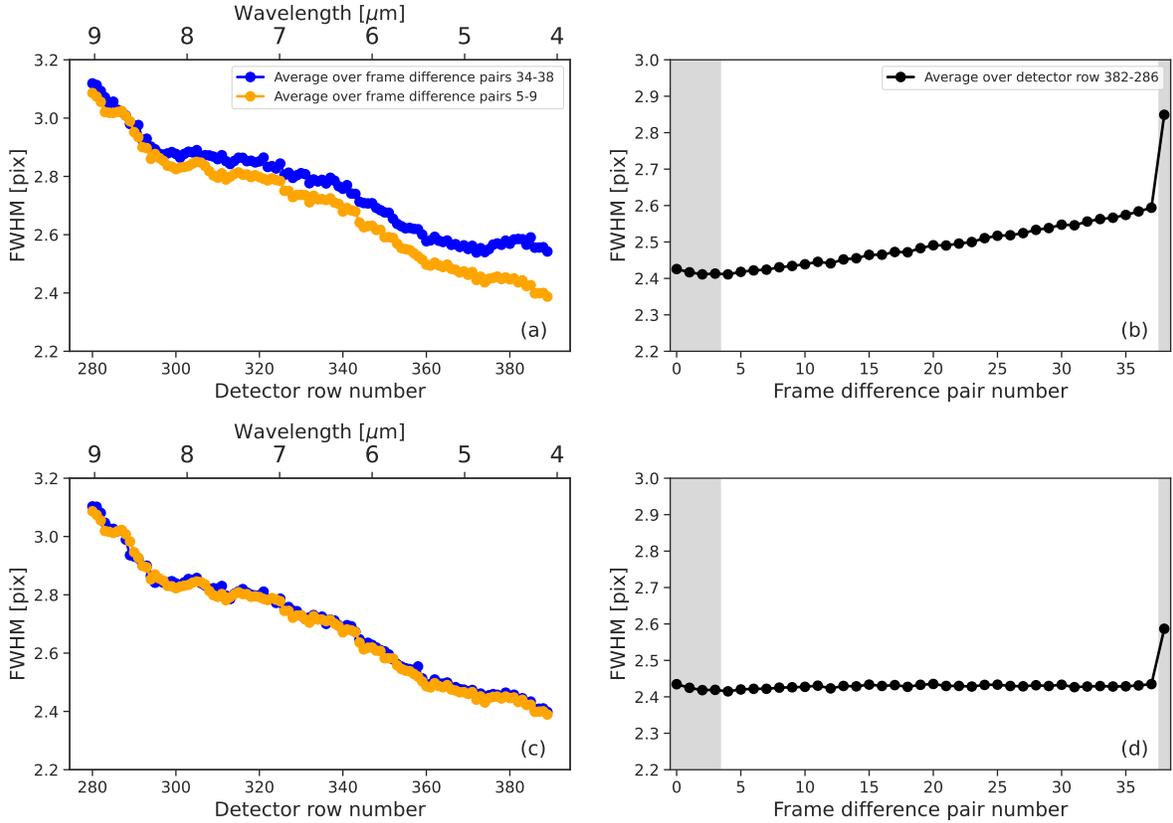
235 Finally, Suppl. Inf. Figure 6 shows the FWHM of the brightest pixels as a function of time.
236 As evident in that figure, the data calibrated using the standard CRDS calibration shows a drop of
237 the derived FWHM during the transit. The drop in the observed signal during the transit of about
238 2% is clearly enough to have a measurable effect on the photometric signal in case the non-linearity
239 of the detector ramps is not properly corrected. Applying our custom calibration for this dataset,
240 no significant effect of the transit on the FWHM estimate can be observed.



Suppl. Inf. – Figure 3: **Linearity of the detector ramps for selected detector pixels along the spectral trace.** Shown are the pair-wise differences of the samples of the detector ramps for a number of detector pixels. From left to right are shown the ramp gradients for the `uncal` data product, the standard `reset`, `dark` and `linearise` processed data using the calibration files from CRDS with `pmap` version 1030, and the data product using a custom calibration for the `linearise` and `dark` calibration steps. From top to bottom are shown the data for 5 detector pixels corresponding to the maximum signal in the spectral trace of WASP-107 at different wavelengths. The pixel indices are indicated in the legends shown in the left column. The shaded grey regions indicate the data not used in the final determination of the slopes of the detector ramps. The red dashed lines are plotted to guide the eye and represent the average linear slope after applying our custom calibration.



Suppl. Inf. – Figure 4: **Linearity of the detector ramps for selected pixels across the spectral trace.** The data shown in this figure is similar to Suppl. Inf. Figure 3 but now for 6 detector pixels corresponding to a cross-section (from top to bottom, detector columns 34 to 39) of the spectral trace of the dispersed light at detector row 385, the latter corresponding to the shortest wavelength in our spectra. Note that panels g,h,and i correspond to panels a,b, and c of Suppl. Inf. Figure 3.

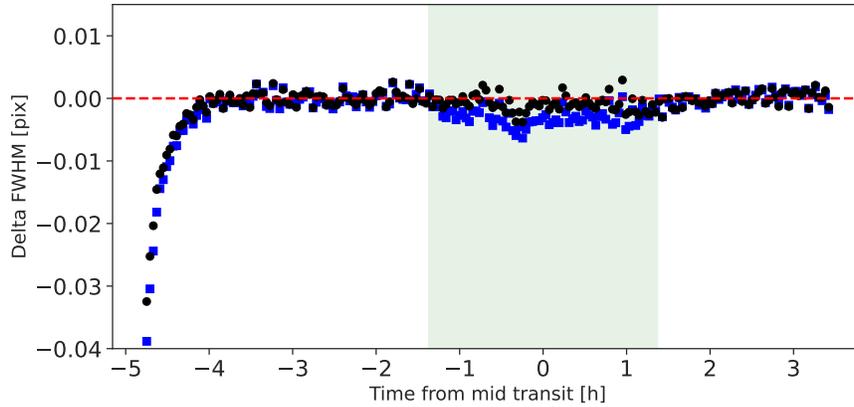


Suppl. Inf. – Figure 5: **FWHM estimates of the spectral trace for different detector ramp frames.** Panels (a) and (b) show the results for the standard calibrated detector ramps while panels (c) and (d) show the results from our custom calibrated data. Panels (a) and (c) show the average FWHM of the spectral trace for detector rows 280 to 390, for frame difference pairs 5 to 10, and 34 to 38, respectively. Panels (b) and (d) show the average FWHM as a function of frame difference pair number for detector rows with the highest signal. The shaded grey regions in the right panels indicate the data not used in the final determination of the slopes of the detector ramps.

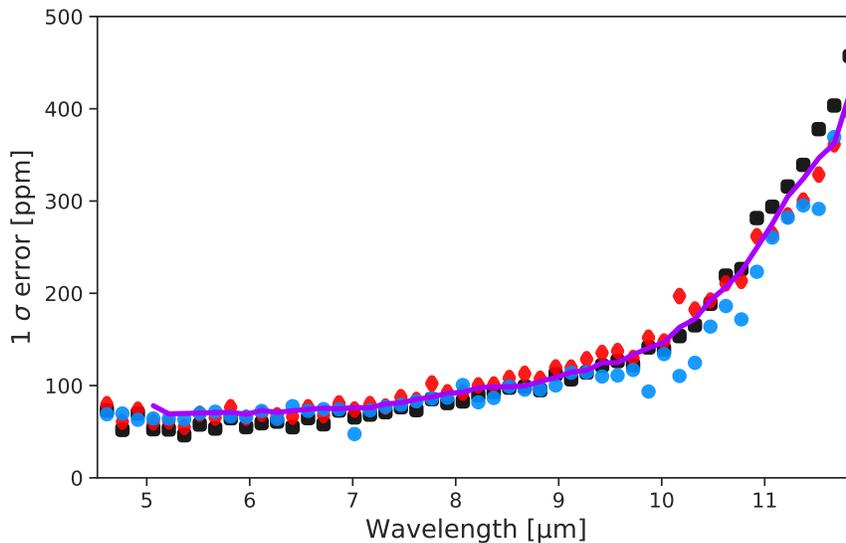
241 1.5. Comparison between the three JWST MIRI data reduction setups

242 To assess the quality of our data reductions and to identify possible biases between the 3 applied
 243 data reduction packages, we compared the uncertainty estimates and the differences in the derived
 244 transit depths.

245 We found that with a single-transit observation we reached a spectrophotometric precision
 246 of ~ 80 ppm in the $7-8 \mu\text{m}$ range at a spectral resolution $R=50$ (see Suppl. Inf. Figure 7). We
 247 used the JWST Exposure Time Calculator (ETC)⁵⁵ to estimate the signal-to-noise ratio on a single
 248 integration. Using this estimate, we simulated the light curves per spectral channel assuming



Suppl. Inf. – Figure 6: **Mean FWHM of the spectral trace for the detector rows 380 to 390.** The blue squares show the FWHM as a function of time after applying the standard calibration from CRDS, while the black dots show the measured FWHM after using our custom non-linearity correction. To show the non-linearity effects more clearly, each data point represents an average of 22 integrations. The red dashed line is plotted to guide the eye and represents zero variations. The shaded green area indicates the time window where the transit occurs.



Suppl. Inf. – Figure 7: **1σ uncertainties on the transit depths as a function of wavelength for the three data reductions.** The blue dots, red diamonds and black squares show, respectively, the error estimates using the CASCADE, the Eureka!, and the TEATRO codes. The purple solid line shows the photon, dark and read noise limited performance estimate based on ETC calculations for comparison. This plot displays the performance of the MIRI/LRS instrument and the reliability of the three data reduction methods.

249 a constant transit depth equal to the observed band-averaged transit depth. The simulated light
 250 curves were then fitted using the `CASCADE` package to estimate the error of the simulated transit
 251 spectrum. This estimate is shown as the solid curve in Extended Data Figure 7. All three data
 252 reductions are consistent with this estimate, indicating that our results are close to the photon
 253 noise limit of the instrument. Note that the noise limit estimate based on the ETC still contains
 254 uncertainties about the exact value of the detector gain and thus photon conversion efficiency and
 255 the level and modelling of the infrared background at longer wavelengths. The largest differences
 256 between the error estimates are observed at wavelengths beyond $10 \mu\text{m}$, which is expected as the
 257 signal to noise of the data rapidly drops beyond this wavelength.

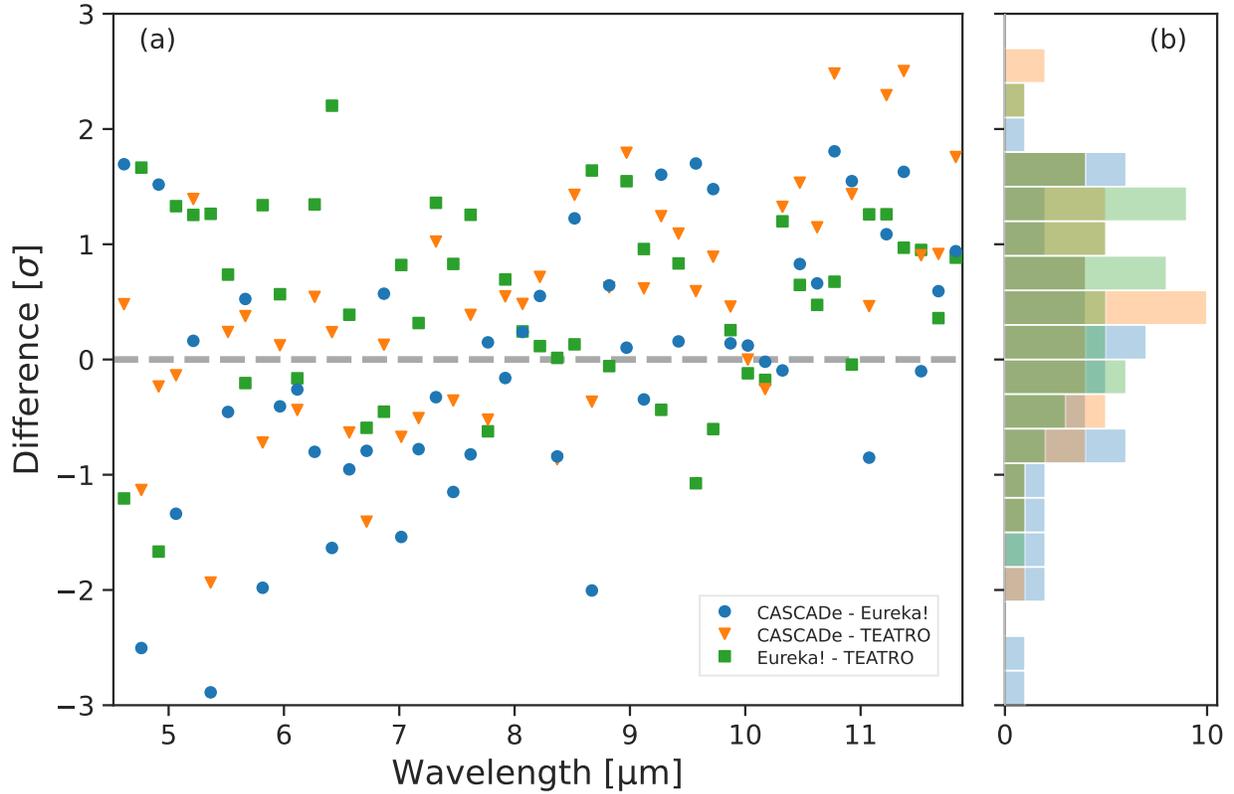
258 Our derived band-averaged transit depths are $20,463 \pm 39$ ppm (see also Figure 1), $20,552$
 259 ± 17 ppm, and $20,566 \pm 33$ ppm, for `CASCADE`, `Eureka!`, and `TEATRO`, respectively. These
 260 values are within 1σ of the previously measured transit depth at near-infrared wavelengths with
 261 the HST (see Sect. 2.3), and well within 3σ from each other, showing that all 3 methods give a
 262 consistent estimate of the overall transit depth.

For the comparison of the 3 derived transit spectra, we calculated the difference between
 pairs of data using a different reduction method as

$$\frac{\text{TD}_1(\lambda) - \text{TD}_2(\lambda)}{\sqrt{\text{err}_1^2(\lambda) + \text{err}_2^2(\lambda)}}, \quad (1)$$

263 with TD_1 and TD_2 being the transit depth of reduction method 1, or 2, respectively, at wavelength
 264 λ and err_1 and err_2 being the corresponding 1σ errors shown in Suppl. Inf. Figure 7. As can be
 265 seen in Suppl. Inf. Figure 8, the three data reduction methods are within 3σ agreement, 96% of
 266 the points being in 2σ agreement. For wavelengths shorter than $10 \mu\text{m}$, no significant systematic
 267 deviations between the data reductions can be observed. For the longer wavelengths, a small
 268 positive offset can be seen in Suppl. Inf. Figure 8 for the three reductions that remains, however,
 269 within 1σ difference.

270 The observed systematic trend in transit depth differences for the longer wavelengths can be
 271 attributed to the different systematics models employed by the `CASCADE`, `TEATRO` and `Eureka!`
 272 reduction codes. `TEATRO` cuts the initial ramp caused by persistence effects at the beginning of
 273 the observation and fits only a linear trend, `Eureka!` includes both an exponential model at the
 274 beginning of the observation and a polynomial one that fits any bending of the light curve, and
 275 in the `CASCADE` analysis, the initial response drift caused by persistence effects is also removed
 276 and the fitted systematics model is constructed from the data itself (see ref. ⁵⁶) using the causal
 277 connection between the different wavelength channels in addition to the time, trace position and
 278 FWHM. Small differences in the curvature of the baseline will then translate in small differences of
 279 the fitted transit depth. **In general, however, these results demonstrate that all three reduction**
 280 **methods are compliant with each other.**



Suppl. Inf. – Figure 8: **Transit depth differences between the three data reduction methods as a function of wavelength.** In panel (a), the blue dots show the differences in units of σ between the CASCADe and Eureka! reductions, the orange triangles the differences between the CASCADe and TEATRO reductions, and the green squares the differences between the Eureka! and TEATRO reductions as computed from Eq. 1. The histograms in panel (b) show the number of points in agreement within the different σ ranges, with colours identical to those in panel (a).

281 2. Ancillary data

282 2.1. NUV data

283 Contemporaneously with the JWST observations, from 2023 January 5 to 29, *Swift* conducted a
 284 ‘Target of Opportunity’ (ToO) observing campaign (Target Id. 15428) for WASP-107, with the
 285 UVOT⁵⁷ as the primary instrument, and utilising the uvm2 filter to optimise the waveband defini-
 286 tion and avoid redward ‘leaks’ present in uvw2⁵⁸. The uvm2 filter has a central wavelength of
 287 2246 Å and a FWHM of 498 Å⁵⁹. The observing campaign consisted of 13 *observation segments*

288 comprising a total of 20 *snapshots* (i.e. continuous exposure periods). Each segment was typically
289 $\sim 1.5 - 2$ ks in duration; with snapshots ranging from the full segment length down to ~ 500 s. All
290 observations were performed in *full imaging* mode, i.e. the snapshot duration was the maximum
291 available time resolution.

292 Data from *Swift* observations are automatically processed by the *Swift*-project pipeline, and
293 placed in an online publicly-accessible archive. The required data products, all FITS-format files,
294 were downloaded from the archive, on 2023 February 22. These UVOT data products were, for
295 each of the 13 observation segments, the segment image file summed over the snapshots in the
296 segment (1 or 2 in the present case), the snapshot image file containing the individual snapshot
297 images and the detected sources catalogue table. The photometry presented in the images is in units
298 of recorded counts/pixel, where 1 pixel = 1×1 arcsec². The ancillary data and visual inspection
299 of the snapshot-level images, indicated that one snapshot (segment-9, snapshot-1) had an aspect-
300 solution problem. These data were excluded from the associated segment image and from further
301 consideration in our analysis, and had been excluded from the automatic pipeline processing. All
302 the following results reported here were based on the segment-level images, i.e. we have available
303 13 photometry values. We verified that, for the seven segments containing two snapshots, the
304 photometry values were consistent within the statistical errors.

305 The information in the pipeline-generated source catalogue included, for each detected source,
306 sky-coordinates and photometric values, the latter at successive levels of correction, from ‘raw’
307 counts through to PSF-corrected isophotal flux densities. The pipeline source detection employs
308 the *Swift* tool `uvotdetect`, which in turn invokes the SourceExtractor (SE) package⁶⁰ to per-
309 form source detection and characterisation, including isophotal signal extraction. For WASP-107,
310 we identified, with no ambiguity, the relevant row of the source table based on an estimated
311 epoch=J2023 position using coordinates and proper motions from CDS-SIMBAD. The UV co-
312 ordinates for all segments lay within 1 arcsec of the estimated optical stellar location and within
313 0.5 arcsec of the mean UV position. The data were analysed interactively using the *Swift* software
314 tools in `HEASOFT` 6.31.1 and the latest available calibration files (CALDB dated 2021-11-08), with
315 `ds9` to display the images, and `TOPCAT/STILTS`⁶¹ to manipulate and view the source-catalogue
316 tables. As recommended by the *Swift* project, we used the `uvotmaghist` tool, with a source-data
317 extraction radius of 5 arcsec centred on the mean UV position, to perform aperture photometry for
318 WASP-107 on the 13 segment images. We used an annular background region with the same cen-
319 tre, and inner and outer radii of 20 and 40 arcsec, respectively. We determined by inspection of
320 the UVOT source detections and visually on the images, that the selected background region was
321 free of contamination from nearby sources, and the inner radius was sufficiently removed from the
322 target source to avoid significant contamination.

323 All 13 aperture-photometry values are consistent within the statistical errors (which dominate
324 the overall errors, as reported by `uvotmaghist`), with a reduced chi-square $\chi^2/\text{dof} \sim 1$ about
325 the mean (with the degrees of freedom, dof, being 12); and at $\sim 10\%$, the sample standard devia-
326 tion was comparable with the 1σ error on the individual data values. The source count rate from

327 individual segments was $\sim 0.1 \pm 0.01$ ct/s. The mean flux density received at Earth distance was
 328 1.08 ± 0.03 erg cm⁻² s⁻¹ Å⁻¹, corresponding to a luminosity of 5.4 erg s⁻¹ Å⁻¹ and a flux density
 329 incident on WASP-107b of 6.4 erg cm⁻² s⁻¹ Å⁻¹. We found good agreement between the flux
 330 values from `uvotmaghist` aperture photometry and `uvotdetect/SE` isophotal extraction. In
 331 making the conversion from instrumental count rate to calibrated flux values, `uvotmaghist` and
 332 `uvotdetect` assume a gamma-ray-burst-type spectrum, given the prime objective of the mission.
 333 However, the difference for a cool-star spectrum is expected to be no more than $\sim 15\%$ ⁶². Given
 334 the proximity of WASP-107 to Earth (~ 65 pc) and relatively high galactic latitude (~ 52 deg), we
 335 have not attempted to make any allowance for extinction along the line-of-sight. We note that the
 336 NUV irradiance of WASP-107b by its host star is (by chance) comparable (within a factor ~ 2)
 337 with that of the Earth by the Sun⁶³, the larger separation of the latter pair being offset by the Sun's
 338 hotter and larger-area photosphere (spectral type G2 V versus K6 V).

339 2.2. X-ray data

340 XMM-Newton has observed the host star WASP-107 on 2018-06-22 (ObsID 0830190901) with the
 341 EPIC X-ray telescope (pn, MOS1, MOS2 instruments; all utilising the `THIN` filter)^{64,65} yielding
 342 an exposure time of ~ 60 ks in a single, continuous observation. The host star was detected in X-
 343 rays⁶⁶⁻⁶⁹, with an X-ray flux in the order of 1×10^{-14} erg cm⁻² s⁻¹ in the soft X-rays, equivalent
 344 to a luminosity of $\sim (4 - 7) \times 10^{27}$ erg s⁻¹ (depending on the adopted spectral energy range) for a
 345 distance of 64.7 pc, yielding an X-ray flux incident on WASP-107b of $\sim 5 \times 10^2$ erg cm⁻² s⁻¹ [68].

346 The flux and luminosity values in the cited literature have a wide range with differences of
 347 up to $\sim 40\%$. Therefore, we have performed our own analysis of the XMM-Newton X-ray data,
 348 using the SAS data-analysis package, to extract source (and background) counts as a function of
 349 photon energy. We binned the spectra to bins with at least 25 source counts each to allow for
 350 proper application of χ^2 fit statistics. The source count-rate was ~ 0.01 ct/s, and the time-series
 351 showed no evidence for variability. The XSPEC package³³ was used for fitting optically-thin
 352 thermal models in collisional equilibrium (coronal models) to the extracted spectra, having two
 353 temperature components representing a wider, presumably continuous distribution of plasma, and
 354 a photoelectric absorption component to account for interstellar absorption. The data from all
 355 three EPIC instruments were fitted simultaneously after removing the notoriously difficult lowest-
 356 energy spectral bins below 0.2 keV. Following ref.⁶⁹, we adopted a fixed, interstellar photoelectric
 357 absorption component equivalent to a hydrogen column density of $N_{\text{H}} = 2 \times 10^{19}$ cm⁻² given the
 358 distance to WASP-107.

359 Owing to the relatively modest signal-to-noise ratio (SNR) of the spectrum, the fits converged
 360 to two classes of solutions in very different temperature regimes. We discriminated between them
 361 by requiring that the solution fulfils the general scaling law between average X-ray stellar surface
 362 flux and the logarithmically averaged coronal temperature, using the emission measures (EM =

363 $\int n_e n_i dV$, where n_e and n_i are the coronal electron and ion number densities, respectively, and V
364 is the coronal volume occupied by the plasma) of the components as weights ⁷¹.

365 The coronal abundances are important quantities for such a fit but the limited SNR does not
366 allow individual element abundances to be retrieved. We therefore used one common abundance
367 factor Z for all elements with respect to their solar photospheric values (relative to H). We then
368 stepped through a grid of fixed Z values, fitting the spectrum for each Z , and then searching for
369 a solution that fulfils the coronal flux-temperature scaling relation while providing low χ^2 value.
370 Such a solution exists, with a reduced χ^2 value of 0.94 for $Z = 0.22$. The formal best-fit yielded
371 temperatures of $T_1 = 1.69$ MK (million K) and $T_2 = 8.6$ MK, with an emission-measure ratio
372 $EM_2/EM_1 = 0.54$. The EM-weighted logarithmic average of the coronal temperatures as defined
373 in ref. ⁷¹ ($\log \bar{T} = \sum_i EM_i \log T_i / \sum_i EM_i$) is $\bar{T} = 2.96$ MK, a relatively modest temperature as
374 expected for a low-activity star. The corresponding absorption-corrected X-ray flux at Earth in
375 the spectral range of 0.1–10 keV is 1.76×10^{-14} erg cm⁻² s⁻¹, equivalent to a luminosity of
376 $L_X \approx 8.8 \times 10^{27}$ erg s⁻¹ for a distance of 64.7 pc, yielding an X-ray flux incident on WASP-107b
377 of $\sim 9.7 \times 10^2$ erg cm⁻² s⁻¹.

378 A rotation period of 17.5 ± 1.5 d was derived from *Kepler* K2 photometry ⁷², while the
379 WASP-107 photometry yields an estimate of 17 ± 1 d ¹. From gyrochronology modelling and the
380 rotation period derived from the WASP photometry, an age estimate of 3.4 ± 0.3 Gyr has been
381 derived ². From recent studies of the activity-age-rotation relation for cool main-sequence stars ⁷³
382 we would expect an X-ray luminosity in the order of 10^{28} erg s⁻¹ for a star with a mass of $0.68 M_\odot$
383 and an age of a few Gyr. This matches our derived X-ray luminosity very well.

384 2.3. HST data

385 A transit of WASP-107b was observed on June 5–6, 2017 with the Wide Field Camera 3 (WFC3)
386 instrument onboard the *Hubble Space Telescope* (HST) using the 1.41 μm Grism (G141). The
387 data were obtained as part of the general observer program 14915 (P.I. L. Kreidberg). We refer to
388 ref. ⁴ for details on the observations and the initial data analysis. We performed an independent
389 calibration and light curve fitting of the HST data using the CASCADe package. For details on the
390 use of CASCADe on HST data, see ref. ⁴⁸. We ran CASCADe using the same orbital and stellar
391 parameters as used for the analysis of the JWST MIRI light curve data (see Methods), except for
392 the ephemeris, for which we used the value published in ref. ⁴². This latter value gives a mid-transit
393 time within 28 s of the value derived by ref. ⁴. We choose to use the value of ref. ⁴² as it resulted in
394 slightly lower residuals after subtracting the best fit light curve model.

395 Before fitting the spectral light curve data, we binned the original spectral resolution of the
396 HST/WFC3 data to a uniform wavelength grid with a spectral bin width of $0.00757 \mu\text{m}$. Of the first
397 HST orbit, the first 6 spatial scans were not used in our analysis as they showed a very strong initial

398 drift. For the systematics model (see ref. ⁴⁸ for details), the additional regression parameters were
399 the time variable and the trace position. The derived transit spectrum is plotted in the top panel of
400 Figure 9 (blue squares). We derived a band-averaged transit depth of $20,448 \pm 79$ ppm, consistent
401 within 1σ of the transit depth derived from the JWST MIRI observations. The errors in the transit
402 spectrum and band-averaged depth were estimated by performing a bootstrap analysis. For the
403 retrieval analysis, we binned the spectrum to a slightly lower spectral resolution, with a spectral
404 bin width of about $0.02 \mu\text{m}$ to increase the signal-to-noise ratio per spectral channel and to ensure
405 that each spectral bin is independent. A comparison of the spectrum derived using the `CASCADE`
406 package to the previous published spectrum of ref. ⁴ can be seen in the lower panel of Suppl. Inf.
407 Figure 9. Both spectra are in excellent agreement with each other. The band-averaged transit
408 depth of ref. ⁴ is 145 ppm, less than 2σ , larger than the averaged depth we derived. This difference
409 is consistent with the quoted error bars and can easily be explained by the large systematics and
410 sparse time sampling of the data, in combination with the different methods used to fit the baselines
411 of the spectral light curves.

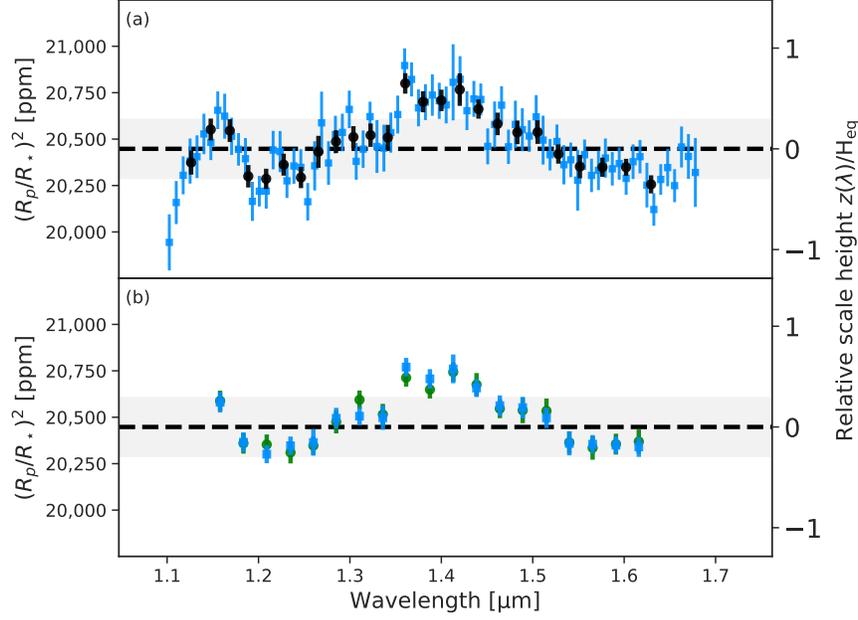
412 3. Retrieval analysis

413 To constrain the atmospheric properties of WASP-107b we carried out retrievals with two different
414 codes: `ARciS` ¹³ (see Sect. 3.1) and `petitRADTRANS` ¹⁴ (see Sect. 3.2).

415 3.1. `ARciS` retrieval setup

416 The atmospheric modelling and retrieval code `ARciS` ¹³ was used to perform retrievals using a free
417 parameterised retrieval setup. Our nominal model for `ARciS` consists of a pressure-temperature
418 profile with a constant value of $d \log T / d \log P$. The temperature at a pressure level of 1 bar is
419 retrieved. Since this is too deep in the atmosphere to be observable, we report the temperature
420 and uncertainties derived from this profile at $P = 10^{-5}$ bar, which is the pressure level dominating
421 the observed transit spectrum. It is important to realise that the derived temperature gradient is
422 only representative of the uppermost atmosphere that we probe with the observed transit spectrum.
423 We include as absorbing molecular species H_2O ⁷⁷, CO ⁷⁸, CO_2 ⁷⁹, CH_4 ⁸⁰, C_2H_2 ⁸¹, SO_2 ⁸², SO ⁸³,
424 H_2S ⁸⁴, SiO ⁸⁵, HCN ⁸⁶, NH_3 ⁸⁷, and PH_3 ⁸⁸. The temperature and pressure dependent opacities were
425 computed from the line lists and formatted for `ARciS` input ⁸⁹. For each species, a log-uniform
426 prior for the volume mixing ratio from 10^{-12} to 1 was taken. The remaining atmosphere consists
427 of H_2 and He with a number density ratio of 0.85:0.15.

The cloud is modelled as a Gaussian layer with a certain width and optical depth at $9 \mu\text{m}$.



Suppl. Inf. – Figure 9: **HST/WFC3 transmission spectrum of WASP-107b**. Panel (a) shows the transmission spectrum derived using the `CASCADE` package (blue squares) together with a slightly lower resolution version of the same spectrum used in the retrieval analysis (black dots). Panel (b) shows the comparison between the spectrum derived by ref. ⁴ (green dots) and the `CASCADE` spectrum (blue squares), binned to the published wavelength resolution of ref. ⁴. In both panels, the band-averaged transit depth is indicated by the dashed vertical line. The shaded grey area represents the 95 % confidence interval of the mean transit depth. The right y-axis gives the planetary spectrum in units of atmospheric scale height of the planetary atmosphere assuming it to be hydrogen dominated. In panel (b), the ref. ⁴ spectrum was shifted downwards by 145 ppm to the same mean transit depth as found in the `CASCADE` analysis for better comparison between the two spectra.

The specific cloud density as a function of pressure P is given by

$$f_{\text{cloud}} = \frac{g \tau_{\text{cloud}}}{\kappa_{\text{cloud}} P \sigma_P \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_P^2} \left[\log \frac{P}{P_0}\right]^2\right), \quad (2)$$

428 where g is the gravitational acceleration of the planet, κ_{cloud} is the cloud opacity at $9 \mu\text{m}$. The
 429 parameters τ_{cloud} (the cloud optical depth), P_0 (the cloud pressure), and σ_P (the cloud width)
 430 are retrieval parameters. Finally, we consider partial cloud coverage using a retrieval parameter
 431 f_{coverage} between zero and one.

432 For the composition of the cloud particles we take a mixture of amorphous MgSiO_3 ⁹⁰,
 433 SiO_2 ^{91–93}, SiO ⁹⁴ and amorphous carbon ⁹⁵. We mix the refractive indices of these materials using
 434 effective medium theory. We use the standard multi-component Bruggeman mixing rule. This

435 mixing rule has the benefit that all materials are treated the same and there is no dominant matrix
 436 material defined (as is the case in the simpler Maxwell-Garnett mixing rule). Note that amorphous
 437 carbon provides a continuum opacity and can be considered a placeholder for any cloud compo-
 438 nent with a featureless spectrum (like, for example, metallic iron). The size of the particles, a_{cloud} ,
 439 is assumed constant throughout the cloud and the optical properties are computed using irregu-
 440 larly shaped particles simulated by the DHS (Distribution of Hollow Spheres) method⁹⁶ where the
 441 irregularity parameter f_{max} , which describes how far the particle shape deviates from a homoge-
 442 neous sphere, is another free parameter. The prior for a_{cloud} is taken to be log-uniform from 0.01
 443 to 10 μm . For f_{max} we take a linear prior from 0 to 1.

444 The above setup has 24 free parameters (1 for the radius, 2 for the T - P structure, 12 molecules,
 445 and 9 for the cloud structure and particle size/shape). We add one additional parameter allowing
 446 for scaling of the HST data with respect to the JWST observations with a 0.38% Gaussian prior
 447 corresponding to the uncertainty on the band-averaged transit depth. All parameters and corre-
 448 sponding prior ranges are given in Suppl. Inf. Table 2. In the ARCiS retrievals we include the full
 449 HST and the MIRI spectrum. In addition to this base model we also perform retrievals where one
 450 of the molecular components is removed to test its significance. We convert the natural logarithm
 451 of the Bayes factors into a rejection significance using the formalism presented in ref.⁹⁷. To test the
 452 significance of the clouds we perform retrievals using no clouds and one where the cloud opacity
 453 is replaced with a parameterised opacity. A full corner plot showing the posterior distribution for
 454 all retrieval parameters is shown in Suppl. Inf. Figure 10.

455 3.2. petitRADTRANS retrieval setup

456 Our nominal petitRADTRANS (pRT) forward model assumed an isothermal planetary atmo-
 457 sphere with a uniform prior on temperature from 200 to 2,000 K. The following line absorber
 458 species were included: H_2O and CO ⁷⁸, C_2H_2 ⁸¹, CO_2 ⁷⁹, CH_4 ⁸⁰, SO_2 ⁸², H_2S ⁸⁴, SiO ⁸⁵, HCN ⁸⁶,
 459 NH_3 ⁸⁷ and PH_3 ⁸⁸. The opacities of all but the first two species were calculated in the pRT format
 460 by ref.⁸⁹. The mass fractions of all molecules were retrieved freely, with a log-uniform prior from
 461 10^{-10} to 1. The remaining atmospheric gas was assumed to be in the form of H_2 and He, at a
 462 mass ratio of 0.72:0.28. The retrieved molecular mass fractions were converted to volume mixing
 463 ratios for comparison with the ARCiS results. As gas continuum opacities we considered H_2 - H_2
 464 and H_2 -He collision induced absorption in addition to H_2 and He Rayleigh scattering⁹⁸⁻¹⁰⁵. The
 465 planetary gravity was retrieved using tight priors from band-averaged light curve measurements
 466 on the planet radius and from radial velocity (RV) measurements on the mass¹. The planet ra-
 467 dius at the reference pressure (taken to be 0.01 bar) was retrieved as a separate free parameter,
 468 using a uniform prior from 0.7 to 2 R_{J} . For our ‘complex’ cloud model we included amorphous
 469 MgSiO_3 ¹⁰⁶, SiO_2 ⁹¹⁻⁹³ and crystalline KCl ⁹² clouds, considering them to be irregularly shaped
 470 (DHS method⁹⁶). The cloud mass fractions at the base of the cloud had log-uniform priors from
 471 10^{-10} to 1, and the cloud base pressures P_{base} were retrieved with a log-uniform prior from 10^{-6}
 472 to 1,000 bar. Above the cloud deck (at lower pressures) the cloud mass fraction was defined as

473 $X_{\text{base}} (P/P_{\text{base}})^{f_{\text{sed}}}$, where X_{base} is the mass fraction at the cloud base and f_{sed} is the settling pa-
474 rameter, defined as the cloud particles’ mass-averaged ratio of settling and mixing velocities. The
475 prior on f_{sed} was uniform, ranging from 0 to 10. The cloud particle sizes were then found as de-
476 scribed in ref. ¹⁰⁷, namely by assuming a log-normal size distribution, and making use of f_{sed} , K_{zz} ,
477 and σ_g , where K_{zz} is the vertical eddy diffusion coefficient and σ_g is the width of the log-normal
478 particle size distribution. We assumed a log-uniform prior from 10^5 to 10^{13} $\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$ for K_{zz} and
479 a log-uniform prior on x_σ from 10^{-2} to 1, where $\sigma_g = 1 + 2x_\sigma$. For our ‘simple’ cloud model
480 we replaced the cloud extinction opacity by $\kappa(\lambda, P) = \kappa_{\text{base}} [1 + (\lambda/\lambda_0)^{-p}] (P/P_{\text{base}})^{f_{\text{sed}}}$, where
481 f_{sed} and P_{base} have the same meaning and priors as before. The opacity at the cloud base was
482 retrieved with a log-uniform prior from 10^{-20} to 10^{20} $\text{cm}^2 \text{g}^{-1}$, λ_0 with a log-uniform prior from
483 0.01 to 100 μm , and P with a uniform prior from 0 to 6. For both forward models we allowed for
484 a multiplicative flux scaling by 0.38% and 0.185% (Gaussian standard deviation of prior), for the
485 HST and JWST data, respectively, corresponding to the uncertainties on the band-averaged tran-
486 sit depths. In the `petitRADTRANS` retrievals we include the full HST spectrum and the MIRI
487 spectrum. All parameters and corresponding prior ranges are given in Suppl. Inf. Table 2. To con-
488 vert the natural logarithm of the Bayes factors, $\Delta\log(Z)$, into a rejection significance we use the
489 formalism presented in ref. ⁹⁷.

490 A full corner plot showing the posterior distribution for all retrieval parameters is shown in
491 Suppl. Inf. Figure 11

492 3.3. Silicate cloud detection significance

In order to determine the significance of the silicate cloud contribution to the retrieval we compare
the Bayesian evidence to that of a retrieval performed using a parameterised cloud setup and to a
retrieval using an atmospheric setup without clouds. The parameterised cloud setup uses exactly
the same cloud structure but a wavelength-dependent opacity characterised by

$$\kappa(\lambda) \propto (1 + (\lambda/\lambda_0)^p)^{-1}, \quad (3)$$

493 with the two parameters λ_0 and p being retrieval parameters. Eq. (3) captures the expected be-
494 haviour of cloud opacities, being largely constant at short wavelengths (cut-off set by the wave-
495 length λ_0) and having a slope at large wavelengths (set by the dimensionless parameter p). The
496 Bayes factor of the silicate cloud model with respect to the parameterised cloud model tells us if
497 the 10 μm silicate feature is required to fit the data. The comparison of the silicate cloud model
498 to the model without clouds tells us if clouds are needed at all in the atmosphere. Furthermore,
499 using `ARCIS`, we compare the cloud setup with only a single cloud component. The results are
500 summarised in Suppl. Inf. Table 3. As can be seen, all setups including any silicate component (ei-
501 ther SiO , SiO_2 or MgSiO_3) are preferred over simplified setups. The cloud containing only carbon
502 opacity acts very similar to our parameterised opacity as it only provides a featureless continuum.
503 It is therefore preferred over no clouds but not preferred over the parameterised setup. We also

Suppl. Inf. – Table 2: **Parameters and prior ranges used in the ARCIS and petitRADTRANS (pRT) retrieval analysis.**

Parameter	Prior range		Prior type
	ARCIS	pRT	
T at 1 bar [K]	100 – 2000	200 – 2000	linear
$d \log T / d \log P$	–0.1 – 0.1	0 ^(a)	linear
$R_p [R_{\text{Jup}}]$	0.7 – 1.14	0.7 – 2.0	linear
$\log_{10}(g)$ (cgs units)	2.47 ^(a)	2.43 ± 0.05	Gaussian
Molecular abundances	$10^{-12} - 1$ ^(b)	$10^{-10} - 1$ ^(c)	logarithmic
Cloud properties			
P_0 [bar]	$10^{-5} - 10^3$	-	logarithmic
σ_P	0.1 – 10	-	logarithmic
τ_{cloud}	$10^{-4} - 10^3$	-	logarithmic
$a_{\text{cloud}} [\mu\text{m}]$	$10^{-2} - 10$	-	logarithmic
f_{max}	0 – 1	-	linear
Material mass fractions	0 – 1	-	linear
f_{coverage}	0 – 1	-	linear
P_{base} [bar] per material	-	$10^{-6} - 10^3$	logarithmic
X_{base} per material	-	$10^{-10} - 1$	logarithmic
f_{sed}	-	0 – 10	linear
K_{zz} [$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$]	-	$10^5 - 10^{13}$	logarithmic
x_σ	-	$10^{-2} - 1$	logarithmic

^(a) fixed value. ^(b) volume mixing ratio. ^(c) mass fraction.

506 To investigate how sensitive our silicate cloud detection is to specific wavelength regions in
507 the MIRI spectrum, we performed the analysis described above for either the full MIRI wavelength
508 range and additionally using only the MIRI spectrum up to a given wavelength λ_{max} . With this
509 exercise we aim to establish the robustness of our retrieved cloud setup acknowledging ongoing
510 discussions in the community on potential higher systematic errors for MIRI transit depths at
511 longer wavelengths. We emphasise here that in our data we see no indications of any shadowed
512 region that would increase the systematic errors for wavelengths between 10 and $\sim 12 \mu\text{m}$.

513 It is expected that the significance of the silicate detection drops quickly if we exclude all
514 wavelengths longer than $10 \mu\text{m}$ because this is where the silicate feature is present (see Suppl. Inf. Fig-
515 ure 12). In Extended Data Figure 5 we show the resulting detection significance as a function of the
516 maximum wavelength used in the analysis. It is clear that clouds are required no matter what wave-
517 length range we choose. As expected, if we remove the entire wavelength range where the silicate
518 feature is present (so wavelengths above $9.5 \mu\text{m}$) the silicate clouds are no longer detected. In these

Suppl. Inf. – Table 3: **Significance of improvement of the fit with ARCiS for various cloud setups with respect to no clouds or with respect to clouds with a parameterised opacity.**

Setup	CASCADE	TEATRO	Eureka!
With respect to no cloud			
All cloud components	9.2σ	_ ^(a)	_ ^(a)
Parameterised opacity	6.0σ	_ ^(a)	_ ^(a)
Only SiO	9.7σ	_ ^(a)	_ ^(a)
Only SiO ₂	7.7σ	_ ^(a)	_ ^(a)
Only MgSiO ₃	8.8σ	_ ^(a)	_ ^(a)
Only carbon	5.8σ	_ ^(a)	_ ^(a)
With respect to a cloud with parameterised opacity			
All cloud components	7.2σ	7.6σ	5.2σ
Only SiO	7.8σ	_ ^(a)	_ ^(a)
Only SiO ₂	5.1σ	_ ^(a)	_ ^(a)
Only MgSiO ₃	6.6σ	_ ^(a)	_ ^(a)
Only carbon	-2.2σ	_ ^(a)	_ ^(a)

^(a) not tested.

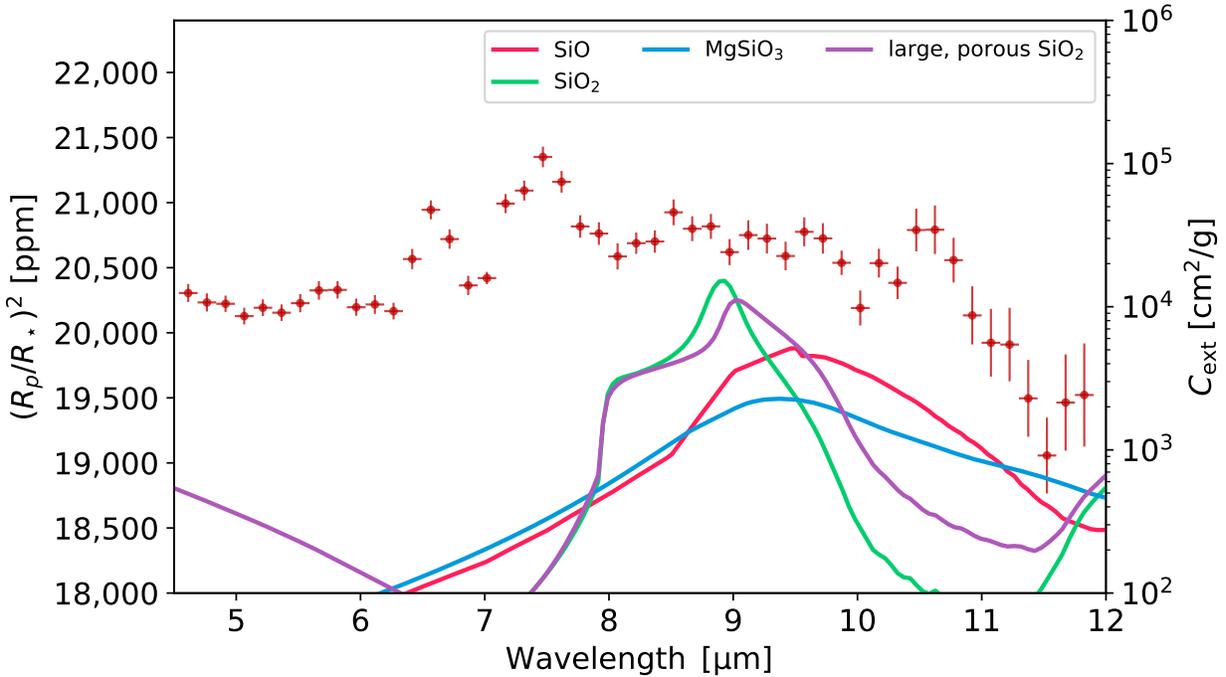
519 cases it is seen that the model prefers the setup with fewer parameters, which is the parameterised
 520 cloud setup.

521 Silicate clouds are preferred with a significance of 5.7σ even if we remove all MIRI obser-
 522 vation with wavelengths longer than $10\mu\text{m}$. This significance quickly increases if we increase the
 523 maximum wavelength used in the analysis showing that the detection of silicate clouds is a robust
 524 result.

525 4. (Photo)chemical models

526 4.1. (Photo)chemical model setup

527 The goal of the forward (photo)chemical models is to understand the gas-phase formation of
 528 molecules in the atmosphere of WASP-107b and to derive the sensitivity of the predicted molar
 529 fractions on the model’s input parameters. Since the primary focus is on the gas-phase formation
 530 of SO₂, CH₄, and H₂O, no cloud-formation processes have been included in these models.



Suppl. Inf. – Figure 12: **Comparison of the extinction coefficient of the silicate cloud particles with the transit spectrum of WASP-107b.** The extinction curves are computed for $0.01 \mu\text{m}$ solid particles for SiO (red), SiO₂ (green) and MgSiO₃ (blue), representative of the particle size found by the ARCiS retrievals. The purple curve is computed using a size distribution of particles between 0.1 and $2 \mu\text{m}$ and a porosity of 0.25 (representative of the particles found by the pRT retrievals).

531 In the case of WASP-107b, a tidally-locked planet with an equilibrium temperature of ~ 740 K,
 532 and orbiting a K6 dwarf host star ^{2,108}, it is anticipated that there will be no significant spatial
 533 gradients in the temperature structure and zonal wind speeds ¹⁰⁹. Consequently, we adopt a one-
 534 dimensional configuration to examine the chemical abundance distribution within the atmosphere
 535 of WASP-107b.

536 The forward chemical models ^{?,110} for WASP-107b were computed considering a host star
 537 radius, R_* , of $0.676 R_\odot$, a planet radius R_p of $0.94 R_J$, and a planet mass M_p of $30.51 M_\oplus$ ¹⁰⁸. The
 538 temperature-pressure profile (T - P) has been computed using the analytical equation derived by
 539 ref. ³², assuming an infrared (IR) atmosphere opacity $\kappa_{\text{IR}} = 0.01$, a ratio between optical and IR
 540 opacity $\gamma = 0.4$, an equilibrium temperature $T_{\text{eq}} = 740$ K, and an intrinsic temperature, T_{int} , in the
 541 range of $250 - 600$ K. Vertical mixing in 1D chemical models is commonly parameterized by eddy
 542 diffusion. However, for exoplanets, the eddy diffusion coefficient K_{zz} is loosely defined ¹⁰⁹. For
 543 the 1D photochemical models used in this work, we assume a constant K_{zz} , with values varying
 544 between $10^8 - 10^{11} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$. We explore a range of C/O ratios, from solar (0.55) to sub-solar (0.1),
 545 the lower limit informed by planet formation models ¹¹² that predict a C/O ratio for the planet above

546 ~ 0.15 . Our base model used in Extended Data Figure 3 has an intrinsic temperature of 400 K, a
547 solar C/O ratio, a metallicity of $10\times$ solar, and a $\log_{10}(K_{zz}, \text{cgs}) = 10$.

548 Our 1D chemical kinetics model treats thermochemical and photochemical reactions. The
549 thermochemical network is based on the C–H–N–O–S network from VULCAN⁹ for reduced at-
550 mospheres containing 89 neutral C-, H-, O-, N-, and S-bearing species and 1028 total thermochem-
551 ical reactions (i.e., 514 forward-backward pairs)¹¹⁴. The photo-absorption cross sections are taken
552 from the KIDA database¹¹⁵ and complemented with additional sulphur photo-absorption cross
553 sections (O. Venot, private communication). The full network cross sections were benchmarked
554 against WASP-39b¹⁰.

555 The chemical model predictions are sensitive to the flux impinging the outer atmosphere.
556 To simulate the spectral energy distribution (SED) of the host star WASP-107, we take the stellar
557 spectrum of HD 85512, which is of similar spectral type (K6 V) and for which a panchromatic SED
558 was constructed in the MUSCLES survey³⁴. Being both K6 dwarf stars, the bolometric luminosity
559 of both SEDs is similar, but the chromospheric and coronal activity can differ between both stars.
560 To assess that difference, we observed contemporaneously with the JWST observations, the Near-
561 Ultraviolet (NUV) emission of the host star WASP-107 with *Neil Gehrels Swift*. We also reanalysed
562 the X-ray emission observed with *XMM-Newton* in 2018. The measured flux densities incident on
563 WASP-107b yields a NUV flux value that is $\sim 6.4 \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1} \text{ \AA}^{-1}$ and an X-ray flux value that
564 is $\sim 1 \times 10^3 \text{ erg cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$; see Sect. 2.1–2.2. The folding of the MUSCLES HD 85512 spectrum
565 with the *Swift* filter transmission curve yields a value that is lower by only $\sim 30\%$ compared to
566 WASP-107, while the X-ray emission of HD 85512 is lower by a factor of ~ 20 . The rotation
567 period of ~ 47 days¹¹⁸ implies an age of ~ 5.6 Gyr for HD 85512, hence considerably older than
568 WASP-107 with an estimated age of ~ 3.4 Gyr². Therefore, it is not unexpected that HD 85512
569 is significantly less magnetic and/or has less coronal activity than WASP-107. However, for our
570 photochemical models mainly the NUV and FUV flux is of importance, since the X-ray emission
571 primarily impacts photoionization which is not included in our models. We therefore can use the
572 MUSCLES HD 85512 spectrum as representation of WASP-107’s SED.

573 Each chemical model was executed with a vertical resolution comprising 130 layers span-
574 ning the pressure range from 10^{-7} to 100 bar. Subsequently, the hydrodynamical input and the
575 abundances resulting from the chemical kinetics simulations are used to compute a synthetic trans-
576 mission spectrum, using the radiative transfer package `petitRADTRANS`¹⁴ (see above). Next to
577 the line absorption opacities described in the `petitRADTRANS` retrieval setup, we also include
578 the line absorption opacities listed in ref. 109. Since the primary goal of the forward model compu-
579 tations is to understand the gas-phase formation of SO_2 , CH_4 and H_2O in this planet independent
580 of cloud-formation, no condensate opacity was added in this last post-processing setup. For each
581 pressure layer, the mean molecular weight is calculated based on the mixture that resulted from
582 the disequilibrium chemistry models. The planetary radius at reference pressure (0.01 bar) was
583 set to $0.9 R_p$. Finally, the predicted synthetic spectra are rebinned to the spectral resolution of the
584 WASP-107b JWST MIRI data.

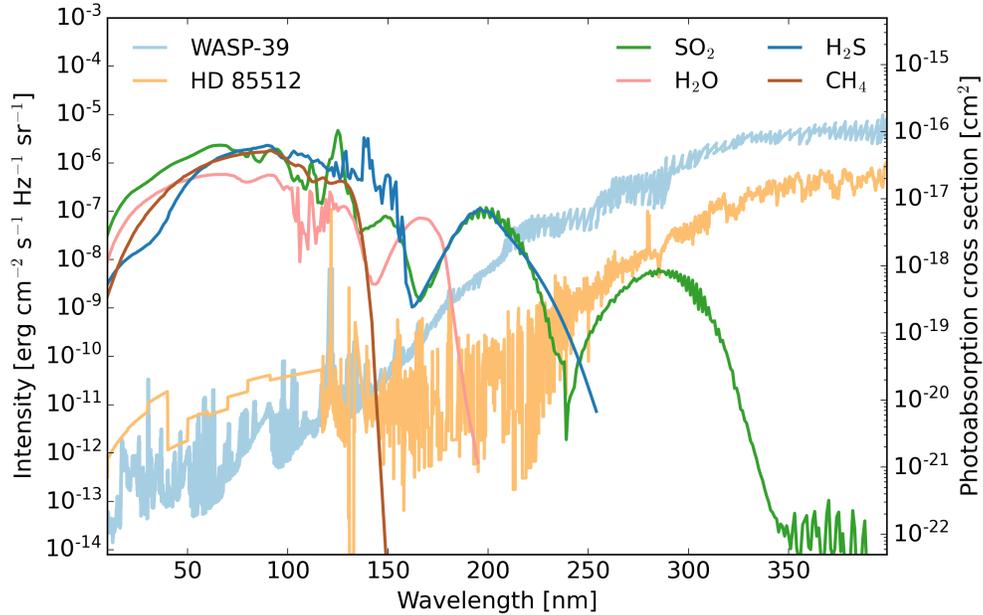
585 4.2. (Photo)chemical model predictions

586 Figure 3 provides evidence that only models incorporating photochemistry in combination with
587 a super-solar metallicity predict a detectable level of SO₂ in WASP-107b. The large atmospheric
588 scale height of WASP-107b enables highly efficient photochemical processes to operate within
589 the ~740 K temperature regime of this low-density planet, resulting in SO₂ volume mixing ratios
590 being $>5 \times 10^{-7}$ at pressures between $10^{-7} - 10^{-4}$ bar.

591 We explored the sensitivity of SO₂ to both the metallicity and the C/O ratio itself. Extended
592 Data Figure 3 shows that the SO₂ molar fraction in the upper atmosphere of WASP-107b displays
593 a mild sensitivity to the explored C/O ratio, increasing by a few factors as the C/O decreased
594 from solar (0.55) to sub-solar (0.10). In contrast, the SO₂ molar fraction is highly sensitive to
595 the metallicity (see Figure 3) owing to the fact that both the sulphur and oxygen abundance scale
596 with metallicity. Our photochemical models show that SO₂ becomes detectable at super-solar
597 metallicities, an effect already noted for higher temperature atmospheres ¹⁷.

598 Two critical parameters influencing the detectability of SO₂ within a planetary atmosphere
599 are the UV irradiation and the gravity (g), which in turn determines the atmospheric scale height
600 (see Extended Data Figure 1). Although the atmospheric scale height for both WASP-107b and
601 WASP-39b is roughly equivalent (estimated at $\sim 2.2 \times 10^6$ m), their gravity differs, with WASP-
602 107b at ~ 260 cm/s² and WASP-39b at ~ 430 cm/s². It is important to note that simulations of
603 WASP-39b in previous studies were conducted at higher gravity values of 1,000 cm/s² ¹⁰ and
604 2,140 m/s² ¹⁷. Extended Data Figure 1 juxtaposes the SO₂ predictions under $g = 260$ cm/s² and
605 $g = 430$ cm/s² (similar to WASP-39b) and 1,000 cm/s², where the gravity has been adapted by
606 scaling the mass of the planet. While the increase of gravity from 260 cm/s² to 430 cm/s² only
607 slightly alters the SO₂ abundance profile, a gravity of 1,000 cm/s² significantly decreases the SO₂
608 abundance at pressures between $\sim 10^{-5} - 1$ bar. This is attributed to the reduced efficiency of
609 photochemistry in deeper layers of atmospheres with high gravity. Consequently, this reduction
610 diminishes the reservoir of OH radicals necessary for the synthesis of SO₂.

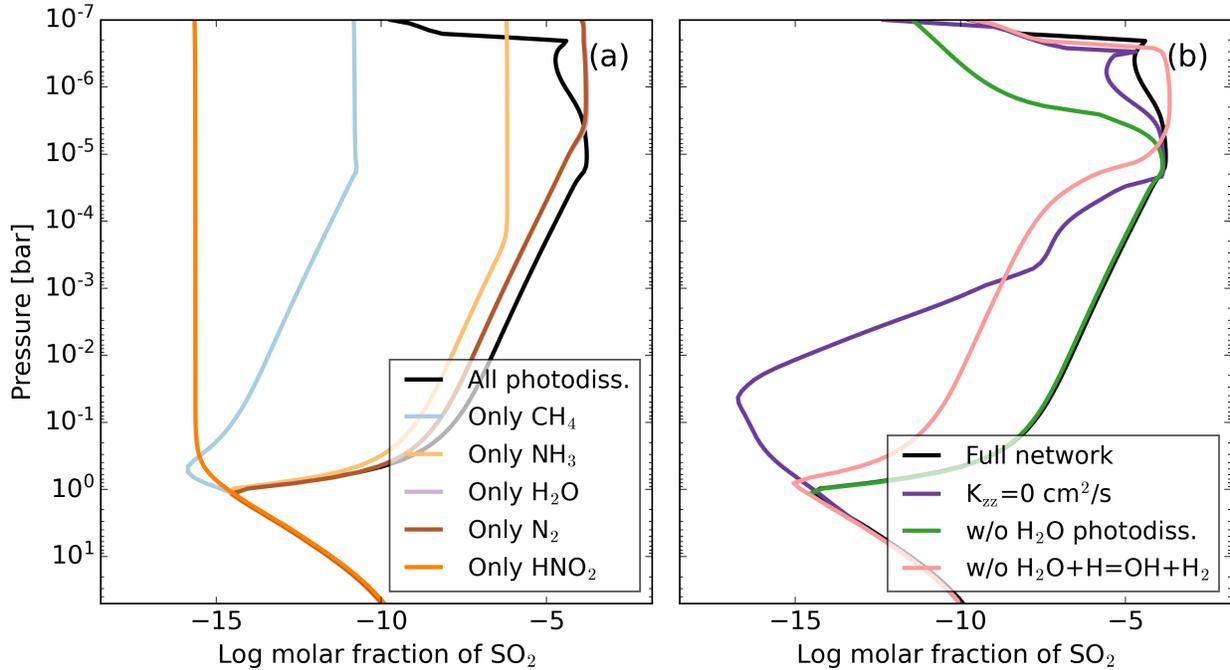
611 A last simulation employs a gravitational force of 260 cm/s² as well, but uses the SED of
612 HD 85512 - as a proxy for WASP-107 - scaled by a factor 100 (brown line in Extended Data
613 Figure 1) or the WASP-39 spectrum from Ref. ¹⁰ (purple line in Extended Data Figure 1) as the
614 input stellar spectrum. The flux density originating from the host star, incident at the planet, is
615 approximately 200 times greater for WASP-39b than for WASP-107b in the near-ultraviolet (NUV)
616 range, and exhibits a factor of $\sim 100 - 1,000$ in the far-ultraviolet (FUV), with comparable EUV
617 and X-ray fluxes (see Suppl. Inf. Figure 13). Photodissociation of SO₂ and H₂S mainly operates
618 in the FUV, with absorption cross sections reaching around 10^{-16} cm². While the NUV absorption
619 cross sections for SO₂ are about two orders of magnitude lower than in the FUV, it's worth noting
620 that the H₂S cross sections are only available up to ~ 250 nm; see Suppl. Inf. Figure 13.



Suppl. Inf. – Figure 13: **Input stellar spectral energy distributions (SED) and photo-absorption cross sections.** The orange and blue curve show the SED of HD 85512 – used as proxy for WASP-107 – and of WASP-39, with corresponding intensity values given on the left y-axis. The photo-absorption cross sections of SO₂, H₂O, H₂S, and CH₄ are shown in green, pink, blue, and brown, respectively, with corresponding values given on the right y-axis.

621 Increasing the UV irradiation with a factor 100 triggers the direct photodissociation of SO₂
 622 at altitudes near 10⁻⁴ bar. At higher altitudes, this process is somewhat counteracted by H₂O pho-
 623 tolysis, generating additional OH radicals that react with S and SO to form SO₂ (see brown line
 624 in Extended Data Figure 1). However, when adopting the WASP-39 spectrum with its more ex-
 625 treme FUV/NUV ratio, an interesting observation emerges (purple line in Extended Data Figure 1):
 626 around 10⁻³ bar, direct FUV-driven photodissociation of SO₂ takes place, while at altitudes near
 627 10⁻⁴ bar, the additional destruction of H₂S liberates sulphur radicals. These sulphur atoms are sub-
 628 sequently oxidized into SO₂, partially offsetting the SO₂ loss at deeper levels. At the uppermost
 629 atmospheric levels, approximately several times 10⁻⁷ bar, SO₂ undergoes photodissociation across
 630 all simulations. Hence, a low gravity together with modest UV irradiation and FUV/NUV ratio are
 631 the key ingredients for the formation of SO₂ in detectable amounts.

632 Extended Data Figure 3 shows that the eddy diffusion and the intrinsic temperature have
 633 a minor impact on the abundance of SO₂ at those pressure levels where the MIRI SO₂ features
 634 predominantly emerge, i.e. at pressures below a few times 10⁻⁵ bar (see Extended Data Figure 4).
 635 Even when excluding vertical transport in the disequilibrium models ($K_{zz} = 0 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$) a significant
 636 abundance of SO₂ is still predicted at pressures below a few times 10⁻⁴ bar (see panel (b) in Suppl.
 637 Inf. Figure 14), proving the crucial role of photolysis in establishing the chemical composition in
 638 WASP-107b's atmosphere. The increase in SO₂ formation around 10⁻³ bar (for $K_{zz} = 0 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$,



Suppl. Inf. – Figure 14: **SO₂ molar fraction predictions for WASP-107b for different set-ups of the photochemical network.** The base model (shown in black in each panel) has an intrinsic temperature of 400 K, a solar C/O ratio, a metallicity of 10× solar, a $\log_{10}(K_{zz, \text{cgs}}) = 10$, and uses the SED of HD 85512 - used as a proxy for WASP-107 - as input stellar spectrum. Panel (a): Predicted SO₂ molar fractions when all photo-absorption cross sections (black) are taken into account during the chemistry simulation, compared to predictions where only CH₄ (light blue), NH₃ (light orange), H₂O (purple), N₂ (brown) or HNO₂ (dark orange) are used. Panel (b): Predicted SO₂ molar fractions without vertical mixing, i.e. $K_{zz} = 0 \text{ cm}^2/\text{s}$ (purple), without photodissociation of H₂O (green), and without including the thermochemical reaction $\text{H}_2\text{O} + \text{H} \rightleftharpoons \text{H}_2 + \text{OH}$ (pink).

639 purple line) is caused by the breaking up of H₂S yielding sulphur radicals that are subsequently
 640 oxidised. When including eddy diffusion, these sulphur atoms are redistributed through the atmo-
 641 sphere, resulting in a SO₂ molar fraction depicted with the full black line.

A chemical network analysis indicated that the primary trigger for the formation of SO₂ in the atmosphere of WASP-39b is water photolysis¹⁰. However, at first sight, it seems that water photolysis only plays a minor role for the production of SO₂ in WASP-107b. This conclusion is drawn from panel (b) in Suppl. Inf. Figure 14 where we exclude water photodissociation from our photochemical models (green line). It can be seen that the influence on the predicted SO₂ abundance is only confined to pressures below 10⁻⁵ bar. The reason for this behaviour is that H₂O is predominantly photodissociated in the uppermost atmospheric layers. This is also shown in panel (b) of Suppl. Inf. Figure 15 where we compare the [OH]/[H] ratio under equilibrium and

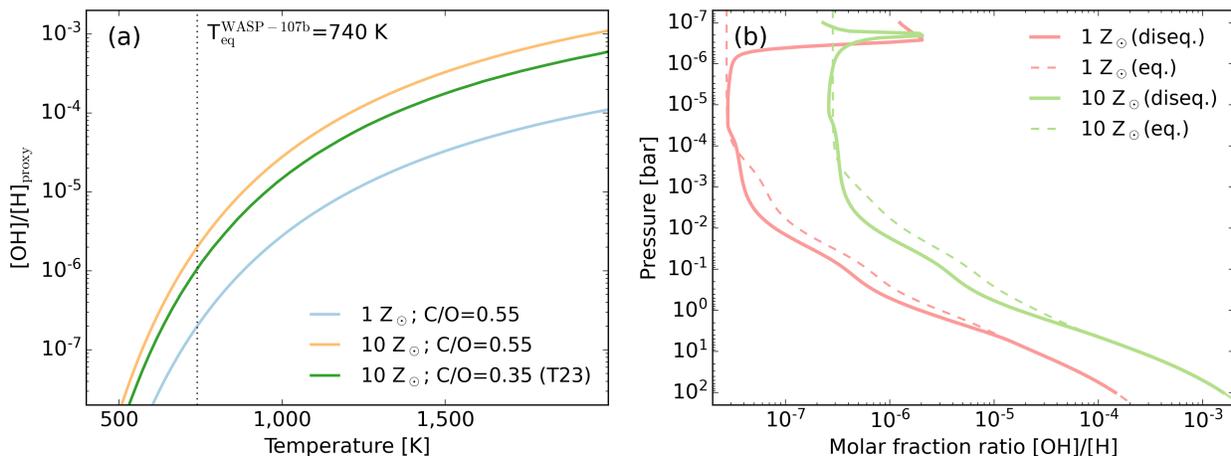
disequilibrium conditions. While the omission of H_2O photodissociation explains the difference between both curves for pressures around a few times 10^{-7} bar, the vertical transport is the main reason for the difference between equilibrium and disequilibrium predictions for pressures between $\sim 10^{-4} - 1$ bar. The thermochemical reaction of main importance for establishing the $[\text{OH}]/[\text{H}]$ ratio in that pressure regime (see panel (b) in Suppl. Inf. Figure 14) is



The reverse reaction rate, k_r , is given in the VULCAN network in its Arrhenius form

$$k_r = A_r T_r^B \exp(-C_r/T) \text{ [cm}^3 \text{ s}^{-1}\text{]}, \quad (5)$$

642 with T the temperature (in Kelvin), and the corresponding parameters being the pre-exponential
 643 factor $A_r = 3.57 \times 10^{-16} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$, the temperature-dependent exponent $B_r = 1.52$, and the activa-
 644 tion energy $C_r = 1740 \text{ K}$. Using the NTRS-NASA thermodynamic data¹²⁰ and assuming thermo-
 645 dynamic equilibrium, the Gibbs free energy of formation of the forward reaction, and the corre-
 646 sponding equilibrium constant can be calculated¹²¹. This allows the calculation of the forward
 647 reaction rate k_f . Fitting these results with the Arrhenius form yields $A_f = 1.54 \times 10^{-14} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$,
 648 $B_f = 1.245$, and a high energy barrier of $C_f = 9468 \text{ K}$. It can be seen that at the temperatures rele-
 649 vant for planet atmospheres, the forward reaction rate is much lower than the reverse rate.



Suppl. Inf. – Figure 15: **[OH]/[H] ratio for equilibrium and disequilibrium predictions.** Panel (a): Proxy for the $[\text{OH}]/[\text{H}]$ ratio assuming thermodynamic equilibrium and that most of the O is in H_2O at solar metallicity (blue) and at $Z = 10 Z_\odot$ (orange). The prediction by Ref. ¹⁰ is shown as a green line for comparison. Panel (b): The molar fraction of $[\text{OH}]/[\text{H}]$ under two conditions: solar metallicity (pink) and $10\times$ solar metallicity (light green), is depicted in both chemical equilibrium (dashed line) and disequilibrium (solid line) calculations.

650 Similar to Ref. ¹⁰, we then can calculate the $[\text{OH}]/[\text{H}]$ ratio assuming thermodynamic equi-
 651 librium and that most of the O is in H_2O . This yields panel (a) in Suppl. Inf. Figure 15, to be

652 compared with Extended Data Figure 10 of Ref. ¹⁰. At temperatures below ~ 750 K, the $[\text{OH}]/[\text{H}]$
653 ratio drops below $\sim 2 \times 10^{-6}$ for $Z = 10 Z_{\odot}$, and hence a factor 10 lower at solar metallicity. This
654 scarcity of OH has been used as an argument for the lack of SO_2 formation at equilibrium temper-
655 atures below approximately $\sim 1,000$ K for a planet with WASP-39b parameters, favouring instead
656 the prevalence of sulphur allotropes S_x ¹⁰.

657 The central inquiry that emerges is how SO_2 can be created within the atmosphere of WASP-
658 107b if the aforementioned argument stands. The solution becomes evident through Suppl. Inf.
659 Figure 14, where it is demonstrated that the photodissociation of various specific abundant molecules
660 sparks the generation of SO_2 . This assertion is exemplified in panel (a) of Suppl. Inf. Figure 14,
661 where the photodissociation of either only H_2O (or only N_2 or NH_3) leads to the emergence of SO_2 .
662 But the photodissociation of only CH_4 (only acting at wavelengths $\lesssim 140$ nm; see Suppl. Inf. Fig-
663 ure 13) yields negligible amounts of SO_2 , while the photodissociation of the rare molecule HNO_2
664 yields outcomes consistent with chemical equilibrium predictions, wherein all photodissociation is
665 thus excluded (see dotted line in panel (b) of Figure 3). This phenomenon arises from the fact that
666 the photodissociation of various specific abundant molecules releases atoms and radicals that in-
667 duce a very active photochemistry even down to pressure layers of approximately 1 bar. Reactions
668 involving the liberated atoms and radicals often display temperature-independent behaviour with-
669 out energy barriers (i.e., $B = C = 0$) and possess pre-exponential factors typically on the order of
670 $10^{-11} - 10^{-7} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$. Consequently, a significant amount of H atoms and OH radicals is formed,
671 leading to the oxidation of sulphur into SO_2 . Hence, although the photolysis of H_2O can initiate
672 the production of SO_2 in WASP-107b, it is not the sole molecule whose photodissociation holds
673 the potential to induce SO_2 formation.

674 In summary, the overarching scenario that unfolds reveals that the primary pathways initi-
675 ating the formation of SO_2 in the low-density atmosphere of WASP-107b are twofold. Firstly,
676 through the photodissociation of H_2O in the upper atmospheric layers at pressures below a few
677 times 10^{-6} bar, yielding atomic H and OH radicals. These OH radicals are key for oxidising sul-
678 phur that is liberated from H_2S . Secondly, in the pressure range of $10^{-5} - 1$ bar, the prevailing
679 determinant of the chemical composition is the interplay of photochemical processes acting upon
680 various abundant molecules, not limited to H_2O . These processes can generate a sufficiently sub-
681 stantial quantity of free atoms and radicals, that can be redistributed through eddy diffusion. This
682 initiates a cascade of barrierless thermochemical reactions that progressively culminate in the for-
683 mation of SO_2 . Given the fact that a large ensemble of those reactions are temperature-independent,
684 the equilibrium temperature stands as just one among several factors dictating the formation (or
685 not) of SO_2 . As long as the UV irradiation and FUV/NUV ratio remain moderate and the gravity is
686 low, these processes will lead to the formation of SO_2 in sufficient amounts to be detectable even
687 within a ~ 740 K temperature planet.

688 Supplementary References

- 689 35. Kendrew, S. *et al.* The Mid-Infrared Instrument for the James Webb Space Telescope, IV: The
690 Low-Resolution Spectrometer. *Pub. Astron. Soc. Pacific* **127**, 623 (2015).
- 691 36. Rieke, G. H. *et al.* The Mid-Infrared Instrument for the James Webb Space Telescope, I:
692 Introduction. *Pub. Astron. Soc. Pacific* **127**, 584 (2015).
- 693 37. Ressler, M. E. *et al.* The Mid-Infrared Instrument for the James Webb Space Telescope, VIII:
694 The MIRI Focal Plane System. *Pub. Astron. Soc. Pacific* **127**, 675 (2015).
- 695 38. Bouwman, J. *et al.* Spectroscopic Time Series Performance of the Mid-infrared Instrument on
696 the JWST. *Pub. Astron. Soc. Pacific* **135**, 038002 (2023).
- 697 39. Bell, T. *et al.* Eureka!: An End-to-End Pipeline for JWST Time-Series Observations. *The*
698 *Journal of Open Source Software* **7**, 4503 (2022).
- 699 40. Bell, T. J. *et al.* A First Look at the JWST MIRI/LRS Phase Curve of WASP-43b (2023).
- 700 41. Anderson, D. R., Collier Cameron, A. & Delrez, L. The discoveries of WASP-91b, WASP-
701 105b and WASP-107b: Two warm Jupiters and a planet in the transition region between ice
702 giants and gas giants. *Astron. Astrophys.* **604**, A110 (2017).
- 703 42. Ivshina, E. S. & Winn, J. N. TESS Transit Timing of Hundreds of Hot Jupiters. *Astrophys. J.*
704 *Suppl.* **259**, 62 (2022).
- 705 43. Dai, F. & Winn, J. N. The Oblique Orbit of WASP-107b from K2 Photometry. *Astron. J.* **153**,
706 205 (2017).
- 707 44. Morello, G. *et al.* The ExoTETHyS Package: Tools for Exoplanetary Transits around Host
708 Stars. *Astron. J.* **159**, 75 (2020).
- 709 45. Kipping, D. M. Efficient, uninformative sampling of limb darkening coefficients for two-
710 parameter laws. *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **435**, 2152–2160 (2013).
- 711 46. Piaulet, C. *et al.* WASP-107b’s Density Is Even Lower: A Case Study for the Physics of
712 Planetary Gas Envelope Accretion and Orbital Migration. *Astron. J.* **161**, 70 (2021).
- 713 47. Morrison, J. JWST MIRI flight performance: Detector Effects and Data Reduction Algo-
714 rithms. *in prep.* (2023).
- 715 48. Carone, L. *et al.* Indications for very high metallicity and absence of methane in the eccentric
716 exo-Saturn WASP-117b. *Astron. Astrophys.* **646**, A168 (2021).
- 717 49. Argyriou, I. Calibration of the MIRI instrument on board the James Webb Space Telescope
718 (2021).

- 719 50. Foreman-Mackey, D., Hogg, D. W., Lang, D. & Goodman, J. emcee: The MCMC Hammer.
720 *Pub. Astron. Soc. Pacific* **125**, 306 (2013).
- 721 51. Kreidberg, L. batman: BASic Transit Model cAlculatioN in Python. *Pub. Astron. Soc. Pacific*
722 **127**, 1161 (2015).
- 723 52. Kumar, R., Carroll, C., Hartikainen, A. & Martin, O. A. ArviZ a unified library for exploratory
724 analysis of Bayesian models in Python. *The Journal of Open Source Software* (2019).
- 725 53. Foreman-Mackey, D. *et al.* exoplanet: Gradient-based probabilistic inference for exoplanet
726 data & other astronomical time series. *The Journal of Open Source Software* **6**, 3285 (2021).
- 727 54. Argyriou, I. *et al.* The Brighter-Fatter Effect in the JWST MIRI Si:As IBC detectors I. Obser-
728 vations, impact on science, and modelling. *arXiv e-prints* arXiv:2303.13517 (2023).
- 729 55. Pontoppidan, K. M. *et al.* Pandeia: a multi-mission exposure time calculator for JWST and
730 WFIRST. In Peck, A. B., Benn, C. R. & Seaman, R. L. (eds.) *Observatory Operations:*
731 *Strategies, Processes, and Systems VI*, 44 (SPIE, Edinburgh, United Kingdom, 2016).
- 732 56. Carone, L. *et al.* Equatorial retrograde flow in WASP-43b elicited by deep wind jets? *Mon.*
733 *Not. Roy. Astron. Soc.* **496**, 3582–3614 (2020).
- 734 57. Roming, P. W. A. *et al.* The Swift Ultra-Violet/Optical Telescope. *Space Science Rev.* **120**,
735 95–142 (2005).
- 736 58. Salz, M. *et al.* Swift UVOT near-UV transit observations of WASP-121 b. *Astron. Astrophys.*
737 **623**, A57 (2019).
- 738 59. Poole, T. S. *et al.* Photometric calibration of the Swift ultraviolet/optical telescope: Photomet-
739 ric calibration of the Swift UVOT. *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **383**, 627–645 (2007).
- 740 60. Bertin, E. & Arnouts, S. SExtractor: Software for source extraction. *Astron. Astrophys. Suppl.*
741 **117**, 393–404 (1996).
- 742 61. Taylor, M. B. TOPCAT & STIL: Starlink Table/VOTable Processing Software. In Shopbell,
743 P., Britton, M. & Ebert, R. (eds.) *Astronomical Data Analysis Software and Systems XIV*, vol.
744 347 of *Astron. Soc. Pacific Conf. Series*, 29 (2005).
- 745 62. Breeveld, A. A. *et al.* An Updated Ultraviolet Calibration for the Swift/UVOT. In McEney,
746 J. E., Racusin, J. L. & Gehrels, N. (eds.) *Gamma Ray Bursts 2010*, vol. 1358 of *American*
747 *Institute of Physics Conference Series*, 373–376 (2011).
- 748 63. Woods, T. N. *et al.* Solar Irradiance Reference Spectra (SIRS) for the 2008 Whole Heliosphere
749 Interval (WHI). *Geophys. Res. Lett.* **36**, L01101 (2009).
- 750 64. Strüder, L. *et al.* The European Photon Imaging Camera on XMM-Newton: The pn-CCD
751 camera. *Astron. Astrophys.* **365**, L18–L26 (2001).

- 752 65. Turner, M. J. L. *et al.* The European Photon Imaging Camera on XMM-Newton: The MOS
753 cameras. *Astron. Astrophys.* **365**, L27–L35 (2001).
- 754 66. Webb, N. A. *et al.* The *XMM-Newton* serendipitous survey: IX. The fourth *XMM-Newton*
755 serendipitous source catalogue. *Astron. Astrophys.* **641**, A136 (2020).
- 756 67. Nortmann, L. *et al.* Ground-based detection of an extended helium atmosphere in the Saturn-
757 mass exoplanet WASP-69b. *Science* **362**, 1388–1391 (2018).
- 758 68. Foster, G., Poppenhaeger, K., Ilic, N. & Schwobe, A. Exoplanet X-ray irradiation and evapo-
759 ration rates with eROSITA. *Astron. Astrophys.* **661**, A23 (2022).
- 760 69. Spinelli, R. *et al.* Planetary Parameters, XUV Environments, and Mass-loss Rates for Nearby
761 Gaseous Planets with X-Ray-detected Host Stars. *Astron. J.* **165**, 200 (2023).
- 762 70. Arnaud, K. A. XSPEC: The First Ten Years. In Jacoby, G. H. & Barnes, J. (eds.) *Astronomical*
763 *Data Analysis Software and Systems V*, vol. 101 of *Astron. Soc. Pacific Conf. Series*, 17 (1996).
- 764 71. Johnstone, C. P. & Güdel, M. The coronal temperatures of low-mass main-sequence stars.
765 *Astron. Astrophys.* **578**, A129 (2015).
- 766 72. Močnik, T., Hellier, C., Anderson, D. R., Clark, B. J. M. & Southworth, J. Starspots on WASP-
767 107 and pulsations of WASP-118. *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **469**, 1622–1629 (2017).
- 768 73. Johnstone, C. P., Bartel, M. & Güdel, M. The active lives of stars: A complete description
769 of the rotation and XUV evolution of F, G, K, and M dwarfs. *Astron. Astrophys.* **649**, A96
770 (2021).
- 771 74. Kreidberg, L., Line, M. R., Thorngren, D., Morley, C. V. & Stevenson, K. B. Water, High-
772 altitude Condensates, and Possible Methane Depletion in the Atmosphere of the Warm Super-
773 Neptune WASP-107b. *Astrophys. J. Lett.* **858**, L6 (2018).
- 774 75. Min, M., Ormel, C. W., Chubb, K., Helling, C. & Kawashima, Y. The ARCiS framework
775 for exoplanet atmospheres. Modelling philosophy and retrieval. *Astron. Astrophys.* **642**, A28
776 (2020).
- 777 76. Mollière, P. *et al.* petitRADTRANS. A Python radiative transfer package for exoplanet char-
778 acterization and retrieval. *Astron. Astrophys.* **627**, A67 (2019).
- 779 77. Polyansky, O. L. *et al.* ExoMol molecular line lists XXX: a complete high-accuracy line list
780 for water. *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **480**, 2597–2608 (2018).
- 781 78. Rothman, L. S. *et al.* HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database. *J.*
782 *Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **111**, 2139–2150 (2010).
- 783 79. Yurchenko, S. N., Mellor, T. M., Freedman, R. S. & Tennyson, J. ExoMol line lists – XXXIX.
784 Ro-vibrational molecular line list for CO₂. *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **496**, 5282–5291
785 (2020).

- 786 80. Yurchenko, S. N., Amundsen, D. S., Tennyson, J. & Waldmann, I. P. A hybrid line list for
787 CH₄ and hot methane continuum. *Astron. Astrophys.* **605**, A95 (2017).
- 788 81. Chubb, K. L., Tennyson, J. & Yurchenko, S. N. ExoMol molecular line lists - XXXVII. Spectra
789 of acetylene. *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **493**, 1531–1545 (2020).
- 790 82. Underwood, D. S. *et al.* ExoMol molecular line lists – XIV. The rotation–vibration spectrum
791 of hot SO₂. *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **459**, 3890–3899 (2016).
- 792 83. Bernath, P. F., Johnson, R. M. & Liévin, J. Line lists for X³Σ⁻ and a¹Δ vibration-rotation
793 bands of SO. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **290**, 108317 (2022).
- 794 84. Azzam, A. A. A., Tennyson, J., Yurchenko, S. N. & Naumenko, O. V. ExoMol molecular line
795 lists – XVI. The rotation–vibration spectrum of hot H₂S. *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **460**,
796 4063–4074 (2016).
- 797 85. Barton, E. J., Yurchenko, S. N. & Tennyson, J. ExoMol line lists – II. The ro-vibrational
798 spectrum of SiO. *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **434**, 1469–1475 (2013).
- 799 86. Barber, R. J. *et al.* ExoMol line lists – III. An improved hot rotation-vibration line list for
800 HCN and HNC. *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **437**, 1828–1835 (2013).
- 801 87. Coles, P. A., Yurchenko, S. N. & Tennyson, J. ExoMol molecular line lists – XXXV. A
802 rotation-vibration line list for hot ammonia. *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **490**, 4638–4647
803 (2019).
- 804 88. Sousa-Silva, C., Al-Refaie, A. F., Tennyson, J. & Yurchenko, S. N. ExoMol line lists – VII.
805 The rotation–vibration spectrum of phosphine up to 1500 K. *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **446**,
806 2337–2347 (2014).
- 807 89. Chubb, K. L. *et al.* The ExoMolOP database: Cross sections and k-tables for molecules of
808 interest in high-temperature exoplanet atmospheres. *Astron. Astrophys.* **646**, A21 (2021).
- 809 90. Jäger, C., Dorschner, J., Mutschke, H., Posch, T. & Henning, T. Steps toward interstellar sili-
810 cate mineralogy. VII. Spectral properties and crystallization behaviour of magnesium silicates
811 produced by the sol-gel method. *Astron. Astrophys.* **408**, 193–204 (2003).
- 812 91. Henning, T. & Mutschke, H. Low-temperature infrared properties of cosmic dust analogues.
813 *Astron. Astrophys.* **327**, 743–754 (1997).
- 814 92. Palik, E. *Handbook of Optical Constants of Solids*. Bd. 1 (Elsevier Science, 2012).
- 815 93. Kitzmann, D. & Heng, K. Optical properties of potential condensates in exoplanetary atmo-
816 spheres. *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **475**, 94–107 (2018).
- 817 94. Wetzel, S., Klevenz, M., Gail, H. P., Pucci, A. & Trieloff, M. Laboratory measurement of
818 optical constants of solid SiO and application to circumstellar dust. *Astron. Astrophys.* **553**,
819 A92 (2013).

- 820 95. Zubko, V. G., Mennella, V., Colangeli, L. & Bussoletti, E. Optical constants of cosmic carbon
821 analogue grains - I. Simulation of clustering by a modified continuous distribution of ellip-
822 soids. *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **282**, 1321–1329 (1996).
- 823 96. Min, M., Hovenier, J. W. & de Koter, A. Modeling optical properties of cosmic dust grains
824 using a distribution of hollow spheres. *Astron. Astrophys.* **432**, 909–920 (2005).
- 825 97. Benneke, B. & Seager, S. How to Distinguish between Cloudy Mini-Neptunes and
826 Water/Volatile-Dominated Super-Earths. *Astrophys. J.* **778**, 153 (2013).
- 827 98. Dalgarno, A. & Williams, D. A. Rayleigh Scattering by Molecular Hydrogen. *Astrophys. J.*
828 **136**, 690–692 (1962).
- 829 99. Chan, Y. M. & Dalgarno, A. The refractive index of helium. *Proceedings of the Physical*
830 *Society* **85**, 227 (1965).
- 831 100. Borysow, J., Frommhold, L. & Birnbaum, G. Collision-induced rototranslational absorption
832 spectra of H₂-He pairs at temperatures from 40 to 3000 K. *Astrophys. J.* **326**, 509–515 (1988).
- 833 101. Borysow, A., Frommhold, L. & Moraldi, M. Collision-induced infrared spectra of H₂-He
834 pairs involving 0-1 vibrational transitions and temperatures from 18 to 7000 K. *Astrophys. J.*
835 **336**, 495–503 (1989).
- 836 102. Borysow, A. & Frommhold, L. Collision-induced infrared spectra of H₂-He pairs at temper-
837 atures from 18 to 7000 K. II - Overtone and hot bands. *Astrophys. J.* **341**, 549–555 (1989).
- 838 103. Borysow, A., Jorgensen, U. G. & Fu, Y. High-temperature (1000-7000 K) collision-induced
839 absorption of H₂ pairs computed from the first principles, with application to cool and dense
840 stellar atmospheres. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **68**, 235–255 (2001).
- 841 104. Borysow, A. Collision-induced absorption coefficients of H₂ pairs at temperatures from 60
842 K to 1000 K. *Astron. Astrophys.* **390**, 779–782 (2002).
- 843 105. Richard, C. *et al.* New section of the HITRAN database: Collision-induced absorption (CIA).
844 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **113**, 1276–1285 (2012).
- 845 106. Scott, A. & Duley, W. W. Ultraviolet and Infrared Refractive Indices of Amorphous Silicates.
846 *Astrophys. J. Suppl.* **105**, 401 (1996).
- 847 107. Ackerman, A. S. & Marley, M. S. Precipitating Condensation Clouds in Substellar Atmo-
848 spheres. *Astrophys. J.* **556**, 872–884 (2001).
- 849 108. Hejazi, N. *et al.* Elemental Abundances of the Super-Neptune WASP-107b’s Host Star Using
850 High-resolution, Near-infrared Spectroscopy. *arXiv e-prints* arXiv:2303.03808 (2023).
- 851 109. Baeyens, R. *et al.* Grid of pseudo-2D chemistry models for tidally locked exoplanets - I. The
852 role of vertical and horizontal mixing. *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.* **505**, 5603–5653 (2021).

- 853 110. Agúndez, M., Venot, O., Selsis, F. & Iro, N. The Puzzling Chemical Composition of GJ
854 436b's Atmosphere: Influence of Tidal Heating on the Chemistry. *Astrophys. J.* **781**, 68 (2014).
- 855 111. Guillot, T. On the radiative equilibrium of irradiated planetary atmospheres. *Astron. Astro-*
856 *phys.* **520**, A27 (2010).
- 857 112. Khorshid, N., Min, M., Désert, J. M., Woitke, P. & Dominik, C. SimAb: A simple, fast, and
858 flexible model to assess the effects of planet formation on the atmospheric composition of gas
859 giants. *Astron. Astrophys.* **667**, A147 (2022).
- 860 113. Tsai, S.-M., Malik, M. & Kitzmann, D. A Comparative Study of Atmospheric Chemistry
861 with VULCAN. *Astrophys. J.* **923**, 264 (2021).
- 862 114. Baeyens, R., Désert, J.-M., Petrignani, A., Carone, L. & Schneider, A. D. Photodissociation
863 and induced chemical asymmetries on ultra-hot gas giants. A case study of HCN on WASP-76
864 b. *arXiv e-prints* arXiv:2309.00573 (2023).
- 865 115. Venot, O. *et al.* New chemical scheme for giant planet thermochemistry. Update of the
866 methanol chemistry and new reduced chemical scheme. *Astron. Astrophys.* **634**, A78 (2020).
- 867 116. Tsai, S.-M. *et al.* Photochemically produced SO₂ in the atmosphere of WASP-39b. *Nature*
868 **617**, 483–487 (2023).
- 869 117. Loyd, R. O. P. *et al.* The MUSCLES Treasury Survey. III. X-Ray to Infrared Spectra of 11
870 M and K Stars Hosting Planets. *Astrophys. J.* **824**, 102 (2016).
- 871 118. France, K. *et al.* The MUSCLES Treasury Survey. I. Motivation and Overview. *Astrophys.*
872 *J.* **820**, 89 (2016).
- 873 119. Polman, J., Waters, L. B. F. M., Min, M., Miguel, Y. & Khorshid, N. H₂S and SO₂ de-
874 tectability in hot Jupiters. Sulphur species as indicators of metallicity and C/O ratio. *Astron.*
875 *Astrophys.* **670**, A161 (2023).
- 876 120. McBride, B. J., Gordon, S. & Reno, M. A. Thermodynamic data for fifty reference elements
877 (2001).
- 878 121. Gail, H.-P. & Sedlmayr, E. *Physics and Chemistry of Circumstellar Dust Shells* (2013).

CHAPITRE 5

Conclusion et perspectives

Sommaire

5.1	Conclusion	254
5.2	Travaux annexes : un pipeline <i>data-driven</i> pour analyser les données <i>Spitzer</i>	255
5.2.1	Le principe de la séparation de sources à l'aveugle	256
5.2.2	L'analyse en composantes indépendantes	258
5.2.3	Ajuster des données à partir d'un modèle de bruit	258
5.2.4	Une méthode de réduction envisageable pour les futures données <i>Ariel</i> ?	259
5.3	Travaux annexes : courbes de phase d'exoplanètes non-transitantes	261
5.3.1	La possible détection d'une exoplanète non-transitante	261
5.3.2	Le suivi en vitesses radiales avec HARPS-N	262
5.3.3	Inférer le rayon planétaire par modélisation de courbes de phase	262
5.4	Perspectives	263
5.4.1	Approfondir l'analyse des performances instrumentales de MIRI	263
5.4.2	De la photochimie dans les atmosphères d'exoplanète	266
5.4.3	Des rocheuses tempérées aux <i>lava worlds</i>	267
5.4.4	Exoplanétologie comparative : la mission <i>Ariel</i>	268

“Samedi 25 [décembre] : nous sommes le jour J, jour de lancement [...] nous sommes installés face au pas de tir, debout. Il pleut des cordes. Je jette un coup d’œil par-dessus mon épaule, deux grands écrans affichent la retransmission de la NASA en temps réel. J’aperçois le compteur : 15 minutes. Je repense aux trois semaines qui viennent de s’écouler, je me sens bien. Et dire qu’hier nous assistions au roulage, je repense à Titan [le remorqueur de la fusée] minuscule sur les rails, tractant cet immense objet de 700 tonnes, qui bientôt, ira dans l’espace. Il pleuvait aussi des cordes la veille. J’étais descendu en courant depuis la tribune de presse jusqu’aux grilles pour voir la fusée de plus près, mais surtout je voulais voir le logo Webb de mes propres yeux. Je crois que j’avais rarement été aussi heureuse. Puis j’ai pris une averse, comme je n’en jamais connue en métropole, une sorte de douche mais plutôt rafraîchissante. [...] Raphaël installe paisiblement son trépied à ma droite, Mathilde est à ma gauche et discute avec Marion. J’apprécie ce moment calme d’introspection. Je ne suis pas inquiète. Nous savons que tout peut changer jusqu’au dernier bulletin météo, 10 minutes avant le lancement. Sur les écrans géants, des interviews et images de la conception du Webb défilent. Cela fait comme un bruit de fond dans les haut-parleurs. Nous savons cependant qu’à 7 minutes avant le top, si le lancement n’est pas annulé, alors il aura forcément lieu. Nous passons de la barre des 10 à 7 minutes sans trop nous en rendre compte. Soudain, la voix du DDO [directeur des opérations] principal retentit par-dessus les voix des interviews de la NASA et coupe court à toutes les discussions. On est à 7 minutes : « démarrage de la séquence principale ». Tous les voyants sont au vert dans la salle Jupiter, tout est prêt au lancement. A partir de ces 7 minutes, l’ordinateur de bord du lanceur prend le relais et gèrera toutes les opérations de manière autonome. Aucune intervention humaine ne sera possible. Seule une opération humaine subsiste : le bouton rouge pour la destruction. Mais oublions ce détail. L’ordinateur de bord passe les 7 minutes restantes à mener à bien les vérifications pré-lancement. Entre les 7 et les 2 minutes, le temps s’est écoulé très vite. Le DDO annonce les 2 minutes, puis la dernière minute. A partir de ce moment-là tout s’accélère. Je ne me souviens pas de l’annonce des 30 secondes mais je me souviens de ce temps qui passe de manière exponentielle, le décollage est arrivé très vite. Soudain nous nous retrouvons à 10 secondes et cette phrase que j’ai tant entendue et attendue, que j’ai tant répétée avec les enfants dans les écoles, que j’ai tellement évoquée dans les collèges et lycées, retentit dans les haut-parleurs. Je n’y crois pas moi même : “à tous les DDO, attention pour le décompte final. 10, 9, 8, 7, 6, 5, 4, 3, 2, 1... allumage Vulcain...décollage”. Et là un blanc de 7 secondes s’installe. Pendant ce blanc qui semble très long et même un peu inquiétant, le moteur Vulcain s’allume et l’ordinateur de bord fait des vérifications de l’étage principal. Et soudain, les EAP [étages accélérateurs à poudre] ou boosters s’allument, une lumière blanche et intense apparaît à l’horizon et nous voyons la fusée s’arracher de la surface de la Terre, puis accélérer peu à peu. Je retiens mon souffle, c’est incroyable ! La fusée s’élève puis disparaît dans les nuages. La voix dans les haut-parleurs est alors notre seul guide : “la trajectoire est nominale”. Tout va bien. Je reprends mon souffle. Après quelques indications rassurantes du DDO, les personnes autour de moi commencent à se disperser. Je reste, le regard fixé à l’horizon, mon téléphone à la main qui continue de filmer (sans trop de raisons pour être honnête). Et puis soudain, mon corps se met à vibrer, un son grave se met à raisonner. “Le son arrive !” Les larmes montent. J’avais oublié que j’allais non seulement voir la fusée partir mais j’allais aussi l’entendre. Je me retourne lentement. Mathilde est déjà en larmes. J’arrête de filmer et me mets à pleurer. [...] Je m’approche de l’un des écrans qui nous montre la trajectoire de la fusée en temps réel. Nous suivons ainsi, pendant 45 minutes, l’ensemble des opérations de largage des étages jusqu’au moment fatidique de la mise en orbite du JWST vers L2 [point de Lagrange 2]. Les images virtuelles sont alors remplacées par des vraies images prises par le dernier étage d’Ariane V. Webb est relâché. Tout le monde applaudit et crie de joie. Quelques minutes plus tard, et à ma plus grande surprise, nous voyons le déploiement du panneau solaire du Webb en direct...et Mathilde, Marion et moi nous effondrons en larmes. Encore une fois.”

— Extrait de mon Journal de bord “La Guyane vers les étoiles”, *Lancement du JWST*, 25 décembre 2021

5.1 Conclusion

Cette section présente la conclusion générale de ma thèse suivant les trois grands domaines de recherche sur lesquelles elle est fondée : l'instrumentation, la réduction des données et l'interprétation scientifique des résultats. Ma thèse est consacrée à l'étude d'atmosphères d'exoplanètes avec le télescope spatial James Webb Space Telescope, lancé en décembre 2021. Dans cette thèse, je me concentre sur l'instrument en infrarouge moyen du JWST, le Mid-Infrared Instrument (MIRI) couvrant une gamme de longueur d'ondes allant de 5 à 28,5 μm et plus particulièrement sur le spectromètre basse résolution ou Low Resolution Spectrometer (LRS) allant de 5 à 12 μm avec une résolution spectrale de $R \sim 100$ à 7,5 μm . Mon travail se décline de la manière suivante : préparer l'arrivée des données JWST MIRI avant le lancement; analyser les données en vol d'étude de performances du MIRI LRS dans le cadre de l'observation d'exoplanètes en transit, données issues du *commissioning*; réduire, analyser et interpréter les données spectroscopiques et photométriques en infrarouge moyen de plusieurs cibles, allant des géantes gazeuses aux rocheuses tempérées.

La caractérisation des atmosphères d'exoplanètes représente un défi observationnel, les signatures spectrales des atomes et molécules recherchées dans les atmosphères étant très faibles. Ces signaux sont en général perdus dans les systématiques instrumentales. L'enjeu repose alors sur notre capacité à en extraire ces signaux. La robustesse des méthodes de réduction ne peut se vérifier que par l'analyse de simulations réalistes qui prennent en compte l'ensemble des systématiques instrumentales susceptibles d'altérer la stabilité temporelle des observations d'exoplanètes en transit. Dans cette thèse (Chap. 2), je présente des simulations réalistes d'observations d'exoplanètes en transit avec le LRS qui incluent la modélisation du système exoplanétaire, le télescope et son chemin optique, l'instrument et sa chaîne de détection et qui produisent des séries temporelles d'images spectrales dont le format est identique à celui des données (Dyrek, Ducrot et al., 2023). La spécificité des simulations repose sur le package *MIRISim-TSO* (Martin-Lagarde, 2020; Dyrek, Ducrot et al., 2023) qui permet d'ajouter les effets de persistance, source de variabilité temporelle du MIRI LRS. J'ai démontré les performances des simulations en les appliquant au cas d'étude WASP-80b, dans le cadre du Temps Garanti d'Observation (GTO) (PID : 1177), en collaboration avec NASA Ames. J'ai fourni les simulations officielles de l'Early Release Science (ERS) exoplanetary transit team (Stevenson, Lewis et al., 2016; Bean, Stevenson et al., 2018) dans le cadre des Data Challenges MIRI pré et post-lancement en 2021 et 2022. L'objectif de ces simulations était d'aider la communauté à la préparation à l'arrivée des premières données. Enfin, grâce aux simulations, j'ai démontré la détectabilité de l'émission côté jour de l'exoplanète rocheuse et tempérée TRAPPIST-1b malgré la présence de variabilités temporelles dues aux effets de persistance. Ces simulations ont permis de préparer les futures observations des GTO (PID : 1279 et 1177).

Dans le chapitre suivant (Chap. 3), je présente mon analyse du premier transit exoplanétaire observé avec le MIRI LRS dans le cadre du *commissioning* du JWST en mai 2022. La cible choisie pour l'étude de ce premier transit est la super-Terre L168-9b (PID : 1033), l'objectif étant de déterminer les performances du LRS. Mon analyse a confirmé l'absence d'une atmosphère étendue et un excès de bruit-sur-signal à courtes longueurs d'onde (Bouwman et al., 2022). J'ai ensuite fourni, en collaboration avec le STScI (Dyrek, Ducrot et al., 2023), l'ensemble des étapes d'investigation de cet excès ainsi qu'une explication qui démontre que cet excès est lié à la méthode de réduction des données du pipeline *jwst*. Dans le cadre de cette investigation, j'ai créé une nouvelle version des simulations prenant en compte la calibration en vol de l'instrument. Ces nouvelles simulations nous permettent aujourd'hui de reproduire les données du premier cycle d'observation et d'aider la communauté à la préparation aux futurs cycles d'observations. Enfin, j'ai mené l'analyse des effets de persistance observés sur la cible L168-9b pour laquelle j'ai démontré l'existence de plusieurs régimes d'effets dépendant du niveau de flux, de la localisation du pixel et de l'historique du détecteur.

Le Chap. 4 est consacré à la présentation des résultats scientifiques obtenus pour quatre cibles distinctes : la super-Neptune très enflée WASP-107b, la rocheuse tempérée de la taille de la Terre TRAPPIST-1b, la super-Terre GJ1214b et la Jupiter chaude WASP-39b. Les résultats présentés dans ce chapitre sont issus d'observations de courbes

de lumière photométriques et spectroscopiques faites avec MIRI. Dans le cadre du GTO, nous avons détecté du dioxyde de soufre (SO_2) à $\sim 12 \sigma$ et des nuages de silicates à $\sim 9 \sigma$ dans l'atmosphère de WASP-107b, premières détections en infrarouge moyen. À l'aide de modèles de chimie hors équilibre, nous avons établi la photochimie comme étant le processus responsable de la formation du SO_2 et avons inféré des hypothèses quant à la non-détection du méthane (CH_4). Ce travail fait l'objet d'un article de consortium (Dyrek, Min et al., 2023) accepté dans la revue *Nature*. À ce titre, j'ai également contribué à la confirmation de la détection de SO_2 en infrarouge moyen ($>3 \sigma$) (Powell et al., 2023 in prep.) dans l'atmosphère de la Jupiter chaude WASP-39b. Enfin, mes travaux ont également contribué à la première détection de l'émission thermique de la rocheuse tempérée TRAPPIST-1b à l'aide d'observations photométriques en infrarouge moyen à $15 \mu\text{m}$ avec MIRI. Nous avons mesuré une température de brillance côté jour de $T_B = 508_{-26}^{+26}$ et ainsi inféré des contraintes sur la présence ou non d'une atmosphère. L'hypothèse privilégiée est actuellement celle d'une planète sans atmosphère ou *bare rock*. Il s'agit là d'un travail pionnier puisqu'aucune émission thermique de rocheuse tempérée n'avait pu être détectée avant le JWST (Greene, Bell et al., 2023).

Cette thèse permet de démontrer :

- Les apports déterminants de la **spectroscopie en infrarouge moyen** pour la caractérisation de la composition chimique des atmosphères d'exoplanètes. MIRI se positionne comme un instrument essentiel pour la détection de signatures spectrales des molécules présentes dans les atmosphères et pour l'étude de l'émission thermique des exoplanètes ayant une température $< 600 \text{ K}$;
- La nécessité d'une **étude globale entre instrumentation, réduction des données et analyse scientifique**. Il s'agit à la fois de comprendre le fonctionnement des instruments, de connaître l'impact des différents choix liés aux méthodes de réduction sur les données finales obtenues, d'assurer une réduction robuste sans introduction de biais susceptibles d'être interprétés comme résultats scientifiques par la suite et, enfin, comprendre les hypothèses liées aux méthodes d'ajustement et aux modèles utilisés pour interpréter les résultats et donc d'établir la discussion non triviale entre modèles et observations.
- L'obtention de **résultats scientifiques disruptifs** rendue possible par des observations issues d'un télescope qui est le fruit de nombreuses innovations et technologies de rupture. À l'ère du JWST, les observations guident la recherche scientifique et amènent à l'évolution des modèles astrophysiques.

5.2 Travaux annexes : un pipeline data-driven pour analyser les données Spitzer

Dans cette section, je présente les travaux de réduction et d'analyse de données *Spitzer* IRAC que j'ai menés, avant le lancement du JWST, en suivant une approche radicalement différente de celle présentée dans le Chap. 3 pour l'analyse des données du JWST MIRI. L'approche choisie pour la réduction des données MIRI se fonde sur la **correction** des systématiques instrumentales (étapes 1, 2, 3 et 4) puis sur l'ajustement d'un modèle de courbe lumière et d'un modèle **empirique** des systématiques instrumentales (étape 5), ou en d'autres termes des variabilités temporelles (les effets de persistance, par exemple). La stabilité du JWST étant excellente (Rigby et al., 2022) et l'échantillonnage de la PSF suivant le critère de Shannon, les données ne présentent pas d'instabilités liées à une variabilité de pointage et une non-uniformité de la réponse intra-pixel. En revanche, les données du télescope *Spitzer* présentent un fort effet de *jitter* et une non-uniformité de la réponse intra-pixel, qui, liés au faible échantillonnage de la PSF, créent des systématiques corrélées temporellement (Ingalls, Krick, Carey, Laine et al., 2012). La Fig. 5.1 présente un exemple de courbe de lumière *Spitzer* IRAC à $4.5 \mu\text{m}$ (PID : 60185) de la Jupiter chaude WASP-18b (Hellier, Anderson, Cameron, Gillon, Hebb et al., 2009; Nymeyer et al., 2011; Maxted et al., 2013; Iro et Maxted, 2013; Zhou et al., 2015; Wilkins et al., 2017; Sheppard et al., 2017; Arcangeli, Desert, Line et al., 2018; Kedziora-

Chudczer et al., 2019; Arcangeli, Desert, Parmentier et al., 2019; Shporer, Wong et al., 2019). La courbe de lumière est **dominée** par les systématiques instrumentales et il est très difficile d'établir un modèle empirique pour les ajuster.

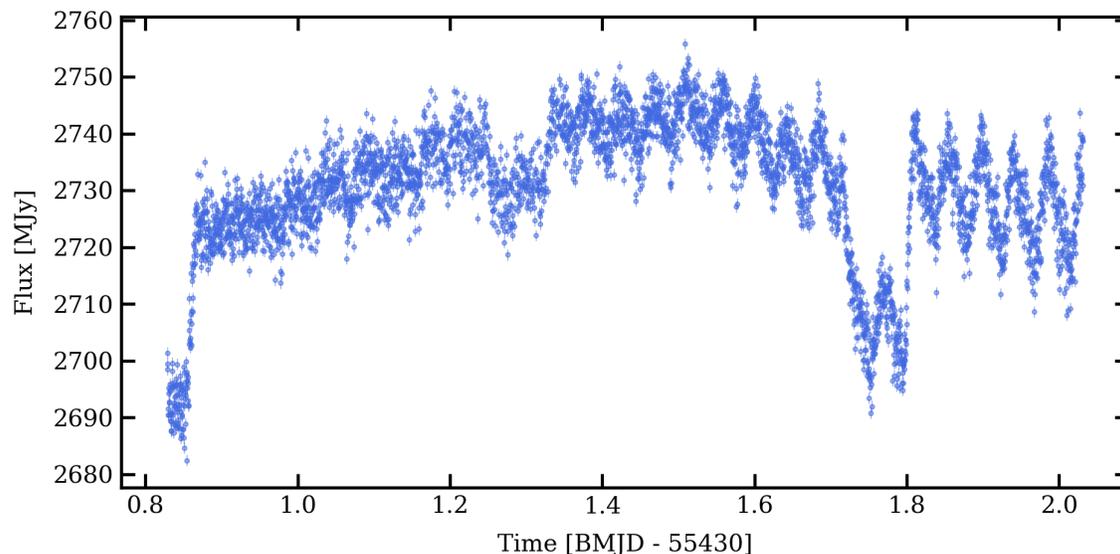


FIGURE 5.1 – Courbe de lumière photométrique *Spitzer* IRAC à $4.5 \mu\text{m}$ de WASP-18b (PID : 60185). La courbe de lumière blanche est obtenue après photométrie d'ouverture et rejet des *outliers*.

L'une des solutions introduites par Waldmann, 2012, 2013 et Morello, 2015 consiste à séparer les composantes de systématiques temporelles de la courbe de lumière sans l'intervention d'un modèle empirique ou de connaissances *a priori* de ces systématiques. La méthode est fondée sur le principe de la **séparation de sources à l'aveugle** ou *blind source separation* (BSS) en anglais. Avant d'appliquer cette méthode, nous commençons par sélectionner un subarray de 5 pixels par 5 autour du centroïde de chaque image. Un exemple de subarray est montré sur la Fig. 5.2. Ensuite, en guise de correction préliminaire, nous éliminons les valeurs aberrantes et nous appliquons un moyennage des données (~ 30 minutes sur un peu plus de 24 heures de données). Nous obtenons donc 25 séries temporelles correspondant aux séries temporelles de chacun des pixels du subarray.

5.2.1 Le principe de la séparation de sources à l'aveugle

Le signal de flux contenu dans chaque pixel du subarray peut être décrit par une combinaison linéaire d'un certain nombre de sources différentes que l'on appelle $S_n(t)$, n étant le nombre de sources. L'une des sources est le flux astrophysique recherchée $S_A(t)$, en d'autres termes la courbe de lumière et les $n - 1$ autres sources sont des bruits temporels $S_{N,n}(t)$. De fait, le signal dans un pixel $P(t)$ s'exprime comme

$$P(t) = a_1 S_A(t) + a_2 S_{N,1}(t) + \dots + a_n S_{N,n}(t) \quad (5.1)$$

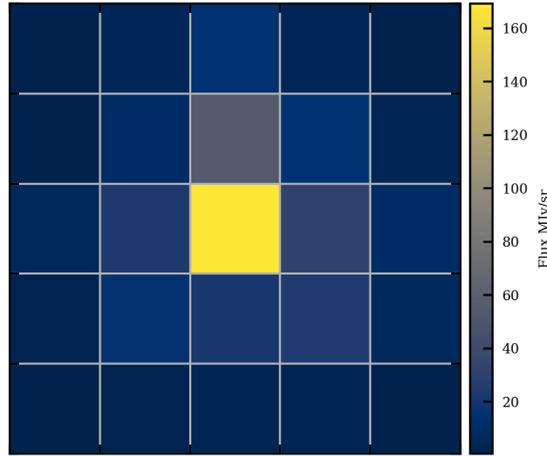


FIGURE 5.2 – Subarray de 5 par 5 pixels centré sur le centroïde de la première image des données photométriques *Spitzer* IRAC à $4.5 \mu\text{m}$ de la cible WASP-18b.

Pour l'ensemble des 25 pixels du subarray, le signal $P(t)$ s'exprime comme

$$\begin{cases} P_1(t) = a_{1,1}S_A(t) + a_{1,2}S_{N,1}(t) + \cdots + a_{1,n}S_{N,n}(t) \\ P_2(t) = a_{2,1}S_A(t) + a_{2,2}S_{N,1}(t) + \cdots + a_{2,n}S_{N,n}(t) \\ \vdots \\ P_{25}(t) = a_{25,1}S_A(t) + a_{25,2}S_{N,1}(t) + \cdots + a_{25,n}S_{N,n}(t). \end{cases} \quad (5.2)$$

De fait, le système peut s'exprimer sous la forme matricielle

$$\mathbf{P} = \mathbf{A}\mathbf{S} \quad (5.3)$$

où A est la matrice des coefficients de mélange des sources. L'objectif de la séparation de sources à l'aveugle est de déterminer l'ensemble des sources constituant le signal à partir de l'information contenue dans chacun des pixels et de l'inversion de la matrice de mélange. Notre objectif final est d'extraire la courbe de lumière (source S_A) des composantes de bruit grâce à l'information contenue dans l'ensemble des pixels constituant le subarray. En supposant que les sources soient indépendantes, que nous ne souffrons pas de perte d'informations issues des sources et que les coefficients de mélange sont constants dans le temps, nous pouvons donc écrire

$$\mathbf{S} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{P} \quad (5.4)$$

Cet exercice de séparation de sources porte le nom de “problème de la *soirée cocktail*” (Waldmann, 2012), présenté sur la Fig. 5.3.

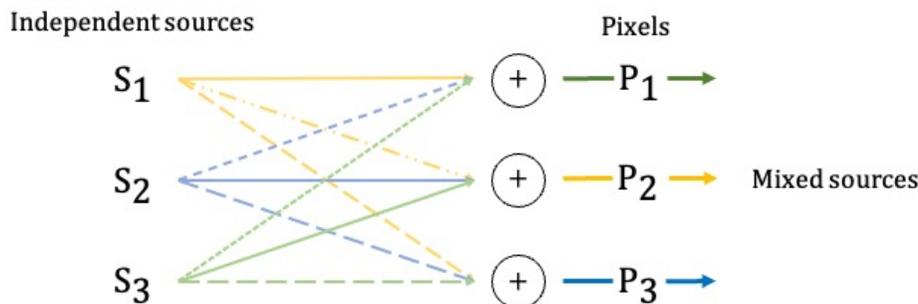


FIGURE 5.3 – Le problème dit de la *soirée cocktail* appliqué à l’observation photométrique en séries temporelles. Les trois sources sont indépendantes (par exemple, une source de courbe de lumière et deux sources de systématiques temporelles). Ces trois sources se mélangent, en quantités différentes, dans chacun des pixels du subarray. Chaque pixel contient donc un mélange donné de ces sources que l’on peut ensuite extraire par décorrélation des signaux de chaque pixel.

5.2.2 L’analyse en composantes indépendantes

La détermination de la matrice de mélange est faite par une analyse en composantes indépendantes ou *independent component analysis* (ICA) (Castella et Pesquet, 2004; Morello, 2015; Benzvi et Shafir, 2018) qui permet de maximiser la non-gaussianité des signaux, autrement dit de chercher les corrélations des moments d’ordre supérieur à 2 (asymétrie et aplatissement) (Stone, 2004). Dans le cadre de cette analyse, nous ne parlons plus de sources (physiques) mais de composantes (mathématiques). La première étape consiste à déterminer le nombre de composantes que nous cherchons à séparer. Pour ce faire, nous utilisons une analyse en composantes principales ou *principal component analysis* (PCA) qui nous permet d’obtenir la matrice de covariance des signaux compris dans les 25 pixels. Cette matrice de covariance est ensuite diagonalisée dont les valeurs propres nous renseignent sur l’amplitude de chacun des vecteurs de cette nouvelle base orthonormale. La somme cumulative des valeurs propres nous permet d’obtenir les contributions à l’énergie totale. À titre d’exemple, pour WASP-18b, 95% de l’énergie totale peut être obtenue uniquement avec 5 composantes et 99% de la puissance totale, avec 17 composantes. La décomposition en composantes indépendantes est faite dans le domaine des ondelettes (Wang et al., 2006; Carter et Winn, 2009), ce qui nous permet de discriminer les différentes échelles temporelles : un transit présente une forme et une fréquence d’apparition caractéristique que nous pouvons utiliser comme information *a priori* pour aider à la décomposition. Nous venons ensuite appliquer un filtre dans le domaine des ondelettes pour lisser le bruit à haute fréquence (Waldmann, 2013). Enfin, nous appliquons l’ICA de l’algorithme *Multi combi* (Tichavsky et al., 2008; Tichavský et Koldovský, 2011). Nous obtenons ainsi entre 5 et 25 composantes indépendantes dont la courbe de lumière. L’algorithme d’ICA appliquant une normalisation arbitraire, nous ne pouvons pas utiliser directement cette courbe de lumière comme résultat, mais nous pouvons utiliser les composantes de bruits temporels obtenus.

5.2.3 Ajuster des données à partir d’un modèle de bruit

L’étape suivante consiste à ajuster la courbe de lumière brute à l’aide d’un modèle astrophysique et d’une combinaison linéaire de l’ensemble des bruits temporels extraits par ICA. Ainsi, nous n’avons pas besoin de corriger la courbe de lumière brute pour ajuster un modèle astrophysique. L’ajustement se fait par inférence bayésienne à l’aide d’un algorithme *emcee* (Foreman-Mackey, Hogg et al., 2013) de Markov-Chain Monte Carlo (MCMC) qui ajuste les paramètres du modèle astrophysique et les amplitudes des n composantes de bruits temporels. La Fig. 5.4 présente le meilleur modèle issu de l’ajustement des données ainsi que les résidus et la Fig. 5.5 présente le *corner plot*

associé. De plus amples détails sur l'inférence bayésienne sont fournis dans le Chap. 3

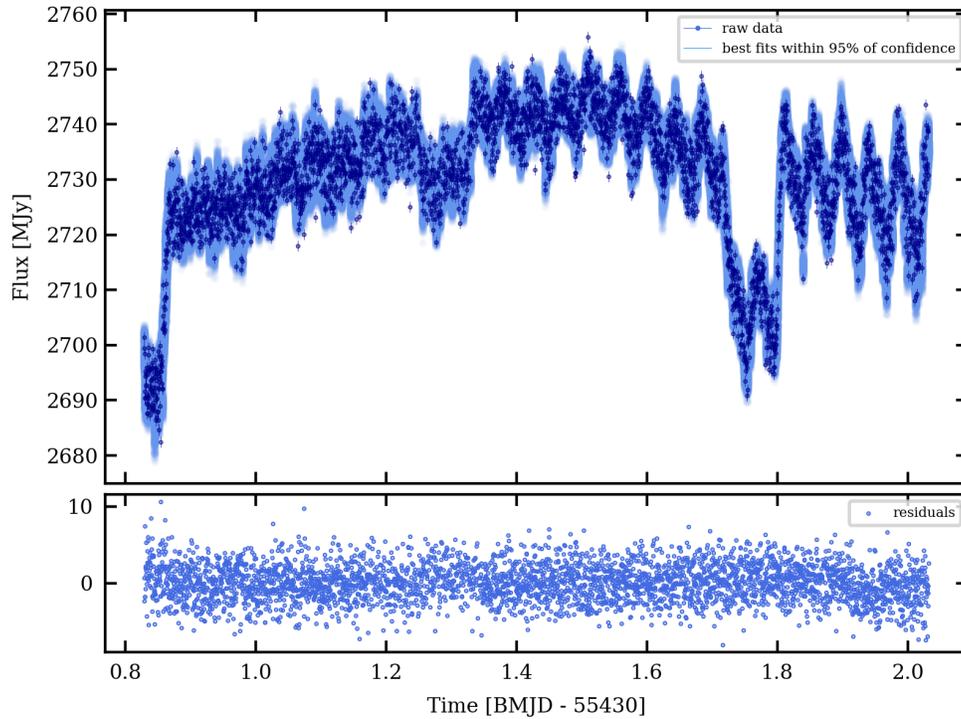


FIGURE 5.4 – *En haut* : Meilleur modèle (en bleu clair) après ajustement des données *Spitzer* de la cible WASP-18b (points en bleu foncé). Le modèle inclut 24 composantes de bruits temporels issus de la séparation de sources à l'aveugle, qui nous permettent d'ajuster parfaitement les données sans corriger les systématiques au préalable. *En bas* : résidus de l'ajustement qui suivent une loi normale centrée réduite.

Les paramètres de bruits temporels de la distribution *a posteriori* nous permettent de construire un *modèle de bruit* que nous pouvons soustraire aux données brutes pour extraire la courbe de lumière. La Fig. 5.6 présente la courbe de lumière de WASP-18b extraite grâce à l'ajustement du modèle bruité.

Ce travail sur les données *Spitzer* fait l'objet d'un package `spitzer_data_reduction` codé en Python3 et Matlab à partir des travaux de Tichavsky et al., 2008 et de Morello, 2015 et d'un article de collaboration (Morello, Dyrek et al., 2022).

5.2.4 Une méthode de réduction envisageable pour les futures données Ariel ?

La stabilité de pointage de la mission Ariel ainsi que l'échantillonnage de la PSF aux longueurs d'onde d'observation, combinées à la réponse intra-pixel des détecteurs pourraient être une source de variabilités temporelles significatives qui pourrait rendre nécessaire l'utilisation de méthodes de réduction *data-driven*. À ce titre, des méthodes de réduction comme celle de la séparation de sources à l'aveugle ou encore des méthodes de prédictions et de correction de systématiques par des algorithmes d'intelligence artificielle (IA) (Morvan, Nikolaou et al., 2020; Morvan, Tsiraras et al., 2021; Yip, Changeat, Nikolaou et al., 2021; Yip, Changeat, Al-Refaie et al., 2022; Waldmann,

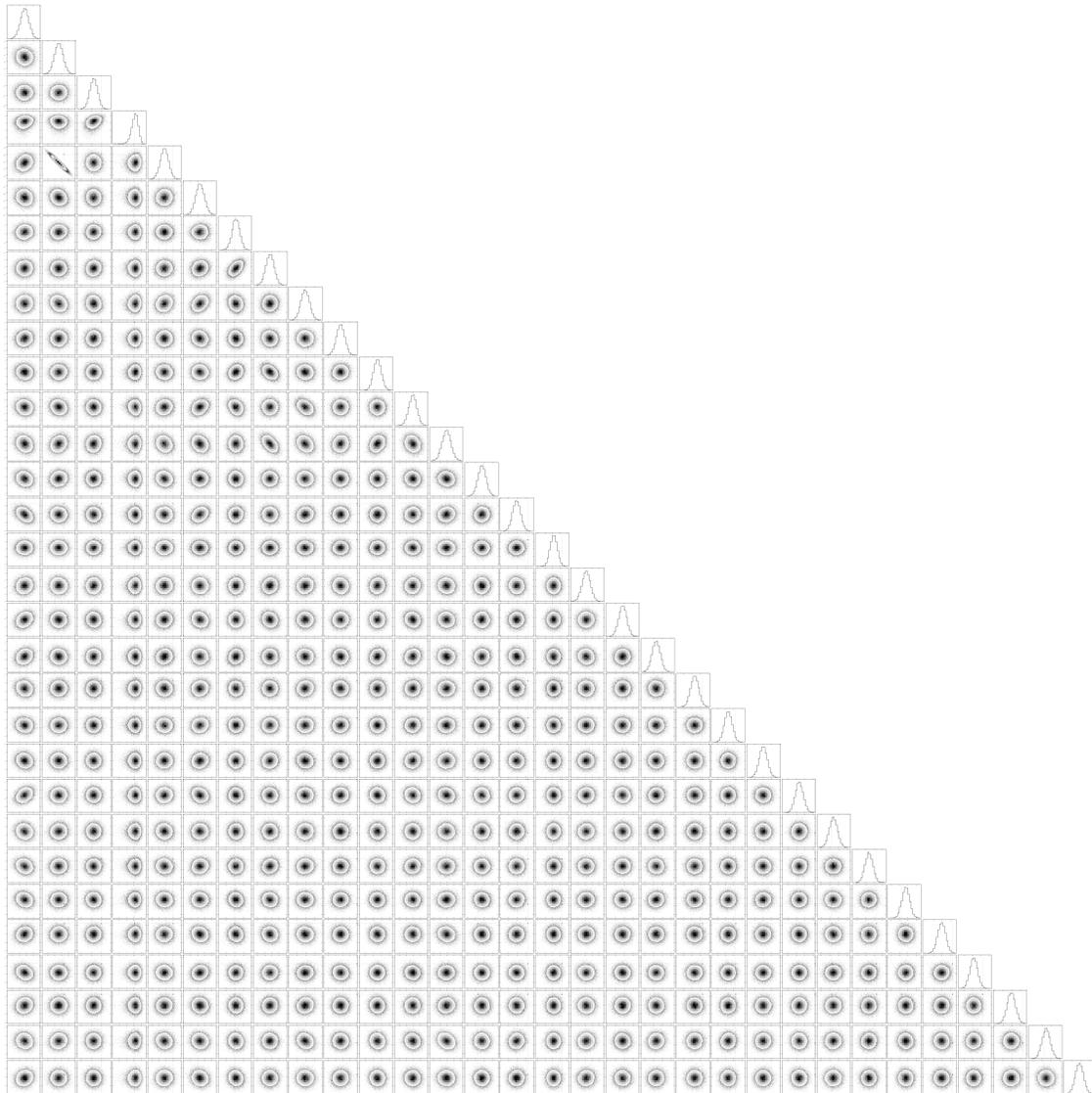


FIGURE 5.5 – Projection 2D de la matrice de covariance de la distribution *a posteriori* de l’ajustement des données *Spitzer* de la cible WASP-18b. Le modèle final contient 24 paramètres d’amplitude des composantes de bruits et 5 paramètres de modèle astrophysique. Nous voyons une corrélation visible à la ligne 4 et colonne 2 entre l’inclinaison et le demi-grand axe de la planète, la relation entre ces paramètres étant ici dégénéré car nous avons une seule connaissance du paramètre d’impact.

2022) sont aujourd’hui envisagées pour la préparation à l’analyse des futures données Ariel (voir le data challenge Ariel 2023¹ par exemple).

1. Le site du data challenge est disponible ici <https://www.ariel-datachallenge.space/>

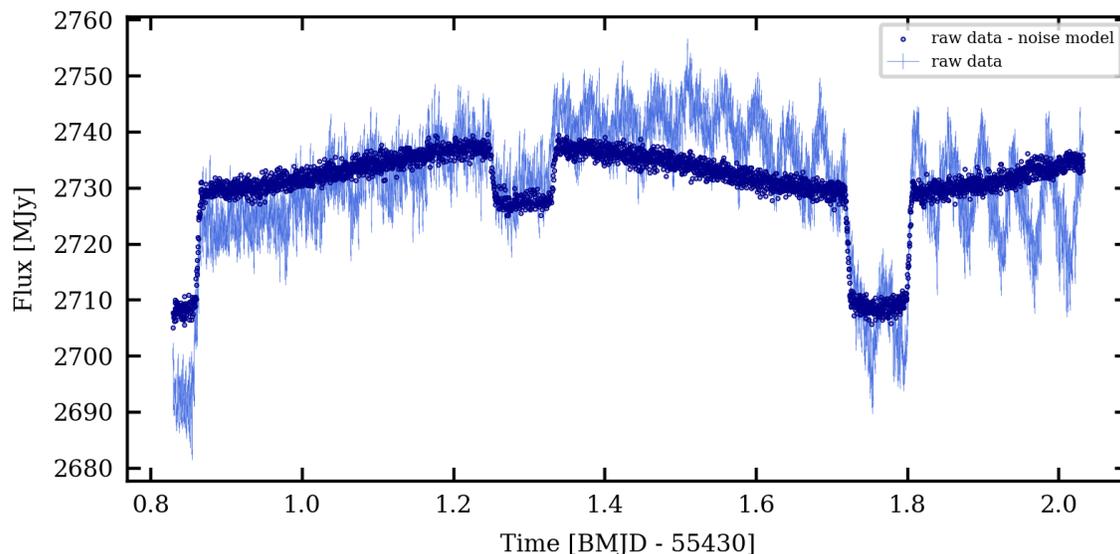


FIGURE 5.6 – Courbe de lumière de la cible WASP-18b extraite grâce à l’ajustement d’un modèle de bruit issu de la séparation de sources à l’aveugle (points en bleu foncé). Les points en bleu clair présentent les données brutes.

5.3 Travaux annexes : courbes de phase d'exoplanètes non-transitantes

Dans cette section, je m’intéresse aux interactions étoile-planète dans le cadre d’un travail collaboratif sur la caractérisation des modes de pulsation des analogues solaires de type F (Breton et al., 2021). Cette caractérisation se fait par étude des données photométriques *Kepler* ou TESS dont les spectres de puissance nous renseignent sur les modes de pulsation (Appourchaux, Chaplin et al., 2012; Appourchaux, Benomar et al., 2012, Corsaro et De Ridder, 2014, Benomar et al., 2015, Lund et al., 2017 et Hall et al., 2021).

5.3.1 La possible détection d’une exoplanète non-transitante

Dans ce spectre de puissance, les basses fréquences sont généralement hors du périmètre d’étude des modes acoustiques, étant situés à plus hautes fréquences, mais peuvent nous apporter de précieuses informations quant à la potentielle existence de compagnons non-transitantes. Ces compagnons non-transitantes ne seraient donc pas répertoriés comme objets d’intérêt TESS ou *Kepler* (TOI ou KOI) mais, du fait de leur présence, moduleraient la lumière reçue de l’étoile (Gaulme et al., 2010; Selsis et al., 2011; Maurin et al., 2012; Shporer, 2017; Lillo-Box et al., 2021).

Cette modulation serait commensurable à la période de rotation de la potentielle planète et donc détectable à basse fréquence dans le spectre de puissance. Dans le cadre de ce projet, nous avons donc fait la découverte d’un potentiel compagnon non-transitant grâce à l’étude de 4 ans de données photométriques *Kepler* de l’étoile KIC 9139163 (García, Hekker et al., 2011; García, Mathur et al., 2014; Pires et al., 2015).

Le graphe de gauche de la Fig. 5.7 présente le spectre de puissance dont les hautes fréquences ont été filtrées. Le spectre présente la détection de deux harmoniques à ~ 19 et $\sim 38 \mu\text{Hz}$, correspondant à une période respectivement de 0.6 et 1.2 jours.

Après repliement de la courbe de lumière en phase suivant la première harmonique à 0.6 jour, j’obtiens la courbe

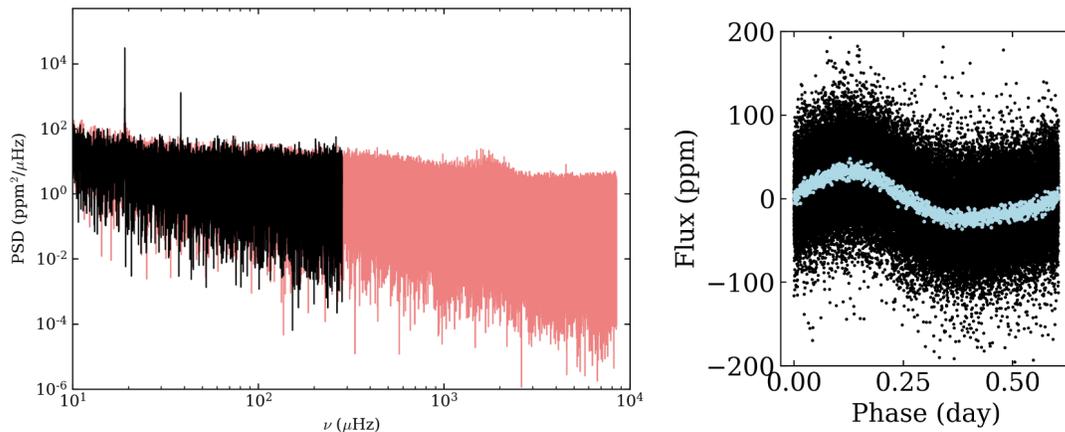


FIGURE 5.7 – *À gauche* : Spectre de puissance de la cible KIC 9139163 issu des données *Kepler*. Les points en rouge correspondent aux données *long cadence* et celles en noir sont les données *short cadence*. *À droite* : Courbe de lumière de KIC 9139163 repliée à 0.6 jour laissant apparaître une modulation. Les points en bleu sont issus d'un moyennage de 500 points pour plus de visibilité.

de lumière présentée sur le graphe de droite de la Fig. 5.7. Les points en bleu sont issus d'un moyennage de 500 points. Le repliement révèle la présence d'une modulation similaire aux modulations présentées dans les travaux de Shporer, 2017; Lillo-Box et al., 2021 et pourrait être attribué à l'existence d'une exoplanète en orbite autour de l'étoile dont nous verrions les variations, par exemple, de l'émission ou de la réflexion.

5.3.2 Le suivi en vitesses radiales avec HARPS-N

Afin de confirmer la présence d'un compagnon non-transitant autour de KIC 9139163, une campagne d'observation en vitesses radiales est en cours au TNG (Telescopio Nazionale Galileo), télescope de 3.5 mètres situé sur l'île de La Palma aux Canaries, à l'aide du spectrographe HARPS-N (High Accuracy Radial velocity Planet Searcher for the Northern hemisphere), données que j'ai analysées en collaboration avec l'Institut d'Astrophysique des Canaries (Intituto de Astrofísica de Canarias, IAC). Nous avons actuellement 54 spectres soit 54 points en vitesses radiales sur 8 nuits d'observation. Les résultats actuels sont présentés sur la Fig. 5.8.

5.3.3 Inférer le rayon planétaire par modélisation de courbes de phase

L'échantillonnage des données en vitesses radiales ne permet pas, pour le moment, de confirmer la présence d'un compagnon transitant. De nouvelles observations cette année devraient nous aider à contraindre la présence d'une planète. En parallèle, je travaille à la prise en compte de modèles permettant de produire une courbe de lumière photométrique correspondant à l'amplitude de la modulation des données KIC 9139163 à ~ 30 ppm. Le modèle mis en place est un modèle orbital d'une exoplanète qui prend en compte l'irradiation par une étoile de masse, de rayon et d'inclinaison correspondant à KIC 9139163 (Selsis et al., 2011; Maurin et al., 2012). Le modèle prend en compte une émission planétaire bolométrique suivant une loi du corps noir à la température de brillance de la planète calculée à partir de la température d'irradiation, dans la bande passante de *Kepler* ainsi que la réflexion pour différentes valeurs d'albédo de Bond. L'exoplanète est considérée comme étant verrouillée par les effets de marées et orbitant donc dans le plan équatorial de l'étoile en 0.6 jour. La Fig. 5.9 présente les résultats obtenus. De fait, le modèle nous permet

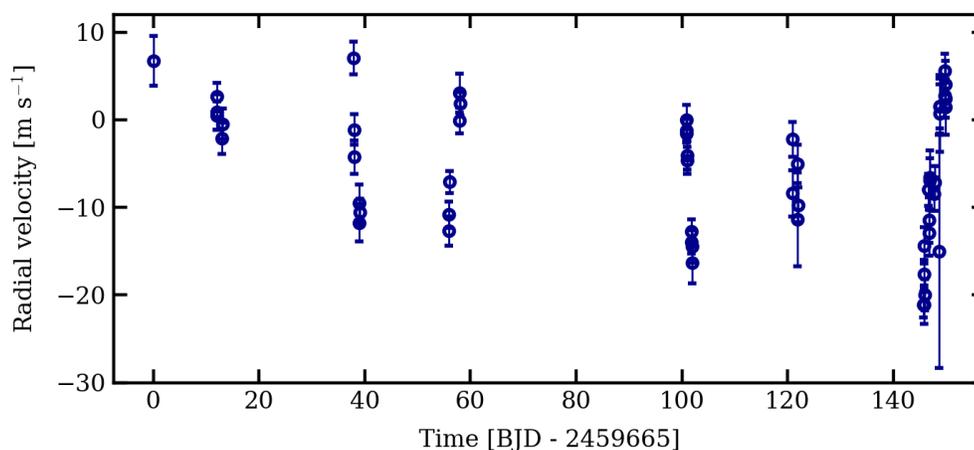


FIGURE 5.8 – 54 points d’observations sur 8 nuits en vitesses radiales de la cible KIC 9139163 avec le spectrographe HARPS-N.

d’inférer des contraintes sur le rayon planétaire à une inclinaison orbitale donnée, pour différents albédos de Bond et efficacités de recirculation atmosphérique.

Le seul cas dégénéré ici est le cas d’une planète ayant une recirculation complète de son atmosphère $\epsilon = 1$ et un albédo de Bond < 1 . Dans tous les autres cas, la courbe iso-amplitude indique la possibilité de l’existence d’un compagnon d’un rayon planétaire allant de 4 à 8 rayons terrestres. Le compagnon serait donc une super-Terre. Ce travail de caractérisation d’exoplanètes non-transitantes est aujourd’hui en cours et fait l’objet d’un premier article (Breton & Dyrek, et al., in prep.) et d’un travail plus global visant à ré-analyser les courbes de lumières photométriques *Kepler* et TESS à la recherche d’exoplanètes non-transitantes, ainsi qu’à établir des synergies entre les missions JWST, Ariel et PLATO. De manière générale, un travail collaboratif entre physique stellaire et planétaire est aujourd’hui nécessaire pour étudier les exoplanètes non pas comme objets seuls mais comme faisant partie d’un système étoile-planète, la perspective de recherche étant l’étude de leur interaction.

5.4 Perspectives

5.4.1 Approfondir l’analyse des performances instrumentales de MIRI

Le travail mené sur la réduction et l’analyse des premières données de transit planétaire du MIRI LRS de la cible L168-9b a permis d’établir les performances de l’instrument et de mettre en lumière les caractéristiques instrumentales spécifiques aux observations en séries temporelles. En particulier, nous avons aujourd’hui plusieurs axes d’études instrumentales à approfondir afin de garantir une réduction des données de plus en plus performante. Trois axes ont été identifiés : les non-linéarités des rampes, rampes issues des lectures non-destructives du détecteur, les effets de persistance ayant un impact sur la stabilité des observations et les effets liés à la dispersion du flux sur le détecteur.

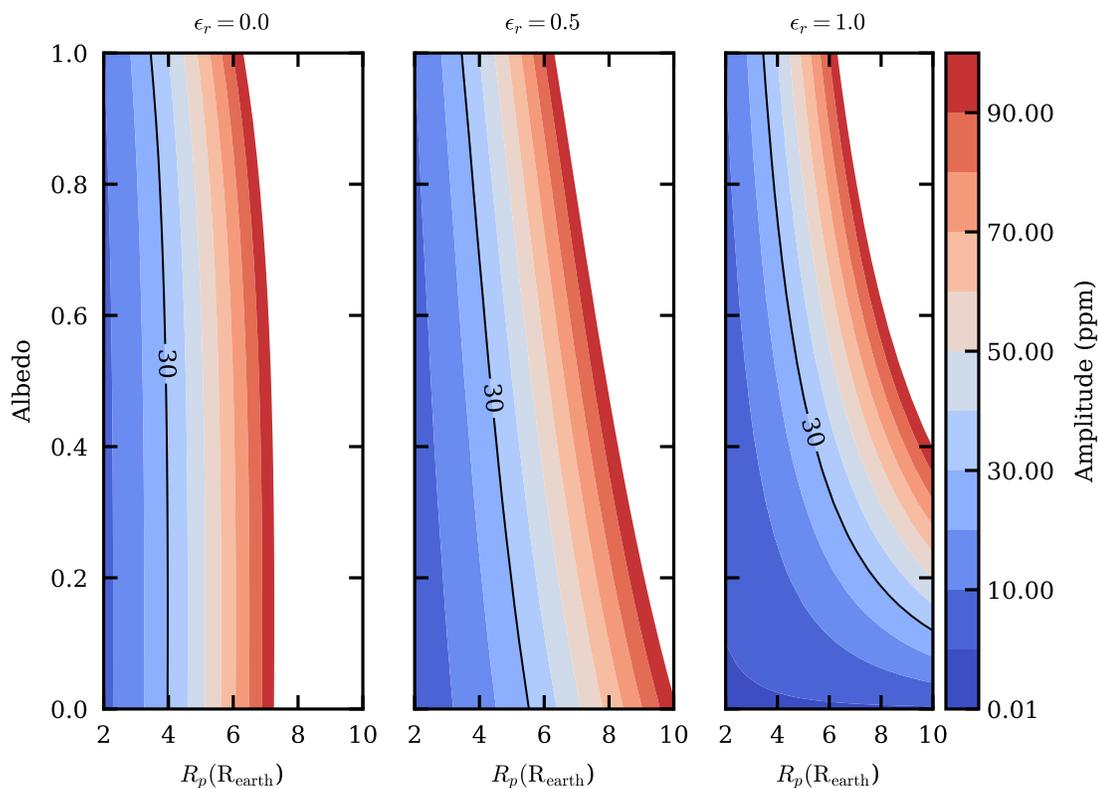


FIGURE 5.9 – Modèle d’une exoplanète orbitant KIC 9139163 dont l’inclinaison de l’orbite est fixée à 30 degrés (plan équatorial de l’étoile) et la période orbitale à 0.6 jour et dont les contributions de flux sont l’émission à la température de brillance et la réflexion pour différents albédos de Bond présentés en ordonnées. Les trois graphes correspondent à trois efficacités de recirculation atmosphérique et présentent les iso-amplitudes de courbes de lumière pour différents rayons planétaires donnés. La courbe correspondant à l’amplitude de la modulation des données *Kepler*, ~ 30 ppm, est montrée en noir. Figure montrée ici avec l’aimable autorisation de F. Selsis.

5.4.1.1 Les non-linéarités des rampes

L’enjeu principal de la première étape de la réduction des données est de garantir une conversion des rampes en pente sur des rampes linéarisées, travail qui est aujourd’hui en cours en collaboration avec le STScI. Aujourd’hui de nombreux effets comme le RSCD (Ressler, Colbert et al., 2023; Morrison et al., 2023) et le *brighter-fatter effect* (Argyriou, Glasse et al., 2023) sont en cours d’analyse et n’ont pas encore de correction associée dans le pipeline de réduction officiel *jwst*. À cause des non-linéarités résiduelles dans les rampes, la méthodologie employée pour corriger les rayons cosmiques (Anderson et Gordon, 2011) conduit au rejet d’un nombre variable de frames selon les intégrations, ce qui peut affecter l’ajustement des cibles très brillantes qui présentent un petit nombre de frames. Par ailleurs, la méthode de correction des non-linéarités a un impact direct sur les flux extraits, sur les courbes de lumière et donc sur les valeurs des rayons planétaires normalisés extraites par ajustement de ces courbes de lumière. En d’autres termes, la méthode de correction des non-linéarités a un impact direct sur le spectre atmosphérique obtenu.

La Fig. 5.10 présente deux exemples de différentes corrections de non-linéarités des données de la cible WASP-39b : la correction *generic* est la correction officielle générique du pipeline *jwst* et la correction *customized* est une correction par linéarisation manuelle des rampes. Selon la méthode appliquée, le spectre obtenu peut présenter un écart allant jusqu'à 500 ppm.

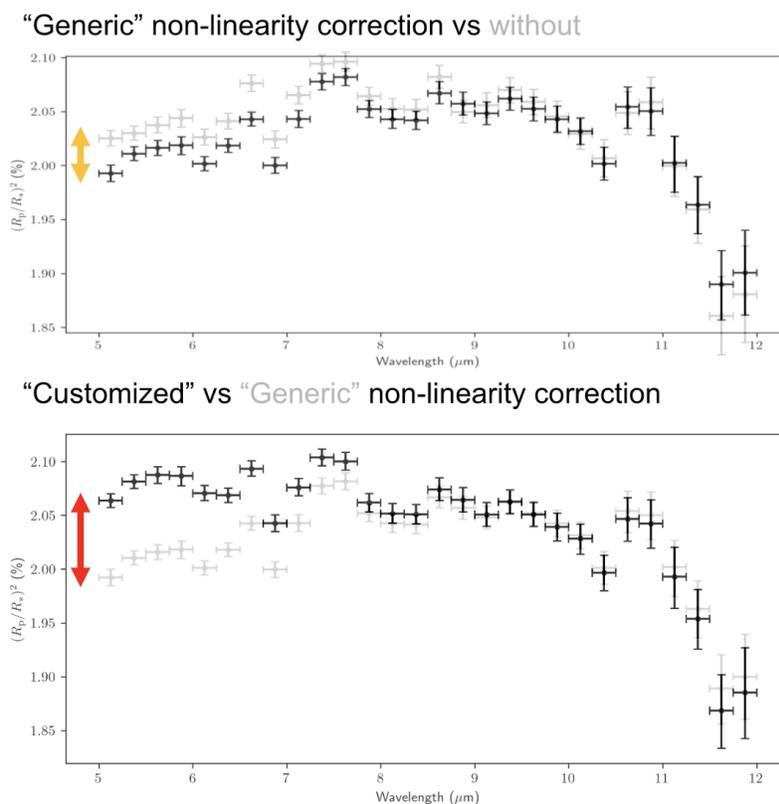


FIGURE 5.10 – Exemples de spectres obtenus après analyse des données WASP-39b pour différentes méthodes de correction des non-linéarités des rampes. *En haut* : comparaison de spectres atmosphériques après application de la correction officielle du pipeline *jwst* et sans application de correction. *En bas* : comparaison de spectres atmosphériques après application de la correction officielle générique du pipeline *jwst* et une correction manuelle adaptée. Les flèches jaune et rouge montrent les écarts que nous sommes susceptibles d’obtenir en appliquant des corrections différentes. Figure présentée ici avec l’aimable autorisation de T. Bell.

5.4.1.2 Les effets de persistance

L’impact global d’un ajustement d’un modèle empirique d’effets de persistance sur les spectres d’atmosphère doit faire l’objet d’investigations supplémentaires. Nous observons, dans les jeux de données du MIRI LRS, des comportements différents dépendants du flux, des zones du détecteur et de l’histoire du détecteur. Certains de ces effets ont un impact sur les courbes de lumière, sur les valeurs des rayons planétaires normalisés extraites par ajustement et sont donc visibles dans les spectres atmosphériques que nous obtenons. À titre d’exemple, le spectre de WASP-39b présente une diminution abrupte de la profondeur de transit à 10 μm dont la cause est instrumentale

et très probablement issue des effets de persistance de la courbe de lumière associée. Un travail d'analyse minutieux de l'ensemble des observations disponibles doit être mené pour **établir les liens de cause à effet entre les modes d'opération de l'instrument et les instabilités temporelles résultantes**. Ce travail est aujourd'hui en cours, en collaboration avec le STScI et devrait permettre de fournir des recommandations de bonnes pratiques d'opérations instrumentales pour les futurs cycles d'observation.

5.4.1.3 *Cross-artifact* et recouvrement de spectre

Un des effets observables sur les images spectrales du MIRI LRS est le *cross artifact*, causé par de la diffusion interne au sein du détecteur qui se manifeste par une forme de croix impactant la tâche de diffraction de la PSF et qui est visible en imagerie et en spectroscopie à des longueurs d'onde $< 10 \mu\text{m}$ (Gáspár et al., 2021). De fait, du flux correspondant à des longueurs d'onde données dispersées sur le détecteur peut être diffusé vers d'autres pixels et donc d'autres longueurs d'onde. La question est de déterminer la quantité de flux effectivement diffusée par le détecteur, le nombre de pixels impactés et donc l'erreur que nous faisons sur l'extraction spectrale du flux lors de l'analyse des données. Les travaux d'Argyriou, 2021 présentent une première analyse des effets de diffusion, notamment concernant le spectromètre à moyenne résolution (MRS) mais dont les résultats peuvent être utilisés pour le MIRI LRS.

Par ailleurs, du fait de la dispersion particulière du LRS, du flux correspondant à des longueurs d'onde comprises entre 3 et 4 μm et du flux correspondant à des longueurs d'onde comprises entre 5 et 6 μm arrivent sur un même pixel, créant ainsi un repliement du spectre à courtes longueurs d'onde (Kendrew, Scheithauer et al., 2015) et une contamination des longueurs d'onde du LRS entre 5 et 6 μm . Une première évaluation théorique montre que l'effet est faible (quelques pourcents) (Bouchet et al., 2022). À cet égard, une évaluation plus poussée en vol peut être faite en comparant les données MIRI aux longueurs d'onde inférieures à 6 μm à des données similaires de NIRSPec entre 4 et 5.3 μm .

5.4.1.4 Vers une utilisation du LRS *slit* pour l'étude des atmosphères d'exoplanète ?

Une des possibilités intéressantes concernant le MIRI LRS est l'utilisation de la fente ou *slit* pour l'étude en séries temporelles d'atmosphère d'exoplanète. En effet, la stabilité de pointage du JWST étant excellente (Rigby et al., 2022), nous pouvons envisager cette option. L'avantage principal de l'utilisation de la fente est la réduction du fond observationnel et d'éventuels problèmes liés au recouvrement de spectre pourraient être évités. Le LRS *slit* étant lu en configuration FULL array correspondant à la lecture de l'imageur, le temps de frame serait plus élevé (2.77 s) (Kendrew, Scheithauer et al., 2015).

5.4.2 De la photochimie dans les atmosphères d'exoplanète

Les premières données du JWST en infrarouge moyen ont révélé la présence de dioxyde de soufre (SO_2) dans l'atmosphère de deux exoplanètes très irradiées : la Jupiter chaude WASP-39b (Alderson et al., 2023; Rustamkulov et al., 2023; Tsai, Lee et al., 2023; Powell et al., 2023 in prep.) et la super-Neptune WASP-107b (Dyrek, Min et al., 2023). Les travaux menés sur ces deux cibles établissent la photochimie comme pouvant être le processus de formation de SO_2 à l'oeuvre dans ces deux atmosphères. Aujourd'hui, la détermination de la **prévalence de la photochimie** dans les atmosphères d'exoplanète ainsi que celle des **conditions de formation du SO_2** font l'objet d'un nouvel axe de recherche. Le SO_2 est-il une molécule prédominante dans les atmosphères ? Dans quelles conditions d'irradiation se forme-t-il ? Pouvons-nous établir un lien entre photochimie et densité de l'atmosphère, métallicité et rapport C/O ? Devons-nous nous attendre à une prévalence de l'oxygène sur le carbone et d'éléments métalliques de manière générale dans ces atmosphères ? Quels sont les processus de formation planétaire qui amènent à la présence d'un réservoir de soufre dans ces atmosphères ?

Le programme d'observation JWST MIRI accepté pour le cycle 2 (PID 2950)² a pour objectif d'étudier 3 géantes gazeuses, dont les atmosphères sont dominées par l'hélium et l'hydrogène, susceptibles de contenir du SO₂ produit photochimiquement : HAT-P-1b, HAT-P-11b et HD106315c. Ces trois cibles ont été judicieusement choisies pour les différentes irradiances qu'elles reçoivent et cette étude comparative pourrait nous permettre d'établir de nouvelles contraintes sur les conditions de formation du SO₂. L'observation de ces cibles commence en juin 2024 et la fin de l'année 2023 ainsi que le premier semestre 2024 seront consacrés à la préparation de ce programme sur lequel je vais collaborer à partir du mois de septembre 2023.

5.4.3 Des rocheuses tempérées aux *lava worlds*

Les observations de la rocheuse tempérée TRAPPIST-1b à l'aide de l'imageur de MIRI en photométrie à bande large à 15 μm ont permis la détection de l'éclipse de la planète et donc de son émission thermique côté jour. Cette détection nous a permis de contraindre la température de brillance côté jour de la planète. Comme précisé dans le Chap. 4, l'hypothèse privilégiée est donc celle d'une planète sans atmosphère ou *bare rock*, avec une température de brillance côté jour de $T_B = 508_{-26}^{+26}$ (Greene, Bell et al., 2023). Les perspectives envisagées sont les suivantes. Nous recevons, au moment où j'écris cette thèse, 5 observations complémentaires de l'éclipse de TRAPPIST-1b à 12.8 μm . L'objectif initial de l'étude de l'éclipse de cette planète à ces deux longueurs d'onde précises était de sonder la présence de CO₂ dans son atmosphère. Les résultats à 15 μm laissant présager un *bare rock*, les données à 12.8 μm vont permettre de confirmer ou d'infirmer ces résultats. Si les données à 12.8 μm venaient à le confirmer, nous pourrions donc inférer des contraintes supplémentaires sur l'efficacité de recirculation et l'albédo de Bond de la planète. Ce travail est aujourd'hui en cours et promet des résultats exaltants quant à la caractérisation des exoplanètes rocheuses et tempérées.

TRAPPIST-1b fait également l'objet d'une proposition de temps JWST accepté sur laquelle je suis co-investigatrice (co-I). Il s'agit d'une observation en photométrie à bande large avec MIRI à 15 μm pour l'observation de la **courbe de phase** cumulée de TRAPPIST-1b et TRAPPIST-1c (PID : 3077)³, soit une observation de ~ 60 heures. L'étude de la courbe de phase complète nous permet d'accéder à l'émission thermique côté nuit et non seulement de confirmer une efficacité de recirculation nulle mais de contraindre l'albédo de Bond, suivant la méthodologie explicitée dans la Sect. 4.4 du Chap. 4. Ces observations sont prévues pour novembre 2023 et vont nous permettre d'apporter des contraintes fortes sur ces planètes. De plus, les conditions d'irradiation ainsi que la connaissance acquise sur les températures et l'existence ou non d'une atmosphère sur TRAPPIST-1b seront comparés aux résultats obtenus par des observations similaires sur TRAPPIST-1c (Zieba et al., 2023).

L'une des suites intéressantes pour l'étude du système TRAPPIST-1 est d'investiguer la **composition des roches** à la surface de TRAPPIST-1b (Greene, Bell et al., 2023). Les roches susceptibles d'être à la surface de TRAPPIST-1b présentent différentes émissivités dans la bande de longueur d'onde du MIRI LRS. En combinant au moins 15 éclipses de TRAPPIST-1b en spectroscopie, nous pourrions inférer des contraintes sur sa composition de surface. La Fig. 5.11 présente les profondeurs d'éclipse pour différentes compositions de roche en infrarouge moyen. À titre d'exemple, avec une erreur inférieure à 100 ppm, nous pourrions discriminer la présence de quartz à la surface la planète (Lustig-Yaeger et al., 2019b).

Enfin, nous pouvons nous intéresser aux conditions sur des rocheuses de petite taille (comme la Terre) bien plus irradiées que celles de notre Système solaire ou du système TRAPPIST-1b, que nous appelons des *lava worlds* ou mondes de lave. Ces exoplanètes peuvent être représentatives d'un état primordial des rocheuses de notre Système solaire et pourraient nous permettre d'apporter des contraintes sur leurs conditions de formation et d'évolution. À ce titre, un programme d'observation JWST MIRI a été accepté (PID 3730)⁴ pour une première étude photométrique

2. Le programme d'observation 2950 est disponible sur le site suivant <https://www.stsci.edu/jwst/phase2-public/2950.pdf>

3. Le programme d'observation 3077 est disponible sur le site <https://www.stsci.edu/jwst/phase2-public/3077.pdf>

4. Le programme d'observation 3730 est disponible sur le site <https://www.stsci.edu/jwst/phase2-public/3730.pdf>

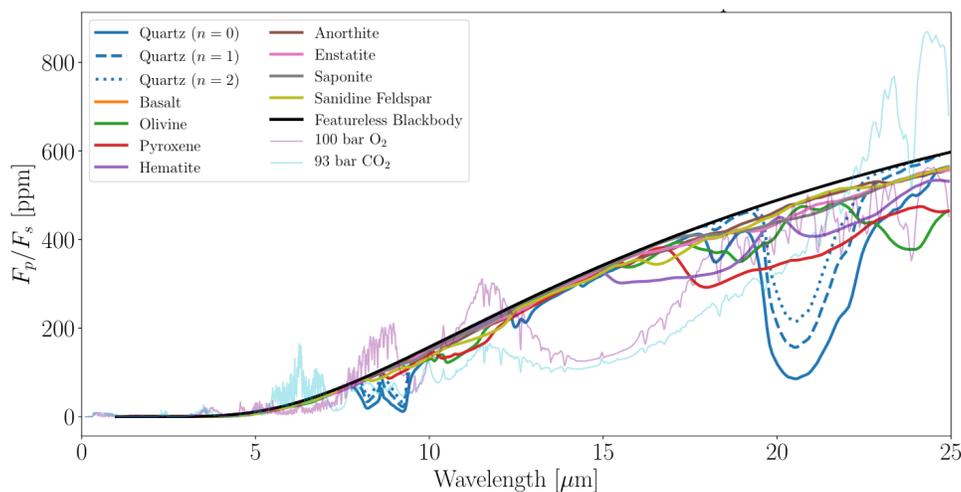


FIGURE 5.11 – Profondeur d’éclipse de TRAPPIST-1b en infrarouge moyen pour différentes compositions de roches à la surface. Nous pouvons d’ores et déjà éliminer l’hypothèse d’une atmosphère dominée par le CO₂. Figure venant de Lustig-Yaeger et al., 2019b.

à 15 μm de 9 mondes de lave.

5.4.4 Exoplanétologie comparative : la mission Ariel

La mission Ariel est la première mission spatiale entièrement dédiée à l’étude des atmosphères d’exoplanètes qui va opérer dans l’infrarouge proche et moyen (de 0.55 à 7.8 μm). Il s’agit de la mission M4 du programme Cosmic-Vision de l’ESA dont le lancement est prévu pour 2029. Cette mission a pour objectif de caractériser spectralement les atmosphères de ~ 1000 exoplanètes. Cette **approche statistique** est aujourd’hui une nécessité pour contraindre les populations planétaires et les relations de masse, de température, de composition, d’irradiation et de conditions de formation qui les lient. Nous pouvons souligner ici la complémentarité des missions JWST et Ariel. La sensibilité du JWST ainsi que sa grande couverture en longueurs d’onde nous permettent de sonder une très large gamme d’atmosphères d’exoplanètes allant des géantes gazeuses aux rocheuses tempérées, et d’établir les compositions chimiques de cibles judicieusement choisies. L’approche statistique de la mission Ariel, fondée sur des études de populations planétaires va nous permettre de révolutionner le domaine de recherche de l’**exoplanétologie comparative**. À ce titre, nous pouvons établir les **synergies entre JWST et Ariel** :

- Le choix des cibles de la mission Ariel est volontairement gardé ouvert afin de pouvoir prendre en compte de nouveaux objets d’intérêt ou de nouveaux axes d’observation. À ce titre, les observations du JWST se positionnent déjà comme pionnières dans de nombreux domaines, à la fois dans l’étude des géantes gazeuses que dans celle des rocheuses tempérées. De fait, l’évolution scientifique du domaine insufflée par le JWST pourrait être prise en compte dans le futur choix des cibles de la mission Ariel (Edwards, Mugnai et al., 2019);
- Les observations du JWST MIRI peuvent servir comme référence de calibration pour Ariel AIRS. Nous pourrions envisager des observations du même objet pour confirmer une indépendance complète des résultats quels que soient les télescopes et instruments employés;
- Les méthodes de réduction et d’analyse de données, les méthodes de *retrievals* atmosphériques ainsi que les modèles évoluent avec les observations du JWST. Nous mettons en évidence aujourd’hui les limites et les axes

de développement et d'amélioration pour à la fois analyser des données spectroscopiques en infrarouge mais également pour modéliser les atmosphères en déséquilibre chimique. Cette expertise que nous acquérons au fur et à mesure peut être mise au service de la préparation de la mission Ariel dans l'objectif d'améliorer les performances et la justesse des outils et techniques employés (Changeat, Edwards, Waldmann et al., 2019; Gordon et al., 2020; Yip, Waldmann et al., 2022; Charnay et Drossart, 2023).

ANNEXE A

Des simulations pour préparer l'arrivée des données

Cette annexe présente le guide utilisateur mis en place dans le cadre du Data Challenge 2021 pré-lancement du JWST, pour lequel j'ai fourni des simulations de la cible NGTS-10b en spectroscopie de transit avec le MIRI LRS.

MIRI LRS Data Simulation

1. Context

As part of the Webb telescope Cycle 1 Early Release Science (ERS) program, a data challenge is organised to prepare the future observations starting hopefully during 2022 second semester. The goal is to test a various number of detrending methods that would be used on Webb data. In order to prepare this data challenge, several team works have been gathered to create simulated data from all four instruments NIRSpec, NIRISS, NIRCам and MIRI.

The CEA team provides simulated MIRI LRS Slitless data from 5 to 12 μm of NGTS-10b exoplanet transiting its star. Those simulations are time series of spectra for the whole phase-curve, including tranists and occultations.

2. Astropysical and noise models

- The astropysical model consists of a time series of spectra provided by Cubillos et al., that takes into account the star emission spectrum as well as the atmospheric absorption, all over the phase-curve.
- The instrument model and the noise model comes from Klaassen et al, 2020. This includes detector noises and non-linearities but no jitter. The temporal drifts model comes from Martin-Lagarde et al., 2020, that are applied to the whole time series and are flux-dependant.
- As the MIRI LRS instrument provides ramps that is to say a non-destructive readout fro each integration, the ramp to slope conversion in done with STScI jwst pipeline, stage 1.
- The data calibration is done with STScI jwst pipeline stage 2.

3. Observation parameters

Exposure and integration configuration information comes from the APT file (January 21, 2022).

- **Companion star:** The NGTS-10B companion star has been added in the simulations according to the aperture range recommanded in the APT file.
- **Subarray:** SLITLESSPRISM

- **Readout pattern:** FAST
- **Total exposures:** 1
- **Total integrations:** 1857
- **Groups(=frames) per integration:** 300
- **Total exposure time:** 88601 seconds

4. Segmented data

The original simulations give an integration per file as an output. That makes a total of 1857 files. In fact, real data would be a little bit different. Each file would contain not one but several integrations. For simulations, it is not possible to put all the integrations together in a file because of the maximum weight allowed (2 GB) to run the pipeline. As a consequence, each provided file contains indeed several integrations but is around 2 GB. Those files are called **segmented** therefore the output files contain the `_seg` suffix.

As an output, there are:

- ✓ 43 segmented *.fits* files
- ✓ 44 integrations per *.fits* file
- ✓ Each segmented file has a number XXX from 000 to 042 corresponding to the time series in te chronological order.

5. Provided files

For each segmented file, we provide 3 different stages of processing. First stage is the raw data in DN (digital number), second stage provides the ramp-to-slope conversion in DN/s, third stage provides te calibrated data in MJy/sr. All three stages have been run for two different configurations : with temporal drift (response drift such as persistence effect), added to the simulations and no temporal drifts added to the simulations. This last category is named **nodrift**.

5.1. WITH temporal drifts

- Raw data
 - `seg_XXX.fits` Directly coming out of the simulator 4D data (ncols x nrows x ngroups x nints). No pipeline processing applied.

```
ERS_NGTS10_2022_seg_XXX.fits
```

- Stage 1 output
 - `ramp.fits` are the corrected and CR-flagged 4D ramp data, which have the same data dimensions as the input raw 4D data (ncols x nrows x ngroups x nints).
 - `rate.fits` are 2D countrate product, based on averaging over all of the integrations within the exposure. The time series information within the integration is therefore lost.
 - `rateints.fits` are 3D countrate products that contain the individual results of each integration. The 2D countrate images for each integration are stacked along the 3rd axis of the data cubes (ncols x nrows x nints). This is what is **used for time series observations**.

```
ERS_NGTS10_2022_seg_XXX_ramp.fits  
ERS_NGTS10_2022_seg_XXX_rate.fits  
ERS_NGTS10_2022_seg_XXX_rateints.fits
```

- Stage 2 output
 - `calints.fits` are fully calibrated, but unrectified, data. Background is removed.
 - `xldints.fits` are 1D extracted spectral data.

```
ERS_NGTS10_2022_seg_XXX_calints.fits  
ERS_NGTS10_2022_seg_XXX_xldints.fits
```

5.2. *WITHOUT temporal drifts*

- Raw data no drift
 - `no_drift_seg_XXX.fits` Directly coming out of the simulator 4D data (ncols x nrows x ngroups x nints). No pipeline processing applied.

```
ERS_NGTS10_2022_nodrift_seg_XXX.fits
```

- Stage 1 output no drift
 - `ramp.fits` are the corrected and CR-flagged 4D ramp data, which have the same data dimensions as the input raw 4D data (ncols x nrows x ngroups x nints).
 - `rate.fits` are 2D countrate product, based on averaging over all of the integrations within the exposure. The time series information within the integration is therefore lost.
 - `rateints.fits` are 3D countrate products that contain the individual results of each integration. The 2D countrate images for each integration are stacked along the 3rd axis of the data cubes (ncols x nrows x nints). This is what is **used for time series observations**.

```
ERS_NGTS10_2022_nodrift_seg_XXX_ramp.fits  
ERS_NGTS10_2022_nodrift_seg_XXX_rate.fits  
ERS_NGTS10_2022_nodrift_seg_XXX_rateints.fits
```

- Stage 2 output no drift
 - `calints.fits` are fully calibrated, but unrectified, data. Background is removed.
 - `x1dints.fits` are 1D extracted spectral data.

```
ERS_NGTS10_2022_nodrift_seg_XXX_calints.fits  
ERS_NGTS10_2022_nodrift_seg_XXX_x1dints.fits
```

Please contact Achrène Dyrek (achrene.dyrek@cea.fr¹) or René Gastaud (rene.gastaud@cea.fr²) for any questions.

¹ <mailto:achrene.dyrek@cea.fr>

² <mailto:rene.gastaud@cea.fr>

ANNEXE B

Publications

Articles première auteure

Les deux papiers première auteure sont joints intégralement à la thèse à la suite des Chap. 3 et 4 dont les premières pages sont ajoutées ici.

Articles contribution principale

Les deux articles sont ajoutés intégralement dans cette section.

Articles de consortium

Seule la première page est affichée ici.

Transiting exoplanets with JWST MIRI: from simulations to observations

A. Dyrek¹, E. Ducrot^{1*}, P-O. Lagage¹, P. Tremblin², S. Kendrew³, J. Bouwman⁴, and R. Bouffet¹

¹ Université Paris Cité, Université Paris-Saclay, CEA, CNRS, AIM, F-91191, Gif-sur-Yvette, France

² Université Paris-Saclay, UVSQ, CNRS, CEA, Maison de la Simulation, 91191, Gif-sur-Yvette, France

³ European Space Agency, Space Telescope Science Institute, 3700 San Martin Dr., Baltimore, MD 21218, USA

⁴ Max Planck Institute for Astronomy (MPIA), Königstuhl 17, D-69117 Heidelberg, Germany

June 8, 2023

ABSTRACT

Context. The James Webb Space Telescope (JWST) has now started its exploration of exoplanetary worlds. In particular, the Mid-InfraRed Instrument (MIRI) with its Low-Resolution Spectrometer (LRS) carries out transit, eclipse and phase-curve spectroscopy of exoplanetary atmospheres with an unprecedented precision in an almost uncharted wavelength range.

Aims. The precision and significance in the detection of molecules in exoplanetary atmospheres relies on a robust understanding of the instrument itself and on accurate data reduction methods. This paper aims to provide a strong understanding of instrumental systematics that affect transiting exoplanetary observations through the use of simulations.

Methods. We carry out realistic simulations of transiting exoplanet observations with the MIRI LRS instrument that include the exoplanetary system model, the telescope optical path, the MIRI detector performances as well as instrumental systematics and drifts that could alter the atmospheric features we are meant to detect in the data. Once our pipeline is introduced, we show its performance on the transit of L168-9b, a Super-Earth sized exoplanet observed during the commissioning of the MIRI instrument.

Results. This paper provides a better understanding of the data itself and of the best practices in terms of reduction and analysis, through comparisons between simulations and real data. We show that simulations validate the current data analyses methods. They also bring out instrumental effects that impact the accuracy of our current spectral extraction techniques. These simulations are proven to be essential in the preparation of JWST observation programs and help us to assess the detectability of various atmospheric and surface scenarios.

Key words. Space vehicles: instruments – Methods: data analysis – Techniques: spectroscopic – Planets and satellites: atmospheres – Infrared: planetary systems – Planets and satellites: terrestrial planets

1. Introduction

The long-awaited James Webb Space Telescope (JWST) was launched on the 25th of December 2021. Equipped with its four instruments NIRISS, NIRCам, NIRSpec and MIRI it has now started to provide its first observations in the infrared. Each instrument has different modes for photometry or spectroscopy and covers various region of the spectra, from 0.6 to 28 μm . In particular, the instrument that covers the longer wavelengths is the Mid-Infrared Instrument (MIRI).

The demands for observations with MIRI are plural and a significant part is dedicated to exoplanet observations either through direct or indirect observations. As a matter of fact, if we consider all the programs proposed for Early Release Science (ERS), Guaranteed Time Observation (GTO) and General Observations (GO), 67 distinct transiting exoplanets are being observed with the JWST. 15 of these 67 planets have or will be observed with the MIRI instrument including 9 with the Low Resolution Spectrometer (LRS) (Kendrew et al. 2015). These proposals with MIRI LRS are mainly focused on small planets, as it is the most suited instrument to observe the thermal emission of temperate rocky or sub-Neptune planets. The scientific impact of these observations is very high as no atmosphere has ever been probed around rocky temperate exoplanets. In that

context, the knowledge of the instrumental effects of MIRI LRS and its expected performance is key.

Although the quality of the first LRS data for transiting exoplanets is exquisite (Bouwman et al. 2022a), some instrumental effects remain poorly understood. In that regard, being able to create realistic simulated data that account for the specificity of the MIRI LRS data brings remarkable prospects in understanding these effects, in strengthening our data reduction methods, and in providing accurate spectra to characterise the physical and chemical composition of the atmospheres. More than that, simulations are able to depict the accuracy of complex retrieval methods. Indeed, the physical parameters that we expect to retrieve from the analysis of our simulations must be consistent with the ones that were injected. Besides, these simulations are very valuable for the community to confidently prepare upcoming observations, prove their feasibility, and therefore maximise their scientific outcomes.

This paper is structured as follows. In Sect. 2 we describe the simulation tool that we created and the detector modelling approach used in this work. In Sect. 3 we use our tool on the science case of the transiting Super-Earth L168-9b, an exoplanet observed as part of the MIRI LRS commissioning. Then, we compare our simulations with real data and show that we retrieve the same parameter values that we injected. In Sect. 4, we discuss how simulations can be used to identify unexpected behaviours

* Paris Region Fellow, Marie Skłodowska-Curie Action

SO₂, silicate clouds, but no CH₄ detected in a warm Neptune

Achrène Dyrek^{1,*†}, Michiel Min^{2,†}, Leen Decin^{3,†}, Jeroen Bouwman⁴, Nicolas Crouzet⁵, Paul Mollière⁴, Pierre-Olivier Lagage⁶, Thomas Konings³, Pascal Tremblin⁷, Manuel Güdel^{8,4,9}, John Pye¹⁰, Rens Waters^{11,12,2}, Thomas Henning⁴, Bart Vandenbussche³, Francisco Ardevol Martinez^{13,2,14,15}, Ioannis Argyriou³, Elsa Ducrot⁶, Linus Heinke^{3,14,15}, Gwenael Van Looveren⁸, Olivier Absil¹⁶, David Barrado¹⁷, Pierre Baudoz¹⁸, Anthony Boccaletti¹⁸, Christophe Cossou¹⁹, Alain Coulais^{6,20}, Billy Edwards², René Gastaud¹⁹, Alistair Glasse²¹, Adrian Glauser⁹, Thomas P. Greene²², Sarah Kendrew²³, Oliver Krause⁴, Fred Lahuis², Michael Mueller¹³, Goran Olofsson²⁴, Polychronis Patapis⁹, Daniel Rouan¹⁷, Pierre Royer³, Silvia Scheithauer⁴, Ingo Waldmann²⁵, Niall Whiteford²⁶, Luis Colina¹⁷, Ewine F. van Dishoeck⁵, Göran Östlin²⁷, Tom P. Ray²⁸, Gillian Wright²⁹

[†]Equal contribution is indicated by shared first-authorship.

¹Université Paris Cité, Université Paris-Saclay, CEA, CNRS, AIM, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

²SRON Netherlands Institute for Space Research, Niels Bohrweg 4, 2333 CA Leiden, the Netherlands

³Institute of Astronomy, KU Leuven, Celestijnenlaan 200D, 3001 Leuven, Belgium

⁴Max-Planck-Institut für Astronomie (MPIA), Königstuhl 17, 69117 Heidelberg, Germany

⁵Leiden Observatory, Leiden University, P.O. Box 9513, 2300 RA Leiden, the Netherlands

⁶Université Paris-Saclay, Université Paris Cité, CEA, CNRS, AIM, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

⁷Université Paris-Saclay, UVSQ, CNRS, CEA, Maison de la Simulation, 91191, Gif-sur-Yvette, France.

⁸Department of Astrophysics, University of Vienna, Türkenschanzstrasse 17, 1180 Vienna, Austria

⁹ETH Zürich, Institute for Particle Physics and Astrophysics, Wolfgang-Pauli-Strasse 27, 8093 Zürich, Switzerland

¹⁰School of Physics & Astronomy, Space Research Centre, Space Park Leicester, University of Leicester, 92 Corporation Road, Leicester, LE4 5SP, UK

¹¹Department of Astrophysics/IMAPP, Radboud University, PO Box 9010, 6500 GL Nijmegen, the Netherlands

¹²HFML - FELIX. Radboud University PO box 9010, 6500 GL Nijmegen, the Netherlands

¹³Kapteyn Institute of Astronomy, University of Groningen, Landleven 12, 9747 AD Groningen, the Netherlands

¹⁴Centre for Exoplanet Science, University of Edinburgh, Edinburgh, EH9 3FD, UK

¹⁵School of GeoSciences, University of Edinburgh, Edinburgh, EH9 3FF, UK

¹⁶STAR Institute, Université de Liège, Allée du Six Août 19c, 4000 Liège, Belgium

Is binning always sinning? The impact of time-averaging for exoplanet phase curves

Giuseppe Morello^{1,2,3*}, Achène Dyrek⁴ and Quentin Changeat^{5,6,7}

¹*Instituto de Astrofísica de Canarias (IAC), E-38205 La Laguna, Tenerife, Spain*

²*Departamento de Astrofísica, Universidad de La Laguna (ULL), E-38206 La Laguna, Tenerife, Spain*

³*INAF - Palermo Astronomical Observatory, Piazza del Parlamento, 1, I-90134 Palermo, Italy*

⁴*AIM, CEA, CNRS, Université Paris-Saclay, Université Paris Diderot, Sorbonne Paris Cité, F-91191 Gif-sur-Yvette, France*

⁵*Department of Physics and Astronomy, University College London, Gower St, London WC1E 6BT, UK*

⁶*European Space Agency (ESA), ESA Baltimore Office, 3700 San Martin Drive, Baltimore, MD 21218, USA*

⁷*Space Telescope Science Institute (STScI), 3700 San Martin Drive, Baltimore, MD 21218, USA*

Accepted 2022 September 21. Received 2022 August 30; in original form 2022 July 1

ABSTRACT

We explore how finite integration time or temporal binning can affect the analysis of exoplanet phase curves. We provide analytical formulae to account for this effect or, if neglected, to estimate the potential biases in the retrieved parameters. As expected, due to their smoother variations over longer time-scales, phase curves can be binned more heavily than transits without causing severe biases. In the simplest case of a sinusoidal phase curve with period P , the integration time Δt reduces its amplitude by the scaling factor $\text{sinc}(\pi \Delta t/P)$, without altering its phase or shape. We also provide formulae to predict reasonable parameter error bars from phase-curve observations. Our findings are tested with both synthetic and real data sets, including unmodelled astrophysical signals and/or instrumental systematic effects. Tests with the *Spitzer* data show that binning can affect the best-fitting parameters beyond predictions, due to the correction of high-frequency correlated noise. Finally, we summarize key guidelines for speeding up the analysis of exoplanet phase curves without introducing significant biases in the retrieved parameters.

Key words: techniques: photometric – planets and satellites: atmospheres – planets and satellites: individual: WASP-43 b – planetary systems.

1 INTRODUCTION

The phase curve of an exoplanet describes the total flux received from the star–planet system as a function of the orbital phase. It includes the planetary thermal emission and reflected starlight from the planet, as well as Doppler beaming, ellipsoidal effects, and reflection from the stellar surface (e.g. Faigler & Mazeh 2011; Shporer 2017). Phase-curve observations of nearly edge-on systems may exhibit up to two periodic occultations, namely the transit and eclipse of the exoplanet in front of and behind its host star. This geometric configuration is particularly favourable for the characterization of the systems. In fact, the planetary eclipses enable us to separate the stellar and planetary flux contributions. The primary transits are also crucial to determine the size of the emitting/reflecting surface of the planets. We refer to the relevant literature for the detailed geometric description (Kipping 2010a; Winn 2010), and light-curve models (Louden & Kreidberg 2018; Martin-Lagarde et al. 2020).

The optical phase curves of exoplanets are automatically obtained from long-term staring surveys, such as *Kepler* (Borucki et al. 2010) and the *Transiting Exoplanet Survey Satellite* (*TESS*, Ricker et al. 2014). Collections of exoplanet phase curves from both *Kepler* and *TESS* missions have been analysed by several authors (e.g. Esteves, De Mooij & Jayawardhana 2013, 2015; Wong et al. 2020, 2021).

Dozens of mid-infrared phase curves have been observed with the *Spitzer*/InfraRed Array Camera (IRAC, Fazio et al. 2004), mostly on two photometric bands centred at 3.6 and 4.5 μm (e.g. Bell et al. 2021; May et al. 2022). Spectroscopic phase curves have also been obtained with the *Hubble Space Telescope* (*HST*)/Wide Field Camera 3 (WFC3) at 1.1–1.7 μm (e.g. Stevenson et al. 2014; Kreidberg et al. 2018; Arcangeli et al. 2019; Changeat et al. 2021; Changeat 2022; Mikal-Evans et al. 2022). These observations provide longitudinally resolved information about the exoplanet atmospheres, well beyond the one-dimensional views of the terminator and dayside regions accessible with transit and eclipse spectroscopy (Cowan & Agol 2008; Placek, Angerhausen & Knuth 2017; Parmentier & Crossfield 2018). For these reasons, exoplanet phase-curve observations are expected to play a significant role in the scientific programs of recent and future space missions (Bean et al. 2018; Charnay et al. 2022).

In this paper, we investigate the impact of finite integration time and/or temporal binning on the analysis of exoplanet phase curves. Our work extends an analogous study carried out for the case of transit light curves (Kipping 2010b). We validate the intuition that binning is less damaging for phase curves, given their smoother variations over longer time-scales, and provide quantitative formulae to predict its effect. In general, the spectrophotometric time series of exoplanetary systems can be taken with various exposure times and/or binned on the fly, leading to integration times from 0.01 s with a *Spitzer*/IRAC mode up to at least half hour with the *Kepler* and *TESS* long-cadence modes. The main benefits of longer integration times

* E-mail: giuseppe.morello@iac.es

are reduced data storage space and downlink times from satellites (for space missions), but they can also increase the observation efficiency by avoiding many reset gaps. Many data analysers further bins the original time series to speed up the light-curve fits or phase-curve retrievals (Mendonça et al. 2018a; Bell et al. 2019; Morello et al. 2019; Changeat et al. 2021). In phase-curve spectroscopy, a few handful of spectra are typically used to sample the full orbital period, the corresponding integration times are above 1 h (Stevenson et al. 2014; Mendonça et al. 2018a; Changeat et al. 2021; Cubillos et al. 2021; Mikal-Evans et al. 2022). On the other hand, too long exposure times can smooth out time-varying signals, causing loss of information and the need to take into account morphological distortions in the model-fits.

The paper is organized as follows. Section 2 discusses the effects of temporal binning on phase-curve models. Section 2.1 introduces mathematical formulae to incorporate the integration interval in time series models. Section 2.2 provides numerical estimates for the potential biases due to neglecting the finite integration time in phase-curve models. Section 2.3 briefly discusses the different impact of temporal binning to model the transit and eclipse light curves. Section 3 introduces mathematical formulae to estimate the minimum phase-curve parameter error bars and the impact of time-correlated noise, based on tests with synthetic data sets. Section 4 tests the impact of temporal binning on real phase-curve data. Section 5 discusses the assumptions made in this study, and Section 5.4 compares our formulae for error bars with another one reported in the literature (only for the phase-curve amplitude). Section 6 summarizes the conclusions of this study.

2 THE EFFECTS OF TEMPORAL BINNING

2.1 Mathematical derivation

We assume that the phase curve of an exoplanet is a periodic function of time with period P equal to the orbital period. Consequently, it can be approximated by a Fourier expansion, which can be expressed as the sum of time-lagged harmonics,

$$f(t) = \frac{c_0}{2} + \sum_{n=1}^N c_n \cos\left(\frac{2\pi n}{P}t - \gamma_n\right), \quad (1)$$

or using the equivalent sine-cosine form,

$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^N \left[a_n \cos\left(\frac{2\pi n}{P}t\right) + b_n \sin\left(\frac{2\pi n}{P}t\right) \right]. \quad (2)$$

Physically motivated models only predicts low-order harmonics with $N \leq 3$ (Cowan, Fuentes & Haggard 2013; Armstrong & Rein 2015; Cowan et al. 2017; Niraula et al. 2022).

The measured flux is never instantaneous, but is averaged over the detector integration time or over a longer temporal bin set by the user. We consider an interval of duration Δt centred on t , so that the measured flux will be

$$F(t) = \frac{1}{\Delta t} \int_{t-\frac{\Delta t}{2}}^{t+\frac{\Delta t}{2}} f(t') dt'. \quad (3)$$

By calculating the integral with the expression given in equation (1), we obtain

$$F(t) = \frac{c_0}{2} + \sum_{n=1}^N \frac{1}{\Delta t} \frac{c_n P}{2\pi n} \left[\sin\left(\frac{2\pi n}{P}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) - \gamma_n\right) - \sin\left(\frac{2\pi n}{P}\left(t - \frac{\Delta t}{2}\right) - \gamma_n\right) \right]. \quad (4)$$

Using the Prosthaphaeresis formula, $\sin a - \sin b = 2 \cos\left(\frac{a+b}{2}\right) \sin\left(\frac{a-b}{2}\right)$, and rearranging, we obtain

$$F(t) = \frac{c_0}{2} + \sum_{n=1}^N c_n \cos\left(\frac{2\pi n}{P}t - \gamma_n\right) \frac{\sin\left(\frac{2\pi n}{P}\frac{\Delta t}{2}\right)}{\frac{2\pi n}{P}\frac{\Delta t}{2}}. \quad (5)$$

Comparing equations (1) and (5), we note that the effect of temporal integration and/or binning is that each harmonic is multiplied by a constant sinc factor, or, equivalently, the coefficients of the Fourier expansion are transformed as follows:

$$c_n \rightarrow C_n = c_n \operatorname{sinc}\left(\frac{2\pi n}{P}\frac{\Delta t}{2}\right). \quad (6)$$

The same sinc factor applies to get the transformed coefficients of the sine-cosine form.

The nice result from the derivation above is that the binned model time series can be computed analytically, having the same mathematical form as the instantaneous model. Therefore, the correction for the finite time interval can be implemented with very little computational cost in phase-curve calculators, if the underlying models are expressed by sum of harmonic terms, such as `ExoNoodle` (Martin-Lagarde, Cossou & Gastaud 2021). Perhaps even better, the correction can be applied a posteriori on the coefficients obtained from the fitting procedure, if required to obtain the correct values of the physical parameters.

2.2 Numerical estimates

As per convention, we adopt the definition of the orbital phase, $\phi = (t - T_0)/P$, where T_0 is the epoch of transit, and $\Delta\phi = \Delta t/P$. With this notation, the second-order McLaurin expansion of the sinc factor from equations (5) and (6) is

$$\operatorname{sinc}(\pi n \Delta\phi) \simeq 1 - \frac{\pi^2}{6} n^2 (\Delta\phi)^2, \quad (7)$$

which is a good approximation if $\Delta\phi \ll 1$, i.e. the temporal bin is much shorter than the orbital period ($\Delta t \ll P$).

If the phase curve consists only of the first harmonic, the temporal binning reduces its amplitude, without altering its phase or shape. We note that even a long bin, such as $\Delta\phi = 1/10$, causes a modest reduction in amplitude, that is, ~ 1.6 per cent. This $\Delta\phi = 1/10$ corresponds to a time interval of more than 1 h, even for ultra-short period planets ($P < 1$ d). If the phase curve is dominated by the second harmonic, the percentage reduction of its amplitude is four times greater with the same $\Delta\phi$. The higher order harmonics are more dampened by temporal binning, the percentage reduction of the amplitude being proportional to n^2 , where n is the order of the harmonic.

In general, phase curves made up of various harmonics are not simply scaled down by temporal binning, but can also change shape. For example, we may expect that the maxima are shifted in phase towards those of the first harmonic, since its weight increases with respect to the other harmonics. Given that exoplanet phase curves are well represented by low-order harmonics, we anticipate that equation (7) provides the correct order of magnitude for the possible changes in morphological parameters. We report some specific examples in Appendix A.

2.3 Phase curves with occultations

The most common and useful studies on exoplanet phase curves are those of near edge-on systems which include transit and eclipse

events. These occultations enable us to break several physical degeneracies, e.g. between the planetary size, thermal flux, and albedo, as well as the planet-to-star flux ratios (Placek et al. 2017; Parmentier & Crossfield 2018).

Kipping (2010b) investigated the effects of binning on the analysis of transit light curves. They found that an integration time of half hour can cause severe biases (if unaccounted for) and/or relatively large uncertainties in the retrieved physical parameters. The analyses of *Kepler*, *TESS*, and other synthetic data led to similar findings, also for shorter integration times (Howarth & Morello 2017; Morello 2018; Goldberg et al. 2019; Huber et al. 2022; Yang, Chary & Liu 2022).

It is not surprising that temporal binning affects occultations more than phase-curve modulations, given their different characteristic time-scales and segmented versus smooth variations. In fact, the typical planetary transits and eclipses last a few hours and exhibit steep gradients during the ingress and egress phases, with about per cent variation in flux within tens of minutes. The variations at the contact points are abrupt, so that parametric light-curve models may have discontinuous derivatives (see Appendix C). Instead, the typical phase-curve variations are smooth and well below 1 per cent over the full orbital period of several hours or days.

Given the different criticality of temporal binning during and outside the occultations, we recommend sampling the phase curves with adapted cadences for various portions, in order to save computing time without introducing biases in the retrieved physical parameters.

3 PHASE-CURVE PARAMETER ERROR BARS

In this section, we will introduce simple formulae to estimate the error bars on the phase-curve parameters as a function of the photon noise level, orbital period, and duration of the observation. We will also discuss the effect of time-correlated noise, which can have a stellar or instrumental origin, along with that of time binning on the fitted parameter error bars.

Let us consider one of the simplest phase-curve parametrization, i.e. the shifted cosinusoid

$$f(\phi) = c_0 + c_1 \cos[2\pi(\phi - \phi_1)]. \quad (8)$$

For simplicity, we neglect the impact of occultations. This approximation is analogous to that of ignoring the transit ingress, egress, and stellar limb-darkening effects to predict the error bars in transit depth (e.g. appendix A of Morello et al. 2019). In this paper, we do not mathematically derive the formulae for the phase-curve parameter error bars, instead we infer them from multiple fits on synthetic data.

3.1 Simulations with white noise only

We generated synthetic model light curves with 1 min cadence, based on equation (8) with $c_0 = 0$, $\phi_1 = 0$, and the following:

- (i) three amplitudes, $c_1 = 10^{-4}$, 10^{-3} , and 10^{-2} ;
- (ii) three orbital periods, $P = 0.5, 0.75$, and 1 d;
- (iii) three values of normalized flux error per frame, $\sigma_{1\text{min}} = 2 \times 10^{-5}$, 10^{-4} , and 5×10^{-4} , the smallest error being similar to the expected noise floor for the *James Webb Space Telescope* (Schlawin et al. 2020, 2021);
- (iv) two observing windows, $\phi \in [-0.6, 0.6]$ and $\phi \in [-0.2, 0.6]$, corresponding to that of typical full (from eclipse to eclipse) and half (from transit to eclipse) phase-curve observations.

Taking all possible combinations from above, they resulted in 54 configurations. We produced 10 realizations for each configuration

by adding or subtracting Gaussian random time series, scaled by the appropriate $\sigma_{1\text{min}}$, to the noiseless templates. We also created five binned versions of each realization, using binning factors of 1 (unbinned), 10, 30, 60, and 120. In total, we generated 2700 synthetic time series to carry out this experiment.

Then we ran `EMCEE`¹ (Foreman-Mackey et al. 2019) with 20 walkers and 15 000 iterations to retrieve the input parameters from all the synthetic time series. The first 5000 iterations were discarded as burn-in. We adopted wide uniform priors for c_0 , c_1 , and ϕ_1 , while keeping the other parameters fixed. We fitted each time series twice, once including and once neglecting the binning correction factor, as given by equation (6). The best-fitting parameters are the medians of the respective `EMCEE` samples (after burn-in) with lower/upper error bars given by the absolute differences between the 16th/84th percentiles and the median.

We computed the best-fitting parameters and error bars for a configuration by averaging those obtained from the individual fits sharing the same baseline model and fitting set-up, i.e. differing only for the specific random noise realization. Note that the same random noise was applied twice, with a ‘+’ or ‘-’ sign, forming pairs of non-independent light-curve realizations. This method provides a shortcut to check for intrinsic bias net of stochastic fluctuations, while also estimating the error bars, instead of using many more independent realizations (see appendix A of Martin-Lagarde et al. 2020). In fact, the averages between the best-fitting parameters calculated for each pair of light curves are identical and coincide with the input values, except in one case. If the binned light curves are fitted by neglecting the appropriate correction factor, the average of the best-fitting values for c_1 coincides with the value predicted by equation (6). In all cases, the estimated parameter values are identical to those that would be obtained from analogous fits to the noiseless light curves, but the inclusion of noise is crucial to also obtain their error bars. The error bars obtained from the individual fits corresponding to the different noise realizations are very similar, therefore well represented by their averages. The dispersion of individual best-fitting values from analogous configurations is consistent with the estimated error bars.

Having passed all the sanity checks described above, we compared the parameter error bars obtained from the different configurations. Fig. 1 shows their main dependencies for the unbinned cases. All parameter error bars are proportional to the inverse of the classical signal-to-noise ratio, $S/N = \sigma_{1\text{min}}/\sqrt{N}$, where N is the number of points in the light curve. The proportionality factors are ~ 1 for σ_{c_0} and ~ 1.35 for σ_{c_1} . The uncertainty on the phase offset, σ_{ϕ_1} , is also inversely proportional to the amplitude c_1 . This inverse proportionality is consistent with the fact that the phase of the peak of the sinusoid becomes indeterminate for $c_1 = 0$, as the sinusoid becomes a flat line. We summarize here the formulae to estimate the minimum error bars:

$$\sigma_{c_0} = k_{c_0} \frac{\sigma_{1\text{min}}}{\sqrt{N}}, \quad k_{c_0} \sim 1 \quad (9)$$

$$\sigma_{c_1} = k_{c_1} \frac{\sigma_{1\text{min}}}{\sqrt{N}}, \quad k_{c_1} \sim 1.35 \quad (10)$$

$$\sigma_{\phi_1} = k_{\phi_1} \frac{\sigma_{1\text{min}}}{c_1 \sqrt{N}}, \quad k_{\phi_1} \sim 0.25. \quad (11)$$

In most cases, binning appears to be harmless, not affecting the parameter error bars. In the most extreme cases, using binning factor $\times 120$ ($\Delta t = 2$ h) for the shorter period ($P = 0.5$ d, leading to $\Delta\phi = 1/6$), the error bars on c_1 and on ϕ_1 appear to be ~ 4 per cent and $6\text{--}7$ per cent larger than the corresponding ones without binning.

¹<https://github.com/dfm/emcee>

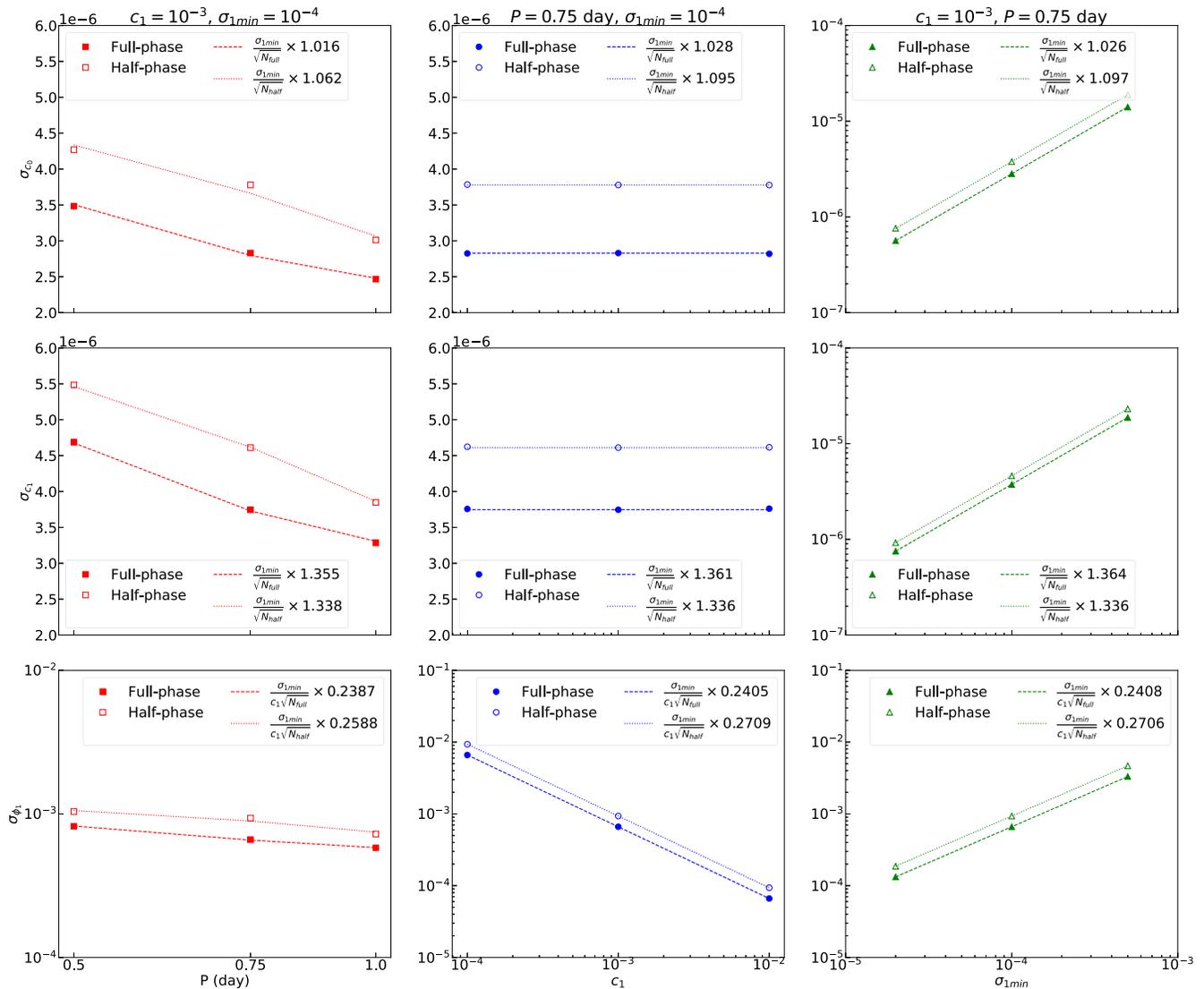


Figure 1. Left-hand panels: Phase-curve parameter error bars versus orbital period, based on the model of equation (8) with amplitude $c_1 = 10^{-3}$, and Gaussian noise of $\sigma_{1\min} = 10^{-4}$. Central panels: Parameter error bars versus c_1 for the case with $P = 0.75$ d and $\sigma_{1\min} = 10^{-4}$. Right-hand panels: Parameter error bars versus $\sigma_{1\min}$ for the case with $P = 0.75$ d and $c_1 = 10^{-3}$. The full and empty markers refer to the error bars obtained from the full- and half-phase curves, respectively. The dashed lines denote semianalytical estimates using the formulae specified in the legends.

In conclusion, if the phase curve is represented by a single harmonic, it can be binned down to less than 10 time bins without significant loss of information.

3.2 Simulations with white and time-correlated noise

We created further simulations with additional noise sources other than Gaussian, based on the same model light curves described in Section 3.1. We used *celerite*² (Foreman-Mackey et al. 2017) to model stochastic time series based on a Gaussian process (GP) with a Matern-3/2 kernel,

$$M_{3/2}(\Delta t) \simeq \sigma_{\text{GP}}^2 \left(1 + \frac{\sqrt{3}|\Delta t|}{\rho_{\text{GP}}} \right) \exp \left(-\frac{\sqrt{3}|\Delta t|}{\rho_{\text{GP}}} \right), \quad (12)$$

²<https://github.com/dfm/celerite>

where Δt denotes the time interval between two data points, σ_{GP} and ρ_{GP} are characteristic amplitude and time-scale of the stochastic process. Our analysis focused on GPs with short time-scales relative to the orbital period, as they are more likely to be affected by time binning. In particular, we adopted $\sigma_{\text{GP}} = 10^{-4}$, and $\rho_{\text{GP}} = 3$ and 42 min, which could mimic stellar granulation and/or instrumental systematic effects (Evans et al. 2015; Chiavassa et al. 2017; Barros et al. 2020). We computed 10 GP time series for each ρ_{GP} value, then added a single white noise realization, properly scaled by $\sigma_{1\min}$, to each of them. These operations resulted in 10 mixed (GP + white) noise time series for each combination of $\sigma_{\text{GP}} = 10^{-4}$, ρ_{GP} , and $\sigma_{1\min}$. We produced 20 light-curve realizations for each parameters configuration by adding or subtracting the mixed noise time series to the noiseless templates. The binned version were also created, as before. In total, we generated 10800 synthetic time series to carry out this second experiment.

We followed the same procedure described in Section 3.1 to retrieve the input parameters from the synthetic time series using EMCEE , but including σ_{GP} and ρ_{GP} as free parameters in the fits. The best-fitting parameter error bars follow the same inverse proportionality trends with the number of data points and phase-curve amplitude, but ~ 3 – 10 times larger proportionality factors compared to the case with white noise only. The larger proportionality factors are partly attributable to the greater dimensionality of the fit with GPs. In general, the error bars are not directly proportional to the white noise amplitude, σ_{1min} , but they also depend on both the amplitude and time-scale of correlated noise. Appendix B presents the detailed results for the tests with white and time-correlated noise.

Some papers with photometric light-curve analyses suggest that temporal binning may be advantageous to reduce the impact of signals with significantly shorter time-scales than those relevant to the astrophysical phenomenon of interest (e.g. Deming et al. 2015; Kammer et al. 2015). Our simulations with GPs do not support this claim, the error bars being essentially unaffected by temporal binning. In some cases, the error bars estimated from different binned version of the same light curve can vary by up to ~ 20 per cent in either direction, depending on the specific noise realizations. Fitting the light curves assuming white noise only leads to significantly underestimated error bars, even if adopting a temporal bin much longer than the GP time-scale (e.g. $\Delta t = 120$ min and $\rho_{\text{GP}} = 3$ min).

4 APPLICATIONS

4.1 *Spitzer*/IRAC observations of WASP-43 b

WASP-43 b is a hot Jupiter with an ultra-short period $P = 0.813$ d. Three phase curves of WASP-43 b were observed with the *Spitzer*/IRAC at $3.6 \mu\text{m}$ (two visits, program ID 11001) and $4.5 \mu\text{m}$ (one visit, program ID 10169). Each visit includes 44 928 detector images taken with the sub-array mode using 2 s frame time, covering one transit and two eclipse events. These observations have been analysed by many authors using various data detrending techniques, leading to some discrepant results (Stevenson et al. 2017; Mendonça et al. 2018a; Morello et al. 2019; May & Stevenson 2020; Bell et al. 2021). The latest two studies reported that the measured phase-curve amplitudes and offsets may (or may not) vary with temporal binning, especially when using the BLISS algorithm with (or without) an additional Point Spread Function (PSF) width term. The different measurements have led to a debate regarding the heat circulation efficiency of the WASP-43 b atmosphere, and its undergoing physical processes, structure, and chemical composition (Mendonça et al. 2018b; Helling et al. 2020; Venot et al. 2020; Changeat et al. 2021).

Here, we evaluate the impact of time binning on the *Spitzer*/IRAC phase curves of WASP-43 b when using the wavelet pixel-ICA data detrending technique (Morello, Waldmann & Tinetti 2016; Morello et al. 2019). This methodology aims to separate the astrophysical signal from instrumental systematic effects by a linear transformation of pixel time series into maximally independent components. For *Spitzer*/IRAC data sets, it is recommended to adopt pixels from a 5×5 array centred on the target star (see also Morello 2015). The raw photometric light curve is fitted with a linear combination of the parametrized astrophysical model and the independent components, excluding (at least) one component that predominantly contains the astrophysical signal.

Morello et al. (2019) binned the pixel time series by a factor of eight prior to the ICA transform. The corresponding time interval

of 16 s was negligible compared to the time-scales of astrophysical interest. Binning was useful to reduce the computational time needed for fitting the light curves. We also find that our ICA algorithm was unable to satisfactorily separate the astrophysical component from the unbinned time series. In this work, we tested to what extent a much larger binning factor like 384 (i.e. 8×48), corresponding to 12.8 min interval, affects the results. The number of binned data points is reduced to 117, which is too low a statistic for robust separation of 25 components via ICA. Instead, we adopted the independent components previously extracted using binning factor of eight (i.e. 16 s), and binned these components for the light-curve fitting (i.e. 12.8 min). Apart from the two cases with uniform binning factors, we also fitted the light curves using the smaller bin size around the occultations and the larger one elsewhere, as suggested in Section 2.3. We applied two fitting procedures for each light-curve and bin configuration. First, we performed a simultaneous fit of the astrophysical model and other independent components, as described by Morello et al. (2019). Second, we subtracted the best-fitting ICA models obtained by Morello et al. (2019) from the raw light curves, then fitted the astrophysical model to these detrended light curves. In all cases, the adopted phase-curve parametrization is the sum of two shifted cosinusoids and a constant,

$$f(\phi) = c_0 + c_1 \cos [2\pi(\phi - \phi_1)] + c_2 \cos [4\pi(\phi - \phi_2)]. \quad (13)$$

Figs 2–4 compare the results obtained for the three phase curves of WASP-43 b with the bin configurations and fitting procedures described above. In particular, they show three phase-curve parameters, i.e. the maximum flux, peak offset, and peak-to-peak amplitude (computed numerically using equation 13), and three transit parameters, i.e. the squared planet-to-star radii ratio ($p^2 = (R_p/R_*)^2$), impact parameter (b), and transit duration of the planet centre (T_0).

We note a slight dependence of the phase-curve parameters on the binning, when performing the simultaneous fit with the independent components. For the second $3.6 \mu\text{m}$ visit, the peak-to-peak amplitude inferred with 12.8 min bins is $>1\sigma$ greater than that obtained with 16 s bins. For the $4.5 \mu\text{m}$ visit, the peak-to-peak amplitude inferred with the larger bin size is smaller by $>1\sigma$. Such discrepancies cannot be explained by the pure binning effect, which predicts a negligible underestimation of the amplitude of ~ 0.02 per cent, i.e. $<0.01\sigma$, when using the larger bin size without any correction. The most likely explanation is that the more heavily binned components fail to correct some high-frequency systematic effects in the *Spitzer* data, also leading to larger error bars by a factor of a few. In fact, when fitting the astrophysical model to pre-detrended light curves, the phase-curve parameters do not show any appreciable variation with different bin configurations.

The transit parameters are significantly biased when using the 12.8 min bins without appropriate oversampling, as predicted by Kipping (2010b). The bin size adopted to sample the phase curve outside the occultations does not affect the transit parameters.

We conclude that using different bin sizes to model the phase curves during the occultations and outside of them is a suitable strategy to decrease the computational time for light-curve fitting. However, some caution is required to ensure that no time-correlated noise is present with high-frequency relative to the adopted bin size, otherwise it should be preliminarily corrected. Based on the current analysis, we do not update the phase-curve and transit parameters of WASP-43 b reported by Morello et al. (2019).

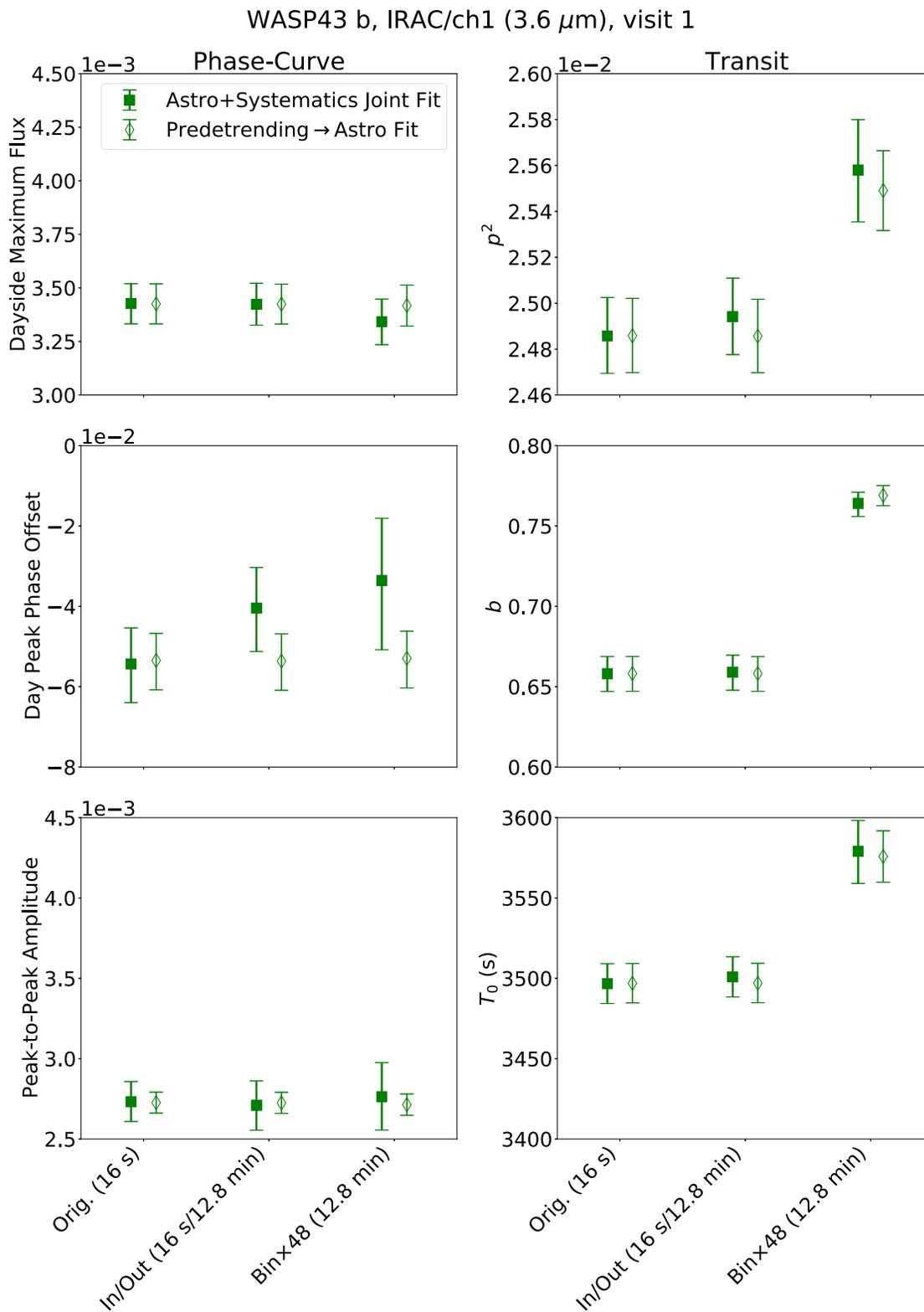


Figure 2. Best-fitting phase curve and transit parameters from the *Spitzer*/IRAC 3.6 μm first visit, using three bin configurations and two procedures, as detailed in Section 4. Using different bin size to sample the occultations and the rest of phase curve is efficient to avoid biases in the retrieved parameters.

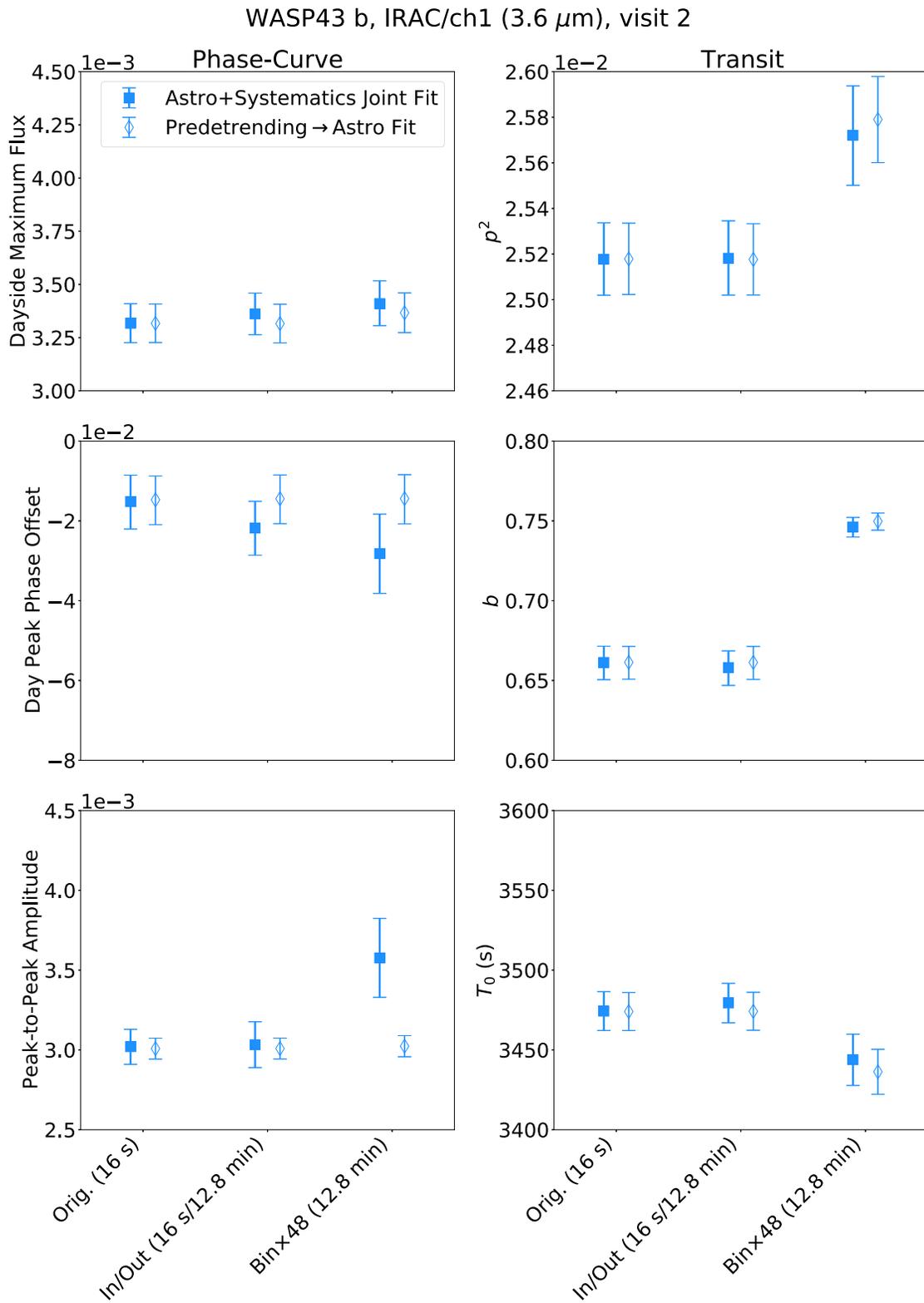


Figure 3. Same as Fig. 2 from the *Spitzer*/IRAC 3.6 μm second visit.

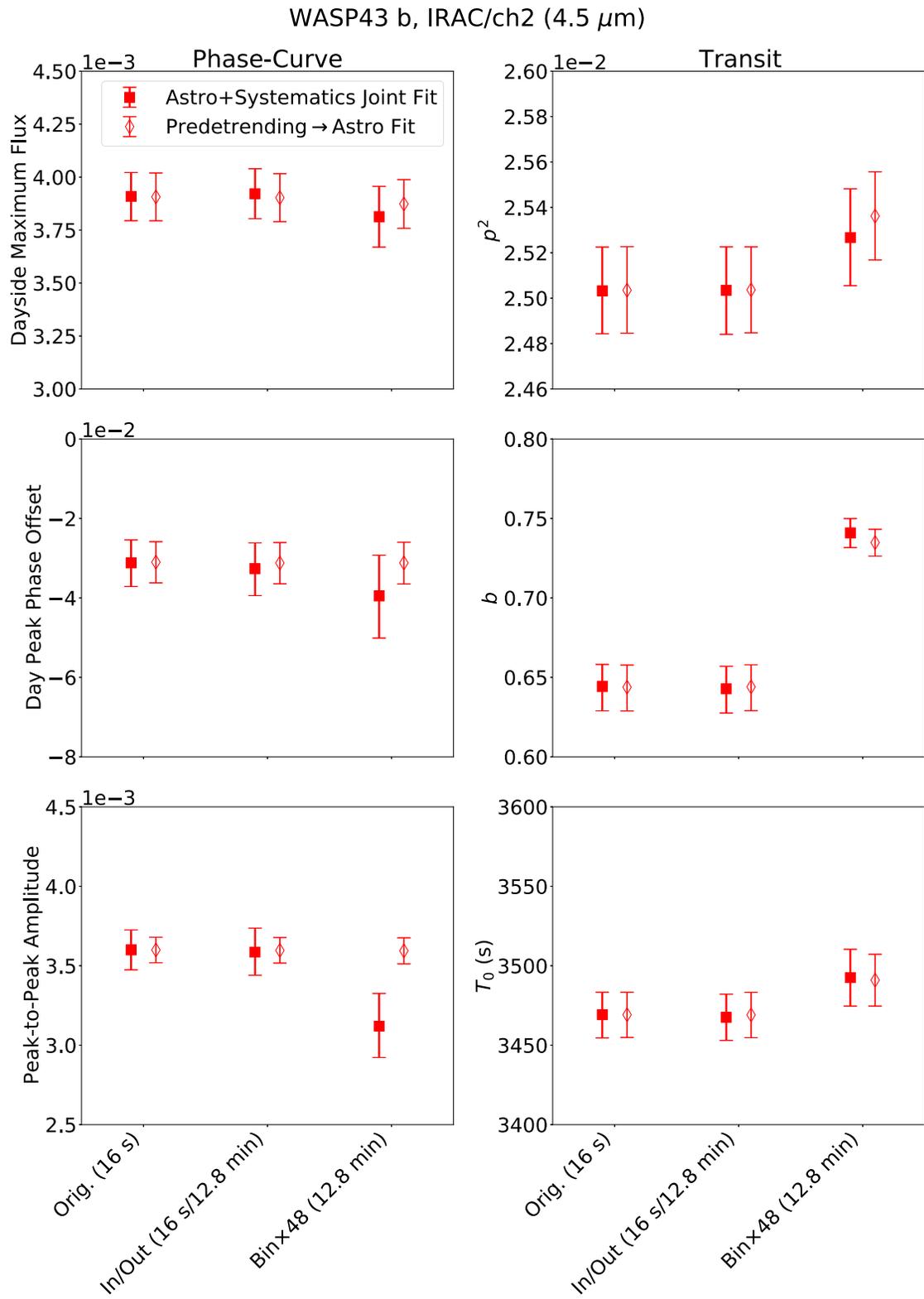


Figure 4. Same as Fig. 2 from the *Spitzer*/IRAC 4.5 μm visit.

5 DISCUSSION

5.1 Reliability of the Fourier expansions

The derivations made in this work rely on the assumptions that (1) exoplanet phase curves are strictly periodic functions, and (2) low-order harmonics are good enough to approximate the most relevant phenomena. The first assumption is motivated by the expectation that short-period planets are tidally locked, and it is valid under the hypothesis that their atmospheres have evolved towards an equilibrium state (Showman & Guillot 2002). Several simulations of the atmospheric dynamics of hot Jupiters support a scenario with a static eastward hotspot (Cooper & Showman 2005; Showman et al. 2008). Overall, the simulated temperature maps are well approximated by low-order spherical harmonics, which translate into low-order Fourier expansion in time (Cowan et al. 2013; Morris et al. 2022).

Other authors suggested that such simulations are not able to capture the small-scale dynamics and its impact at larger scales, through non-linear interactions (Skinner & Cho 2021). They predicted the presence of storms with various sizes that cause variability over time-scales longer than the orbital period, leading to quasi-periodic life cycles (Cho et al. 2003; Cho, Skinner & Thrastarson 2021; Skinner & Cho 2022). In some cases, the phase curves observed at multiple epochs appear to have significantly different amplitudes and hotspot offsets, although these results may also depend on the data reduction method (Armstrong et al. 2016; Stevenson et al. 2017; Bell et al. 2019; Morello et al. 2019).

Even if the Fourier expansion may be inaccurate to model planetary phase curves, the longer term variability should be less affected by temporal binning. Therefore, equation (7) would still provide conservative estimates of the order of magnitude of binning effects. Of course, the analytical corrections derived for the harmonics cannot be applied to non-periodic signals.

5.2 Stellar variability

Stellar spectrophotometry also exhibits variability at multiple time-scales. Stars often present rotational modulations with typical periods of several days or longer (Simpson et al. 2010; Irwin et al. 2011; Newton et al. 2016; Jeffers et al. 2018). They may also present years-long activity cycles (Baliunas & Vaughan 1985; Mathur et al. 2014; Reinhold, Cameron & Gizon 2017). The same considerations concerning the binning effects in presence of longer time-scale signals, as discussed in Section 5.1, are valid regardless of their stellar or planetary origins. Stellar granulation and pulsations may have much shorter time-scales. Their photometric signatures are often, but not always, negligible compared to the planetary phase-curve and/or photon noise limit (Kjeldsen & Bedding 1995; Barros et al. 2020; von Essen et al. 2020). In case of strictly periodic pulsations, the binning effect could be corrected analytically with analogous formulae to those derived in Section 2.1. Sporadic rapid events, such as flares, may introduce subtle biases when using long integration times (Günther et al. 2020; Jackman, Shkolnik & Loyd 2021a; Jackman et al. 2021b).

5.3 Instrumental systematic effects

Instrumental systematic effects may also introduce signals with various characteristic time-scales. In some contexts, certain data detrending techniques appear to be more/less efficient with binned time series (Deming et al. 2015; Kammer et al. 2015; Morello et al. 2016; May & Stevenson 2020; Bell et al. 2021). In Section 4, we explored

the impact of different binning factors in the analysis of specific data sets, obtaining slight discrepant parameters ($> 1\sigma$) in some cases. A detailed discussion of the instrumental systematic effects in the analysis of exoplanet phase curves is beyond the scope of this paper.

5.4 Comparison between formulae to estimate error bars

Charnay et al. (2022) provided a formula to estimate the S/N for phase-curve observations, which we report here:

$$(S/N)_{\text{orbit}} = 0.5 (S/N)_{1\text{h}} \sqrt{P/2}, \quad (14)$$

where $(S/N)_{1\text{h}}$ is the ratio between the peak-to-peak amplitude and the photometric error over 1 h of integration, i.e.

$$(S/N)_{1\text{h}} = \frac{2c_1}{\sigma_{1\text{h}}}. \quad (15)$$

Assuming that $(S/N)_{\text{orbit}} = c_1/\sigma_{c_1, \text{orbit}}$ and replacing $(S/N)_{1\text{h}}$ into equation (14), we obtain

$$\sigma_{c_1, \text{orbit}} = \sqrt{2} \frac{\sigma_{1\text{h}}}{\sqrt{P}}. \quad (16)$$

We note that equation (16) is analogous to equation (10), but expressed in terms of 1-h instead of 1-min integrated frames, while P equals the number of integrated frames per orbit. The empirically determined factor $k_{c_1} \sim 1.35$ is similar to $\sqrt{2}$.

6 CONCLUSIONS

We examined the impact of finite integration time and/or temporal binning in the analysis of exoplanet phase curves. We derived analytical formulae to include these effects in the light-curve models, provided that they can be expressed by the sum of harmonic terms. Additionally, we provide formulae to estimate the minimum phase-curve parameter error bars, depending on the photon noise level, orbital period, and duration of the observation.

Owing to smoother variations over longer time-scales, phase curves are less sensitive to temporal binning than transits and eclipses. We found that bin sizes of up to ~ 1 h should not significantly affect the retrieved parameters. However, tests with the *Spitzer* data show that, in some cases, the phase-curve parameters vary more than expected with binning due to the correction of high-frequency signals. Hence, some caution is needed to check whether instrumental systematic effects and/or other signals with time-scales shorter than a few hours are present in the data. A significantly smaller bin size and/or appropriate oversampling should be adopted to accurately model the planetary transits and eclipses.

ACKNOWLEDGEMENTS

GM has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement No. 895525.

DATA AVAILABILITY

This research has used the NASA/IPAC Infrared Science Archive, which is operated by the Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, under contract with the National Aeronautics and Space Administration. The numerical simulations upon which this study is based are too large to archive or to transfer. Instead, we provide all the information needed to replicate the simulations. The original scripts and outputs are available upon request to the authors.

REFERENCES

- Agol E., Luger R., Foreman-Mackey D., 2020, *AJ*, 159, 123
- Arcangeli J. et al., 2019, *A&A*, 625, A136
- Armstrong C., Rein H., 2015, *MNRAS*, 453, L98
- Armstrong D. J., de Mooij E., Barstow J., Osborn H. P., Blake J., Sanjeev N. F., 2016, *Nat. Astron.*, 1, 0004
- Baliunas S. L., Vaughan A. H., 1985, *ARA&A*, 23, 379
- Barros S. C. C., Demangeon O., Díaz R. F., Cabrera J., Santos N. C., Faria J. P., Pereira F., 2020, *A&A*, 634, A75
- Batalha N. E. et al., 2017, *PASP*, 129, 064501
- Bean J. L. et al., 2018, *PASP*, 130, 114402
- Bell T. J. et al., 2019, *MNRAS*, 489, 1995
- Bell T. J. et al., 2021, *MNRAS*, 504, 3316
- Borucki W. J. et al., 2010, *Science*, 327, 977
- Carter J. A., Yee J. C., Eastman J., Gaudi B. S., Winn J. N., 2008, *ApJ*, 689, 499
- Changeat Q., 2022, *AJ*, 163, 106
- Changeat Q., Al-Refai A. F., Edwards B., Waldmann I. P., Tinetti G., 2021, *ApJ*, 913, 73
- Charnay B. et al., 2022, *Exp. Astron.*, 53, 417
- Chiavassa A. et al., 2017, *A&A*, 597, A94
- Cho J. Y. K., Menou K., Hansen B. M. S., Seager S., 2003, *ApJ*, 587, L117
- Cho J. Y. K., Skinner J. W., Thrastarson H. T., 2021, *ApJ*, 913, L32
- Claret A., 2000, *A&A*, 363, 1081
- Cooper C. S., Showman A. P., 2005, *ApJ*, 629, L45
- Cowan N. B., Agol E., 2008, *ApJ*, 678, L129
- Cowan N. B., Fuentes P. A., Haggard H. M., 2013, *MNRAS*, 434, 2465
- Cowan N. B., Chayes V., Bouffard É., Meynig M., Haggard H. M., 2017, *MNRAS*, 467, 747
- Cubillos P. E. et al., 2021, *ApJ*, 915, 25
- Deming D. et al., 2015, *ApJ*, 805, 132
- Esteves L. J., De Mooij E. J. W., Jayawardhana R., 2013, *ApJ*, 772, 51
- Esteves L. J., De Mooij E. J. W., Jayawardhana R., 2015, *ApJ*, 804, 150
- Evans T. M., Aigrain S., Gibson N., Barstow J. K., Amundsen D. S., Tremblin P., Mourier P., 2015, *MNRAS*, 451, 680
- Faigler S., Mazeh T., 2011, *MNRAS*, 415, 3921
- Fazio G. G. et al., 2004, *ApJS*, 154, 10
- Foreman-Mackey D., Agol E., Ambikasaran S., Angus R., 2017, *AJ*, 154, 220
- Foreman-Mackey D. et al., 2019, *J. Open Source Softw.*, 4, 1864
- Gaudi B. S. et al., 2017, *Nature*, 546, 514
- Goldberg M., Hadden S., Payne M. J., Holman M. J., 2019, *AJ*, 157, 142
- Günther M. N. et al., 2020, *AJ*, 159, 60
- Helling C., Kawashima Y., Graham V., Samra D., Chubb K. L., Min M., Waters L. B. F. M., Parmentier V., 2020, *A&A*, 641, A178
- Hipke M., Heller R., 2019, *A&A*, 623, A39
- Howarth I. D., 2011, *MNRAS*, 418, 1165
- Howarth I. D., Morello G., 2017, *MNRAS*, 470, 932
- Huber D. et al., 2022, *AJ*, 163, 79
- Irwin J., Berta Z. K., Burke C. J., Charbonneau D., Nutzman P., West A. A., Falco E. E., 2011, *ApJ*, 727, 56
- Jackman J. A. G., Shkolnik E., Loyd R. O. P., 2021a, *MNRAS*, 502, 2033
- Jackman J. A. G. et al., 2021b, *MNRAS*, 504, 3246
- Jeffers S. V. et al., 2018, *A&A*, 614, A76
- Kammer J. A. et al., 2015, *ApJ*, 810, 118
- Kipping D. M., 2010a, *MNRAS*, 407, 301
- Kipping D. M., 2010b, *MNRAS*, 408, 1758
- Kipping D. M., Sandford E., 2016, *MNRAS*, 463, 1323
- Kjeldsen H., Bedding T. R., 1995, *A&A*, 293, 87
- Kreidberg L. et al., 2018, *AJ*, 156, 17
- Li J., Tenenbaum P., Twicken J. D., Burke C. J., Jenkins J. M., Quintana E. V., Rowe J. F., Seader S. E., 2019, *PASP*, 131, 024506
- Louden T., Kreidberg L., 2018, *MNRAS*, 477, 2613
- Mandel K., Agol E., 2002, *ApJ*, 580, L171
- Martin-Lagarde M., Morello G., Lagage P.-O., Gastaud R., Cossou C., 2020, *AJ*, 160, 197
- Martin-Lagarde M., Cossou C., Gastaud R., 2021, *J. Open Source Softw.*, 6, 2287
- Mathur S. et al., 2014, *A&A*, 562, A124
- May E. M., Stevenson K. B., 2020, *AJ*, 160, 140
- May E. M. et al., 2022, *AJ*, 163, 256
- Mendonça J. M., Malik M., Demory B.-O., Heng K., 2018a, *AJ*, 155, 150
- Mendonça J. M., Tsai S.-m., Malik M., Grimm S. L., Heng K., 2018b, *ApJ*, 869, 107
- Mikal-Evans T. et al., 2022, *Nat. Astron.*, 6, 471
- Morello G., 2015, *ApJ*, 808, 56
- Morello G., 2018, *AJ*, 156, 175
- Morello G., Waldmann I. P., Tinetti G., 2016, *ApJ*, 820, 86
- Morello G., Tsiaras A., Howarth I. D., Homeier D., 2017, *AJ*, 154, 111
- Morello G., Danielski C., Dickens D., Tremblin P., Lagage P. O., 2019, *AJ*, 157, 205
- Morello G., Zingales T., Martin-Lagarde M., Gastaud R., Lagage P.-O., 2021, *AJ*, 161, 174
- Morris B. M., Heng K., Jones K., Piaulet C., Demory B.-O., Kitzmann D., Jens Hoeijmakers H., 2022, *A&A*, 660, A123
- Newton E. R., Irwin J., Charbonneau D., Berta-Thompson Z. K., Dittmann J. A., West A. A., 2016, *ApJ*, 821, 93
- Niraula P., Shporer A., Wong I., de Wit J., 2022, *AJ*, 163, 172
- Pál A., 2008, *MNRAS*, 390, 281
- Parmentier V., Crossfield I. J. M., 2018, in Deeg H. J., Belmonte J. A., eds, *Handbook of Exoplanets*. Springer, Cham, p. 116
- Placek B., Angerhausen D., Knuth K. H., 2017, *AJ*, 154, 154
- Reinhold T., Cameron R. H., Gizon L., 2017, *A&A*, 603, A52
- Ricker G. R. et al., 2014, in Oschmann Jacobus M. J., Clampin M., Fazio G. G., MacEwen H. A., eds, *Proc. SPIE Conf. Ser. 9143, Space Telescopes and Instrumentation 2014: Optical, Infrared, and Millimeter Wave*. SPIE, Bellingham, p. 914320
- Schlawin E., Leisenring J., Misselt K., Greene T. P., McElwain M. W., Beatty T., Rieke M., 2020, *AJ*, 160, 231
- Schlawin E. et al., 2021, *AJ*, 161, 115
- Seager S., Mallén-Ornelas G., 2003, *ApJ*, 585, 1038
- Showman A. P., Guillot T., 2002, *A&A*, 385, 166
- Showman A. P., Cooper C. S., Fortney J. J., Marley M. S., 2008, *ApJ*, 682, 559
- Shporer A., 2017, *PASP*, 129, 072001
- Simpson E. K., Baliunas S. L., Henry G. W., Watson C. A., 2010, *MNRAS*, 408, 1666
- Skinner J. W., Cho J. Y. K., 2021, *MNRAS*, 504, 5172
- Skinner J. W., Cho J. Y. K., 2022, *MNRAS*, 511, 3584
- Stevenson K. B. et al., 2014, *Science*, 346, 838
- Stevenson K. B. et al., 2017, *AJ*, 153, 68
- Venot O. et al., 2020, *ApJ*, 890, 176
- von Essen C., Mallonn M., Borre C. C., Antoci V., Stassun K. G., Khalafinejad S., Tautvaišienė G., 2020, *A&A*, 639, A34
- Winn J. N., 2010, in Seager S., ed., *Exoplanets*. Univ. Arizona Press, Tucson, AZ, p. 55
- Wong I. et al., 2020, *AJ*, 160, 155
- Wong I. et al., 2021, *AJ*, 162, 127
- Yang F., Chary R.-R., Liu J.-F., 2022, *AJ*, 163, 42

APPENDIX A: EXAMPLES OF PHASE-CURVE BIAS VERSUS BINNING

Fig. A1 shows how temporal binning can affect the peak-to-peak amplitude and offset of the maximum through a range of examples with two harmonics from Wong et al. (2021). In particular, they adopted the following parametrization:

$$f_p(\phi) = \overline{f_p} - A_{\text{atm}} \cos(\phi + \delta), \quad (\text{A1})$$

$$f_*(\phi) = 1 - A_{\text{ellip}} \cos(2\phi) + A_{\text{Dopp}} \sin \phi, \quad (\text{A2})$$

where A_{atm} , δ , and $\overline{f_p}$ describe the planet atmospheric term, A_{ellip} and A_{Dopp} are the amplitudes of the star ellipsoidal distortion and Doppler

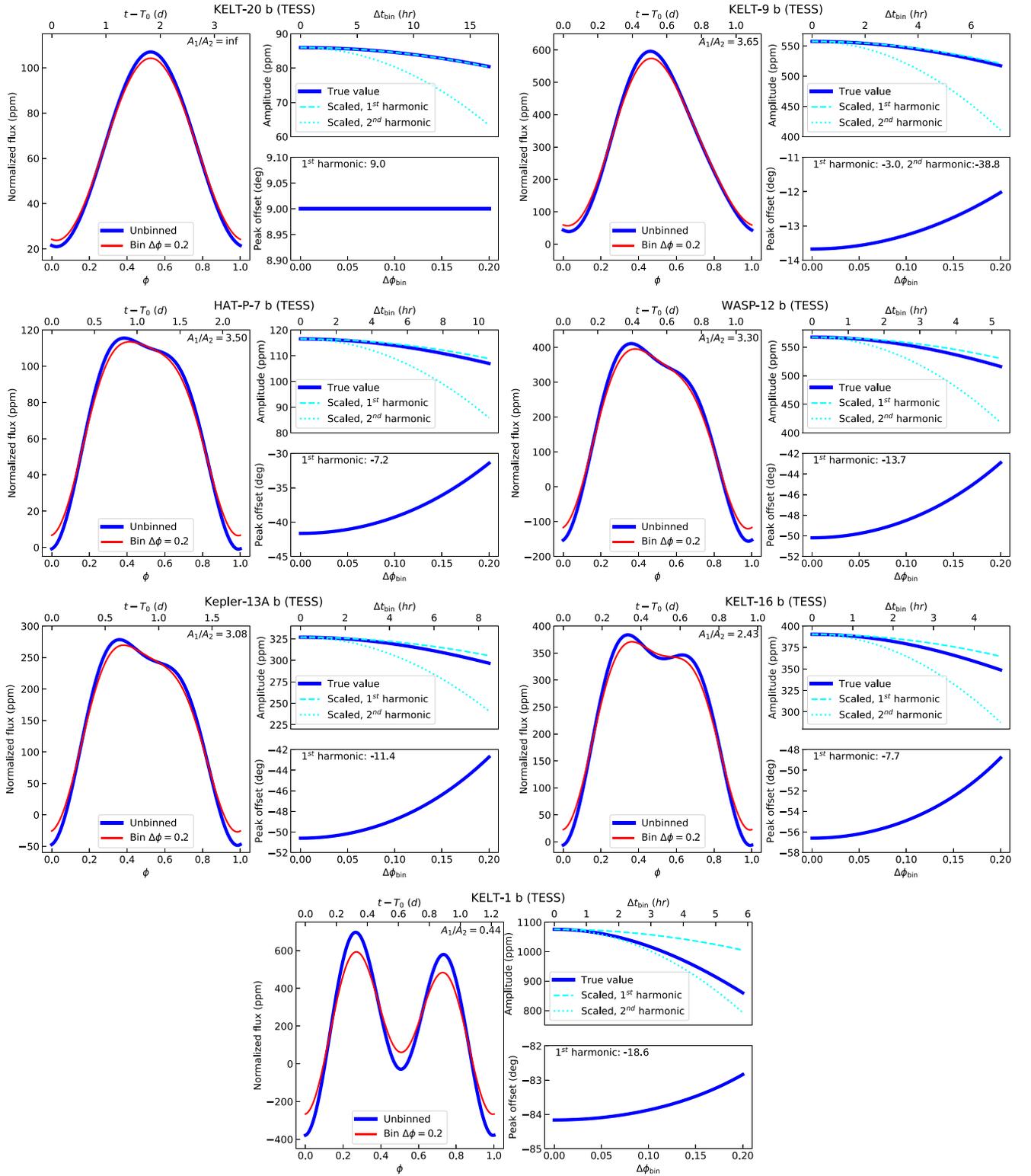


Figure A1. *TESS* phase-curve models for various planets as reported by Wong et al. (2021), and relevant parameters versus temporal bin size. Left-hand panels: unbinned light curve (blue) and binned with $\Delta\phi = 0.2$ (red). Top right-hand panels: apparent peak-to-peak amplitude of the whole phase curve (solid blue line), of the first harmonic (dashed cyan line), and of the second harmonic (dotted magenta line) versus bin size. Bottom right-hand panels: same as top right-hand panels, but for the peak offset. The peak offset of the second harmonic is always -90 , except for KELT-9 b.

boosting. The total phase-curve model is $f(\phi) = f_p(\phi) + f_*(\phi)$. Note that the first harmonic is the sum of the planet atmospheric and star Doppler boosting terms. Wong et al. (2021) also considered a special parametrization for the atmosphere of KELT-9 b, the hottest giant exoplanet (Gaudi et al. 2017):

$$f_p^{\text{KELT-9b}}(\phi) = \overline{f}_p - A_{\text{atm}} \cos(\phi + \delta) + A_{\text{irrad}} \cos(2[\phi + \delta_{\text{irrad}}]) \quad (\text{A3})$$

The bin scaling factor of the peak-to-peak amplitude is intermediate between those of the two harmonics, as from equation (6). The peak offset is also intermediate between two peaks of the harmonics, and move closer to that of the first harmonic for larger bin sizes.

APPENDIX B: PHASE-CURVE PARAMETER ERROR BARS WITH GP CONTAMINATION

We show here the phase-curve parameter error bars versus P , c_1 , and $\sigma_{1\text{min}}$ obtained from the simulations with time-correlated noise, as described in Section 3.2. Figs B1 and B2 report the results obtained with $\rho_{\text{GP}} = 3$ min and 42 min, respectively. It clearly emerges that error bars are largely affected by the structure of time-correlated noise. They are significantly larger for the cases with $\rho_{\text{GP}} = 42$ min, which is a more relevant time-scale for the phase-curve modulations (despite being less than one-tenth of the orbital period).

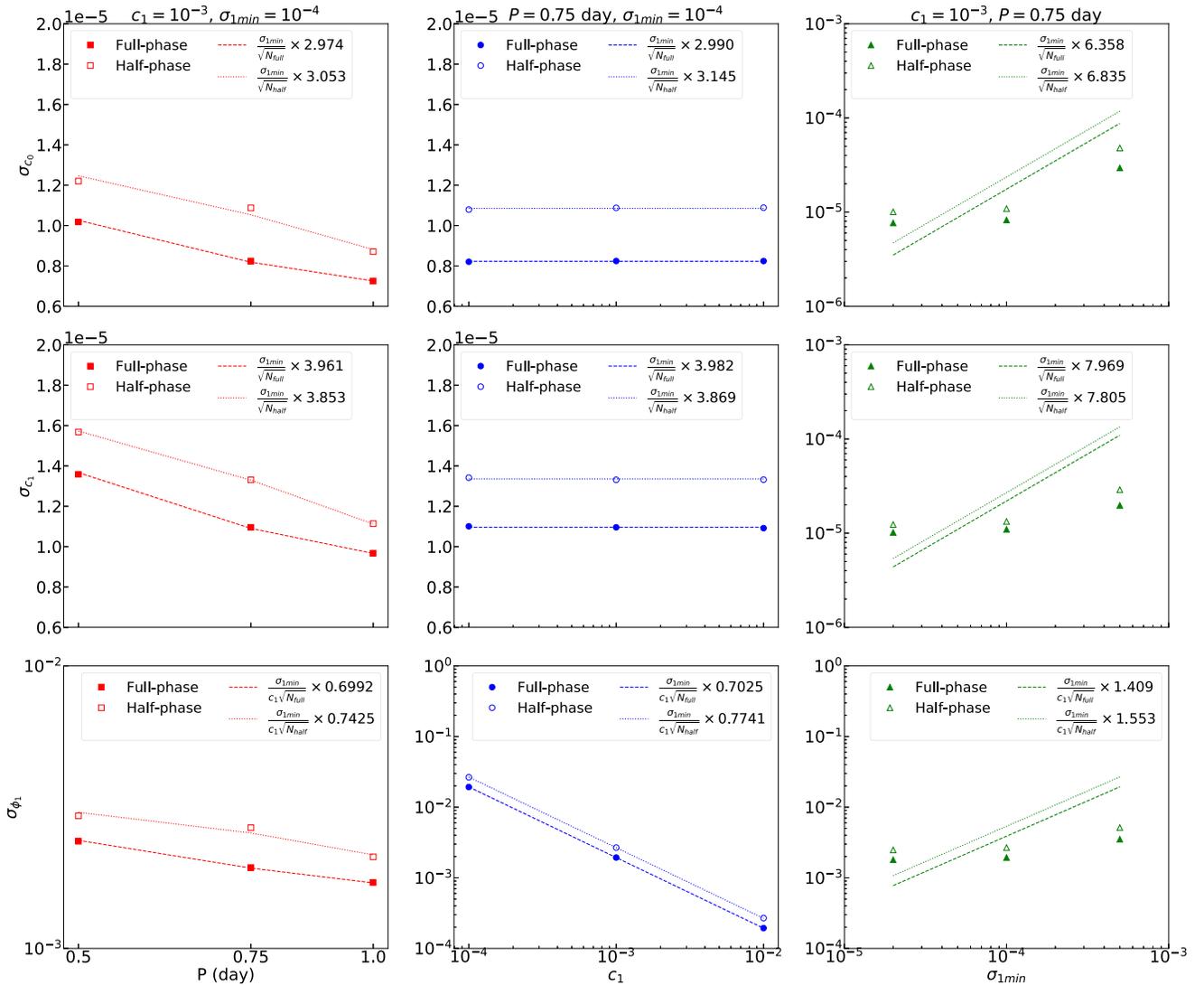


Figure B1. Same as Fig. 1, but for the simulations including GPs with $\sigma_{\text{GP}} = 10^{-4}$ and $\rho_{\text{GP}} = 3$ min.

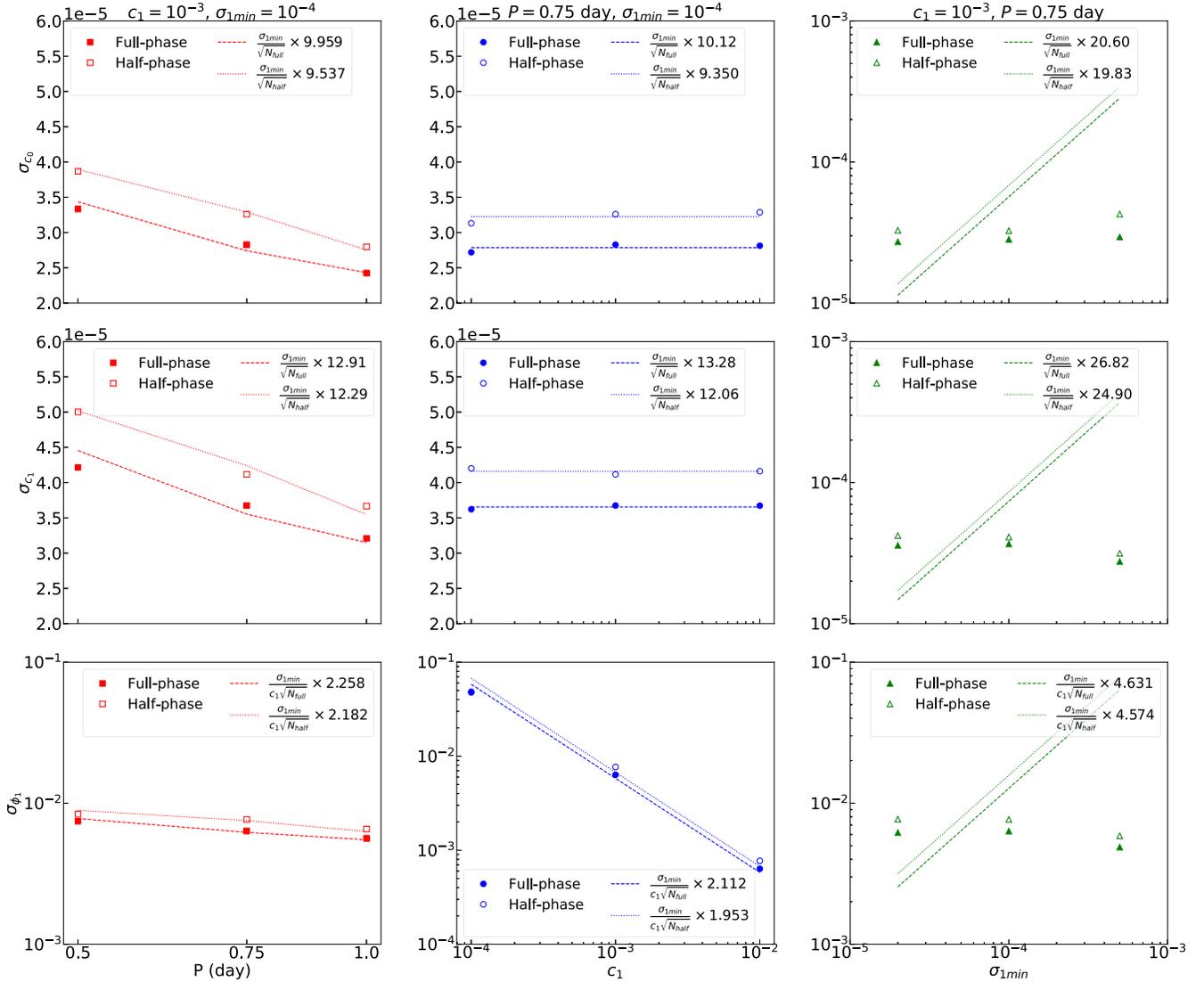


Figure B2. Same as Fig. 1, but for the simulations including GPs with $\sigma_{\text{GP}} = 10^{-4}$ and $\rho_{\text{GP}} = 42$ min.

APPENDIX C: DISCONTINUITIES IN THE DERIVATIVES OF TRANSIT LIGHT CURVES

In this appendix, we review different models used to approximate transit light curves.

C1 Box-shaped

The simplest approximation considers fixed out-of-transit and in-transit fluxes, neglecting the planetary ingress, egress, and stellar limb-darkening effects. This function presents two jump discontinuities delimiting the transit event. It is commonly used in S/N calculations (Batalha et al. 2017; Morello et al. 2021), and transit detection algorithms (Hippke & Heller 2019).

C2 Trapezoidal

The trapezoidal model approximates the planetary ingress and egress by straight lines. The vertices of the trapezoid coincide with the con-

tact points defined by Seager & Mallén-Ornelas (2003). It provides a convenient analytical formula for mathematical explorations (Carter et al. 2008; Kipping & Sandford 2016), and it is also used in transit detection algorithms (Hippke & Heller 2019; Li et al. 2019). The derivative of the trapezoidal model is a piecewise constant function with a negative/positive value during the ingress/egress, and null during the full transit and out of transit.

C3 Uniform source

If the star is represented by a uniform emitting disc, the decrease in flux during transit is proportional to the fraction of occulted stellar area. Unlike the trapezoidal model, the flux is constant (null derivative) between the second and third contact points and out of transit. Following the notation of Mandel & Agol (2002), the normalized flux is a function $F(p, z) = 1 - \Lambda(p, z)$, where p is the planet-to-star radii ratio and z is the projected star-planet distance in units of the stellar radius (z). Here, $\Lambda(p, z)$ is the fraction of stellar disc occulted

by the planet:

$$\Lambda(p, z) = \begin{cases} 0 & z > 1 + p \\ \frac{1}{\pi} \left[p^2 k_0 + k_1 - \sqrt{\frac{4z^2 - (1+z^2 - p^2)}{4}} \right] & |1 - p| < z \leq 1 + p \\ p^2 & z \leq 1 - p \\ 1 & z \leq p - 1 \end{cases} \quad (\text{C1})$$

being

$$k_0 = \arccos \left(\frac{p^2 + z^2 - 1}{2pz} \right) \quad (\text{C2})$$

and

$$k_1 = \arccos \left(\frac{1 - p^2 + z^2}{2z} \right). \quad (\text{C3})$$

The derivative of equation (C1) is

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial z}(p, z) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \frac{\sqrt{(1+z+p)(1+z-p)(1-z+p)(1-z-p)}}{z} & |1 - p| < z \leq 1 + p \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases}. \quad (\text{C4})$$

Note that

$$\lim_{z \rightarrow |1-p|^+} \frac{\partial \Lambda}{\partial z}(p, z) = \lim_{z \rightarrow (1+p)^-} \frac{\partial \Lambda}{\partial z}(p, z) = 0, \quad (\text{C5})$$

i.e. $\frac{\partial \Lambda}{\partial z}(p, z)$ is a continuous function, even at the contact points. The second derivative is

$$\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial z^2}(p, z) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \frac{z^4 - (p^2 - 1)^2}{z^2 \sqrt{(1+z+p)(1+z-p)(1-z+p)(1-z-p)}} & |1 - p| < z \leq 1 + p \\ 0 & \text{elsewhere} \end{cases}. \quad (\text{C6})$$

Note that

$$-\lim_{z \rightarrow |1-p|^+} \frac{\partial^2 \Lambda}{\partial z^2}(p, z) = \lim_{z \rightarrow (1+p)^-} \frac{\partial^2 \Lambda}{\partial z^2}(p, z) = +\infty, \quad (\text{C7})$$

i.e. $\frac{\partial^2 \Lambda}{\partial z^2}(p, z)$ is discontinuous at the contact points.

C4 Limb-darkened source

In many applications, the radial decrease in specific intensity on the stellar disc is parametrized by a limb-darkening law (Claret 2000; Howarth 2011; Morello et al. 2017). Analytical expressions of the flux derivatives for some laws have been published in previous studies (Pál 2008; Agol, Luger & Foreman-Mackey 2020). Limb-darkening can cause the transit light curves to appear rather U-shaped instead of almost trapezoidal. Nevertheless, the second- or higher order flux derivatives are discontinuous at the contact points.

This paper has been typeset from a $\text{\TeX}/\text{\LaTeX}$ file prepared by the author.

Thermal emission from the Earth-sized exoplanet TRAPPIST-1 b using JWST

<https://doi.org/10.1038/s41586-023-05951-7>

Received: 22 January 2023

Accepted: 13 March 2023

Published online: 27 March 2023

 Check for updates

Thomas P. Greene¹✉, Taylor J. Bell^{1,2}, Elsa Ducrot³, Achrène Dyrek³, Pierre-Olivier Lagage³ & Jonathan J. Fortney⁴

The TRAPPIST-1 system is remarkable for its seven planets that are similar in size, mass, density and stellar heating to the rocky planets Venus, Earth and Mars in the Solar System¹. All the TRAPPIST-1 planets have been observed with transmission spectroscopy using the Hubble or Spitzer space telescopes, but no atmospheric features have been detected or strongly constrained^{2–5}. TRAPPIST-1 b is the closest planet to the M-dwarf star of the system, and it receives four times as much radiation as Earth receives from the Sun. This relatively large amount of stellar heating suggests that its thermal emission may be measurable. Here we present photometric secondary eclipse observations of the Earth-sized exoplanet TRAPPIST-1 b using the F1500W filter of the mid-infrared instrument on the James Webb Space Telescope (JWST). We detect the secondary eclipses in five separate observations with 8.7σ confidence when all data are combined. These measurements are most consistent with re-radiation of the incident flux of the TRAPPIST-1 star from only the dayside hemisphere of the planet. The most straightforward interpretation is that there is little or no planetary atmosphere redistributing radiation from the host star and also no detectable atmospheric absorption of carbon dioxide (CO₂) or other species.

The TRAPPIST-1 system has an age of 7.6 ± 2.2 Gyr (ref. 6) and consists of a very cool ($T_{\text{eff}} = 2,566$ K), low-mass star (0.09 solar masses) and seven transiting planets that are 0.75–1.10 Earth radii in size with masses 0.3–1.4 times that of Earth^{1,7}. The small size of its star and its nearby location (12 pc from Earth) make its planets amenable to observational characterization studies.

Late M-dwarf stars such as TRAPPIST-1 (ref. 8) are observed to have frequent X-ray and ultraviolet flares^{9,10}. These low-mass stars evolve through an extended high-luminosity pre-main-sequence phase lasting 1 Gyr or more¹¹, causing extreme water loss on planets that would later become temperate^{12,13}. The TRAPPIST-1 planets are expected to be tidally locked so that their rotations are synchronized to their orbital periods¹. These phenomena affect the atmospheres and climates of the TRAPPIST-1 planets, causing them to be different from the terrestrial planets in the Solar System^{14,15}. High-energy stellar flares and coronal mass ejections from M dwarfs can dissociate molecules and drive atmospheric escape^{16,17}. This can be mitigated by planetary magnetic fields if the ejected stellar plasma heats planetary interiors and leads to volcanism and outgassing¹⁸. The tidal synchronization of planetary rotations to orbits causes some internal heating that could also lead to significant atmospheric outgassing¹⁹. Furthermore, tidal synchronization causes the TRAPPIST-1 planets to have warm permanent daysides that always face the star and colder nightsides that always radiate to free space.

A number of studies have modelled possible TRAPPIST-1 planetary atmospheres, usually with outgassed secondary compositions that may have undergone further processing through desiccation or reduction.

These atmospheres are often dominated by H₂O, O₂, N₂ or CO₂ and have higher mean molecular weights than primordial hydrogen-dominated ones^{15,19–21}. Current TRAPPIST-1 planetary transmission spectroscopy observations have been precise enough to detect only moderately high concentrations of atomic or molecular constituents in clear hydrogen-dominated atmospheres^{2–5}. These existing observations are insensitive to detecting spectroscopic absorptions in cloudy or high-mean-molecular-weight atmospheres of planets as small and cool as the ones in the TRAPPIST-1 system.

The recently commissioned JWST should be more sensitive to the spectral features and thermal signatures of TRAPPIST-1 planetary atmospheres due to its improved aperture, wavelength range, spectral resolving power and stability compared with previous observatories^{19,22,23}. The inner TRAPPIST-1 planets are warm enough to potentially detect their thermal emission with mid-infrared secondary eclipse observations²⁴. TRAPPIST-1 b, the innermost planet, has the highest expected equilibrium temperature of $T_{\text{eq}} = 391\text{--}400$ K (refs. 1,25). The T_{eq} value is computed for absorbing all the incident stellar radiation on its dayside and re-radiating it isotropically over 4π steradians. Measuring the actual dayside temperature would constrain the existence, composition and circulation of its atmosphere^{26,27}. Spitzer Space Telescope observations did not detect the secondary eclipse of TRAPPIST-1 b but did constrain its dayside temperature to below 611 K (3σ upper limit²⁸).

We now report JWST observations that detect the TRAPPIST-1 b secondary eclipse, measure the dayside temperature of the planet and constrain the properties of any atmosphere that it may have.

¹Space Science and Astrobiology Division, NASA Ames Research Center, Moffett Field, CA, USA. ²Bay Area Environmental Research Institute, NASA Ames Research Center, Moffett Field, CA, USA. ³Université Paris-Saclay, Université Paris-Cité, CEA, CNRS, Gif-sur-Yvette, France. ⁴Department of Astronomy and Astrophysics, University of California, Santa Cruz, Santa Cruz, CA, USA.

✉e-mail: tom.greene@nasa.gov

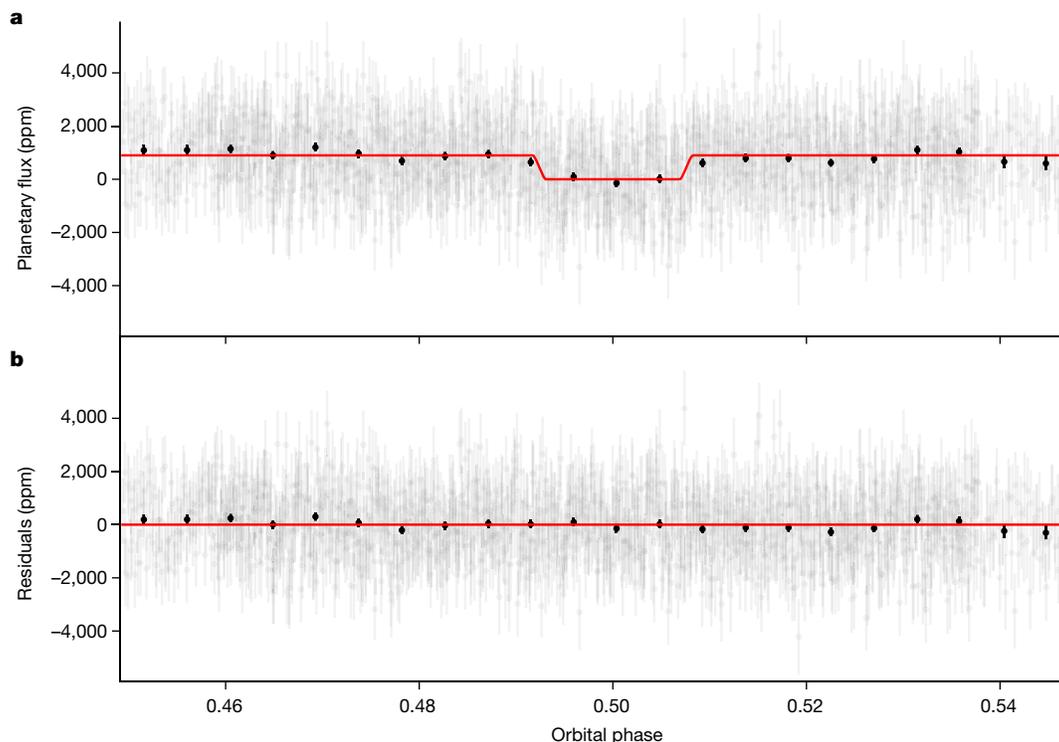


Fig. 1 | Combined TRAPPIST-1 b MIRI F1500W secondary eclipse light curve. **a**, Phase-folded light curves from all five observations after the removal of systematic noise based on joint fit no. 1 (Methods). Data binned to a cadence of 9.7 min are overplotted to more clearly visualize the detection of the eclipse,

and the red line shows the fitted astrophysical model. The model fit has an eclipse depth of $F_p/F_* = 861 \pm 99$ ppm. **b**, Residuals after fitting the observations. The error bars show the 1σ uncertainties in both panels.

Our programme consisted of the photometric observations of five secondary eclipses of TRAPPIST-1 b using the F1500W filter of the JWST mid-infrared instrument (MIRI)²⁹. This filter transmits wavelengths over a half-maximum bandpass of 13.5–16.6 μm , nearly ideal for maximizing the signal-to-noise ratio of the secondary eclipse for the expected $T \geq 400$ K dayside temperature of the planet. Each observation consisted of 377 integrations of 14 FAST1R groups in the full-frame mode, with a duration of 4.36 h. The secondary eclipses were observed on 8, 12, 20 and 24 November 2022 and 3 December 2022. The dates and times of the observations were computed from a dynamical model of the TRAPPIST-1 planetary system⁷ and chosen so that there was no contamination by transits or secondary eclipses of the other planets in the system.

We reduced the data using the Eureka! pipeline, which is optimized to minimize noise in the JWST time-series data³⁰. Secondary eclipse light curves were generated and fit from each observation, and the light curves from all the observations were also jointly fit (Methods). The secondary eclipse was detected in each observation; Fig. 1 shows the combined light curve and fit for all the observations.

Next, we convert the measured eclipse depth, $F_p/F_* = 861 \pm 99$ ppm, to the measured dayside planetary flux (F_p) and to its brightness temperature within the JWST MIRI F1500W photometric bandpass. We used the calibrated JWST data products to compute a mean stellar flux of 2.589 ± 0.078 mJy (Methods). Therefore, TRAPPIST-1 b has a dayside flux of $F_p = 2.229 \pm 0.263$ μJy . This corresponds to a blackbody brightness temperature of $T_B = 503^{+26}_{-27}$ K, computed from Planck's law. We calculated this T_B value for the effective wavelength of the F1500W filter, $\lambda = 14.79$ μm . This wavelength was computed by weighting wavelength-dependent throughput of the JWST in this filter by the flux of a PHOENIX stellar model³¹ interpolated to $T_{\text{eff}} = 2,566$ K to represent the stellar spectrum.

The apparent observed dayside temperature of a planet in a non-eccentric orbit with zero heat redistribution to its nightside is

$T_d = (2/3(1 - A))^{1/4} T_0$, where $T_0 = T_{\text{eff}}(R_*/a)^{1/2}$ for semi-major axis a , bond albedo A , stellar effective temperature T_{eff} and stellar radius R_* (ref. 32). The substellar point of the planet has temperature T_0 , and all other locations have lower temperatures and contribute less relative area to the observed planet flux in a secondary eclipse observation. For the adopted parameters of TRAPPIST-1 b (ref. 7) and $A = 0$, we compute $T_d = 508$ K, close to our measured $T_B = 503^{+26}_{-27}$ K.

Any atmospheric circulation that redistributes stellar heating or absorption by atmospheric constituents within the spectral bandpass of the F1500W filter will impact the observed secondary eclipse depth and brightness temperature of the planet. All of the model TRAPPIST-1 b planetary surfaces that are composed of anorthite, basalt, enstatite, feldspar olivine, pyroxene, quartz or saponite minerals with no gaseous atmospheres are expected to have secondary eclipse depths and brightness temperatures similar to blackbodies in the MIRI F1500W bandpass²³. These and other materials could potentially be identified with low-resolution spectroscopic observations at other wavelengths. Furthermore, atmospheres dominated by CO_2 or O_2 with some CO_2 (outgassed or desiccated) having surface pressures as low as 10 bar should have significant absorptions in the F1500W filter bandpass, reducing the observed brightness temperature to 300 K or lower when accompanied by efficient heat redistribution over the planet^{20,23}. Table 1 shows that such low-brightness temperatures are inconsistent with our observations. Furthermore, our measured secondary eclipse depth is also inconsistent with $T_{\text{eq}} = 400$ K expected for uniform stellar heat redistribution and isotropic re-radiation even with no absorbing atmospheric species within the spectral bandpass of our observations.

The heat redistribution of the TRAPPIST-1 b atmosphere has been modelled in terms of its surface pressures P_s and effective grey optical depths τ (ref. 25). Table 1 shows that our observations are consistent with a thin atmosphere with little heat distribution; the flux for the model with surface pressure $P_s = 0.1$ bar and grey optical depth $\tau = 0.1$

Table 1 | TRAPPIST-1 b observations and model comparison

Atmospheric model	Reference	P_s (bar)	Predicted T_B^a (K)	Difference (σ) ^b
96.5% CO ₂	23	10, 92	290	-6.7
95% O ₂ + 0.5 bar CO ₂	23	10, 100	303	-6.4
Isotropic T_{eq}	1	–	400	-3.6
Grey $\tau=1.0$	25	1	445	-2.1
Grey $\tau=0.1$	25	0.1	495	-0.3
0 redistribution	32	0	508	0.2
0 redistribution + internal	19	<0.1	534	1.2

^a T_B in MIRI F1500W filter, when applicable.

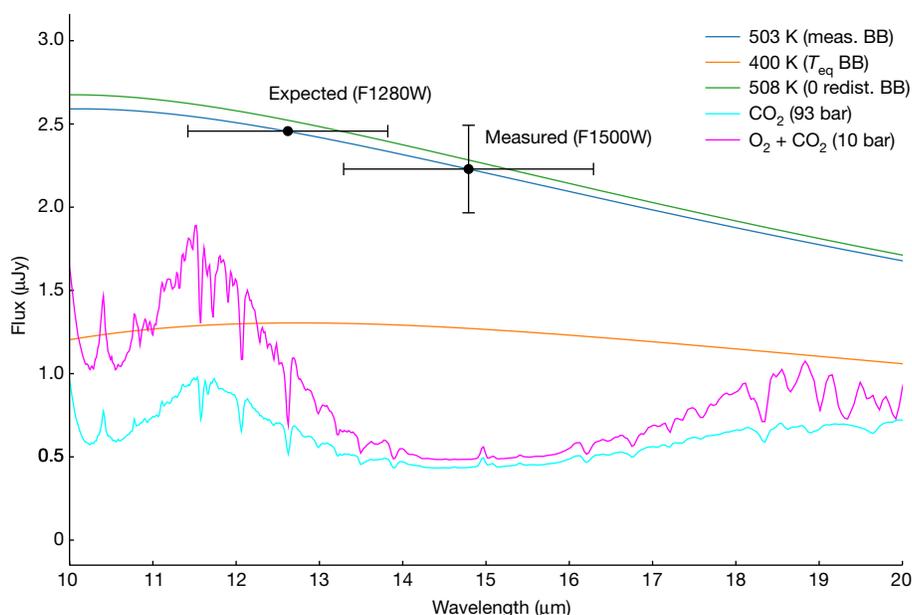
^bDifference between the predicted and observed $\lambda=15\ \mu\text{m}$ flux in units of the measured σ .

(ref. 25) is well within 1σ of our measurements. By contrast, the atmosphere model with ten times these values recirculates too much heat and has a dayside temperature that is too low to be clearly consistent with our observations.

A coupled atmosphere–interior model that includes heating from tidal effects, interior processes and instellation predicts isotropic surface temperatures for different TRAPPIST-1 b scenarios at its present age¹⁹. The median isothermal surface temperature of the 50 hottest and lowest-albedo PACMAN models with negligible final atmospheres ($P_s < 0.1$ bar) was 446 K (ref. 19) (J. Krissansen-Totton, personal communication). We converted this mean isotropic surface temperature to an apparent observed dayside temperature of $T_{day} = 534$ K using the geometric and thermal conventions for the zero redistribution of stellar heating to the nightside, as was done for defining T_d above³². This should be regarded as the maximum T_{day} possible from this particular internal heating model given that it is derived from only the hottest 10% of the model runs that resulted in negligible atmospheres. Our observations are consistent with this prediction (Table 1).

Our observations are most consistent with near-zero-bond albedo and little to no heat redistribution from the dayside to the nightside of TRAPPIST-1 b. The most likely explanation for this finding is that the planet absorbs nearly all of the incident stellar flux and does not have a high-pressure or optically thick atmosphere. Figure 2 shows the measured TRAPPIST-1 b flux in the F1500W filter along with the model spectra for blackbodies, CO₂ and O₂ + CO₂ atmospheres^{20,33}. Our data are clearly incompatible with the $T_{eq} = 400$ K, CO₂ or O₂ + CO₂ models. Disfavouring a substantial, high-mean-molecular-weight secondary atmosphere suggests that the null results from the previous transmission spectroscopy observations^{2–4} are probably caused by little or no atmosphere of any kind. The absence of a substantial atmosphere is also consistent with a coupled atmosphere–interior model that predicts complete atmospheric erosion for TRAPPIST-1 b over its lifetime in approximately half of the model cases run¹⁹.

Future observations have the potential to further constrain the heat redistribution and possible atmospheres of TRAPPIST-1 b. Spitzer 3.6- μm - and 4.5- μm -band fluxes were once interpreted as possibly due to CO₂ emission at the 2σ level³⁴, but this was not seen in additional observations²⁸. JWST secondary eclipse measurements in the MIRI F1280W filter (JWST programme 1279) may better constrain the dayside brightness temperature and determine how well the emission from the planet does or does not follow a blackbody emission or atmospheric emission or absorption spectrum (Fig. 2). Future thermal-emission phase curve observations that capture most of the orbit of the planet ($P = 36$ h) could also measure the contrast between its dayside and nightside. This would allow measuring the heat transfer and could further determine whether there is a tenuous atmosphere, as done with the Spitzer Space Telescope for the much hotter rocky planet LHS 3844b (ref. 35). Secondary eclipse or thermal-emission phase curve observations of additional similar planets including others in the TRAPPIST-1 system (for example, JWST programme 2304) could also further constrain the systematic properties of M-dwarf terrestrial planets and how they differ from the ones in the Solar System.

**Fig. 2 | TRAPPIST-1 b F1500W measured flux and spectral models.**

The blackbody (BB) curves represent the measured $T_B = 503$ K dayside temperature, the $T_d = 508$ K apparent dayside temperature predicted for zero heat redistribution and no internal heating, and $T_{eq} = 400$ K temperature for the isotropic redistribution of stellar heating. The flux expected in the upcoming observations in the MIRI F1280W filter is also shown, assuming the planet emits

like a $T_B = 503$ K blackbody. The widths of the F1280W and F1500W markers represent their transmission half-amplitude bandpasses, and the vertical error bar of the F1500W point represents its 1σ uncertainty. The emergent spectra from 93.0 bar CO₂ and 10.0 bar outgassed O₂ with 0.5 bar CO₂ atmospheres are also plotted^{20,33}.

Online content

Any methods, additional references, Nature Portfolio reporting summaries, source data, extended data, supplementary information, acknowledgements, peer review information; details of author contributions and competing interests; and statements of data and code availability are available at <https://doi.org/10.1038/s41586-023-05951-7>.

- Gillon, M. et al. Seven temperate terrestrial planets around the nearby ultracool dwarf star TRAPPIST-1. *Nature* **542**, 456–460 (2017).
- Ducrot, E. et al. The 0.8–4.5 μm broadband transmission spectra of TRAPPIST-1 planets. *Astron. J.* **156**, 218 (2018).
- de Wit, J. et al. Atmospheric reconnaissance of the habitable-zone Earth-sized planets orbiting TRAPPIST-1. *Nat. Astron.* **2**, 214–219 (2018).
- Zhang, Z., Zhou, Y., Rackham, B. V. & Apai, D. The near-infrared transmission spectra of TRAPPIST-1 planets b, c, d, e, f, and g and stellar contamination in multi-epoch transit spectra. *Astron. J.* **156**, 178 (2018).
- García, L. J. et al. HST/WFC3 transmission spectroscopy of the cold rocky planet TRAPPIST-1h. *Astron. Astrophys.* **665**, A19 (2022).
- Burgasser, A. J. & Mamajek, E. E. On the age of the TRAPPIST-1 system. *Astrophys. J.* **845**, 110 (2017).
- Agol, E. et al. Refining the transit-timing and photometric analysis of TRAPPIST-1: masses, radii, densities, dynamics, and ephemerides. *Planet. Sci. J.* **2**, 1 (2021).
- Liebert, J. & Gizis, J. E. RI photometry of 2MASS-selected late M and L dwarfs. *Publ. Astron. Soc. Pac.* **118**, 659–670 (2006).
- Roettenbacher, R. M. & Kane, S. R. The stellar activity of TRAPPIST-1 and consequences for the planetary atmospheres. *Astrophys. J.* **851**, 77 (2017).
- Paudel, R. R. et al. K2 ultracool dwarfs survey. III. White light flares are ubiquitous in M6-L0 dwarfs. *Astrophys. J.* **858**, 55 (2018).
- Baraffe, I., Chabrier, G., Allard, F. & Hauschildt, P. H. Evolutionary models for solar metallicity low-mass stars: mass-magnitude relationships and color-magnitude diagrams. *Astron. Astrophys.* **337**, 403–412 (1998).
- Luger, R. & Barnes, R. Extreme water loss and abiotic O_2 buildup on planets throughout the habitable zones of M dwarfs. *Astrobiology* **15**, 119–143 (2015).
- Bolmont, E. et al. Water loss from terrestrial planets orbiting ultracool dwarfs: implications for the planets of TRAPPIST-1. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **464**, 3728–3741 (2017).
- Tarter, J. C. et al. A reappraisal of the habitability of planets around M dwarf stars. *Astrobiology* **7**, 30–65 (2007).
- Turbet, M. et al. Modeling climate diversity, tidal dynamics and the fate of volatiles on TRAPPIST-1 planets. *Astron. Astrophys.* **612**, A86 (2018).
- Tilley, M. A., Segura, A., Meadows, V., Hawley, S. & Davenport, J. Modeling repeated M dwarf flaring at an Earth-like planet in the habitable zone: atmospheric effects for an unmagnetized planet. *Astrobiology* **19**, 64–86 (2019).
- Airapetian, V. S. et al. Impact of space weather on climate and habitability of terrestrial-type exoplanets. *Int. J. Astrobiol.* **19**, 136–194 (2020).
- Grayver, A., Bower, D. J., Saur, J., Dorn, C. & Morris, B. M. Interior heating of rocky exoplanets from stellar flares with application to TRAPPIST-1. *Astrophys. J. Lett.* **941**, L7 (2022).
- Krissansen-Totton, J. & Fortney, J. J. Predictions for observable atmospheres of Trappist-1 planets from a fully coupled atmosphere–interior evolution model. *Astrophys. J.* **933**, 115 (2022).
- Lincowski, A. P. et al. Evolved climates and observational discriminants for the TRAPPIST-1 planetary system. *Astrophys. J.* **867**, 76 (2018).
- Turbet, M. et al. A review of possible planetary atmospheres in the TRAPPIST-1 system. *Space Sci. Rev.* **216**, 100 (2020).
- Barstow, J. K. & Irwin, P. G. J. Habitable worlds with JWST: transit spectroscopy of the TRAPPIST-1 system? *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **461**, L92–L96 (2016).
- Lustig-Yaeger, J., Meadows, V. S. & Lincowski, A. P. The detectability and characterization of the TRAPPIST-1 exoplanet atmospheres with JWST. *Astron. J.* **158**, 27 (2019).
- Crossfield, I. J. M. Observations of exoplanet atmospheres. *Publ. Astron. Soc. Pac.* **127**, 941 (2015).
- Koll, D. D. B. A scaling for atmospheric heat redistribution on tidally locked rocky planets. *Astrophys. J.* **924**, 134 (2022).
- Koll, D. D. B. et al. Identifying candidate atmospheres on rocky M dwarf planets via eclipse photometry. *Astrophys. J.* **886**, 140 (2019).
- Mansfield, M. et al. Identifying atmospheres on rocky exoplanets through inferred high albedo. *Astrophys. J.* **886**, 141 (2019).
- Ducrot, E. et al. TRAPPIST-1: global results of the Spitzer exploration science program Red Worlds. *Astron. Astrophys.* **640**, A112 (2020).
- Rieke, G. H. et al. The mid-infrared instrument for the James Webb Space Telescope, I: introduction. *Publ. Astron. Soc. Pac.* **127**, 584 (2015).
- Bell, T. et al. Eureka!: an end-to-end pipeline for JWST time-series observations. *J. Open Source Softw.* **7**, 4503 (2022).
- Husser, T. O. et al. A new extensive library of PHOENIX stellar atmospheres and synthetic spectra. *Astron. Astrophys.* **553**, A6 (2013).
- Cowan, N. B. & Agol, E. A model for thermal phase variations of circular and eccentric exoplanets. *Astrophys. J.* **726**, 82 (2011).
- University of Washington. VPL Spectral Explorer (2018); <https://live-vpl-test.pantheonsite.io/models/vpl-spectral-explorer/>.
- Delrez, L. et al. Early 2017 observations of TRAPPIST-1 with Spitzer. *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **475**, 3577–3597 (2018).
- Kreidberg, L. et al. Absence of a thick atmosphere on the terrestrial exoplanet LHS 3844b. *Nature* **573**, 87–90 (2019).

Publisher's note Springer Nature remains neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.

Springer Nature or its licensor (e.g. a society or other partner) holds exclusive rights to this article under a publishing agreement with the author(s) or other rightsholder(s); author self-archiving of the accepted manuscript version of this article is solely governed by the terms of such publishing agreement and applicable law.

© This is a U.S. Government work and not under copyright protection in the US; foreign copyright protection may apply 2023

Methods

Data and analysis overview

The JWST MIRI F1500W time-series observations have significant background signals, dominated by the thermal emission from the JWST primary mirror and sunshade within the F1500W filter bandpass^{36,37}. At the start of each of the five exposures, we measured a mean background of 19,837–22,779 electrons per pixel in an annulus with a radius of 12–30 pixels per 38.9 s integration. These values assume a gain of 3.1 electrons per digital number. This background level corresponds to approximately 45% of the total flux within a five-pixel-radius photometric aperture centred on the TRAPPIST-1 star. Therefore, it is important to accurately subtract the background flux to maximize the quality of these and perhaps other long-wavelength JWST data.

We now describe how we analysed the raw image data to measure the secondary eclipse parameters of TRAPPIST-1 b in two different ways. The descriptions below refer to calibration pipelines and other software for which code and citations appear in the ‘Code availability’ section.

Data analyses for images to light curves

We reduced our observations using the data analysis pipeline Eureka! v. 9 (ref. 30) with jwst version 1.8.3 (ref. 38) and CRDS version 11.16.16 (ref. 39) using the ‘jwst_1019.pmap’ CRDS context. We started from the _uncal.fits files and ran stages 1–4 of the Eureka! pipeline. Stage 1 was first run using the default jwst settings with the exception of increasing the cosmic ray rejection threshold of the jump step to 10σ to avoid an excessively large number of false-positive cosmic ray detections. The only change to the stage 2 defaults were to turn off the photom step, except when computing the calibrated stellar flux; turning off the photom step makes it easier to understand how close our reduction is to the photon noise limit.

In stage 3 of Eureka!, we performed aperture photometry using source radii ranging from 4 to 12 pixels. In some of our observations, we found that using a large aperture (for example, a 9-pixel radius that encircles the first Airy ring) resulted in a smaller eclipse depth as well as noisier residuals; we attributed this to imperfect background subtraction across the large source aperture, resulting in a dilution of our eclipse depth. Ultimately, we found that an aperture radius of 5 pixels (which encircles the Airy disk) offered the lowest scatter in our residuals by maximizing the encircled starlight and minimizing the encircled background flux. We also considered a range of annuli to determine the background in each frame, which was important as the background flux varies significantly over the duration of the observations. We found that the choice of background annulus had little impact on the resulting eclipse depth, but an annulus that started near the end of the first Airy ring and included many background pixels helped to reduce the scatter in our residuals; ultimately, we chose an annulus spanning 12–30 pixels from the centroid. We also masked the values marked as DO NOT USE in the data quality (DQ) array, 5σ -clipped background flux outliers and linearly interpolated bad pixels. We computed the centroid for each integration using a two-dimensional Gaussian fit with an initial value for the centroid of $x = 698, y = 516$ and using only the 20×20 grid of pixels surrounding this first value. In stage 4 of Eureka!, we σ -clipped the 10σ outliers compared with the local median flux computed using a boxcar filter with a width of 10 integrations.

We also performed an alternative data reduction that was identical to the one described thus far, except that we set ramp_fitting_weighting to uniform in stage 1. All the groups in each integration of the data are limited by photon noise (background and star signal) and not read noise; therefore, it is logical to uniformly weigh them instead of using the default optimal value that is optimized for faint sources and low backgrounds.

Calibrated stellar flux

We measured the stellar flux of TRAPPIST-1 from the _calints.fits data products that we downloaded from the JWST archive. These had undergone standard processing with calibration version 1.8.2 and data processing version 2022_4a. After discarding the first 40 integrations of each observation, we computed the flux in a 15-pixel-radius aperture and subtracted the background in a 16–35 pixel annulus centred on the star. We applied corrections for starlight outside the measurement aperture and inside the background annulus (approximately 4% each^{40,41}) and applied the pixel scale of 2.844×10^{-13} sr per pixel. The calibrated flux varied by less than 0.4% ($\sigma = 0.004$ mJy) between the five observations, and there is an additional absolute calibration uncertainty of approximately 3% (0.078 mJy; Space Telescope Science Institute, personal communication). We add the systematic and observational uncertainties in quadrature to get an observed stellar flux of 2.589 ± 0.078 mJy. This is 13% lower than the flux expected from a PHOENIX/BT-Settl model produced by the pysynphot package for the stellar parameters and normalized to the observed 2MASS $J = 11.35$ mag flux of the star.

Secondary eclipse depths

First, we first individually fit each of our visits to assess the data quality of each visit and assess the evidence for astrophysical variability. We performed two independent fits to the observations to ensure the reproducibility of our conclusions. Individual and joint fits no. 1 used the standard-processed stages 1–4 data, whereas individual and joint fits no. 2 used the alternatively processed data with ramp_fitting_weighting = uniform. We describe the method used in each fit below.

Individual fits no. 1. For the first fit to the individual observations, we used Eureka! to fit a uniform-surface eclipse depth model using starry⁴², a linear trend in time, and we linearly decorrelated against the x and y positions of the star as well as the x and y point-spread-function width of the star as determined using the Gaussian centroiding method in stage 3 of Eureka!. We also inflated the estimated white-noise level during the fit to account for noise above the photon limit. The first approximately 100 integrations showed a moderate ramp shape that was probably caused by detector settling, and we decided to remove these data rather than try to fit them with an exponential decay model. To fit these observations, we used No-U-Turn sampler⁴³ of PyMC3 and ran two chains with a target acceptance rate of 0.95, with each chain taking 5,000 tuning steps followed by 2,000 posterior samples. The Gelman–Rubin statistic⁴⁴ was used to ensure the chain had converged. For astrophysical priors, we took $R_p/R_* = 0.08590$, $R_* = 0.1192R_\odot$ (to account for light travel time), $F_p/F_* = 0 \pm 0.01$, $P = 1.5108794$ days, $t_0 = 59,890.5150313 \pm 0.0050000$ barycentric modified Julian date in the barycentric dynamical time standard (BJD_TDB), $i = 89.728^\circ$, $a/R_* = 20.843$ and $e = 0$ (ref. 7). From these independent fits, only the eclipse from 20 November 2022 showed evidence of a small amount of unmodelled red noise in its Allan variance plot⁴⁵; this unmodelled red noise is probably a slight downward ramp at the start of the observation (Extended Data Fig. 1).

Note that our t_0 prior comes from numerical predictions that account for planet–planet interactions that significantly perturb the planets’ orbits from static, circular orbits⁷. To ensure that any inaccuracies in such predictive models do not bias our eclipse depth, we inflated the uncertainty in t_0 compared with the published uncertainty⁷ to search through a larger region of parameter space. Reassuringly, all our individual eclipse timings were within the error of each other and within 2σ of the predicted timings⁷ assuming zero eccentricity. Each observation constrained the eclipse timing to within almost 3 min or approximately 8% of the eclipse duration. The mid-eclipse times for the five observations are given in Extended Data Table 1.

Our five independently fit observations gave eclipse depths of 790 ± 210 , 510 ± 210 , 950 ± 170 , 820 ± 220 and 829 ± 200 ppm. Each of these observations is consistent with an average eclipse depth of 795 ppm, and we find no evidence for variability in the eclipse depth of TRAPPIST-1b.

Individual fits no. 2. For the second fit to the individual observations, we used the Fortran code *trafit* that is an updated version of the adaptive Markov chain Monte Carlo code described elsewhere^{46–48}. It uses the eclipse model of another work⁴⁹ as a photometric time series, multiplied by a baseline model to represent the other astrophysical and instrumental systematics that could produce photometric variations. First, we individually fit all the visits. We tested a large range of baseline models to account for different types of external source of flux variations or modulations (instrumental and stellar effects). This includes polynomials of variable orders in time, background, point-spread-function position on the detector (in x and y) and point-spread-function width (in x and y). Once the baseline was chosen, we ran a preliminary analysis with one Markov chain of 50,000 steps to evaluate the need for rescaling the photometric errors through the consideration of a potential underestimation or overestimation of the white noise of each measurement and the presence of time-correlated (red) noise in the light curve. After rescaling the photometric errors, we ran two Markov chains of 100,000 steps each to sample the probability density functions of the parameters of the model and the physical parameters of the system, and assessed the convergence of the Markov chain Monte Carlo analysis with the Gelman–Rubin statistical test⁴⁴. Our jump parameters were as follows: the mass of the star M_* with a normal prior distribution $\mathcal{N}(0.0980, 0.0023^2)M_\odot$; the radius R_* with a normal prior distribution $\mathcal{N}(0.1192, 0.0033^2)R_\odot$; the effective temperature T_{eff} with a normal prior distribution $\mathcal{N}(2,520, 39^2)$ K; the metallicity [Fe/H] of the star with a normal prior distribution $\mathcal{N}(0.0535, 0.0880^2)$; the impact parameter of planet b with a normal prior distribution $\mathcal{N}(0.25, 0.11^2)$; t_0 with normal priors and inflated errors similar to fit no. 1; and F_p/F_* with a broad uniform prior. All the normal priors were taken from another work²⁸, except for the transit timings that were derived from the dynamical model predictions in ref. 7. All our individual eclipse timings were also within 2σ of the predicted timings of this dynamical model assuming zero eccentricity.

For the five individual fits, the Gelman–Rubin statistic was lower than 1.003 for every jump parameter measured across the two chains, indicating good convergence. The eclipse depths that we measured for visits 1–5 are 994_{+187}^{-193} , 691_{+166}^{-169} , 798_{+284}^{-282} , 821_{+243}^{-229} and 736_{+266}^{-259} ppm, respectively.

Combining multiple eclipse measurements. Finally, we simultaneously fit the five eclipse observations to allow for better constraints on the timing of the eclipse; this is important as any error in the mid-eclipse time results in a bias towards smaller eclipse depths as some of the eclipse signal is included in the baseline and vice versa.

Joint fit no. 1. For the first joint fit to all the observations, we followed the same method as that in the ‘Individual fits no. 1’ section, with the exception of fitting the period using a Gaussian prior of $P = 1.5108794 \pm 0.0000060$ (ref. 7) and assuming a shared F_p/F_* , P and t_0 among all the visits; all other fitted variables were allowed to vary freely between the different visits. We again fit the observations using the No-U-Turn sampler⁴³ of PyMC3 and ran two chains with a target acceptance rate of 0.90, with each chain taking 6,000 tuning steps followed by 3,000 posterior samples. Again, the Gelman–Rubin statistic⁴⁴ was used to ensure that the chain had converged. From this joint fit, only the eclipse from 20 November 2022 showed evidence of a small amount of unmodelled red noise in its Allan variance plot⁴⁵. This shared fit constrained the eclipse time to within 36 s ($t_0 = 2,459,891.01487704778 \pm 0.00042000000$; or approximately 1% of the eclipse duration) and is in close

agreement with the numerical predictions⁷. Our fitted orbital period ($P = 1.5108793 \pm 0.0000062$ days) also remained consistent with the prior value⁷. Overall, we find that the numerical, planet–planet interaction model⁷ based on observations taken three or more years before our JWST observations was able to predict the timing of the eclipses of TRAPPIST-1b with excellent accuracy and precision. We also find that the eclipse duration is consistent with the published transit duration of the planet, but our limited data allow constraining this time to only approximately 10%.

The individual raw and de-trended light curves as well as the joint model fits to our phase-folded observations are shown in Extended Data Fig. 1. With this joint fit, we measure an average eclipse depth of 899 ± 91 ppm. Although this average eclipse depth is significantly higher than that from the individual fits, this seems to be the result of a bias towards smaller eclipse depths in the individual fits as a result of higher uncertainty in the eclipse timing. Indeed, allowing the eclipse depths to vary between visits and requiring only the time of eclipse to remain consistent between visits gives an average eclipse depth entirely consistent with our joint fit. The phase-folded light curves from all the observations after systematic noise removal are shown with the joint eclipse model fit in Fig. 1.

Joint fit no. 2. For the second joint fit to all the observations, we used *trafit* with the baseline models derived from our individual fit for each light curve (see the ‘Individual fits no. 2’ section). Again, we performed a preliminary run of one chain of 50,000 steps to estimate the correction factors that we then apply to the photometric error bars and a second run with two chains of 100,000 steps. The jump parameters were the same as for individual fit no. 2, except for the fact that we fixed t_0 and allowed for transit timing variations to happen for each visit (each transit timing variation has an unconstrained uniform prior). We used the Gelman–Rubin statistic to assess the convergence of the fit. We measure an eclipse depth of 823_{+88}^{-87} ppm from this joint fit.

Adopted eclipse depth and noise. We compute a single-mean secondary eclipse depth of $F_p/F_* = 861$ ppm from the two separate jointly fit values of 899 and 823 ppm. We use the uncertainty of 99 ppm = $(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)^{1/2}$, where $\sigma_1 = 91$ ppm is the larger of the two jointly fit random uncertainties and $\sigma_2 = 38$ ppm is an estimate of the systematic error equal to the difference between either jointly fit depth and their mean. The random noise value of 91 ppm is almost 1.3 times the photon noise measured from the data as well as that estimated from an in-flight JWST MIRI performance model. This excess noise factor is similar to the one measured for the MIRI low-resolution-spectroscopy time-series-observing mode that uses the same detector and signal chain electronics⁵⁰.

Data availability

The data used in this paper are associated with the JWST-GTO-1177 programme (observations 7–11) and will be publicly available from the Mikulski Archive for Space Telescopes (<https://mast.stsci.edu>) at the end of their one-year exclusive-access periods. Source data are provided with this paper.

Code availability

We used the following codes to process, extract, reduce and analyse the data: STScI JWST calibration pipeline³⁸; Eureka³⁰; emcee⁵¹; starry⁴²; PyMC3 (ref. 43); PySynphot⁵²; and the standard Python libraries *numpy*⁵³, *astropy*⁵⁴ and *matplotlib*⁵⁵. These were incorporated into custom Python notebooks for data analysis. These notebooks are available from the corresponding author on request. The notebooks were developed by a NASA employee and cannot be posted publicly until approved by NASA.

36. Lightsey, P. A. & Wei, Z. James Webb Space Telescope stray light performance status update. In *Proc. SPIE 8442, Space Telescopes and Instrumentation 2012: Optical, Infrared, and Millimeter Wave 84423B* (SPIE, 2012).
37. Rigby, J. R. et al. How dark the sky: the JWST backgrounds. *Publ. Astron. Soc. Pac.* **135**, 048002 (2023).
38. JWST Calibration Pipeline Developers. JWST: Python library for science observations from the James Webb Space Telescope. *GitHub* <https://github.com/spacetelescope/jwst> (2022).
39. CRDS Developers. CRDS: calibration reference data system for HST and JWST. *GitHub* <https://github.com/spacetelescope/crds> (2022).
40. Rigby, J. et al. The science performance of JWST as characterized in commissioning. *Publ. Astron. Soc. Pac.* **135**, 048001 (2023).
41. Guillard, P. et al. MIRI point spread functions: radial and encircled energy profiles (2023); <https://jwst-docs.stsci.edu/jwst-mid-infrared-instrument/miri-performance/miri-point-spread-functions#MIRIPointSpreadFunctions-Radialandencircledenergyprofiles>.
42. Luger, R. et al. rodluger/starry: v1.2.0. *Zenodo* <https://zenodo.org/record/5567790/export/csl> (2021).
43. Salvatier, J., Wiecki, T. V. & Fonnesbeck, C. Probabilistic programming in Python using PyMC3. *PeerJ Comput. Sci.* **2**, e55 (2016).
44. Gelman, A. & Rubin, D. B. Inference from iterative simulation using multiple sequences. *Stat. Sci.* **7**, 457–472 (1992).
45. Allan, D. W. Statistics of atomic frequency standards. *IEEE Proc.* **54**, 221–230 (1966).
46. Gillon, M. et al. The Spitzer search for the transits of HARPS low-mass planets. *Astron. Astrophys.* **518**, A25 (2010).
47. Gillon, M. et al. The TRAPPIST survey of southern transiting planets. I. Thirty eclipses of the ultra-short period planet WASP-43 b. *Astron. Astrophys.* **542**, A4 (2012).
48. Gillon, M. et al. Search for a habitable terrestrial planet transiting the nearby red dwarf GJ 1214. *Astron. Astrophys.* **563**, A21 (2014).
49. Mandel, K. & Agol, E. Analytic light curves for planetary transit searches. *Astrophys. J. Lett.* **580**, L171–L175 (2002).
50. Bouwman, J. et al. Spectroscopic time series performance of the mid-infrared instrument on the JWST. *Publ. Astron. Soc. Pac.* **135**, 038002 (2023).
51. Foreman-Mackey, D., Hogg, D. W., Lang, D. & Goodman, J. emcee: the MCMC hammer. *Publ. Astron. Soc. Pac.* **125**, 306 (2013).
52. Lim, P. L., Diaz, R. I. & Laidler, V. PySynphot user's guide (2015); <https://pysynphot.readthedocs.io/en/latest/>.
53. Harris, C. R. et al. Array programming with NumPy. *Nature* **585**, 357–362 (2020).
54. The Astropy Collaboration. The Astropy project: sustaining and growing a community-oriented open-source project and the latest major release (v5.0) of the core package. *Astrophys. J.* **935**, 167 (2022).
55. Hunter, J. D. Matplotlib: a 2D graphics environment. *Comput. Sci. Eng.* **9**, 90–95 (2007).

Acknowledgements We thank E. Schlawin, M. Gillon, V. Parmentier and E. Rauscher for discussions and L. Kreidberg for comments that helped to improve the manuscript. This work is based on observations made with the NASA/ESA/CSA JWST. The data were obtained from the Mikulski Archive for Space Telescopes at the Space Telescope Science Institute, which is operated by the Association of Universities for Research in Astronomy under NASA contract NAS 5-03127 for JWST. These observations are associated with the JWST-GTO-1177 programme. We thank the MIRI instrument team and the many other people who contributed to the success of JWST. T.P.G. and T.J.B. acknowledge funding support from the NASA Next Generation Space Telescope Flight Investigations programme (now JWST) by WBS 411672.07.04.01.02. This material is based on work supported by NASA Interdisciplinary Consortia for Astrobiology Research (NNH19ZDA001N-ICAR) under award number 19-ICAR19_2-0041 (to J.J.F.) and NASA WBS 811073.02.12.04.71 (to T.P.G.). P.-O.L. acknowledges funding support from CNES. E.D. acknowledges support from the EU Horizon 2020 research and innovation programme in the context of the Marie Skłodowska-Curie subvention 945298. E.D. is a Paris Region Fellow and is funded by the Marie Skłodowska-Curie Actions.

Author contributions T.P.G. provided the programme leadership, devised the observational programme, led setting the observation parameters, contributed to the data analysis, led the interpretation of the results and led the writing of the manuscript. T.J.B. verified the observing parameters and led the data analysis. E.D. checked and contributed to the observing parameters, data analysis and interpretation of the results. A.D. contributed to the data reduction. P.-O.L. contributed to the design of the observational programme and setting the observing parameters, commented on the draft manuscript and contributed to the data analysis. J.J.F. contributed to the design of the observational programme, provided information for the paper and helped to interpret the results.

Competing interests The authors declare no competing interests.

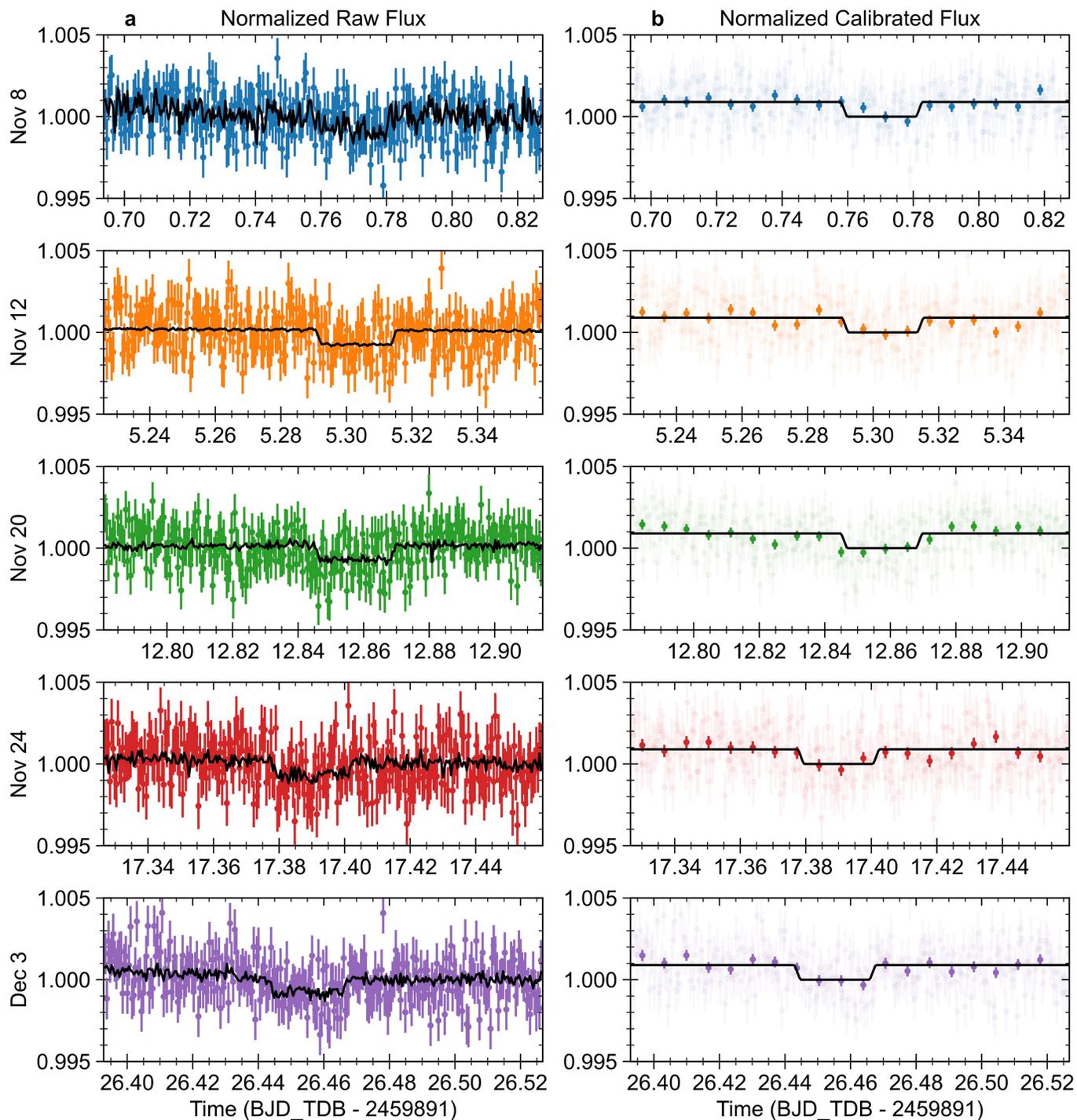
Additional information

Supplementary information The online version contains supplementary material available at <https://doi.org/10.1038/s41586-023-05951-7>.

Correspondence and requests for materials should be addressed to Thomas P. Greene.

Peer review information *Nature* thanks L. Kreidberg and the other, anonymous, reviewer(s) for their contribution to the peer review of this work. Peer reviewer reports are available.

Reprints and permissions information is available at <http://www.nature.com/reprints>.



Extended Data Fig. 1 | Light curves of individual observations and the Joint Fit #1 models. **a.** The raw light curves from each of our five visits normalized by their median value are shown in color, while the fitted model from Joint Fit #1 including systematic noise is shown using a black line. The date in UT of each visit is indicated by the y-axis labels. Each visit did not start at the same orbital

phase, so the apparent movement in the eclipse time is simply caused by when the observations began. **b.** The same data and model from each visit after the removal of systematic noise. Overplotted are data binned at a cadence of 9.7 minutes (14 integrations) to more clearly visualize the detection of the eclipse in each visit. All error bars show 1σ uncertainties in both panels.

Extended Data Table 1 | Mid-eclipse times

Observation	UT date (2022)	mid-eclipse time (BJD TDB)
1	8 November	$2459891.7711^{+0.0017}_{-0.0010}$
2	12 November	$2459896.3038^{+0.0018}_{-0.0011}$
3	20 November	$2459903.8559^{+0.0011}_{-0.0015}$
4	24 November	$2459908.3893^{+0.0012}_{-0.0015}$
5	3 December	$2459917.4563^{+0.0009}_{-0.0010}$

The uncertainties given for each mid-eclipse time are 1σ .

A reflective, metal-rich atmosphere for GJ 1214b from its JWST phase curve

<https://doi.org/10.1038/s41586-023-06159-5>

Received: 11 February 2023

Accepted: 2 May 2023

Published online: 10 May 2023

 Check for updates

Eliza M.-R. Kempton^{1✉}, Michael Zhang², Jacob L. Bean², Maria E. Steinrueck³, Anjali A. A. Piette⁴, Vivien Parmentier^{5,6}, Isaac Malsky⁷, Michael T. Roman⁸, Emily Rauscher⁷, Peter Gao⁴, Taylor J. Bell⁹, Qiao Xue², Jake Taylor^{5,10}, Arjun B. Savel¹¹, Kenneth E. Arnold¹, Matthew C. Nixon¹, Kevin B. Stevenson¹², Megan Mansfield¹³, Sarah Kendrew¹⁴, Sebastian Zieba^{3,15}, Elsa Ducrot^{16,17}, Achrène Dyrek¹⁷, Pierre-Olivier Lagage¹⁷, Keivan G. Stassun¹⁸, Gregory W. Henry¹⁹, Travis Barman²⁰, Roxana Lupu²¹, Matej Malik¹, Tiffany Kataria²², Jegug Ih¹, Guangwei Fu²³, Luis Welbanks²⁴ & Peter McGill²⁵

There are no planets intermediate in size between Earth and Neptune in our Solar System, yet these objects are found around a substantial fraction of other stars¹. Population statistics show that close-in planets in this size range bifurcate into two classes on the basis of their radii^{2,3}. It is proposed that the group with larger radii (referred to as ‘sub-Neptunes’) is distinguished by having hydrogen-dominated atmospheres that are a few percent of the total mass of the planets⁴. GJ 1214b is an archetype sub-Neptune that has been observed extensively using transmission spectroscopy to test this hypothesis^{5–14}. However, the measured spectra are featureless, and thus inconclusive, due to the presence of high-altitude aerosols in the planet’s atmosphere. Here we report a spectroscopic thermal phase curve of GJ 1214b obtained with the James Webb Space Telescope (JWST) in the mid-infrared. The dayside and nightside spectra (average brightness temperatures of 553 ± 9 and 437 ± 19 K, respectively) each show more than 3σ evidence of absorption features, with H₂O as the most likely cause in both. The measured global thermal emission implies that GJ 1214b’s Bond albedo is 0.51 ± 0.06 . Comparison between the spectroscopic phase curve data and three-dimensional models of GJ 1214b reveal a planet with a high metallicity atmosphere blanketed by a thick and highly reflective layer of clouds or haze.

The exoplanet GJ 1214b has a radius of $2.6 R_{\oplus}$ and orbits its late M dwarf host star with a period of 37.9 h (ref. 15). We observed the phase curve of GJ 1214b using the James Webb Space Telescope’s (JWST’s) Mid-Infrared Instrument Low Resolution Spectrometer (MIRI LRS)¹⁶ on 20–22 July 2022. The observation was a time series of regular and continuous integrations using the slitless prism mode, starting 2.0 hours before the predicted time of secondary eclipse. The data acquisition continued through the eclipse, a transit and for 1.1 hours after a second eclipse for a total of 41.0 hours. The telescope pointing was kept fixed during the observation; neither scanning nor dithering was used. A total of 21,600 integrations with 42 groups per integration (6.68 s of integration time) were obtained.

We used a custom pipeline to reduce the data and extract the combined spectra of the planet and its host star from 5 to 12 μm . We

generated spectroscopic light curves (Extended Data Fig. 1, inverted to equivalently produce spectra at each orbital phase; Extended Data Fig. 2) by binning the data by 0.5 μm (corresponding to 7 to 28 pixels per bin). We also produced a band-integrated ‘white’ light phase curve by summing the data over all wavelengths (Fig. 1). Although the raw JWST light curves show systematics that are typical for space-based phase curve observations, we clearly see the transit and the secondary eclipse in the light curve before any detrending (Extended Data Fig. 3). We thus applied corrections for the systematics using standard methods and fit the data with an exoplanet phase curve model. More details of the data analysis are given in the Methods section.

Previous observations at 4.5 μm with the Spitzer Space Telescope tentatively detected the secondary eclipse of GJ 1214b half an orbital period following the transit (that is, at phase 0.5) with a corresponding

¹Department of Astronomy, University of Maryland, College Park, MD, USA. ²Department of Astronomy and Astrophysics, University of Chicago, Chicago, IL, USA. ³Max-Planck Institute for Astronomy, Heidelberg, Germany. ⁴Earth and Planets Laboratory, Carnegie Institution for Science, Washington, DC, USA. ⁵Department of Physics, University of Oxford, Oxford, UK. ⁶Lagrange Laboratory, University of the Côte d’Azur, Observatory of the Côte d’Azur, CNRS, Nice, France. ⁷Department of Astronomy, University of Michigan, Ann Arbor, MI, USA. ⁸School of Physics and Astronomy, University of Leicester, Leicester, UK. ⁹BAER Institute, NASA Ames Research Center, Moffett Field, CA, USA. ¹⁰Institut Trottier de Recherche sur les Exoplanètes and Department of Physics, University of Montréal, Montréal, Québec, Canada. ¹¹Center for Computational Astrophysics, Flatiron Institute, New York, NY, USA. ¹²Johns Hopkins Applied Physics Laboratory, Laurel, MD, USA. ¹³Steward Observatory, University of Arizona, Tucson, AZ, USA. ¹⁴European Space Agency, Space Telescope Science Institute, Baltimore, MD, USA. ¹⁵Leiden Observatory, Leiden University, Leiden, the Netherlands. ¹⁶Paris Region Fellow, Marie Skłodowska-Curie Action, Paris, France. ¹⁷AIM, CEA, CNRS, University of Paris-Saclay, University of Paris, Gif-sur-Yvette, France. ¹⁸Department of Physics and Astronomy, Vanderbilt University, Nashville, TN, USA. ¹⁹Center of Excellence in Information Systems, Tennessee State University, Nashville, TN, USA. ²⁰Lunar and Planetary Laboratory, University of Arizona, Tucson, AZ, USA. ²¹Eureka Scientific, Inc., Oakland, CA, USA. ²²NASA Jet Propulsion Laboratory, California Institute of Technology, Pasadena, CA, USA. ²³Department of Physics and Astronomy, Johns Hopkins University, Baltimore, MD, USA. ²⁴School of Earth and Space Exploration, Arizona State University, Tempe, AZ, USA. ²⁵Department of Astronomy & Astrophysics, University of California, Santa Cruz, CA, USA. ✉e-mail: ekempton@astro.umd.edu

Spitzer thermal phase curve of WASP-121 b

G. Morello^{1,2}, Q. Changeat^{3,4}, A. Dyrek⁵, P.-O. Lagage⁵, and J. C. Tan^{1,6}

¹ Department of Space, Earth and Environment, Chalmers University of Technology, SE-412 96 Gothenburg, Sweden

² Instituto de Astrofísica de Canarias (IAC), 38205 La Laguna, Tenerife, Spain

³ European Space Agency (ESA), ESA Office, Space Telescope Science Institute (STScI), Baltimore MD 21218, USA.

⁴ Department of Physics and Astronomy, University College London, Gower Street, WC1E 6BT London, United Kingdom

⁵ AIM, CEA, CNRS, Université Paris-Saclay, Université Paris Diderot, Sorbonne Paris Cité, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

⁶ Dept. of Astronomy, University of Virginia, Charlottesville, VA 22904, USA

July 4, 2023

ABSTRACT

Aims. We analyse unpublished Spitzer observations of the thermal phase-curve of WASP-121 b, a benchmark ultra-hot Jupiter.

Methods. We adopted the wavelet pixel-independent component analysis technique to remove challenging instrumental systematic effects in these datasets and we fit them simultaneously with parametric light-curve models. We also performed phase-curve retrievals to better understand the horizontal and vertical thermal structure of the planetary atmosphere.

Results. We measured planetary brightness temperatures of ~ 2700 K (dayside) and ~ 700 – 1100 K (nightside), along with modest peak offsets of $5.9^\circ \pm 1.6$ ($3.6 \mu\text{m}$) and $5.0^{+3.4}_{-3.1}$ ($4.5 \mu\text{m}$) after mid-eclipse. These results suggest inefficient heat redistribution in the atmosphere of WASP-121 b. The inferred atmospheric Bond albedo and circulation efficiency align well with observed trends for hot giant exoplanets. Interestingly, the measured peak offsets correspond to a westward hot spot, which has rarely been observed. We also report consistent transit depths at 3.6 and $4.5 \mu\text{m}$, along with updated geometric and orbital parameters. Finally, we compared our Spitzer results with previous measurements, including recent JWST observations.

Conclusions. We extracted new information on the thermal properties and dynamics of an exoplanet atmosphere from an especially problematic dataset. This study probes the reliability of exoplanet phase-curve parameters obtained from Spitzer observations when state-of-the-art pipelines are adopted to remove the instrumental systematic effects. It demonstrates that Spitzer phase-curve observations provide a useful baseline for comparison with JWST observations, and shows the increase in parameters precision achieved with the newer telescope.

Key words. planetary systems – planets and satellites: individual: WASP-121 b – planets and satellites: atmospheres – techniques: spectroscopic – methods: observational

1. Introduction

WASP-121 b is an ultra-hot Jupiter (UHJ) orbiting around an F6 V star in ~ 1.27 d. Table 1 reports the stellar and planetary parameters taken from its discovery paper (Delrez et al. 2016). WASP-121 b has been targeted by many follow-up studies, based on its nature as an exoplanet amenable to characterisations with various observing techniques. It is especially well suited for atmospheric characterisation by both transmission and emission spectroscopy, owing to its high equilibrium temperature and large size. Some researchers have proposed WASP-121 b as a suitable target to further investigate its interior structure and/or shape deformations (Akisanmi et al. 2019; Hellard et al. 2020).

Shortly after the WASP-121 b discovery, Evans et al. (2016) detected the $1.4 \mu\text{m}$ water absorption band from a transit observed with the Hubble Space Telescope (HST) using the Wide Field Camera 3 (WFC3) with the G141 grism, covering 1.1 – $1.7 \mu\text{m}$. Evans et al. (2017) also detected H_2O in emission, along with evidence of a stratosphere, using the same instrument setup to observe the planetary eclipse. Earlier atmospheric models of UHJs predicted temperature inversions to occur due to absorption by metal oxides, such as TiO and VO, in their upper atmospheric layers (Hubeny et al. 2003; Fortney et al. 2008). Small features occurring at the blue edge of the HST/WFC3 spectra of WASP-121 b have been tentatively attributed to TiO and VO (Evans et al. 2017; Tsiaras et al. 2018). Based on subse-

quent transit observations obtained with the HST/Space Telescope Imaging Spectrograph (STIS), covering 0.3 – $1.0 \mu\text{m}$, Evans et al. (2018) confirmed the presence of VO, but not TiO, at the terminator of WASP-121 b atmosphere. Mikal-Evans et al. (2019) found evidence of H^- in the emission spectrum of WASP-121 b taken with HST/WFC3 using the G102 grism (0.8 – $1.1 \mu\text{m}$), but retracted the previous claim of VO in emission. Mikal-Evans et al. (2020) refined H_2O detection and VO non-detection in the planet dayside by stacking multiple eclipse observations taken with HST/WFC3 G141. Salz et al. (2019) detected an excess of near-UV absorption (0.20 – $0.27 \mu\text{m}$) during three transits of WASP-121 b observed with the Ultraviolet/Optical Telescope (UVOT) onboard the Neil Gehrels Swift Observatory. Sing et al. (2019) resolved exospheric Mg II and Fe II lines in the near-UV transmission spectrum observed with HST/STIS.

Bourrier et al. (2020) and Daylan et al. (2021) reported two independent analyses of long-term visible photometry of WASP-121 from the Transiting Exoplanet Survey Satellite (TESS, Ricker et al. 2014) showing strong phase-curve modulations. Both studies measured a strong day-night temperature contrast and a small offset between the maximum emission and sub-stellar points, suggesting low reflectivity and inefficient heat redistribution in the planetary atmosphere. They also found evidence for a temperature inversion, partly caused by H^- . Mikal-Evans et al. (2022) analysed two spectroscopic phase curves ob-

Nightside clouds and disequilibrium chemistry on the hot Jupiter WASP-43b

Taylor J. Bell^{1,2}, Nicolas Crouzet³, Patricio E. Cubillos^{4,5}, Laura Kreidberg⁶, Anjali A. A. Piette⁷, Michael T. Roman^{8,9}, Joanna K. Barstow¹⁰, Jasmina Blečić^{11,12}, Ludmila Carone⁵, Louis-Philippe Coulombe¹³, Elsa Ducrot^{14,15}, Mark Hammond¹⁶, João M. Mendonça¹⁷, Julianne I. Moses¹⁸, Vivien Parmentier¹⁹, Kevin B. Stevenson²⁰, Lucas Teinturier^{21,22}, Michael Zhang^{23,24}, Natalie M. Batalha²⁵, Jacob L. Bean²³, Björn Benneke¹³, Benjamin Charnay²¹, Katy L. Chubb²⁶, Brice-Olivier Demory^{27,28}, Peter Gao⁷, Elspeth K. H. Lee²⁷, Mercedes López-Morales²⁹, Giuseppe Morello^{30,31,32}, Emily Rauscher³³, David K. Sing^{34,35}, Xianyu Tan^{36,37,16}, Olivia Venot³⁸, Hannah R. Wakeford³⁹, Keshav Aggarwal⁴⁰, Eva-Maria Ahrer^{41,42}, Munazza K. Alam⁷, Robin Baeyens⁴³, David Barrado⁴⁴, Claudio Caceres^{45,46,47}, Aarynn L. Carter²⁵, Sarah L. Casewell⁸, Ryan C. Challener³³, Ian J. M. Crossfield⁴⁸, Leen Decin⁴⁹, Jean-Michel Désert⁴³, Ian Dobbs-Dixon¹¹, Achrène Dyrek¹⁴, Néstor Espinoza^{50,35}, Adina D. Feinstein^{23,51,52}, Neale P. Gibson⁵³, Joseph Harrington⁵⁴, Christiane Helling⁵, Renyu Hu^{55,56}, Nicolas Iro⁵⁷, Eliza M.-R. Kempton⁵⁸, Sarah Kendrew⁵⁹, Thaddeus D. Komacek⁵⁸, Jessica Krick⁶⁰, Pierre-Olivier Lagage¹⁴, Jérémy Leconte⁶¹, Monika Lendl⁶², Neil T. Lewis⁶³, Joshua D. Lothringer⁶⁴, Isaac Malsky³³, Luigi Mancini^{65,66,6}, Megan Mansfield^{67,68}, Nathan J. Mayne⁶⁹, Thomas Mikal-Evans⁶, Karan Molaverdikhani^{70,71}, Nikolay K. Nikolov⁵⁰, Matthew C. Nixon⁵⁸, Enric Palle³⁰, Dominique J. M. Petit dit de la Roche⁶², Caroline Piaulet¹³, Diana Powell^{29,68}, Benjamin V. Rackham^{72,73,24}, Aaron D. Schneider^{49,74}, Maria E. Steinrueck⁶, Jake Taylor^{16,13}, Luis Welbanks^{75,68}, Sergei N. Yurchenko⁷⁶, Xi Zhang⁷⁷, Sebastian Zieba^{6,3}

¹BAER Institute, NASA Ames Research Center, Moffet Field, CA, USA

²Space Science and Astrobiology Division, NASA Ames Research Center, Moffett Field, CA, USA

³Leiden Observatory, University of Leiden, Leiden, The Netherlands

⁴INAF – Osservatorio Astrofisico di Torino, Pino Torinese, Italy

⁵Space Research Institute, Austrian Academy of Sciences, Graz, Austria

⁶Max Planck Institute for Astronomy, Heidelberg, Germany

⁷Earth and Planets Laboratory, Carnegie Institution for Science, Washington, DC, USA

⁸School of Physics and Astronomy, University of Leicester, Leicester

⁹Universidad Adolfo Ibáñez: Peñalolén, Santiago, Chile

¹⁰School of Physical Sciences, The Open University, Milton Keynes, UK

¹¹Department of Physics, New York University Abu Dhabi, Abu Dhabi, UAE

¹²Center for Astro, Particle and Planetary Physics (CAP3), New York University Abu Dhabi, Abu Dhabi, UAE

¹³Department of Physics and Trottier Institute for Research on Exoplanets, Université de Montréal, Montreal, QC, Canada

¹⁴Université Paris-Saclay, Université Paris Cité, CEA, CNRS, AIM, Gif-sur-Yvette, France

¹⁵Paris Region Fellow, Marie Skłodowska-Curie Action

¹⁶Atmospheric, Oceanic and Planetary Physics, Department of Physics, University of Oxford, Ox-

Références

- Acuña, L., Deleuil, M. et Mousis, O. (2023). « Interior–atmosphere modelling to assess the observability of rocky planets with JWST ». *Astronomy & Astrophysics* 677. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Agol, E., Dorn, C., Grimm, S. L., Turbet, M., Ducrot, E., Delrez, L., Gillon, M., Demory, B.-O., Burdanov, A., Barkaoui, K., Benkhaldoun, Z., Bolmont, E., Burgasser, A., Carey, S., de Wit, J., Fabrycky, D., Foreman-Mackey, D., Haldemann, J., Hernandez, D. M., Ingalls, J., Jehin, E., Langford, Z., Leconte, J., Lederer, S. M., Luger, R., Malhotra, R., Meadows, V. S., Morris, B. M., Pozuelos, F. J., Queloz, D., Raymond, S. N., Selsis, F., Sestovic, M., Triaud, A. H. M. J. et Van Grootel, V. (2021). « Refining the Transit-timing and Photometric Analysis of TRAPPIST-1 : Masses, Radii, Densities, Dynamics, and Ephemerides ». *PSJ* 2.1, 1.
- Agol, E., Luger, R. et Foreman-Mackey, D. (2020). « Analytic Planetary Transit Light Curves and Derivatives for Stars with Polynomial Limb Darkening ». en. *The Astronomical Journal* 159.3. arXiv :1908.03222 [astro-ph]. ISSN : 1538-3881.
- Aguirre, V. S., Lund, M. N., Antia, H. M., Ball, W. H., Basu, S., Christensen-Dalsgaard, J., Lebreton, Y., Reese, D. R., Verma, K., Casagrande, L., Justesen, A. B., Mosumgaard, J. R., Chaplin, W. J., Bedding, T. R., Davies, G. R., Handberg, R., Houdek, G., Huber, D., Kjeldsen, H., Latham, D. W., White, T. R., Coelho, H. R., Miglio, A. et Rendle, B. (2017). « Standing on the Shoulders of Dwarfs : the *Kepler* Asteroseismic LEGACY Sample. II. Radii, Masses, and Ages ». en. *The Astrophysical Journal* 835.2. ISSN : 1538-4357.
- Airapetian, V. S., Barnes, R., Cohen, O., Collinson, G. A., Danchi, W. C., Dong, C. F., Del Genio, A. D., France, K., Garcia-Sage, K., Glocer, A., Gopalswamy, N., Grenfell, J. L., Gronoff, G., Güdel, M., Herbst, K., Henning, W. G., Jackman, C. H., Jin, M., Johnstone, C. P., Kaltenegger, L., Kay, C. D., Kobayashi, K., Kuang, W., Li, G., Lynch, B. J., Lüftinger, T., Luhmann, J. G., Maehara, H., Mlynczak, M. G., Notsu, Y., Osten, R. A., Ramirez, R. M., Rugheimer, S., Scheucher, M., Schlieder, J. E., Shibata, K., Sousa-Silva, C., Stamenković, V., Strangeway, R. J., Usmanov, A. V., Vergados, P., Verkhoglyadova, O. P., Vidotto, A. A., Voytek, M., Way, M. J., Zank, G. P. et Yamashiki, Y. (2020). « Impact of space weather on climate and habitability of terrestrial-type exoplanets ». en. *International Journal of Astrobiology* 19.2. ISSN : 1473-5504, 1475-3006.
- Alderson, L., Wakeford, H. R. et Alam, M. K. (2023). « Early Release Science of the exoplanet WASP-39b with JWST NIRSpec G395H ». en. *Nature* 614.7949. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- Anderson, D. R., Collier Cameron, A. et Delrez, L. (2017). « The discoveries of WASP-91b, WASP-105b and WASP-107b : Two warm Jupiters and a planet in the transition region between ice giants and gas giants ». *A&A* 604, A110.

- Anderson, R. E. et Gordon, K. D. (2011). « Optimal Cosmic-Ray Detection for Nondestructive Read Ramps ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 123,908. arXiv :1109.2626 [astro-ph]. ISSN : 00046280, 15383873.
- Apai, D., Rackham, B. V., Giampapa, M. S., Angerhausen, D., Teske, J., Barstow, J., Carone, L., Cegla, H., Domagal-Goldman, S. D., Espinoza, N., Giles, H., Gully-Santiago, M., Haywood, R., Hu, R., Jordan, A., Kreidberg, L., Line, M., Llama, J., López-Morales, M., Marley, M. S. et De Wit, J. (2018). *Understanding Stellar Contamination in Exoplanet Transmission Spectra as an Essential Step in Small Planet Characterization*. en. arXiv :1803.08708 [astro-ph].
- Appourchaux, T., Benomar, O., Gruberbauer, M., Chaplin, W. J., García, R. A., Handberg, R., Verner, G. A., Antia, H. M., Campante, T. L., Davies, G. R., Deheuvels, S., Hekker, S., Howe, R., Salabert, D., Bedding, T. R., White, T. R., Houdek, G., Silva Aguirre, V., Elsworth, Y. P., van Cleve, J., Clarke, B. D., Hall, J. R. et Kjeldsen, H. (2012). « Oscillation mode linewidths of main-sequence and subgiant stars observed by Kepler ». *A&A* 537, A134.
- Appourchaux, T., Chaplin, W. J., García, R. A., Gruberbauer, M., Verner, G. A., Antia, H. M., Benomar, O., Campante, T. L., Davies, G. R., Deheuvels, S., Handberg, R., Hekker, S., Howe, R., Régulo, C., Salabert, D., Bedding, T. R., White, T. R., Ballot, J., Mathur, S., Silva Aguirre, V., Elsworth, Y. P., Basu, S., Gilliland, R. L., Christensen-Dalsgaard, J., Kjeldsen, H., Uddin, K., Stumpe, M. C. et Barclay, T. (2012). « Oscillation mode frequencies of 61 main-sequence and subgiant stars observed by Kepler ». *A&A* 543, A54.
- Arcangeli, J., Desert, J.-M., Line, M. R., Bean, J. L., Parmentier, V., Stevenson, K. B., Kreidberg, L., Fortney, J. J., Mansfield, M. et Showman, A. P. (2018). « H- Opacity and Water Dissociation in the Dayside Atmosphere of the Very Hot Gas Giant WASP-18 b ». en. *The Astrophysical Journal* 855.2. arXiv : 1801.02489. ISSN : 2041-8213.
- Arcangeli, J., Desert, J.-M., Parmentier, V., Stevenson, K. B., Bean, J. L., Line, M. R., Kreidberg, L., Fortney, J. J. et Showman, A. P. (2019). « Climate of an Ultra hot Jupiter : Spectroscopic phase curve of WASP-18b with HST/WFC3 ». en. *Astronomy & Astrophysics* 625. arXiv : 1904.02069. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Argyriou, I. (2021). « Calibration of the MIRI instrument on board the James Webb Space Telescope ». en.
- Argyriou, I., Glasse, A., Law, D. R., Labiano, A., Álvarez-Márquez, J., Patapis, P., Kavanagh, P. J., Gasman, D., Mueller, M., Larson, K., Vandenbussche, B., Glauser, A. M., Royer, P., Dicken, D., Harkett, J., Sargent, B. A., Engesser, M., Jones, O. C., Kendrew, S., Noriega-Crespo, A., Brandl, B., Rieke, G. H., Wright, G. S., Lee, D. et Wells, M. (2023). *JWST MIRI flight performance : The Medium-Resolution Spectrometer*. arXiv :2303.13469 [astro-ph].
- Argyriou, I., Lage, C., Rieke, G. H., Gasman, D., Bouwman, J., Morrison, J., Libralato, M., Dicken, D., Brandl, B. R., Álvarez-Márquez, J., Labiano, A., Regan, M. et Ressler, M. E. (2023). *The Brighter-Fatter Effect in the JWST MIRI Si:As IBC detectors I. Observations, impact on science, and modelling*. en. arXiv :2303.13517 [astro-ph].
- Astudillo-Defru, N., Cloutier, R., Wang, S. X., Teske, J., Brahm, R., Hellier, C., Ricker, G., Vanderspek, R., Latham, D., Seager, S., Winn, J. N., Jenkins, J. M., Collins, K. A., Stassun, K. G., Ziegler, C., Almenara, J. M., Anderson, D. R., Artigau, E., Bonfils, X., Bouchy, F., Briceño, C., Butler, R. P., Charbonneau, D., Conti, D. M., Crane, J., Crossfield, I. J. M., Davies, M., Delfosse, X., Díaz, R. F., Doyon, R., Dragomir, D., Eastman, J. D., Espinoza, N., Essack, Z., Feng, F., Figueira, P., Forveille, T., Gan, T., Glidden, A., Guerrero, N., Hart, R., Henning, T., Horch, E. P., Isopi, G., Jenkins, J. S., Jordán, A., Kielkopf, J. F., Law, N., Lovis, C., Mallia, F., Mann, A. W., Medeiros, J. R. de Melo, C., Mennickent, R. E., Mignon, L., Murgas, F., Nusdeo, D. A., Pepe, F., Relles, H. M., Rose, M., Santos, N. C., Ségransan, D., Shectman, S., Shporer, A., Smith, J. C., Torres, P., Udry, S., Villanor,

RÉFÉRENCES

- J., Winters, J. G. et Zhou, G. (2020). « A hot terrestrial planet orbiting the bright M dwarf L 168-9 unveiled by TESS ». en. *Astronomy & Astrophysics* 636. arXiv :2001.09175 [astro-ph]. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Auclair-Desrotour, P., Laskar, J. et Mathis, S. (2017). « Atmospheric tides in Earth-like planets ». *Astronomy & Astrophysics* 603. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Babcock, H. W. (1961). « The Topology of the Sun's Magnetic Field and the 22-YEAR Cycle. » en. *The Astrophysical Journal* 133. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Bailer-Jones, C. A. L., Rybizki, J., Fouesneau, M., Mantelet, G. et Andrae, R. (2018). « Estimating Distance from Parallaxes. IV. Distances to 1.33 Billion Stars in Gaia Data Release 2 ». *AJ* 156.2, 58.
- Ballard, S., Charbonneau, D., Deming, D., Knutson, H. A., Christiansen, J. L., Holman, M. J., Fabrycky, D., Seager, S. et A'Hearn, M. F. (2010). « A Search for a Sub-Earth-Sized Companion to GJ 436 and a Novel Method to Calibrate Warm *Spitzer* IRAC Observations ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 122.897. ISSN : 0004-6280, 1538-3873.
- Baraffe, I., Chabrier, G., Allard, F. et Hauschildt, P. H. (1998). « Evolutionary models for solar metallicity low-mass stars : mass-magnitude relationships and color-magnitude diagrams ». *Astron. Astrophys.* 337.
- Baraffe, I., Chabrier, G. et Barman, T. (2010). « The physical properties of extra-solar planets ». *Reports on Progress in Physics* 73.1, 016901.
- Barstow, J. K., Aigrain, S., Irwin, P. G. J. et Sing, D. K. (2016). « A CONSISTENT RETRIEVAL ANALYSIS OF 10 HOT JUPITERS OBSERVED IN TRANSMISSION ». en. *The Astrophysical Journal* 834.1. ISSN : 1538-4357.
- Barstow, J. K., Changeat, Q., Garland, R., Line, M. R., Rocchetto, M. et Waldmann, I. P. (2020). « A comparison of exoplanet spectroscopic retrieval tools ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 493.4. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Batalha, N. E., Lewis, N. K., Line, M. R., Valenti, J. et Stevenson, K. (2018). « Strategies for Constraining the Atmospheres of Temperate Terrestrial Planets with *JWST* ». en. *The Astrophysical Journal* 856.2. ISSN : 2041-8213.
- Batalha, N. E., Mandell, A., Pontoppidan, K., Stevenson, K. B., Lewis, N. K., Kalirai, J., Earl, N., Greene, T., Albert, L. et Nielsen, L. D. (2017). « PandExo : A Community Tool for Transiting Exoplanet Science with *JWST* & *HST* ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 129.976. ISSN : 0004-6280, 1538-3873.
- Batygin, K., Stevenson, D. J. et Bodenheimer, P. H. (2011). « Evolution of Ohmically Heated Hot Jupiters ». *ApJ* 738.1, 1.
- Bayes (1763). « LII. An essay towards solving a problem in the doctrine of chances. By the late Rev. Mr. Bayes, F. R. S. communicated by Mr. Price, in a letter to John Canton, A. M. F. R. S ». la. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* 53. ISSN : 0261-0523, 2053-9223.
- Bean, J. L., Désert, J.-M., Kabath, P., Stalder, B., Seager, S., Miller-Ricci Kempton, E., Berta, Z. K., Homeier, D., Walsh, S. et Seifahrt, A. (2011). « THE OPTICAL AND NEAR-INFRARED TRANSMISSION SPECTRUM OF THE SUPER-EARTH GJ 1214b : FURTHER EVIDENCE FOR A METAL-RICH ATMOSPHERE ». *The Astrophysical Journal* 743.1. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Bean, J. L., Kempton, E. M.-R. et Homeier, D. (2010). « A ground-based transmission spectrum of the super-Earth exoplanet GJ 1214b ». en. *Nature* 468.7324. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.

- Bean, J. L., Raymond, S. N. et Owen, J. E. (2021). « The Nature and Origins of Sub-Neptune Size Planets ». en. *Journal of Geophysical Research : Planets* 126.1. ISSN : 2169-9097, 2169-9100.
- Bean, J. L., Stevenson, K. B. et al. (2018). « The Transiting Exoplanet Community Early Release Science Program for JWST ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 130.993. arXiv :1803.04985 [astro-ph]. ISSN : 0004-6280, 1538-3873.
- Beichman, C., Benneke, B., Knutson, H., Smith, R., Lagage, P.-O., Dressing, C., Latham, D., Lunine, J., Birkmann, S., Ferruit, P., Giardino, G., Kempton, E., Carey, S., Krick, J., Deroo, P. D., Mandell, A., Ressler, M. E., Shporer, A., Swain, M., Vasisht, G., Ricker, G., Bouwman, J., Crossfield, I., Greene, T., Howell, S., Christiansen, J., Ciardi, D., Clampin, M., Greenhouse, M., Sozzetti, A., Goudfrooij, P., Hines, D., Keyes, T., Lee, J., McCullough, P., Robberto, M., Stansberry, J., Valenti, J., Rieke, M., Rieke, G., Fortney, J., Bean, J., Kreidberg, L., Ehrenreich, D., Deming, D., Albert, L., Doyon, R. et Sing, D. (2014). « Observations of Transiting Exoplanets with the James Webb Space Telescope (*JWST*) ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 126.946. ISSN : 00046280, 15383873.
- Beleznyay, M. et Kunimoto, M. (2022). « Exploring the Dependence of Hot Jupiter Occurrence Rates on Stellar Mass with TESS ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 516.1. arXiv :2207.12522 [astro-ph]. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Bell, C. P. M., Mamajek, E. E. et Naylor, T. (2015). « A self-consistent, absolute isochronal age scale for young moving groups in the solar neighbourhood ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 454.1. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Bell, T. J., Crouzet, N. et al., et (2023). « Nightside clouds and disequilibrium chemistry on the hot Jupiter WASP-43b ». en. *Nature*.
- Bell, T., Ahrer, E.-M., Brande, J., Carter, A., Feinstein, A., Caloca, G., Mansfield, M., Zieba, S., Piaulet, C., Benneke, B., Filippazzo, J., May, E., Roy, P.-A., Kreidberg, L. et Stevenson, K. (2022). « Eureka! : An End-to-End Pipeline for JWST Time-Series Observations ». *The Journal of Open Source Software* 7.79, 4503.
- Bell, T. J., Kreidberg, L., Kendrew, S., Bean, J., Crouzet, N., Lagage, P.-O. et Moses, J. I. (2023). « A First Look at the JWST MIRI/LRS Phase Curve of WASP-43b ». en.
- Benneke, B. et Seager, S. (2013). « How to Distinguish between Cloudy Mini-Neptunes and Water/Volatile-Dominated Super-Earths ». en. *ApJ* 778.2. arXiv :1306.6325 [astro-ph]. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Benneke, B., Wong, I., Piaulet, C., Knutson, H. A., Lothringer, J., Morley, C. V., Crossfield, I. J. M., Gao, P., Greene, T. P., Dressing, C., Dragomir, D., Howard, A. W., McCullough, P. R., Kempton, E. M. .-. , Fortney, J. J. et Fraine, J. (2019). « Water Vapor and Clouds on the Habitable-Zone Sub-Neptune Exoplanet K2-18b ». Publisher : arXiv Version Number : 2.
- Benomar, O., Takata, M., Shibahashi, H., Ceillier, T. et García, R. A. (2015). « Nearly uniform internal rotation of solar-like main-sequence stars revealed by space-based asteroseismology and spectroscopic measurements ». *MNRAS* 452.3.
- Benzvi, D. et Shafir, A. (2018). « An ICA Algorithm for Separation of Convolutional Mixture of Periodic Signals ». en. *2018 IEEE International Conference on the Science of Electrical Engineering in Israel (ICSEE)*. Eilat, Israel : IEEE. ISBN : 978-1-5386-6378-3.
- Berta, Z. K., Charbonneau, D., Désert, J.-M., Miller-Ricci Kempton, E., McCullough, P. R., Burke, C. J., Fortney, J. J., Irwin, J., Nutzman, P. et Homeier, D. (2012). « THE FLAT TRANSMISSION SPECTRUM OF THE

- SUPER-EARTH GJ1214b FROM WIDE FIELD CAMERA 3 ON THE *HUBBLE SPACE TELESCOPE* ». *The Astrophysical Journal* 747.1. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Betancourt, M. J. et Girolami, M. (2013). *Hamiltonian Monte Carlo for Hierarchical Models*. en. arXiv :1312.0906 [stat].
- Birkby, J. L., De Kok, R. J., Brogi, M., De Mooij, E. J. W., Schwarz, H., Albrecht, S. et Snellen, I. A. G. (2013). « Detection of water absorption in the day side atmosphere of HD 189733 b using ground-based high-resolution spectroscopy at 3.2 μm ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society : Letters* 436.1. ISSN : 1745-3933, 1745-3925.
- Blackledge, B. W., Green, J. A. M., Barnes, R. et Way, M. J. (2020). « Tides on Other Earths : Implications for Exoplanet and Palaeo-Tidal Simulations ». en. *Geophysical Research Letters* 47.12. ISSN : 0094-8276, 1944-8007.
- Boccaletti, A., Cossou, C., Baudoz, P., Lagage, P. O., Dicken, D., Glasse, A., Hines, D. C., Aguilar, J., Detre, O., Nickson, B., Noriega-Crespo, A., Gáspár, A., Labiano, A., Stark, C., Rouan, D., Reess, J. M., Wright, G. S., Rieke, G. et Marin, M. G. (2022). « JWST/MIRI coronagraphic performances as measured on-sky ». *Astronomy & Astrophysics* 667. arXiv :2207.11080 [astro-ph]. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Boccaletti, A., Sezestre, E., Lagrange, A.-M., Thébault, P., Gratton, R., Langlois, M., Thalmann, C., Janson, M., Delorme, P., Augereau, J.-C., Schneider, G., Milli, J., Grady, C., Debes, J., Kral, Q., Olofsson, J., Carson, J., Maire, A. L., Henning, T., Wisniewski, J., Schlieder, J., Dominik, C., Desidera, S., Ginski, C., Hines, D., Ménard, F., Mouillet, D., Pawellek, N., Vigan, A., Lagadec, E., Avenhaus, H., Beuzit, J.-L., Biller, B., Bonavita, M., Bonnefoy, M., Brandner, W., Cantalloube, F., Chauvin, G., Cheetham, A., Cudel, M., Gry, C., Daemgen, S., Feldt, M., Galicher, R., Girard, J., Hagelberg, J., Janin-Potiron, P., Kasper, M., Le Coroller, H., Mesa, D., Peretti, S., Perrot, C., Samland, M., Sissa, E., Wildi, F., Zurlo, A., Rochat, S., Stadler, E., Gluck, L., Origné, A., Llored, M., Baudoz, P., Rousset, G., Martinez, P. et Rigal, F. (2018). « Observations of fast-moving features in the debris disk of AU Mic on a three-year timescale : Confirmation and new discoveries ». *Astronomy & Astrophysics* 614. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Bolmont, E., Breton, S. N., Tobie, G., Dumoulin, C., Mathis, S. et Grasset, O. (2020). « Solid tidal friction in multi-layer planets : Application to Earth, Venus, a Super Earth and the TRAPPIST-1 planets : Potential approximation of a multi-layer planet as a homogeneous body ». *Astronomy & Astrophysics* 644. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Bonomo, A. S., Desidera, S., Benatti, S., Borsa, F., Crespi, S., Damasso, M., Lanza, A. F., Sozzetti, A., Lodato, G., Marzari, F., Boccato, C., Claudi, R. U., Cosentino, R., Covino, E., Gratton, R., Maggio, A., Micela, G., Molinari, E., Pagano, I., Piotto, G., Poretti, E., Smareglia, R., Affer, L., Biazzo, K., Bignamini, A., Esposito, M., Giacobbe, P., Hébrard, G., Malavolta, L., Maldonado, J., Mancini, L., Fiorenzano, A. M., Masiero, S., Nascimbeni, V., Pedani, M., Rainer, M. et Scandariato, G. (2017). « The GAPS Programme with HARPS-N@TNG XIV. Investigating giant planet migration history via improved eccentricity and mass determination for 231 transiting planets ». en. *Astronomy & Astrophysics* 602. arXiv :1704.00373 [astro-ph]. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Borghi, R. (2021). « Solving Kepler's equation via nonlinear sequence transformations ». Publisher : arXiv Version Number : 1.
- Boss, A. P. (1997). « Giant Planet Formation by Gravitational Instability ». en. *Science* 276.5320. ISSN : 0036-8075, 1095-9203.
- Bouchet, P., Gastaud, R., Lagage, P.-O., Kendrew, S., Bombardi, O., Coulais, A., Ronayette, S., Sloan, G. C., Moreau, V., Orduna, T., Grégoire, E., Dyrek, A., Bouwman, J., Glasse, A. C. et Wright, G. S. (2022). « Charac-

- terization of the MIRIm double prism assembly at short wavelengths : implications for transit observations of exoplanets ». *Space Telescopes and Instrumentation 2022 : Optical, Infrared, and Millimeter Wave*. Sous la dir. de L. E. Coyle, M. D. Perrin et S. Matsuura. Montréal, Canada : SPIE. ISBN : 978-1-5106-5341-2 978-1-5106-5342-9.
- Bourque, M., Espinoza, N., Filippazzo, J., Fix, M., King, T., Martlin, C., Medina, J., Batalha, N., Fox, M., Fowler, J., Fraine, J., Hill, M., Lewis, N., Stevenson, K., Valenti, J. et Wakeford, H. (2021). « The Exoplanet Characterization Toolkit (ExoCTK) ». *Zenodo*. ADS Bibcode : 2021Zndo...4556063B.
- Bourrier, V., Wit, J. D., Bolmont, E., Stamenković, V., Wheatley, P. J., Burgasser, A. J., Delrez, L., Demory, B.-O., Ehrenreich, D., Gillon, M., Jehin, E., Leconte, J., Lederer, S. M., Lewis, N., Triaud, A. H. M. J. et Grootel, V. V. (2017). « Temporal Evolution of the High-energy Irradiation and Water Content of TRAPPIST-1 Exoplanets ». *The Astronomical Journal* 154.3. ISSN : 1538-3881.
- Bouwman, J., Kendrew, S., Greene, T. P., Bell, T. J., Lagage, P.-O., Schreiber, J., Dicken, D., Sloan, G. C., Espinoza, N., Scheithauer, S., Coulais, A., Fox, O. D., Gastaud, R., Glauser, A. M., Jones, O. C., Labiano, A., Lahuis, F., Morrison, J. E., Murray, K., Mueller, M., Nayak, O., Wright, G. S., Glasse, A. et Rieke, G. (2022). *Spectroscopic time series performance of the Mid-Infrared Instrument on the JWST*. en. arXiv :2211.16123 [astro-ph].
- Brandeker, A., Heng, K., Lendl, M., Patel, J. A., Morris, B. M., Broeg, C., Guterman, P., Beck, M., Maxted, P. F. L., Demangeon, O., Delrez, L., Demory, B.-O., Kitzmann, D., Santos, N. C., Singh, V., Alibert, Y., Alonso, R., Anglada, G., Bárczyk, T., Navascues, D. B. y., Barros, S. C. C., Baumjohann, W., Beck, T., Benz, W., Billot, N., Bonfils, X., Bruno, G., Cabrera, J., Charnoz, S., Cameron, A. C., Damme, C. C. van, Csizmadia, S., Davies, M. B., Deleuil, M., Deline, A., Ehrenreich, D., Erikson, A., Farinato, J., Fortier, A., Fossati, L., Fridlund, M., Gandolfi, D., Gillon, M., Güdel, M., Hoyer, S., Isaak, K. G., Kiss, L., Laskar, J., Etangs, A. L. d., Lovis, C., Luntzer, A., Magrin, D., Nascimbeni, V., Olofsson, G., Ottensamer, R., Pagano, I., Pallé, E., Peter, G., Piotto, G., Pollacco, D., Queloz, D., Ragazzoni, R., Rando, N., Rauer, H., Ribas, I., Scandariato, G., Ségransan, D., Simon, A. E., Smith, A. M. S., Sousa, S. G., Steller, M., Szabó, G. M., Thomas, N., Udry, S., Van Grootel, V., Walton, N. et Wolter, D. (2022). « CHEOPS geometric albedo of the hot Jupiter HD 209458b ». *Astronomy & Astrophysics* 659. arXiv :2202.11516 [astro-ph]. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Breton, S. N., Santos, A. R. G., Bugnet, L., Mathur, S., García, R. A. et Pallé, P. L. (2021). « ROOSTER : a machine-learning analysis tool for Kepler stellar rotation periods ». *A&A* 647, A125.
- Broggi, M., De Kok, R. J., Birkby, J. L., Schwarz, H. et Snellen, I. A. G. (2014). « Carbon monoxide and water vapor in the atmosphere of the non-transiting exoplanet HD 179949 b ». *Astronomy & Astrophysics* 565. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Brown, T. M. (2001). « Transmission Spectra as Diagnostics of Extrasolar Giant Planet Atmospheres ». en. *The Astrophysical Journal* 553.2. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Brown, T. M. et Charbonneau, D. (2000). *The STARE Project : A Transit Search for Hot Jupiters*. arXiv :astro-ph/0005009.
- Buchner, J. (2023). *Nested Sampling Methods*. en. arXiv :2101.09675 [astro-ph, stat].
- Burgasser, A. J. et Mamajek, E. E. (2017a). « On the Age of the TRAPPIST-1 System ». en. *The Astrophysical Journal* 845.2. arXiv :1706.02018 [astro-ph]. ISSN : 1538-4357.
- Burgasser, A. J. et Mamajek, E. E. (2017b). « On the Age of the TRAPPIST-1 System ». *Astrophys. J.* 845.2, 110.
- Burrows, A., Hubeny, I., Budaj, J. et Hubbard, W. B. (2007). « Possible Solutions to the Radius Anomalies of Transiting Giant Planets ». *ApJ* 661.1.

- Carter, J. A. et Winn, J. N. (2009). « Parameter Estimation from Time-Series Data with Correlated Errors : A Wavelet-Based Method and its Application to Transit Light Curves ». en. *The Astrophysical Journal* 704.1. arXiv : 0909.0747. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Casertano, S. (2022). « Determining the best-fitting slope and its uncertainty for up-the-ramp sampled images with unevenly distributed resultants ». en.
- Castella, M. et Pesquet, J.-C. (2004). « An Iterative Blind Source Separation Method for Convolutional Mixtures of Images ». en. *Independent Component Analysis and Blind Signal Separation*. Sous la dir. de C. G. Puntonet et A. Prieto. T. 3195. Series Title : Lecture Notes in Computer Science. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg. ISBN : 978-3-540-23056-4 978-3-540-30110-3.
- Chabrier, G., Johansen, A., Janson, M. et Rafikov, R. (2014). « Giant planet and brown dwarf formation ». en. arXiv :1401.7559 [astro-ph].
- Chabrier, G. et Baraffe, I. (2007). « Heat Transport in Giant (Exo)planets : A New Perspective ». *ApJ* 661.1.
- Chambers, J. E. (2009). « Planetary Migration : What Does It Mean for Planet Formation ? » en. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences* 37.1. ISSN : 0084-6597, 1545-4495.
- Changeat, Q., Edwards, B., Al-Refai, A. F., Tsiaras, A., Skinner, J. W., Cho, J. Y.-K., Yip, K. H., Anisman, L., Ikoma, M., Bieger, M. F., Venot, O., Shibata, S., Waldmann, I. P. et Tinetti, G. (2022). « Five key exoplanet questions answered via the analysis of 25 hot Jupiter atmospheres in eclipse ». en. *The Astrophysical Journal Supplement Series* 260.1. arXiv :2204.11729 [astro-ph]. ISSN : 0067-0049, 1538-4365.
- Changeat, Q., Edwards, B., Waldmann, I. et Tinetti, G. (2019). « Towards a more complex description of chemical profiles in exoplanets retrievals : A 2-layer parameterisation ». *The Astrophysical Journal* 886.1. arXiv :1903.11180 [astro-ph]. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Charbonneau, D., Allen, L. E., Megeath, S. T., Torres, G., Alonso, R., Brown, T. M., Gilliland, R. L., Latham, D. W., Mandushev, G., O'Donovan, F. T. et Sozzetti, A. (2005). « Detection of Thermal Emission from an Extrasolar Planet ». en. *The Astrophysical Journal* 626.1. arXiv :astro-ph/0503457. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Charbonneau, D., Berta, Z. K., Irwin, J., Burke, C. J., Nutzman, P., Buchhave, L. A., Lovis, C., Bonfils, X., Latham, D. W., Udry, S., Murray-Clay, R. A., Holman, M. J., Falco, E. E., Winn, J. N., Queloz, D., Pepe, F., Mayor, M., Delfosse, X. et Forveille, T. (2009). « A super-Earth transiting a nearby low-mass star ». en. *Nature* 462.7275. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- Charbonneau, D., Brown, T. M., Latham, D. W. et Mayor, M. (2000). « Detection of Planetary Transits Across a Sun-like Star ». en. *The Astrophysical Journal* 529.1. ISSN : 0004637X.
- Charbonneau, D., Brown, T. M., Noyes, R. W. et Gilliland, R. L. (2002). « Detection of an Extrasolar Planet Atmosphere ». en. *The Astrophysical Journal* 568.1. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Charnay, B. et Drossart, P. (2023). « Characterization and modelling of exoplanetary atmospheres ». en. *Comptes Rendus. Physique* 24.S2. ISSN : 1878-1535.
- Cho, J. Y.-K., Skinner, J. W. et Thrastarson, H. T. (2021). *Storms, Variability, and Multiple Equilibria on Hot Jupiters*. en. arXiv :2105.12759 [astro-ph].
- Claret, A. (2000). « A new non-linear limb-darkening law for LTE stellar atmosphere models ». en.

- Cloutier, R., Charbonneau, D., Deming, D., Bonfils, X. et Astudillo-Defru, N. (2021). « A More Precise Mass for GJ 1214 b and the Frequency of Multiplanet Systems Around Mid-M Dwarfs ». *The Astronomical Journal* 162.5. ISSN : 0004-6256, 1538-3881.
- Cooper, C. S. et Showman, A. P. (2006). « Dynamics and Disequilibrium Carbon Chemistry in Hot Jupiter Atmospheres, with Application to HD 209458b ». *ApJ* 649.2.
- Corsaro, E. et De Ridder, J. (2014). « DIAMONDS : A new Bayesian nested sampling tool. Application to peak bagging of solar-like oscillations ». *A&A* 571, A71.
- Cowan, N. B. et Agol, E. (2011a). « A Model for Thermal Phase Variations of Circular and Eccentric Exoplanets ». *Astrophys. J.* 726.2, 82.
- Cowan, N. B. et Agol, E. (2011b). « THE STATISTICS OF ALBEDO AND HEAT RECIRCULATION ON HOT EXOPLANETS ». en. *The Astrophysical Journal* 729.1. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Cowan, N. B. et Fujii, Y. (2018). « Mapping Exoplanets ». en. arXiv :1704.07832 [astro-ph].
- Croll, B., Albert, L., Jayawardhana, R., Kempton, E. M.-R., Fortney, J. J., Murray, N. et Neilson, H. (2011). « BROAD-BAND TRANSMISSION SPECTROSCOPY OF THE SUPER-EARTH GJ 1214b SUGGESTS A LOW MEAN MOLECULAR WEIGHT ATMOSPHERE ». *The Astrophysical Journal* 736.2. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Crossfield, I. J. M. (2015). « Observations of Exoplanet Atmospheres ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 127.956. arXiv :1507.03966 [astro-ph]. ISSN : 00046280, 15383873.
- Cruz, K. L., Reid, I. N., Liebert, J., Kirkpatrick, J. D. et Lowrance, P. J. (2003). « Meeting the Cool Neighbors. V. A 2MASS-Selected Sample of Ultracool Dwarfs ». en. *The Astronomical Journal* 126.5. ISSN : 0004-6256, 1538-3881.
- Damiani, C. et Mathis, S. (2018). « Influence of stellar structure, evolution and rotation on the tidal damping of exoplanetary spin-orbit angles ». en. *Astronomy & Astrophysics* 618. arXiv :1803.09661 [astro-ph]. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- De Wit, J., Gillon, M., Demory, B.-O. et Seager, S. (2012). « Towards consistent mapping of distant worlds : secondary-eclipse scanning of the exoplanet HD 189733b ». en. *Astronomy & Astrophysics* 548. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- De Wit, J., Wakeford, H. R., Lewis, N. K., Delrez, L., Gillon, M., Selsis, F., Leconte, J., Demory, B.-O., Bolmont, E., Bourrier, V., Burgasser, A. J., Grimm, S., Jehin, E., Lederer, S. M., Owen, J. E., Stamenković, V. et Triard, A. H. M. J. (2018). « Atmospheric reconnaissance of the habitable-zone Earth-sized planets orbiting TRAPPIST-1 ». *Nature Astronomy* 2.
- Deming, D., Harrington, J., Laughlin, G., Seager, S., Navarro, S. B., Bowman, W. C. et Horning, K. (2007). « Spitzer Transit and Secondary Eclipse Photometry of GJ 436b ». en. *The Astrophysical Journal* 667.2. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Deming, D., Louie, D. et Sheets, H. (2019). « How to Characterize the Atmosphere of a Transiting Exoplanet ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 131.995. arXiv :1810.04175 [astro-ph]. ISSN : 0004-6280, 1538-3873.
- Deming, D., Seager, S., Richardson, L. J. et Harrington, J. (2005). « Infrared radiation from an extrasolar planet ». en. *Nature* 434.7034. arXiv :astro-ph/0503554. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.

- Deming, D., Wilkins, A., McCullough, P., Burrows, A., Fortney, J. J., Agol, E., Dobbs-Dixon, I., Madhusudhan, N., Crouzet, N., Desert, J.-M., Gilliland, R. L., Haynes, K., Knutson, H. A., Line, M., Magic, Z., Mandell, A. M., Ranjan, S., Charbonneau, D., Clampin, M., Seager, S. et Showman, A. P. (2013). « INFRARED TRANSMISSION SPECTROSCOPY OF THE EXOPLANETS HD 209458b AND XO-1b USING THE WIDE FIELD CAMERA-3 ON THE *HUBBLE SPACE TELESCOPE* ». *The Astrophysical Journal* 774.2. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Deming, L. D. et Seager, S. (2017). « Illusion and reality in the atmospheres of exoplanets : Illusion and Reality for Exoplanets ». en. *Journal of Geophysical Research : Planets* 122.1. ISSN : 21699097.
- Demory, B.-O., De Wit, J., Lewis, N., Fortney, J., Zsom, A., Seager, S., Knutson, H., Heng, K., Madhusudhan, N., Gillon, M., Barclay, T., Desert, J.-M., Parmentier, V. et Cowan, N. B. (2013). « INFERENCE OF INHOMOGENEOUS CLOUDS IN AN EXOPLANET ATMOSPHERE ». en. *The Astrophysical Journal* 776.2. ISSN : 2041-8205, 2041-8213.
- Demory, B.-O., Gillon, M., De Wit, J., Madhusudhan, N., Bolmont, E., Heng, K., Kataria, T., Lewis, N., Hu, R., Krick, J., Stamenković, V., Benneke, B., Kane, S. et Queloz, D. (2016). « A map of the large day-night temperature gradient of a super-Earth exoplanet ». en. *Nature* 532.7598. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- Désert, J.-M., Kempton, E. M.-R., Berta, Z. K., Charbonneau, D., Irwin, J., Fortney, J., Burke, C. J. et Nutzman, P. (2011). « OBSERVATIONAL EVIDENCE FOR A METAL-RICH ATMOSPHERE ON THE SUPER-EARTH GJ1214b ». *The Astrophysical Journal* 731.2. ISSN : 2041-8205, 2041-8213.
- Désert, J.-M., Lecavelier Des Etangs, A., Hébrard, G., Sing, D. K., Ehrenreich, D., Ferlet, R. et Vidal-Madjar, A. (2009). « SEARCH FOR CARBON MONOXIDE IN THE ATMOSPHERE OF THE TRANSITING EXOPLANET HD 189733b ». *The Astrophysical Journal* 699.1. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Doressoundiram, A. et Lellouch, E. (2008). *Aux confins du système solaire*. fre. Bibliothèque scientifique. Paris : Belin-"Pour la science". ISBN : 978-2-7011-4607-2.
- Dorn, C., Khan, A., Heng, K., Connolly, J. A. D., Alibert, Y., Benz, W. et Tackley, P. (2015). « Can we constrain the interior structure of rocky exoplanets from mass and radius measurements? » *Astronomy & Astrophysics* 577. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Dragomir, D., Benneke, B., Pearson, K. A., Crossfield, I. J. M., Eastman, J., Barman, T. et Biddle, L. I. (2015). *Rayleigh Scattering in the Atmosphere of the Warm Exo-Neptune GJ 3470b*. en. arXiv :1511.05601 [astro-ph].
- Driscoll, P. et Barnes, R. (2015). « Tidal Heating of Earth-like Exoplanets around M Stars : Thermal, Magnetic, and Orbital Evolutions ». en. *Astrobiology* 15.9. ISSN : 1531-1074, 1557-8070.
- Drummond, B., Mayne, N. J., Baraffe, I., Tremblin, P., Manners, J., Amundsen, D. S., Goyal, J. et Acreman, D. (2018). « The effect of metallicity on the atmospheres of exoplanets with fully coupled 3D hydrodynamics, equilibrium chemistry, and radiative transfer ». *Astronomy & Astrophysics* 612. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Drummond, B., Hébrard, E., Mayne, N. J., Venot, O., Ridgway, R. J., Changeat, Q., Tsai, S.-M., Manners, J., Tremblin, P., Abraham, N. L., Sing, D. et Kohary, K. (2020). « Implications of three-dimensional chemical transport in hot Jupiter atmospheres : Results from a consistently coupled chemistry-radiation-hydrodynamics model ». *A&A* 636, A68.
- Ducrot, E., Gillon, M., Delrez, L., Agol, E., Rimmer, P., Turbet, M., Günther, M. N., Demory, B.-O., Triaud, A. H. M. J., Bolmont, E., Burgasser, A., Carey, S. J., Ingalls, J. G., Jehin, E., Leconte, J., Lederer, S. M., Queloz,

- D., Raymond, S. N., Selsis, F., Van Grootel, V. et Wit, J. de (2020). « TRAPPIST-1 : Global results of the *Spitzer* Exploration Science Program Red Worlds ». en. *Astronomy & Astrophysics* 640. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Durrer, R. (2020). *The cosmic microwave background*. Second edition. New York : Cambridge University Press. ISBN : 978-1-316-47152-4.
- Dyrek, A., Ducrot, E., Lagage, P.-O., Tremblin, P., Kendrew, S., Bouwman, J. et Bouffet, R. (2023). « Transiting exoplanets with JWST MIRI : from simulations to observations ». *Astronomy & Astrophysics*.
- Dyrek, A., Min, M., Decin, L., Bouwman, J., Crouzet, N., Molliere, P., Lagage, P.-O., Konings, T., Tremblin, P., Güdel, M., Pye, J., Waters, L. B. F. M., Henning, T., Vandenbussche, B., Martinez, F. A., Argyriou, I., Ducrot, E., Heinke, L., Looveren, G. V., Absil, O., Barrado, D., Baudoz, P., Boccaletti, A., Cossou, C., Coulais, A., Edwards, B., Gastaud, R., Glasse, A., Glauser, A., Greene, T., Kendrew, S., Krause, O., Lahuis, F., Mueller, M., Olofsson, G., Patapis, P., Rouan, D., Royer, P., Scheithauer, S., Waldmann, I., Whiteford, N., Colina, L., Dishoeck, E. V., Östlin, G., Ray, T. et Wright, G. (2023). *SO₂, silicate clouds, but no CH₄ detected in a warm Neptune with JWST MIRI*. preprint. In Review.
- Eastman, J., Gaudi, B. S. et Agol, E. (2013). « EXOFAST : A fast exoplanetary fitting suite in IDL ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 125.923. arXiv :1206.5798 [astro-ph]. ISSN : 00046280, 15383873.
- Edwards, B., Changeat, Q., Tsirias, A., Yip, K. H., Al-Refaei, A. F., Anisman, L., Bieger, M. F., Gressier, A., Shibata, S., Skaf, N., Bouwman, J., Cho, J. Y.-K., Ikoma, M., Venot, O., Waldmann, I., Lagage, P.-O. et Tinetti, G. (2022). *Exploring the Ability of HST WFC3 G141 to Uncover Trends in Populations of Exoplanet Atmospheres Through a Homogeneous Transmission Survey of 70 Gaseous Planets*. arXiv :2211.00649 [astro-ph].
- Edwards, B., Mugnai, L., Tinetti, G., Pascale, E. et Sarkar, S. (2019). « An Updated Study of Potential Targets for Ariel ». *The Astronomical Journal* 157.6. ISSN : 0004-6256, 1538-3881.
- Ehrenreich, D., Bourrier, V., Wheatley, P. J., Des Etangs, A. L., Hébrard, G., Udry, S., Bonfils, X., Delfosse, X., Désert, J.-M., Sing, D. K. et Vidal-Madjar, A. (2015). « A giant comet-like cloud of hydrogen escaping the warm Neptune-mass exoplanet GJ 436b ». en. *Nature* 522.7557. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- Encrenaz, T. (2014). « Infrared spectroscopy of exoplanets : observational constraints ». en. *Philosophical Transactions of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 372.2014. ISSN : 1364-503X, 1471-2962.
- Espinoza, N. et Jones, K. (2021). « Constraining mornings & evenings on distant worlds : a new semi-analytical approach and prospects with transmission spectroscopy ». en. *The Astronomical Journal* 162.4. arXiv :2106.15687 [astro-ph]. ISSN : 0004-6256, 1538-3881.
- Estrela, R., Swain, M. R. et Roudier, G. M. (2022). « A Temperature Trend for Clouds and Hazes in Exoplanet Atmospheres ». *ApJ* 941.1, L5.
- Evans, T. M., Pont, F., Sing, D. K., Aigrain, S., Barstow, J. K., Désert, J.-M., Gibson, N., Heng, K., Knutson, H. A. et Etangs, A. L. d. (2013). « The Deep Blue Color of HD189733b : Albedo Measurements with Hubble Space Telescope/Space Telescope Imaging Spectrograph at Visible Wavelengths ». en. *The Astrophysical Journal* 772.2. arXiv :1307.3239 [astro-ph]. ISSN : 2041-8205, 2041-8213.
- Evans, T. M., Sing, D. K., Kataria, T., Goyal, J., Nikolov, N., Wakeford, H. R., Deming, D., Marley, M. S., Amundsen, D. S., Ballester, G. E., Barstow, J. K., Ben-Jaffel, L., Bourrier, V., Buchhave, L. A., Cohen, O., Ehrenreich, D., García Muñoz, A., Henry, G. W., Knutson, H., Lavvas, P., Etangs, A. L. D., Lewis, N. K., López-Morales,

- M., Mandell, A. M., Sanz-Forcada, J., Tremblin, P. et Lupu, R. (2017). « An ultrahot gas-giant exoplanet with a stratosphere ». en. *Nature* 548.7665. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- Evans, T. M., Sing, D. K., Wakeford, H. R., Nikolov, N., Ballester, G. E., Drummond, B., Kataria, T., Gibson, N. P., Amundsen, D. S. et Spake, J. (2016). « DETECTION OF H₂O AND EVIDENCE FOR TiO/VO IN AN ULTRA-HOT EXOPLANET ATMOSPHERE ». *The Astrophysical Journal* 822.1. ISSN : 2041-8213.
- Faedi, F., Barros, S. C. C., Anderson, D. R., Brown, D. J. A., Collier Cameron, A., Pollacco, D., Boisse, I., Hébrard, G., Lendl, M., Lister, T. A., Smalley, B., Street, R. A., TriAUD, A. H. M. J., Bento, J., Bouchy, F., Butters, O. W., Enoch, B., Haswell, C. A., Hellier, C., Keenan, F. P., Miller, G. R. M., Moulds, V., Moutou, C., Norton, A. J., Queloz, D., Santerne, A., Simpson, E. K., Skillen, I., Smith, A. M. S., Udry, S., Watson, C. A., West, R. G. et Wheatley, P. J. (2011). « WASP-39b : a highly inflated Saturn-mass planet orbiting a late G-type star ». *Astronomy & Astrophysics* 531. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Fixsen, D., Offenberg, J., Hanisch, R., Mather, J., Nieto-Santisteban, M., Sengupta, R. et Stockman, H. (2000). « Cosmic-Ray Rejection and Readout Efficiency for Large-Area Arrays ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 112.776. ISSN : 0004-6280, 1538-3873.
- Fleury, B., Gudipati, M. S., Henderson, B. L. et Swain, M. (2019). « Photochemistry in Hot H₂-dominated Exoplanet Atmospheres ». *The Astrophysical Journal* 871.2. ISSN : 1538-4357.
- Foreman-Mackey, D., Hogg, D. W., Lang, D. et Goodman, J. (2013). « emcee : The MCMC Hammer ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 125.925. arXiv :1202.3665 [astro-ph, physics :physics, stat]. ISSN : 00046280, 15383873.
- Foreman-Mackey, D., Luger, R., Agol, E., Barclay, T., Bouma, L. G., Brandt, T. D., Czekala, I., David, T. J., Dong, J., Gilbert, E. A., Gordon, T. A., Hedges, C., Hey, D. R., Morris, B. M., Price-Whelan, A. M. et Savel, A. B. (2021). « exoplanet : Gradient-based probabilistic inference for exoplanet data & other astronomical time series ». en. *Journal of Open Source Software* 6.62. arXiv :2105.01994 [astro-ph]. ISSN : 2475-9066.
- Fortney, J. J. (2018). *Modeling Exoplanetary Atmospheres : An Overview*. arXiv :1804.08149 [astro-ph].
- Fortney, J. J., Barstow, J. K. et Madhusudhan, N. (2021). *Atmospheric Modelling and Retrieval*. en. arXiv :2109.01976 [astro-ph].
- Fortney, J. J., Dawson, R. I. et Komacek, T. D. (2021). « Hot Jupiters : Origins, Structure, Atmospheres ». en. *Journal of Geophysical Research : Planets* 126.3. ISSN : 2169-9097, 2169-9100.
- Fortney, J. J., Lodders, K., Marley, M. S. et Freedman, R. S. (2008). « A Unified Theory for the Atmospheres of the Hot and Very Hot Jupiters : Two Classes of Irradiated Atmospheres ». *The Astrophysical Journal* 678.2. arXiv :0710.2558 [astro-ph]. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Fortney, J. J., Mordasini, C., Nettelmann, N., Kempton, E. M.-R., Greene, T. P. et Zahnle, K. (2013). « A FRAMEWORK FOR CHARACTERIZING THE ATMOSPHERES OF LOW-MASS LOW-DENSITY TRANSITING PLANETS ». en. *The Astrophysical Journal* 775.1. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Foster, G., Poppenhaeger, K., Ilic, N. et Schwöpe, A. (2022). « Exoplanet X-ray irradiation and evaporation rates with eROSITA ». *A&A* 661. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Fraine, J. D., Deming, D., Gillon, M., Jehin, E., Demory, B.-O., Benneke, B., Seager, S., Lewis, N. K., Knutson, H. et Désert, J.-M. (2013). « SPITZER TRANSITS OF THE SUPER-EARTH GJ1214b AND IMPLICATIONS FOR ITS ATMOSPHERE ». *The Astrophysical Journal* 765.2. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.

- Fulton, B. J., Petigura, E. A., Howard, A. W., Isaacson, H., Marcy, G. W., Cargile, P. A., Hebb, L., Weiss, L. M., Johnson, J. A., Morton, T. D., Sinukoff, E., Crossfield, I. J. M. et Hirsch, L. A. (2017). « The California- *Kepler* Survey. III. A Gap in the Radius Distribution of Small Planets ». *The Astronomical Journal* 154.3. ISSN : 1538-3881.
- Gaia Collaboration (2018). « VizieR Online Data Catalog : Gaia DR2 (Gaia Collaboration, 2018) ». *VizieR Online Data Catalog*. ADS Bibcode : 2018yCat.1345....oG.
- Garcia, R. A. et Ballot, J. (2019). « Asteroseismology of solar-type stars ». en. *Living Reviews in Solar Physics* 16.1. arXiv :1906.12262 [astro-ph]. ISSN : 2367-3648, 1614-4961.
- García, R. A., Hekker, S., Stello, D., Gutiérrez-Soto, J., Handberg, R., Huber, D., Karoff, C., Uytterhoeven, K., Appourchaux, T., Chaplin, W. J., Elsworth, Y., Mathur, S., Ballot, J., Christensen-Dalsgaard, J., Gilliland, R. L., Houdek, G., Jenkins, J. M., Kjeldsen, H., McCauliff, S., Metcalfe, T., Middour, C. K., Molenda-Zakowicz, J., Monteiro, M. J. P. F. G., Smith, J. C. et Thompson, M. J. (2011). « Preparation of Kepler light curves for asteroseismic analyses ». *MNRAS* 414.1.
- García, R. A., Mathur, S., Pires, S., Régulo, C., Bellamy, B., Pallé, P. L., Ballot, J., Barceló Forteza, S., Beck, P. G. et Bedding, T. R. (2014). « Impact on asteroseismic analyses of regular gaps in Kepler data ». *A&A* 568, A10.
- Gáspár, A., Rieke, G. H., Guillard, P., Dicken, D., Gastaud, R., Alberts, S., Morrison, J., Ressler, M. E., Argyriou, I. et Glasse, A. (2021). « The Quantum Efficiency and Diffractive Image Artifacts of Si :As IBC mid-IR Detector Arrays at 5–10 μm : Implications for the JWST/MIRI Detectors ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 133.1019. ISSN : 0004-6280, 1538-3873.
- Gaulme, P., Vannier, M., Guillot, T., Mosser, B., Mary, D., Weiss, W. W., Schmider, F.-X., Bourguignon, S., Deeg, H. J., Régulo, C., Aigrain, S., Schneider, J., Bruntt, H., Deheuvels, S., Donati, J.-F., Appourchaux, T., Auvergne, M., Baglin, A., Baudin, F., Catala, C., Michel, E. et Samadi, R. (2010). « Possible detection of phase changes from the non-transiting planet HD 46375b by CoRoT ». *Astronomy and Astrophysics* 518. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Gazak, J. Z., Johnson, J. A., Tonry, J., Eastman, J., Mann, A. W. et Agol, E. (2012). « Transit Analysis Package (TAP and autoKep) : IDL Graphical User Interfaces for Extrasolar Planet Transit Photometry ». en. *Advances in Astronomy* 2012. arXiv :1102.1036 [astro-ph]. ISSN : 1687-7969, 1687-7977.
- Gelman A., D. P. R. (1992). « Inference from Iterative Simulation Using Multiple Sequences ». en. *Statistical Science* 7.4.
- Gennaro, D. R. et Geoff, G. Z. Z. (2010). « A postprocessing method for spatially variant point spread function compensation ».
- Geyer, C. J. et Thompson, E. A. (1995). « Annealing Markov Chain Monte Carlo with Applications to Ancestral Inference ». en. *Journal of the American Statistical Association* 90.431. ISSN : 0162-1459, 1537-274X.
- Gillon, M., Deming, D., Demory, B.-O., Lovis, C., Seager, S., Mayor, M., Pepe, F., Queloz, D., Segransan, D., Udry, S., Delmelle, S. et Magain, P. (2010). « The *Spitzer* search for the transits of HARPS low-mass planets : I. No transit for the super-Earth HD 40307b ». en. *Astronomy and Astrophysics* 518. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Gillon, M., Demory, B.-O., Madhusudhan, N., Deming, D., Seager, S., Zsom, A., Knutson, H. A., Lanotte, A. A., Bonfils, X., Désert, J.-M., Delrez, L., Jehin, E., Fraine, J. D., Magain, P. et Triaud, A. H. M. J. (2014). « Search for a habitable terrestrial planet transiting the nearby red dwarf GJ 1214 ». en. *Astronomy & Astrophysics* 563. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.

- Gillon, M., Triaud, A. H. M. J., Fortney, J. J., Demory, B.-O., Jehin, E., Lendl, M., Magain, P., Kabath, P., Queloz, D., Alonso, R., Anderson, D. R., Collier Cameron, A., Fumel, A., Hebb, L., Hellier, C., Lanotte, A., Maxted, P. F. L., Mowlavi, N. et Smalley, B. (2012). « The TRAPPIST survey of southern transiting planets : I. Thirty eclipses of the ultra-short period planet WASP-43 b ». en. *Astronomy & Astrophysics* 542. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Gillon, M., Triaud, A. H. M. J., Demory, B.-O., Jehin, E., Agol, E., Deck, K. M., Lederer, S. M., De Wit, J., Burdakov, A., Ingalls, J. G., Bolmont, E., Leconte, J., Raymond, S. N., Selsis, F., Turbet, M., Barkaoui, K., Burgasser, A., Burleigh, M. R., Carey, S. J., Chaushev, A., Copperwheat, C. M., Delrez, L., Fernandes, C. S., Holdsworth, D. L., Kotze, E. J., Van Grootel, V., Almléaky, Y., Benkhaldoun, Z., Magain, P. et Queloz, D. (2017). « Seven temperate terrestrial planets around the nearby ultracool dwarf star TRAPPIST-1 ». en. *Nature* 542.7642. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- Giménez, A. (2006). « Equations for the analysis of the light curves of extra-solar planetary transits ». en. *Astronomy & Astrophysics* 450.3. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Goodman, J. et Weare, J. (2010). « Ensemble samplers with affine invariance ». en. *Communications in Applied Mathematics and Computational Science* 5.1. ISSN : 2157-5452, 1559-3940.
- Gordon, K. D. (2022). « The James Webb Space Telescope Absolute Flux Calibration. I. Program Design and Calibrator Stars ». en. *The Astronomical Journal*.
- Gordon, T. A., Agol, E. et Foreman-Mackey, D. (2020). « A Fast, Two-dimensional Gaussian Process Method Based on Celerite : Applications to Transiting Exoplanet Discovery and Characterization ». *The Astronomical Journal* 160.5. ISSN : 1538-3881.
- Grayver, A., Bower, D. J., Saur, J., Dorn, C. et Morris, B. M. (2022). « Interior Heating of Rocky Exoplanets from Stellar Flares with Application to TRAPPIST-1 ». *Astrophys. J. Lett.* 941.1, L7.
- Green, P. J. (1995). « Reversible jump Markov chain Monte Carlo computation and Bayesian model determination ». en. *Biometrika* 82.4. ISSN : 0006-3444, 1464-3510.
- Greene, T. P., Bell, T. J., Ducrot, E., Dyrek, A., Lagage, P.-O. et Fortney, J. J. (2023). « Thermal emission from the Earth-sized exoplanet TRAPPIST-1 b using JWST ». en. *Nature* 618.7963. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- Greene, T. P., Line, M. R., Montero, C., Fortney, J. J., Lustig-Yeager, J. et Luther, K. (2016). « Characterizing transiting exoplanet atmospheres with JWST ». en. *The Astrophysical Journal* 817.1. arXiv :1511.05528 [astro-ph]. ISSN : 1538-4357.
- Guillot, T. (2010a). « On the radiative equilibrium of irradiated planetary atmospheres ». *A&A* 520, A27.
- Guillot, T. (2010b). « On the radiative equilibrium of irradiated planetary atmospheres ». en. *Astronomy and Astrophysics* 520. arXiv :1006.4702 [astro-ph]. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Guillot, T., Fletcher, L. N., Helled, R., Ikoma, M., Line, M. R. et Parmentier, V. (2022). *Giant Planets from the Inside-Out*. en. arXiv :2205.04100 [astro-ph].
- Gunell, H., Maggiolo, R., Nilsson, H., Stenberg Wieser, G., Slapak, R., Lindkvist, J., Hamrin, M. et De Keyser, J. (2018). « Why an intrinsic magnetic field does not protect a planet against atmospheric escape ». *Astronomy & Astrophysics* 614. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Gupta, S., Basak, A. et Nandy, D. (2023). « Impact of Changing Stellar and Planetary Magnetic Fields on (Exo)planetary Environments and Atmospheric Mass Loss ». Publisher : arXiv Version Number : 1.

- Hagan, J. B., Rieke, G., Fox, O. D., Noriega-Crespo, A., Hines, D. C., Cracraft, M. et García Marín, M. (2021). « Cosmic-ray-related Signals from Detectors in Space : The Spitzer/IRAC Si :As IBC Devices ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 133.1029. ISSN : 0004-6280, 1538-3873.
- Hall, O. J., Davies, G. R., van Saders, J., Nielsen, M. B., Lund, M. N., Chaplin, W. J., García, R. A., Amard, L., Breimann, A. A., Khan, S., See, V. et Tayar, J. (2021). « Weakened magnetic braking supported by asteroseismic rotation rates of Kepler dwarfs ». *Nature Astronomy* 5.
- Hammersley, J. M. et Handscomb, D. C. (1964). *Monte Carlo Methods*. en. Dordrecht : Springer Netherlands.
- Hartman, J. D., Bakos, G. Á., Torres, G., Kovács, G., Noyes, R. W., Pál, A., Latham, D. W., Sipőcz, B., Fischer, D. A., Johnson, J. A., Marcy, G. W., Butler, R. P., Howard, A. W., Esquerdo, G. A., Sasselov, D. D., Kovács, G., Stefanik, R. P., Fernandez, J. M., Lázár, J., Papp, I. et Sári, P. (2009). « HAT-P-12b : A LOW-DENSITY SUB-SATURN MASS PLANET TRANSITING A METAL-POOR K DWARF ». *The Astrophysical Journal* 706.1. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Hastings, W. K. (1970). « Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications ». en. *Biometrika* 57.1. ISSN : 1464-3510, 0006-3444.
- Hawker, G. A., Madhusudhan, N., Cabot, S. H. C. et Gandhi, S. (2018). « Evidence for Multiple Molecular Species in the Hot Jupiter HD 209458b ». *The Astrophysical Journal* 863.1. ISSN : 2041-8213.
- Haynes, K., Mandell, A. M., Madhusudhan, N., Deming, D. et Knutson, H. (2015). « SPECTROSCOPIC EVIDENCE FOR A TEMPERATURE INVERSION IN THE DAYSIDE ATMOSPHERE OF HOT JUPITER WASP-33b ». *The Astrophysical Journal* 806.2. ISSN : 1538-4357.
- Hejazi, N., Crossfield, I., Nordlander, T., Mansfield, M., Souto, D., Marfil, E., Coria, D., Brande, J., Polanski, A., Hand, J. et Wienke, K. (2023). « Elemental Abundances of the Super-Neptune WASP-107b's Host Star Using High-resolution, Near-infrared Spectroscopy ». *arXiv e-prints*, arXiv :2304.03808.
- Hellier, C., Anderson, D. R., Cameron, A. C., Gillon, M., Hebb, L., Maxted, P. F. L., Queloz, D., Smalley, B., Triaud, A. H. M. J., West, R. G., Wilson, D. M., Bentley, S. J., Enoch, B., Horne, K., Irwin, J., Lister, T. A., Mayor, M., Parley, N., Pepe, F., Pollacco, D. L., Segransan, D., Udry, S. et Wheatley, P. J. (2009). « An orbital period of 0.94 days for the hot-Jupiter planet WASP-18b ». en. *Nature* 460.7259. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- Hellier, C., Anderson, D. R., Cameron, A. C., Gillon, M., Jehin, E., Lendl, M., Maxted, P. F. L., Pepe, F., Pollacco, D., Queloz, D., Segransan, D., Smalley, B., Smith, A. M. S., Southworth, J., Triaud, A. H. M. J., Udry, S. et West, R. G. (2011). « WASP-43b : The closest-orbiting hot Jupiter ». *Astronomy & Astrophysics* 535. arXiv :1104.2823 [astro-ph]. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Helling, C., Lee, E., Dobbs-Dixon, I., Mayne, N., Amundsen, D. S., Khaimova, J., Unger, A. A., Manners, J., Acreman, D. et Smith, C. (2016). « The mineral clouds on HD 209458b and HD 189733b ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 460.1. ISSN : 1365-2966, 0035-8711.
- Heng, K. et Marley, M. (2018). « Radiative Transfer for Exoplanet Atmospheres ». en. arXiv :1706.03188 [astro-ph, physics :physics].
- Heng, K. et Showman, A. P. (2015). « Atmospheric Dynamics of Hot Exoplanets ». en. *Annual Review of Earth and Planetary Sciences* 43.1. arXiv :1407.4150 [astro-ph]. ISSN : 0084-6597, 1545-4495.
- Henning, T. et Semenov, D. (2013). *Chemistry in Protoplanetary Disks*. en. arXiv :1310.3151 [astro-ph].

RÉFÉRENCES

- Herbort, O., Woitke, P., Helling, C. et Zerkle, A. (2020). « The atmospheres of rocky exoplanets : I. Outgassing of common rock and the stability of liquid water ». en. *Astronomy & Astrophysics* 636. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Hergé et Hergé (1984). *L' étoile mystérieuse*. fre. Nachdr. Les aventures de Tintin / Hergé. Tournai : Casterman. ISBN : 978-2-203-00109-1.
- Herzberg, G. (1966). *Molecular spectra and molecular structure. Vol.3 : Electronic spectra and electronic structure of polyatomic molecules*. Van Nostrand Reinhold Company.
- Hoffman, M. D. et Gelman, A. (2011). « The No-U-Turn Sampler : Adaptively Setting Path Lengths in Hamiltonian Monte Carlo ». Publisher : arXiv Version Number : 1.
- Hora, J. L., Patten, B. M., Fazio, G. G. et Glaccum, W. J. (2006). « The effects of cosmic rays and solar flares on the IRAC detectors : the first two years of in-flight operation ». en. Sous la dir. de D. A. Dorn et A. D. Holland. Orlando, Florida, USA.
- Howard, A. W., Marcy, G. W., Bryson, S. T., Jenkins, J. M., Rowe, J. F., Batalha, N. M., Borucki, W. J., Koch, D. G., Dunham, E. W., Gautier, T. N., Van Cleve, J., Cochran, W. D., Latham, D. W., Lissauer, J. J., Torres, G., Brown, T. M., Gilliland, R. L., Buchhave, L. A., Caldwell, D. A., Christensen-Dalsgaard, J., Ciardi, D., Fressin, F., Haas, M. R., Howell, S. B., Kjeldsen, H., Seager, S., Rogers, L., Sasselov, D. D., Steffen, J. H., Basri, G. S., Charbonneau, D., Christiansen, J., Clarke, B., Dupree, A., Fabrycky, D. C., Fischer, D. A., Ford, E. B., Fortney, J. J., Tarter, J., Girouard, F. R., Holman, M. J., Johnson, J. A., Klaus, T. C., Machalek, P., Moorhead, A. V., Morehead, R. C., Ragozzine, D., Tenenbaum, P., Twicken, J. D., Quinn, S. N., Isaacson, H., Shporer, A., Lucas, P. W., Walkowicz, L. M., Welsh, W. F., Boss, A., Devore, E., Gould, A., Smith, J. C., Morris, R. L., Prsa, A., Morton, T. D., Still, M., Thompson, S. E., Mullally, F., Endl, M. et MacQueen, P. J. (2012). « PLANET OCCURRENCE WITHIN 0.25 AU OF SOLAR-TYPE STARS FROM KEPLER ». *The Astrophysical Journal Supplement Series* 201.2. ISSN : 0067-0049, 1538-4365.
- Howe, D. (1995). « An extension of the Allan variance with increased confidence at long term ». *Proceedings of the 1995 IEEE International Frequency Control Symposium (49th Annual Symposium)*. San Francisco, CA, USA : IEEE. ISBN : 978-0-7803-2500-5.
- Hu, R. et Seager, S. (2014). « PHOTOCHEMISTRY IN TERRESTRIAL EXOPLANET ATMOSPHERES. III. PHOTOCHEMISTRY AND THERMOCHEMISTRY IN THICK ATMOSPHERES ON SUPER EARTHS AND MINI NEPTUNES ». *The Astrophysical Journal* 784.1. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Hu, R., Seager, S. et Bains, W. (2012). « PHOTOCHEMISTRY IN TERRESTRIAL EXOPLANET ATMOSPHERES. I. PHOTOCHEMISTRY MODEL AND BENCHMARK CASES ». *The Astrophysical Journal* 761.2. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Hu, R., Seager, S. et Bains, W. (2013). « PHOTOCHEMISTRY IN TERRESTRIAL EXOPLANET ATMOSPHERES. II. H₂ S AND SO₂ PHOTOCHEMISTRY IN ANOXIC ATMOSPHERES ». *The Astrophysical Journal* 769.1. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Huitson, C. M., Sing, D. K., Pont, F., Fortney, J. J., Burrows, A. S., Wilson, P. A., Ballester, G. E., Nikolov, N., Gibson, N. P., Deming, D., Aigrain, S., Evans, T. M., Henry, G. W., Etangs, A. L. d., Showman, A. P., Vidal-Madjar, A. et Zahnle, K. (2013). « An HST Optical to Near-IR Transmission Spectrum of the Hot Jupiter WASP-19b : Detection of Atmospheric Water and Likely Absence of TiO ». Publisher : arXiv Version Number : 2.

- Husser, T.-O., Berg, S. W. von, Dreizler, S., Homeier, D., Reiners, A., Barman, T. et Hauschildt, P. H. (2013). « A new extensive library of PHOENIX stellar atmospheres and synthetic spectra ». en. *Astronomy & Astrophysics* 553. arXiv :1303.5632 [astro-ph]. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Ingalls, J. G., Krick, J. E., Carey, S. J., Stauffer, J. R., Lowrance, P. J., Grillmair, C. J., Buzasi, D., Deming, D., Diamond-Lowe, H., Evans, T. M., Morello, G., Stevenson, K. B., Wong, I., Capak, P., Glaccum, W., Laine, S., Surace, J. et Storré-Lombardi, L. (2016). « Repeatability and Accuracy of Exoplanet Eclipse Depths Measured with Post-Cryogenic Spitzer ». Publisher : arXiv Version Number : 4.
- Ingalls, J. G., Krick, J. E., Carey, S. J., Laine, S., Surace, J. A., Glaccum, W. J., Grillmair, C. C. et Lowrance, P. J. (2012). « Intra-pixel gain variations and high-precision photometry with the Infrared Array Camera (IRAC) ». Sous la dir. de M. C. Clampin, G. G. Fazio, H. A. MacEwen et J. M. Oschmann. Amsterdam, Netherlands.
- Iro, N. et Maxted, P. (2013). « On the heat redistribution of the hot transiting exoplanet WASP-18b ». en. *Icarus* 226.2. arXiv : 1302.6696. ISSN : 00191035.
- Karovicova, I., White, T. R., Nordlander, T., Casagrande, L., Ireland, M., Huber, D. et Jofré, P. (2020). « Fundamental stellar parameters of benchmark stars from CHARA interferometry : I. Metal-poor stars ». *Astronomy & Astrophysics* 640. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Kasting, J. F., Kopparapu, R., Ramirez, R. M. et Harman, C. E. (2014). « Remote life-detection criteria, habitable zone boundaries, and the frequency of Earth-like planets around M and late K stars ». en. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 111.35. ISSN : 0027-8424, 1091-6490.
- Kawashima, Y. et Min, M. (2021). « Implementation of disequilibrium chemistry to spectral retrieval code ARCIS and application to 16 exoplanet transmission spectra : Indication of disequilibrium chemistry for HD 209458b and WASP-39b ». en. *Astronomy & Astrophysics* 656. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Kedziora-Chudczer, L., Zhou, G., Bailey, J., Bayliss, D. D. R., Tinney, C. G., Osip, D., Colon, K. D., Shporer, A. et Dragomir, D. (2019). « Secondary eclipses of WASP-18b – Near Infrared observations with the Anglo Australian Telescope, the Magellan Clay Telescope and the LCOGT network ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 483.4. arXiv : 1812.10623. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Kempton, E. M.-R., Zhang, M., Bean, J. L., Steinrueck, M. E., Piette, A. A. A., Parmentier, V., Malsky, I., Roman, M. T., Rauscher, E., Gao, P., Bell, T. J., Xue, Q., Taylor, J., Savel, A. B., Arnold, K. E., Nixon, M. C., Stevenson, K. B., Mansfield, M., Kendrew, S., Zieba, S., Ducrot, E., Dyrek, A., Lagage, P.-O., Stassun, K. G., Henry, G. W., Barman, T., Lupu, R., Malik, M., Kataria, T., Ih, J., Fu, G., Welbanks, L. et McGill, P. (2023). « A reflective, metal-rich atmosphere for GJ 1214b from its JWST phase curve ». en. *Nature*. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- Kendrew, S., Bouwman, J., Schreiber, J., Sloan, G. C., Bouchet, P., Coulais, A., Detre, O. H., Dicken, D. et Dyrek (2023, in prep.). « JWST MIRI Flight Performance : The Low Resolution Spectrometer ». *PASP*.
- Kendrew, S., Scheithauer, S., Bouchet, P., Amiaux, J., Azzolini, R., Bouwman, J., Chen, C., Dubreuil, D., Fischer, S., Glasse, A., Greene, T., Lagage, P.-O., Lahuis, F., Ronayette, S., Wright, D. et Wright, G. S. (2015). « The Mid-Infrared Instrument for the James Webb Space Telescope : IV. The Low Resolution Spectrometer ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 127.953. arXiv :1512.03000 [astro-ph]. ISSN : 00046280, 15383873.
- Khorshid, N., Min, M., Désert, J. M., Woitke, P. et Dominik, C. (2022). « SimAb : A simple, fast, and flexible model to assess the effects of planet formation on the atmospheric composition of gas giants ». *A&A* 667, A147.

RÉFÉRENCES

- Kipping, D. M. (2008). « Transiting planets - light-curve analysis for eccentric orbits ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 389.3. ISSN : 00358711, 13652966.
- Kipping, D. M. (2013). « Efficient, uninformative sampling of limb darkening coefficients for two-parameter laws ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 435.3. arXiv :1308.0009 [astro-ph]. ISSN : 1365-2966, 0035-8711.
- Klaassen, P. D., Geers, V. C., Beard, S. M., O'Brien, A. D., Cossou, C., Gastaud, R., Coulais, A., Schreiber, J., Kavanagh, P. J., Topinka, M., Azzollini, R., De Meester, W., Bouwman, J., Glasse, A. C. H., Glauser, A. M., Law, D. R., Cracraft, M., Murray, K., Sargent, B., Jones, O. C. et Wright, G. S. (2020). « MIRISim : A Simulator for the Mid-Infrared Instrument on JWST ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 500.3. arXiv :2010.15710 [astro-ph]. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Knutson, H. A., Charbonneau, D., Allen, L. E., Burrows, A. et Megeath, S. T. (2008). « The 3.6–8.0 μm Broad-band Emission Spectrum of HD 209458b : Evidence for an Atmospheric Temperature Inversion ». en. *The Astrophysical Journal* 673.1. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Knutson, H. A., Charbonneau, D., Allen, L. E., Fortney, J. J., Agol, E., Cowan, N. B., Showman, A. P., Cooper, C. S. et Megeath, S. T. (2007). « A map of the day–night contrast of the extrasolar planet HD 189733b ». en. *Nature* 447.7141. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- Knutson, H. A., Lewis, N., Fortney, J. J., Burrows, A., Showman, A. P., Cowan, N. B., Agol, E., Aigrain, S., Charbonneau, D., Deming, D., Désert, J.-M., Henry, G. W., Langton, J. et Laughlin, G. (2012). « 3.6 AND 4.5 μm PHASE CURVES AND EVIDENCE FOR NON-EQUILIBRIUM CHEMISTRY IN THE ATMOSPHERE OF EXTRASOLAR PLANET HD 189733b ». en. *The Astrophysical Journal* 754.1. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Kok, R. J. de, Brogi, M., Snellen, I. A. G., Birkby, J., Albrecht, S. et Mooij, E. J. W. de (2013). « Detection of carbon monoxide in the high-resolution day-side spectrum of the exoplanet HD 189733b ». en. *Astronomy & Astrophysics* 554. arXiv :1304.4014 [astro-ph]. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Koll, D. D. B. (2022). « A Scaling for Atmospheric Heat Redistribution on Tidally Locked Rocky Planets ». *Astrophys. J.* 924.2, 134.
- Kreidberg, L. (2015). « batman : BAsic Transit Model cAlculatioN in Python ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 127.957. arXiv :1507.08285 [astro-ph]. ISSN : 00046280, 15383873.
- Kreidberg, L. (2018). « Exoplanet Atmosphere Measurements from Transmission Spectroscopy and other Planet-Star Combined Light Observations ». en. arXiv :1709.05941 [astro-ph].
- Kreidberg, L., Bean, J. L., Désert, J.-M., Benneke, B., Deming, D., Stevenson, K. B., Seager, S., Berta-Thompson, Z., Seifahrt, A. et Homeier, D. (2014). « Clouds in the atmosphere of the super-Earth exoplanet GJ 1214b ». *Nature* 505.7481. arXiv :1401.0022 [astro-ph]. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- Kreidberg, L., Bean, J. L., Désert, J.-M., Line, M. R., Fortney, J. J., Madhusudhan, N., Stevenson, K. B., Showman, A. P., Charbonneau, D., McCullough, P. R., Seager, S., Burrows, A., Henry, G. W., Williamson, M., Kataria, T. et Homeier, D. (2014). « A Precise Water Abundance Measurement for the Hot Jupiter WASP-43b ». en. *The Astrophysical Journal* 793.2. arXiv :1410.2255 [astro-ph]. ISSN : 2041-8213.
- Kreidberg, L., Line, M. R., Thorngren, D., Morley, C. V. et Stevenson, K. B. (2018). « Water, High-altitude Condensates, and Possible Methane Depletion in the Atmosphere of the Warm Super-Neptune WASP-107b ». *ApJ* 858.1, L6.

- Krick, J. E., Ingalls, J., Carey, S., Braun, K. v., Kane, S. R., Ciardi, D., Plavchan, P., Wong, I. et Lowrance, P. (2016). « *SPITZER* IRAC SPARSELY SAMPLED PHASE CURVE OF THE EXOPLANET WASP-14B ». en. *The Astrophysical Journal* 824.1. ISSN : 1538-4357.
- Krissansen-Totton, J. et Fortney, J. J. (2022). « Predictions for Observable Atmospheres of Trappist-1 Planets from a Fully Coupled Atmosphere-Interior Evolution Model ». *Astrophys. J.* 933.1, 115.
- Laginja, I. et Wakeford, H. (2020). « Exo TiC-ISM : A Python package for marginalised exoplanet transit parameters across a grid of systematic instrument models ». en. *Journal of Open Source Software* 5.51. ISSN : 2475-9066.
- Lavvas, P. et Arfaux, A. (2021). « Impact of photochemical hazes and gases on exoplanet atmospheric thermal structure ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 502.4. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Lecavelier Des Etangs, A., Bourrier, V., Wheatley, P. J., Dupuy, H., Ehrenreich, D., Vidal-Madjar, A., Hébrard, G., Ballester, G. E., Désert, J.-M., Ferlet, R. et Sing, D. K. (2012). « Temporal variations in the evaporating atmosphere of the exoplanet HD 189733b ». en. *Astronomy & Astrophysics* 543. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Lecavelier Des Etangs, A. et Lissauer, J. J. (2022). « The IAU working definition of an exoplanet ». en. *New Astronomy Reviews* 94. ISSN : 13876473.
- Lee, E. J. (2019). « The Boundary between Gas-rich and Gas-poor Planets ». *ApJ* 878.1, 36.
- Lee, E. J. et Chiang, E. (2016). « Breeding Super-Earths and Birthing Super-puffs in Transitional Disks ». *ApJ* 817.2, 90.
- Lillo-Box, J., Millholland, S. et Laughlin, G. (2021). « Follow-up of non-transiting planets detected by Kepler. Confirmation of three hot-Jupiters and validation of three other planets ». *A&A* 654, A9.
- Lincowski, A. P., Meadows, V. S., Crisp, D., Robinson, T. D., Luger, R., Lustig-Yaeger, J. et Arney, G. N. (2018). « Evolved Climates and Observational Discriminants for the TRAPPIST-1 Planetary System ». *Astrophys. J.* 867.1, 76.
- Line, M. R., Stevenson, K. B., Bean, J., Desert, J.-M., Fortney, J. J., Kreidberg, L., Madhusudhan, N., Showman, A. P. et Diamond-Lowe, H. (2016). « No Thermal Inversion and a Solar Water Abundance for the Hot Jupiter HD209458b from HST WFC3 Emission Spectroscopy ». en. *The Astronomical Journal* 152.6. arXiv :1605.08810 [astro-ph]. ISSN : 1538-3881.
- Line, M. R., Wolf, A., Zhang, X., Knutson, H., Kammer, J., Ellison, E., Deroo, P., Crisp, D. et Yung, Y. (2013). « A Systematic Retrieval Analysis of Secondary Eclipse Spectra I : A Comparison of Atmospheric Retrieval Techniques ». en. *The Astrophysical Journal* 775.2. arXiv :1304.5561 [astro-ph]. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Linsky, J. (2014). « The Radiation Environment of Exoplanet Atmospheres ». en. *Challenges* 5.2. ISSN : 2078-1547.
- Louden, T. et Kreidberg, L. (2018). « SPIDERMAN : an open-source code to model phase curves and secondary eclipses ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 477.2. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Louden, T. et Wheatley, P. J. (2015). « SPATIALLY RESOLVED EASTWARD WINDS AND ROTATION OF HD 189733b ». *The Astrophysical Journal* 814.2. ISSN : 2041-8213.
- Love, P. J., Hoffman, A. W., Lum, N. A., Ando, K. J., Rosbeck, J., Ritchie, W. D., Therrien, N. J., Holcombe, R. S. et Corrales, E. (2005). « 1024 × 1024 Si :As IBC detector arrays for JWST MIRI ». Sous la dir. de T. J. Grycewicz et C. J. Marshall. San Diego, California, USA.

- Luger, R. et Barnes, R. (2015). « Extreme Water Loss and Abiotic O₂ Buildup on Planets Throughout the Habitable Zones of M Dwarfs ». *Astrobiology* 15,2.
- Luger, R., Agol, E., Foreman-Mackey, D., Fleming, D. P., Lustig-Yaeger, J. et Deitrick, R. (2019). « starry : Analytic Occultation Light Curves ». *The Astronomical Journal* 157. ADS Bibcode : 2019AJ....157...64L. ISSN : 0004-6256.
- Lund, M. N., Silva Aguirre, V., Davies, G. R., Chaplin, W. J., Christensen-Dalsgaard, J., Houdek, G., White, T. R., Bedding, T. R., Ball, W. H., Huber, D., Antia, H. M., Lebreton, Y., Latham, D. W., Handberg, R., Verma, K., Basu, S., Casagrande, L., Justesen, A. B., Kjeldsen, H. et Mosumgaard, J. R. (2017). « Standing on the Shoulders of Dwarfs : the Kepler Asteroseismic LEGACY Sample. I. Oscillation Mode Parameters ». *ApJ* 835,2, 172.
- Lustig-Yaeger, J., Meadows, V. S. et Lincowski, A. P. (2019a). « The Detectability and Characterization of the TRAPPIST-1 Exoplanet Atmospheres with JWST ». en. *The Astronomical Journal* 158.1. arXiv : 1905.07070. ISSN : 0004-6256, 1538-3881.
- Lustig-Yaeger, J., Meadows, V. S. et Lincowski, A. P. (2019b). « The Detectability and Characterization of the TRAPPIST-1 Exoplanet Atmospheres with JWST ». *Astron. J.* 158.1, 27.
- Macintosh, B., Graham, J. R., Barman, T., Rosa, R. J. D., Konopacky, Q., Marley, M. S., Nielsen, E. L., Pueyo, L., Rajan, A., Rameau, J., Saumon, D., Wang, J. J., Ammons, M., Arriaga, P., Artigau, E., Beckwith, S., Brewster, J., Bruzzone, S., Burningham, B., Burrows, A. S., Chen, C., Chiang, E., Chilcote, J. K., Dong, R., Doyon, R., Draper, Z. H., Duchêne, G., Esposito, T. M., Fitzgerald, M. P., Follette, K. B., Fortney, J. J., Gerard, B., Goodsell, S., Hibon, P., Hinkley, S., Cotten, T. H., Kalas, P., Lafreniere, D., Larkin, J. E., Lee, J., Line, M., Long, D., Marchis, F., Matthews, B. C., Max, C. E., Metchev, S., Millar-Blanchaer, M. A., Mittal, T., Morley, C. V., Morzinski, K. M., Murray-Clay, R., Oppenheimer, R., Patel, R., Perrin, M. D., Poyneer, L. A., Rafikov, R. R., Rantakyro, F. T., Rojo, P., Rudy, A. R., Salama, M., Savransky, D., Schneider, A. C., Sivaramakrishnan, A., Song, I., Soummer, R., Thomas, S., Vasisht, G., Wallace, J. K., Ward-Duong, K., Wiktorowicz, S. J. et Zuckerman, B. (2015). « Title : Discovery and spectroscopy of the young Jovian planet 51 Eri b with the Gemini Planet Imager ». en.
- MacKay, D. J. C. (2003). « Information Theory, Inference, and Learning Algorithms ». en.
- Madhusudhan, N. et Seager, S. (2009). « A Temperature and Abundance Retrieval Method for Exoplanet Atmospheres ». en. *The Astrophysical Journal* 707.1. arXiv : 0910.1347 [astro-ph]. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Madhusudhan, N. (2012). « C/O ratio as a Dimension for Characterizing Exoplanetary Atmospheres ». en. *The Astrophysical Journal* 758.1. arXiv : 1209.2412 [astro-ph]. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Madhusudhan, N. (2018). « Atmospheric Retrieval of Exoplanets ». en. arXiv : 1808.04824 [astro-ph].
- Madhusudhan, N. (2019). « Exoplanetary Atmospheres : Key Insights, Challenges and Prospects ». en. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* 57.1. arXiv : 1904.03190 [astro-ph]. ISSN : 0066-4146, 1545-4282.
- Madhusudhan, N., Agúndez, M., Moses, J. I. et Hu, Y. (2016). « Exoplanetary Atmospheres—Chemistry, Formation Conditions, and Habitability ». en. *Space Science Reviews* 205.1-4. ISSN : 0038-6308, 1572-9672.
- Madhusudhan, N., Harrington, J., Stevenson, K. B., Nymeyer, S., Campo, C. J., Wheatley, P. J., Deming, D., Blecic, J., Hardy, R. A., Lust, N. B., Anderson, D. R., Collier-Cameron, A., Britt, C. B. T., Bowman, W. C., Hebb, L., Hellier, C., Maxted, P. F. L., Pollacco, D. et West, R. G. (2011). « A high C/O ratio and weak thermal inversion in the atmosphere of exoplanet WASP-12b ». en. *Nature* 469.7328. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.

- Madhusudhan, N., Mousis, O., Johnson, T. V. et Lunine, J. I. (2011). « Carbon-rich Giant Planets : Atmospheric Chemistry, Thermal Inversions, Spectra, and Formation conditions ». en. *The Astrophysical Journal* 743.2. arXiv :1109.3183 [astro-ph]. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Mancini, L., Southworth, J., Ciceri, S., Dominik, M., Henning, T., Jorgensen, U. G., Lanza, A. F., Rabus, M., Snodgrass, C., Vilela, C., Alsubai, K. A., Bozza, V., Bramich, D. M., Novati, S. C., D'Ago, G., Jaimes, R. F., Galianni, P., Gu, S.-H., Harpsoe, K., Hinse, T., Hundertmark, M., Juncher, D., Kains, N., Korhonen, H., Popovas, A., Rahvar, S., Skottfelt, J., Street, R., Surdej, J., Tsapras, Y., Wang, X.-B. et Wertz, O. (2014). « Physical properties and transmission spectrum of the WASP-80 planetary system from multi-colour photometry ». en. *Astronomy & Astrophysics* 562. arXiv :1312.4982 [astro-ph]. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Mandel, K. et Agol, E. (2002). « Analytic Light Curves for Planetary Transit Searches ». en. *The Astrophysical Journal* 580.2. ISSN : 0004637X, 15384357.
- Mansfield, M., Line, M. R., Bean, J. L., Fortney, J. J., Parmentier, V., Wisner, L., Kempton, E. M.-R., Gharib-Nezhad, E., Sing, D. K., López-Morales, M., Baxter, C., Désert, J.-M., Swain, M. R. et Roudier, G. M. (2021). « A unique hot Jupiter spectral sequence with evidence for compositional diversity ». en. *Nature Astronomy* 5.12. ISSN : 2397-3366.
- Marley, M. S., Ackerman, A. S., Cuzzi, J. N. et Kitzmann, D. (2013). « Clouds and Hazes in Exoplanet Atmospheres ». *Comparative Climatology of Terrestrial Planets*. University of Arizona Press. ISBN : 978-0-8165-3059-5.
- Marley, M. et Robinson, T. (2015). « On the Cool Side : Modeling the Atmospheres of Brown Dwarfs and Giant Planets ». en. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* 53.1. ISSN : 0066-4146, 1545-4282.
- Martin-Lagarde, M. (2020). « Thèse Marine ». fr.
- Martin-Lagarde, M., Morello, G., Lagage, P.-O., Gastaud, R. et Cossou, C. (2020). « Phase-curve Pollution of Exoplanet Transit Depths ». en. *The Astronomical Journal* 160.5. ISSN : 1538-3881.
- Maurin, A. S., Selsis, F., Hersant, F. et Belu, A. (2012). « Thermal phase curves of non-transiting terrestrial exoplanets 2. Characterizing airless planets ». *Astronomy & Astrophysics* 538. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Maxted, P. F. L., Anderson, D. R., Doyle, A. P., Gillon, M., Harrington, J., Iro, N., Jehin, E., Lafrenière, D., Smalley, B. et Southworth, J. (2013). « Spitzer 3.6 micron and 4.5 micron full-orbit lightcurves of WASP-18 ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 428.3. arXiv : 1210.5585. ISSN : 1365-2966, 0035-8711.
- Mayor, M. et Queloz, D. (1995). « A Jupiter-mass companion to a solar-type star ». en. *Nature* 378.6555. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- McCormac, J., Gillen, E., Jackman, J. A. G., Brown, D. J. A., Bayliss, D., Wheatley, P. J., West, R. G., Anderson, D. R., Armstrong, D. J., Bouchy, F., Briegal, J. T., Burleigh, M. R., Cabrera, J., Casewell, S. L., Chaushev, A., Chazelas, B., Chote, P., Cooke, B. F., Costes, J. C., Csizmadia, S., Eigmuller, P., Erikson, A., Foxell, E., Gaensicke, B. T., Goad, M. R., Gunther, M. N., Hodgkin, S. T., Hooton, M. J., Jenkins, J. S., Lambert, G., Lendl, M., Longstaff, E., Louden, T., Moyano, M., Nielsen, L. D., Pollacco, D., Queloz, D., Rauer, H., Raynard, L., Smith, A. M. S., Smalley, B., Soto, M., Turner, O., Udry, S., Vines, J. I., Walker, S. R. et Watson, C. A. (2020). « NGTS-10b : The shortest period hot Jupiter yet discovered ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 493.1. arXiv :1909.12424 [astro-ph]. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- McMurtry, C. W., Forrest, W. J. et Pipher, J. L. (2005). « James Webb space telescope : noise results for the multiplexers of the mid-infrared instrument (MIRI) ». Sous la dir. de T. J. Grycewicz et C. J. Marshall. San Diego, California, USA.

- Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., Teller, A. H. et Teller, E. (1953). « Equation of State Calculations by Fast Computing Machines ». en. *The Journal of Chemical Physics* 21.6. ISSN : 0021-9606, 1089-7690.
- Min, M., Ormel, C. W., Chubb, K., Helling, C. et Kawashima, Y. (2020a). « The ARCiS framework for exoplanet atmospheres : Modelling philosophy and retrieval ». en. *Astronomy & Astrophysics* 642. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Min, M., Ormel, C. W., Chubb, K., Helling, C. et Kawashima, Y. (2020b). « The ARCiS framework for exoplanet atmospheres. Modelling philosophy and retrieval ». *A&A* 642, A28.
- Močnik, T., Hellier, C., Anderson, D. R., Clark, B. J. M. et Southworth, J. (2017). « Starspots on WASP-107 and pulsations of WASP-118 ». en. *MNRAS* 469.2. arXiv :1702.05078 [astro-ph]. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Mollière, P., Boekel, R. V., Dullemond, C., Henning, T. et Mordasini, C. (2015). « MODEL ATMOSPHERES OF IRRADIATED EXOPLANETS : THE INFLUENCE OF STELLAR PARAMETERS, METALLICITY, AND THE C/O RATIO ». *The Astrophysical Journal* 813.1. ISSN : 1538-4357.
- Mollière, P., Van Boekel, R., Bouwman, J., Henning, T., Lagage, P.-O. et Min, M. (2017). « Observing transiting planets with JWST : Prime targets and their synthetic spectral observations ». en. *Astronomy & Astrophysics* 600. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Mollière, P., Wardenier, J. P., Boekel, R. van, Henning, T., Molaverdikhani, K. et Snellen, I. A. G. (2019a). « peti-rADTRANS : a Python radiative transfer package for exoplanet characterization and retrieval ». en. *Astronomy & Astrophysics* 627. arXiv :1904.11504 [astro-ph]. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Mollière, P., Wardenier, J. P., van Boekel, R., Henning, T., Molaverdikhani, K. et Snellen, I. A. G. (2019b). « peti-rADTRANS. A Python radiative transfer package for exoplanet characterization and retrieval ». *A&A* 627, A67.
- Morello, G. (2015). « A BLIND METHOD TO DETREND INSTRUMENTAL SYSTEMATICS IN EXOPLANETARY LIGHT CURVES ». en. *The Astrophysical Journal* 808.1. ISSN : 1538-4357.
- Morello, G., Claret, A., Martin-Lagarde, M., Cossou, C., Tsiaras, A. et Lagage, P.-O. (2020). « The ExoTETHyS package : Tools for Exoplanetary Transits around Host Stars ». en. *The Astronomical Journal* 159.2. arXiv :1908.09599 [astro-ph]. ISSN : 1538-3881.
- Morello, G., Dyrek, A. et Changeat, Q. (2022). « Is binning always sinning? The impact of time-averaging for exoplanet phase curves ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 517.2. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Morello, G., Waldmann, I. P. et Tinetti, G. (2016). « Repeatability of Spitzer/IRAC exoplanetary eclipses with Independent Component Analysis ». en. *The Astrophysical Journal* 820.2. arXiv :1601.03959 [astro-ph]. ISSN : 1538-4357.
- Morrison, J. E., Dicken, D., Argyriou, I., Ressler, M. E. et Gordon, K. D. (2023). « JWST MIRI flight performance : Detector Effects and Data Reduction Algorithms ».
- Morvan, M., Nikolaou, N., Tsiaras, A. et Waldmann, I. P. (2020). « Detrending Exoplanetary Transit Light Curves with Long Short-Term Memory Networks ». en. *The Astronomical Journal* 159.3. arXiv : 2001.03370. ISSN : 1538-3881.

- Morvan, M., Tsiaras, A., Nikolaou, N. et Waldmann, I. P. (2021). « PyLightcurve-torch : a transit modeling package for deep learning applications in PyTorch ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 133.1021. ISSN : 0004-6280, 1538-3873.
- Moses, J. I. (2014). « Chemical Kinetics on Extrasolar Planets ». en. *Philosophical Transactions of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 372.2014. arXiv :1307.5450 [astro-ph]. ISSN : 1364-503X, 1471-2962.
- Moses, J. I., Line, M. R., Visscher, C., Richardson, M. R., Nettelmann, N., Fortney, J. J., Stevenson, K. B. et Madhusudhan, N. (2013). « Compositional diversity in the atmospheres of hot Neptunes, with application to GJ 436b ». en. *The Astrophysical Journal* 777.1. arXiv :1306.5178 [astro-ph]. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Muñoz, A. G. et Isaak, K. G. (2015). « Probing exoplanet clouds with optical phase curves ». en. *Proceedings of the National Academy of Sciences* 112.44. ISSN : 0027-8424, 1091-6490.
- Murison, M. A. (2006). « A Practical Method for Solving the Kepler Equation ». en. Publisher : U.S. Naval Observatory.
- Murray, C. D. et Correia, A. C. M. (2011). *Keplerian Orbits and Dynamics of Exoplanets*. en. arXiv :1009.1738 [astro-ph].
- Nikolov, N., Sing, D. K., Pont, F., Burrows, A. S., Fortney, J. J., Ballester, G. E., Evans, T. M., Huitson, C. M., Wakeford, H. R., Wilson, P. A., Aigrain, S., Deming, D., Gibson, N. P., Henry, G. W., Knutson, H., Lecavelier Des Etangs, A., Showman, A. P., Vidal-Madjar, A. et Zahnle, K. (2014). « Hubble Space Telescope hot Jupiter transmission spectral survey : a detection of Na and strong optical absorption in HAT-P-1b ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 437.1. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Nixon, M. C. et Madhusudhan, N. (2022). « Aura-3D : A Three-dimensional Atmospheric Retrieval Framework for Exoplanet Transmission Spectra ». en. *The Astrophysical Journal* 935.2. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Nymeyer, S., Harrington, J., Hardy, R. A., Stevenson, K. B., Campo, C. J., Madhusudhan, N., Collier-Cameron, A., Loredó, T. J., Blecic, J., Bowman, W. C., Britt, C. B. T., Cubillos, P., Hellier, C., Gillon, M., Maxted, P. F. L., Hebb, L., Wheatley, P. J., Pollacco, D. et Anderson, D. R. (2011). « Spitzer Secondary Eclipses of WASP-18b ». en. *The Astrophysical Journal* 742.1. arXiv : 1005.1017. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Öberg, K. I., Murray-Clay, R. et Bergin, E. A. (2011). « THE EFFECTS OF SNOWLINES ON C/O IN PLANETARY ATMOSPHERES ». en. *The Astrophysical Journal* 743.1. ISSN : 2041-8205, 2041-8213.
- Oblakowska-Mucha, A. (2017). « Radiation Damage in Silicon Particle Detectors in High Luminosity Experiments ». en.
- Odrzywolek, A. et Rafelski, J. (2018). « Classification of Exoplanets According to Density ». en. *Acta Physica Polonica B* 49.11. ISSN : 0587-4254, 1509-5770.
- Orell-Miquel, J., Murgas, F., Pallé, E., Lampón, M., López-Puertas, M., Sanz-Forcada, J., Nagel, E., Kaminski, A., Casasayas-Barris, N., Nortmann, L., Luque, R., Molaverdikhani, K., Sedaghati, E., Caballero, J. A., Amado, P. J., Bergond, G., Czesla, S., Hatzes, A. P., Henning, T., Khalafinejad, S., Montes, D., Morello, G., Quirrenbach, A., Reiners, A., Ribas, I., Sánchez-López, A., Schweitzer, A., Stangret, M., Yan, F. et Zapatero Osorio, M. R. (2022). « A tentative detection of He I in the atmosphere of GJ 1214 b ». *Astronomy & Astrophysics* 659. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.

- Owens, A., Conway, E. K., Tennyson, J. et Yurchenko, S. N. (2020). « ExoMol line lists – XXXVIII. High-temperature molecular line list of silicon dioxide (SiO_2) ». *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 495.2. arXiv :2005.13586 [astro-ph, physics :physics]. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Parmentier, V. et Crossfield, I. (2018). « Exoplanet phase curves : observations and theory ». en. arXiv :1711.07696 [astro-ph].
- Parmentier, V., Showman, A. P. et Fortney, J. J. (2020). « The cloudy shape of hot Jupiter thermal phase curves ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 501.1. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Parmentier, V., Showman, A. P. et Lian, Y. (2013). « 3D mixing in hot Jupiter atmospheres. I. application to the day/night cold trap in HD 209458b ». en. *Astronomy & Astrophysics* 558. arXiv :1301.4522 [astro-ph]. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Partridge, H. et Schwenke, D. W. (1997). « The determination of an accurate isotope dependent potential energy surface for water from extensive *ab initio* calculations and experimental data ». en. *The Journal of Chemical Physics* 106.11. ISSN : 0021-9606, 1089-7690.
- Parviainen, H. (2015). « PyTransit : Fast and Easy Exoplanet Transit Modelling in Python ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 450.3. arXiv :1504.07433 [astro-ph]. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Patel, J. A. et Espinoza, N. (2022). « Empirical limb-darkening coefficients & transit parameters of known exoplanets from TESS ». *The Astronomical Journal* 163.5. arXiv :2203.05661 [astro-ph]. ISSN : 0004-6256, 1538-3881.
- Paudel, R. R., Gizis, J. E., Mullan, D. J., Schmidt, S. J., Burgasser, A. J., Williams, P. K. G. et Berger, E. (2018). « K2 Ultracool Dwarfs Survey. III. White Light Flares Are Ubiquitous in M6-Lo Dwarfs ». *Astrophys. J.* 858.1, 55.
- Perez-Becker, D. et Showman, A. P. (2013). « Atmospheric Heat Redistribution on Hot Jupiters ». en. *The Astrophysical Journal* 776.2. arXiv :1306.4673 [astro-ph]. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Perrin, M. D., Sivaramakrishnan, A., Lajoie, C.-P., Elliott, E., Pueyo, L., Ravindranath, S. et Albert, L. (2014). « Updated point spread function simulations for JWST with WebbPSF ». Sous la dir. de J. M. Oschmann, M. Clampin, G. G. Fazio et H. A. MacEwen. Montréal, Quebec, Canada.
- Perrin, M. D., Soummer, R., Elliott, E. M., Lallo, M. D. et Sivaramakrishnan, A. (2012). « Simulating point spread functions for the James Webb Space Telescope with WebbPSF ». Sous la dir. de M. C. Clampin, G. G. Fazio, H. A. MacEwen et J. M. Oschmann. Amsterdam, Netherlands.
- Perryman, M. (2018). *The Exoplanet Handbook* : 2^e éd. Cambridge University Press.
- Peterson, M. S., Benneke, B., Collins, K., Piaulet, C., Crossfield, I. J. M., Ali-Dib, M., Christiansen, J. L., Gagné, J., Faherty, J., Kite, E., Dressing, C., Charbonneau, D., Murgas, F., Cointepas, M., Almenara, J. M., Bonfils, X., Kane, S., Werner, M. W., Gorjian, V., Roy, P.-A., Shporer, A., Pozuelos, F. J., Socia, Q. J., Cloutier, R., Dietrich, J., Irwin, J., Weiss, L., Waalkes, W., Berta-Thomson, Z., Evans, T., Apai, D., Parviainen, H., Pallé, E., Narita, N., Howard, A. W., Dragomir, D., Barkaoui, K., Gillon, M., Jehin, E., Ducrot, E., Benkhaldoun, Z., Fukui, A., Mori, M., Nishiumi, T., Kawauchi, K., Ricker, G., Latham, D. W., Winn, J. N., Seager, S., Isaacson, H., Bixel, A., Gibbs, A., Jenkins, J. M., Smith, J. C., Chavez, J. P., Rackham, B. V., Henning, T., Gabor, P., Chen, W.-P., Espinoza, N., Jensen, E. L. N., Collins, K. I., Schwarz, R. P., Conti, D. M., Wang, G., Kielkopf, J. F., Mao, S., Horne, K., Sefako, R., Quinn, S. N., Moldovan, D., Fausnaugh, M., Fűrész, G. et Barclay, T. (2023). « A temperate Earth-sized planet with tidal heating transiting an M6 star ». en. *Nature*. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.

- Piaulet, C., Benneke, B., Rubenzahl, R. A., Howard, A. W., Lee, E. J., Thorngren, D., Angus, R., Peterson, M., Schlieder, J. E., Werner, M., Kreidberg, L., Jaouni, T., Crossfield, I. J. M., Ciardi, D. R., Petigura, E. A., Livingston, J., Dressing, C. D., Fulton, B. J., Beichman, C., Christiansen, J. L., Gorjian, V., Hardegree-Ullman, K. K., Krick, J. et Sinukoff, E. (2021). « WASP-107b's Density Is Even Lower : A Case Study for the Physics of Planetary Gas Envelope Accretion and Orbital Migration ». *AJ* 161.2, 70.
- Pierrehumbert, R. T. et Hammond, M. (2019). « Atmospheric Circulation of Tide-Locked Exoplanets ». en. *Annual Review of Fluid Mechanics* 51.1. ISSN : 0066-4189, 1545-4479.
- Pinhas, A., Madhusudhan, N., Gandhi, S. et MacDonald, R. J. (2019). « H₂O abundances and cloud properties in ten hot giant exoplanets ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 482.2. arXiv :1811.00011 [astro-ph]. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Pires, S., Mathur, S., García, R. A., Ballot, J., Stello, D. et Sato, K. (2015). « Gap interpolation by inpainting methods : Application to ground and space-based asteroseismic data ». *A&A* 574, A18.
- Plavchan, P., Barclay, T., Gagné, J., Gao, P., Cale, B., Matzko, W., Dragomir, D., Quinn, S., Feliz, D., Stassun, K., Crossfield, I. J. M., Berardo, D. A., Latham, D. W., Tieu, B., Anglada-Escudé, G., Ricker, G., Vanderspek, R., Seager, S., Winn, J. N., Jenkins, J. M., Rinehart, S., Krishnamurthy, A., Dynes, S., Doty, J., Adams, F., Afanasev, D. A., Beichman, C., Bottom, M., Bowler, B. P., Brinkworth, C., Brown, C. J., Cancino, A., Ciardi, D. R., Clampin, M., Clark, J. T., Collins, K., Davison, C., Foreman-Mackey, D., Furlan, E., Gaidos, E. J., Geneser, C., Giddens, F., Gilbert, E., Hall, R., Hellier, C., Henry, T., Horner, J., Howard, A. W., Huang, C., Huber, J., Kane, S. R., Kenworthy, M., Kielkopf, J., Kipping, D., Klenke, C., Kruse, E., Latouf, N., Lowrance, P., Mennesson, B., Mengel, M., Mills, S. M., Morton, T., Narita, N., Newton, E., Nishimoto, A., Okumura, J., Palle, E., Pepper, J., Quintana, E. V., Roberge, A., Roccatagliata, V., Schlieder, J. E., Tanner, A., Teske, J., Tinney, C. G., Vanderburg, A., Von Braun, K., Walp, B., Wang, J., Wang, S. X., Weigand, D., White, R., Wittenmyer, R. A., Wright, D. J., Youngblood, A., Zhang, H. et Zilberman, P. (2020). « A planet within the debris disk around the pre-main-sequence star AU Microscopii ». en. *Nature* 582.7813. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- Pluriel, W. (2023). « Hot exoplanetary atmospheres in 3D ». en. *Remote Sensing* 15.3. arXiv :2301.12779 [astro-ph]. ISSN : 2072-4292.
- Pluriel, W., Leconte, J., Parmentier, V., Zingales, T., Falco, A., Selsis, F. et Bordé, P. (2022). « Toward a multidimensional analysis of transmission spectroscopy : II. Day-night-induced biases in retrievals from hot to ultrahot Jupiters ». *Astronomy & Astrophysics* 658. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Pluriel, W., Zingales, T., Leconte, J. et Parmentier, V. (2020). « Strong biases in retrieved atmospheric composition caused by day-night chemical heterogeneities ». *Astronomy & Astrophysics* 636. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Pollack, J. B., Hubickyj, O., Bodenheimer, P., Lissauer, J. J., Podolak, M. et Greenzweig, Y. (1996). « Formation of the Giant Planets by Concurrent Accretion of Solids and Gas ». en. *Icarus* 124.1. ISSN : 00191035.
- Pont, F., Zucker, S. et Queloz, D. (2006). « The effect of red noise on planetary transit detection ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 373.1. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Pontoppidan, K. M., Pickering, T. E., Laidler, V. G., Gilbert, K., Sontag, C. D., Slocum, C., Sienkiewicz, M. J., Hanley, C., Earl, N. M., Pueyo, L., Ravindranath, S., Karakla, D. M., Robberto, M., Noriega-Crespo, A. et Barker, E. A. (2016). « Pandeia : A Multi-mission Exposure Time Calculator for JWST and WFIRST ». en. *Observatory Operations : Strategies, Processes, and Systems VI*. arXiv :1707.02202 [astro-ph].
- Popper, D. M. et Etzel, P. B. (1981). « Photometric orbits of seven detached eclipsing binaries. » *The Astronomical Journal* 86. ADS Bibcode : 1981AJ.....86..102P. ISSN : 0004-6256.

RÉFÉRENCES

- Powell, D., Feinstein, A. D., Lee, E. K. H. et Zhang, M. (2023 in prep.). « Detection of SO₂ in the Mid-Infrared Transmission Spectrum of WASP-39b ». en. *Nature*.
- Rackham, B. V., Apai, D. et Giampapa, M. S. (2018). « The Transit Light Source Effect : False Spectral Features and Incorrect Densities for M-dwarf Transiting Planets ». en. *The Astrophysical Journal* 853.2. ISSN : 1538-4357.
- Rackham, B. V., Apai, D. et Giampapa, M. S. (2019). « The Transit Light Source Effect. II. The Impact of Stellar Heterogeneity on Transmission Spectra of Planets Orbiting Broadly Sun-like Stars ». en. *The Astronomical Journal* 157.3. ISSN : 1538-3881.
- Radick, R. R., Lockwood, G. W., Skiff, B. A. et Baliunas, S. L. (1998). « Patterns of Variation among Sun-like Stars ». en. *The Astrophysical Journal Supplement Series* 118.1. ISSN : 0067-0049, 1538-4365.
- Ranjan, S., Seager, S., Zhan, Z., Koll, D. D. B., Bains, W., Petkowski, J. J., Huang, J. et Lin, Z. (2022). « Photochemical Runaway in Exoplanet Atmospheres : Implications for Biosignatures ». *The Astrophysical Journal* 930.2. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Raposo Pulido, V. et Peláez, J. (2017). « An efficient code to solve the Kepler equation. Elliptic case. » en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Rauscher, B. J., Fox, O. et Ferruit, P. (2007). « Detectors for the James Webb Space Telescope Near-Infrared Spectrograph I : Readout Mode, Noise Model, and Calibration Considerations ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 119.857. arXiv :0706.2344 [astro-ph]. ISSN : 0004-6280, 1538-3873.
- Rauscher, E., Menou, K., Seager, S., Deming, D., Cho, J. Y.-K. et Hansen, B. M. S. (2007). « Toward Eclipse Mapping of Hot Jupiters ». en. *The Astrophysical Journal* 664.2. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Al-Refai, A. F., Changeat, Q., Waldmann, I. P. et Tinetti, G. (2021). « TauREx III : A fast, dynamic and extendable framework for retrievals ». en. *The Astrophysical Journal* 917.1. arXiv :1912.07759 [astro-ph]. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Reffert, S., Bergmann, C., Quirrenbach, A., Trifonov, T. et Künstler, A. (2015). « Precise radial velocities of giant stars : VII. Occurrence rate of giant extrasolar planets as a function of mass and metallicity ». *Astronomy & Astrophysics* 574. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Rein, E. et Ofir, A. (2019). « Fast and Precise Light Curve Model for Transiting Exoplanets with Rings ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 490.1. arXiv :1910.12099 [astro-ph]. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Reinhold, T., Bell, K. J., Kuzlewicz, J., Hekker, S. et Shapiro, A. I. (2019). « Transition from spot to faculae domination : An alternate explanation for the dearth of intermediate *Kepler* rotation periods ». en. *Astronomy & Astrophysics* 621. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Ressler, M. E., Sukhatme, K. G., Franklin, B. R., Mahoney, J. C., Thelen, M. P., Bouchet, P., Colbert, J. W., Cracraft, M., Dicken, D., Gastaud, R., Goodson, G. B., Eccleston, P., Moreau, V., Rieke, G. H. et Schneider, A. (2015). « The Mid-Infrared Instrument for the *James Webb Space Telescope* , VIII : The MIRI Focal Plane System ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 127.953. ISSN : 00046280, 15383873.
- Ressler, M. E., Cho, H., Lee, R. A. M., Sukhatme, K. G., Drab, J. J., Domingo, G., McKelvey, M. E., McMurray Jr., R. E. et Dotson, J. L. (2008). « Performance of the JWST/MIRI Si :As detectors ». Sous la dir. de D. A. Dorn et A. D. Holland. Marseille, France.

- Ressler, M. E., Colbert, J. W., Laine, S. et Morrison, J. E. (2023). « The Reset Switch Charge Decay Effect in JWST/MIRI Observations ».
- Rieke, G. H., Ressler, M. E., Morrison, J. E., Bergeron, L., Bouchet, P., Garcia-Marín, M., Greene, T. P., Regan, M. W., Sukhatme, K. G. et Walker, H. (2015). « The Mid-Infrared Instrument for the James Webb Space Telescope, VII: The MIRI Detectors ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 127.953. arXiv :1508.02362 [astro-ph]. ISSN : 00046280, 15383873.
- Rieke, G. (2007). « Infrared Detector Arrays for Astronomy ». en. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* 45.1. ISSN : 0066-4146, 1545-4282.
- Rieke, G. (2003). *Detection of Light : from the Ultraviolet to the Submillimeter*. Cambridge University Press. ISBN : 0-521-01710-6.
- Rigby, J. et al. (2022). « The Science Performance of JWST as Characterized in Commissioning ». en.
- Robberto, M. (2007). « Derivation of the correct noise equation for general MULTIACCUM readout ». en. JWST-STScI-001853, SM-12.
- Robberto, M. (2013). « Generalized Least Square algorithm to correctly perform linear ramp fitting ». en.
- Rocchetto, M., Waldmann, I. P., Venot, O., Lagage, P.-O. et Tinetti, G. (2016). « EXPLORING BIASES OF ATMOSPHERIC RETRIEVALS IN SIMULATED JWST TRANSMISSION SPECTRA OF HOT JUPITERS ». en. *The Astrophysical Journal* 833.1. ISSN : 1538-4357.
- Roettenbacher, R. M. et Kane, S. R. (2017). « The Stellar Activity of TRAPPIST-1 and Consequences for the Planetary Atmospheres ». *Astrophys. J.* 851.2, 77.
- Rothman, L., Gordon, I., Barber, R., Dothe, H., Gamache, R., Goldman, A., Perevalov, V., Tashkun, S. et Tennyson, J. (2010). « HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database ». en. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 111.15. ISSN : 00224073.
- Roudier, G. M., Swain, M. R., Gudipati, M. S., West, R. A., Estrela, R. et Zellem, R. T. (2021). « Disequilibrium Chemistry in Exoplanet Atmospheres Observed with the Hubble Space Telescope ». *The Astronomical Journal* 162.2. ISSN : 0004-6256, 1538-3881.
- Rowe, J. F., Matthews, J. M., Seager, S., Miller-Ricci, E., Sasselov, D., Kuschnig, R., Guenther, D. B., Moffat, A. F. J., Rucinski, S. M., Walker, G. A. H. et Weiss, W. W. (2008). « The Very Low Albedo of an Extrasolar Planet : MOST Space-based Photometry of HD 209458 ». en. *The Astrophysical Journal* 689.2. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Russell, D. G. (2021). « On the Need for a Classification System for Consistent Characterization of the Composition of Planetary Bodies ». en.
- Rustamkulov, Z., Sing, D. K., Mukherjee, S., May, E. M., Kirk, J., Schlawin, E., Line, M. R., Piaulet, C., Carter, A. L., Batalha, N. E., Goyal, J. M., López-Morales, M., Lothringer, J. D., MacDonald, R. J., Moran, S. E., Stevenson, K. B., Wakeford, H. R., Espinoza, N., Bean, J. L., Batalha, N. M., Benneke, B., Berta-Thompson, Z. K., Crossfield, I. J. M., Gao, P., Kreidberg, L., Powell, D. K., Cubillos, P. E., Gibson, N. P., Leconte, J., Molaverdikhani, K., Nikolov, N. K., Parmentier, V., Roy, P., Taylor, J., Turner, J. D., Wheatley, P. J., Aggarwal, K., Ahrer, E., Alam, M. K., Alderson, L., Allen, N. H., Banerjee, A., Barat, S., Barrado, D., Barstow, J. K., Bell, T. J., Blečić, J., Brande, J., Casewell, S., Changeat, Q., Chubb, K. L., Crouzet, N., Daylan, T., Decin, L., Désert, J., Mikal-Evans, T., Feinstein, A. D., Flagg, L., Fortney, J. J., Harrington, J., Heng, K., Hong, Y., Hu, R., Iro, N., Kataria, T., Kempton, E. M.-R., Krick, J., Lendl, M., Lillo-Box, J., Louca, A., Lustig-Yaeger, J., Mancini,

- L., Mansfield, M., Mayne, N. J., Miguel, Y., Morello, G., Ohno, K., Palle, E., Petit dit de la Roche, D. J. M., Rackham, B. V., Radica, M., Ramos-Rosado, L., Redfield, S., Rogers, L. K., Shkolnik, E. L., Southworth, J., Teske, J., Tremblin, P., Tucker, G. S., Venot, O., Waalkes, W. C., Welbanks, L., Zhang, X. et Zieba, S. (2023). « Early Release Science of the exoplanet WASP-39b with JWST NIRSpec PRISM ». en. *Nature* 614.7949. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- Sainsbury-Martinez, F., Wang, P., Fromang, S., Tremblin, P., Dubos, T., Meurdesoif, Y., Spiga, A., Leconte, J., Baraffe, I., Chabrier, G., Mayne, N., Drummond, B. et Debras, F. (2019). « Idealised simulations of the deep atmosphere of hot Jupiters. Deep, hot adiabats as a robust solution to the radius inflation problem ». *A&A* 632, A114.
- Sarkis, P., Mordasini, C., Henning, T., Marleau, G. D. et Mollière, P. (2021). « Evidence of three mechanisms explaining the radius anomaly of hot Jupiters ». *A&A* 645, A79.
- Schneider, A. D., Carone, L., Decin, L., Jørgensen, U. G. et Helling, C. (2022). « No evidence for radius inflation in hot Jupiters from vertical advection of heat ». *A&A* 666, L11.
- Schneider, J., Dedieu, C., Sidaner, P. L., Savalle, R. et Zolotukhin, I. (2011). « Defining and cataloging exoplanets : The exoplanet.eu database ». en. *Astronomy & Astrophysics* 532. arXiv :1106.0586 [astro-ph]. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Schwartz, J. C. et Cowan, N. B. (2015). « Balancing the Energy Budget of Short-Period Giant Planets : Evidence for Reflective Clouds and Optical Absorbers ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 449.4. arXiv :1502.06970 [astro-ph]. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Schwartz, J. C., Kashner, Z., Jovmir, D. et Cowan, N. B. (2017). « Phase Offsets and the Energy Budgets of Hot Jupiters ». en. *The Astrophysical Journal* 850.2. arXiv :1707.05790 [astro-ph]. ISSN : 1538-4357.
- Seager, S. (2010). *Exoplanet atmospheres : physical processes*. Princeton series in astrophysics. OCLC : ocn466343197. Princeton, N.J : Princeton University Press.
- Seager, S. et Mallen-Ornelas, G. (2003). « On the Unique Solution of Planet and Star Parameters from an Extrasolar Planet Transit Light Curve ». en. *The Astrophysical Journal* 585.2. arXiv :astro-ph/0206228. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Sebastian, D., Gillon, M., Ducrot, E., Pozuelos, F. J., Garcia, L. J., Günther, M. N., Delrez, L., Queloz, D., Demory, B. O., Triaud, A. H. M. J., Burgasser, A., De Wit, J., Burdanov, A., Dransfield, G., Jehin, E., McCormac, J., Murray, C. A., Niraula, P., Pedersen, P. P., Rackham, B. V., Sohy, S., Thompson, S. et Van Grootel, V. (2021). « SPECULOOS : Ultracool dwarf transit survey : Target list and strategy ». *Astronomy & Astrophysics* 645. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Sedaghati, E., Boffin, H. M. J., MacDonald, R. J., Gandhi, S., Madhusudhan, N., Gibson, N. P., Oshagh, M., Claret, A. et Rauer, H. (2017). « Detection of titanium oxide in the atmosphere of a hot Jupiter ». en. *Nature* 549.7671. arXiv :1709.04118 [astro-ph]. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- Selsis, F., Wordsworth, R. et Forget, F. (2011). « Thermal phase curves of nontransiting terrestrial exoplanets I. Characterizing atmospheres ». *Astronomy & Astrophysics* 532. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Shapiro, A. I., Solanki, S. K., Krivova, N. A., Yeo, K. L. et Schmutz, W. K. (2016). « Are solar brightness variations faculae- or spot-dominated? ». en. *Astronomy & Astrophysics* 589. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.

- Sheppard, K., Mandell, A. M., Tamburo, P., Gandhi, S., Pinhas, A., Madhusudhan, N. et Deming, D. (2017). « Evidence for a Dayside Thermal Inversion and High Metallicity for the Hot Jupiter WASP-18b ». en. *The Astrophysical Journal* 850.2. arXiv : 1711.10491. ISSN : 2041-8213.
- Showman, A. P. et Guillot, T. (2002). « Atmospheric circulation and tides of “51 Pegasus b-like” planets ». *A&A* 385.
- Showman, A. P., Fortney, J. J., Lian, Y., Marley, M. S., Freedman, R. S., Knutson, H. A. et Charbonneau, D. (2009). « Atmospheric Circulation of Hot Jupiters : Coupled Radiative-Dynamical General Circulation Model Simulations of HD 189733b and HD 209458b ». *ApJ* 699.1.
- Showman, A. P. et Polvani, L. M. (2011). « EQUATORIAL SUPERROTATION ON TIDALLY LOCKED EXOPLANETS ». en. *The Astrophysical Journal* 738.1. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Shporer, A. (2017). « The Astrophysics of Visible-light Orbital Phase Curves in the Space Age ». *PASP* 129.977.
- Shporer, A. et Hu, R. (2015). « STUDYING ATMOSPHERE-DOMINATED HOT JUPITER *KEPLER* PHASE CURVES : EVIDENCE THAT INHOMOGENEOUS ATMOSPHERIC REFLECTION IS COMMON ». *The Astronomical Journal* 150.4. ISSN : 1538-3881.
- Shporer, A., Wong, I., Huang, C. X., Line, M. R., Stassun, K. G., Fetherolf, T., Kane, S. R., Bouma, L. G., Daylan, T., Guenther, M. N., Ricker, G. R., Latham, D. W., Vanderspek, R., Seager, S., Winn, J. N., Jenkins, J. M., Glidden, A., Berta-Thompson, Z., Ting, E. B., Li, J. et Haworth, K. (2019). « TESS full orbital phase curve of the WASP-18b system ». en. *The Astronomical Journal* 157.5. arXiv : 1811.06020. ISSN : 1538-3881.
- Sing, D. K., Désert, J.-M., Fortney, J. J., Lecavelier Des Etangs, A., Ballester, G. E., Cepa, J., Ehrenreich, D., López-Morales, M., Pont, F., Shabram, M. et Vidal-Madjar, A. (2011). « Gran Telescopio Canarias OSIRIS transiting exoplanet atmospheric survey : detection of potassium in XO-2b from narrowband spectrophotometry ». *Astronomy & Astrophysics* 527. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Sing, D. K., Lecavelier Des Etangs, A., Fortney, J. J., Burrows, A. S., Pont, F., Wakeford, H. R., Ballester, G. E., Nikolov, N., Henry, G. W., Aigrain, S., Deming, D., Evans, T. M., Gibson, N. P., Huitson, C. M., Knutson, H., Showman, A. P., Vidal-Madjar, A., Wilson, P. A., Williamson, M. H. et Zahnle, K. (2013). « HST hot-Jupiter transmission spectral survey : evidence for aerosols and lack of TiO in the atmosphere of WASP-12b ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 436.4. ISSN : 1365-2966, 0035-8711.
- Sing, D. K., Fortney, J. J., Nikolov, N., Wakeford, H. R., Kataria, T., Evans, T. M., Aigrain, S., Ballester, G. E., Burrows, A. S., Deming, D., Désert, J.-M., Gibson, N. P., Henry, G. W., Huitson, C. M., Knutson, H. A., Etangs, A. L. D., Pont, F., Showman, A. P., Vidal-Madjar, A., Williamson, M. H. et Wilson, P. A. (2016). « A continuum from clear to cloudy hot-Jupiter exoplanets without primordial water depletion ». en. *Nature* 529.7584. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- Skinner, J. W. et Cho, J. Y.-K. (2022). « Modons on Tidally Synchronised Extrasolar Planets ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 511.3. arXiv : 2109.06568 [astro-ph]. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Skinner, J. W., Nättilä, J. et Cho, J. Y.-K. (2022). *Repeated Cyclogenesis on Hot-Exoplanet Atmospheres with Deep Heating*. en. arXiv : 2212.05114 [astro-ph].
- Skumanich, A. (1972). « Time Scales for CA II Emission Decay, Rotational Braking, and Lithium Depletion ». en. *The Astrophysical Journal* 171. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.

- Southworth, J., Maxted, P. F. L. et Smalley, B. (2004). « Eclipsing binaries in open clusters. II. V453 Cyg in NGC 6871 ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 351.4. arXiv :astro-ph/0403572. ISSN : 00358711, 13652966.
- Spake, J. J., Sing, D. K., Evans, T. M., Oklopčić, A., Bourrier, V., Kreidberg, L., Rackham, B. V., Irwin, J., Ehrenreich, D., Wyttenbach, A., Wakeford, H. R., Zhou, Y., Chubb, K. L., Nikolov, N., Goyal, J. M., Henry, G. W., Williamson, M. H., Blumenthal, S., Anderson, D. R., Hellier, C., Charbonneau, D., Udry, S. et Madhusudhan, N. (2018). « Helium in the eroding atmosphere of an exoplanet ». *Nature* 557.7703.
- Spake, J. J., Oklopčić, A., Hillenbrand, L. A., Knutson, H. A., Kasper, D., Dai, F., Orell-Miquel, J., Vissapragada, S., Zhang, M. et Bean, J. L. (2022). *Non-detection of He I in the atmosphere of GJ1214b with Keck/NIRSPEC, at a time of minimal telluric contamination*. arXiv :2209.03502 [astro-ph].
- Speagle, J. S. (2020). « dynesty : A Dynamic Nested Sampling Package for Estimating Bayesian Posteriors and Evidence ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 493.3. arXiv :1904.02180 [astro-ph, stat]. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Spinelli, R., Gallo, E., Haardt, F., Caldiroli, A., Biassoni, F., Borsa, F. et Rauscher, E. (2023). « Planetary Parameters, XUV Environments, and Mass-loss Rates for Nearby Gaseous Planets with X-Ray-detected Host Stars ». *AJ* 165.5, 200.
- Stassun, K. G., Oelkers, R. J., Paegert, M., Torres, G., Pepper, J., De Lee, N., Collins, K., Latham, D. W., Muirhead, P. S., Chittidi, J., Rojas-Ayala, B., Fleming, S. W., Rose, M. E., Tenenbaum, P., Ting, E. B., Kane, S. R., Barclay, T., Bean, J. L., Brassuer, C. E., Charbonneau, D., Lissauer, J. J., Mann, A. W., McLean, B., Mulally, S., Narita, N., Plavchan, P., Ricker, G. R., Sasselov, D., Seager, S., Sharma, S., Shiao, B., Sozzetti, A., Stello, D., Vanderspek, R., Wallace, G. et Winn, J. N. (2019). « The Revised TESS Input Catalog and Candidate Target List ». en. *The Astronomical Journal* 158.4. arXiv :1905.10694 [astro-ph]. ISSN : 1538-3881.
- Stauffer, J., Tanner, A. M., Bryden, G., Ramirez, S., Berriman, B., Ciardi, D. R., Kane, S. R., Mizusawa, T., Payne, A., Plavchan, P., Von Braun, K., Wyatt, P. et Kirkpatrick, J. D. (2010). « Accurate Coordinates and 2MASS Cross Identifications for (Almost) All Gliese Catalog Star ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 122.894. ISSN : 0004-6280, 1538-3873.
- Stevenson, K. B. (2016). « Quantifying and Predicting the Presence of Clouds in Exoplanet Atmospheres ». Publisher : arXiv Version Number : 1.
- Stevenson, K. B., Desert, J.-M., Line, M. R., Bean, J. L., Fortney, J. J., Showman, A. P., Kataria, T., Kreidberg, L., McCullough, P. R., Henry, G. W., Charbonneau, D., Burrows, A., Seager, S., Madhusudhan, N., Williamson, M. H. et Homeier, D. (2014). « Thermal structure of an exoplanet atmosphere from phase-resolved emission spectroscopy ». en. *Science* 346.6211. arXiv :1410.2241 [astro-ph]. ISSN : 0036-8075, 1095-9203.
- Stevenson, K. B., Harrington, J., Fortney, J. J., Loredo, T. J., Hardy, R. A., Nymeyer, S., Bowman, W. C., Cubillos, P., Bowman, M. O. et Hardin, M. (2012). « TRANSIT AND ECLIPSE ANALYSES OF THE EXOPLANET HD 149026b USING BLISS MAPPING ». en. *The Astrophysical Journal* 754.2. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Stevenson, K. B., Harrington, J., Nymeyer, S., Madhusudhan, N., Seager, S., Bowman, W. C., Hardy, R. A., Deming, D., Rauscher, E. et Lust, N. B. (2010). « Possible thermochemical disequilibrium in the atmosphere of the exoplanet GJ 436b ». en. *Nature* 464.7292. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- Stevenson, K. B., Lewis, N. K., Bean, J. L., Beichman, C., Fraine, J., Kilpatrick, B. M., Krick, J. E., Lothringer, J. D., Mandell, A. M., Valenti, J. A., Agol, E., Angerhausen, D., Barstow, J. K., Birkmann, S. M., Burrows, A., Charbonneau, D., Cowan, N. B., Crouzet, N., Cubillos, P. E., Curry, S. M., Dalba, P. A., De Wit, J., Deming,

- D., Désert, J.-M., Doyon, R., Dragomir, D., Ehrenreich, D., Fortney, J. J., García Muñoz, A., Gibson, N. P., Gizis, J. E., Greene, T. P., Harrington, J., Heng, K., Kataria, T., Kempton, E. M.-R., Knutson, H., Kreidberg, L., Lafrenière, D., Lagage, P.-O., Line, M. R., Lopez-Morales, M., Madhusudhan, N., Morley, C. V., Rocchetto, M., Schlawin, E., Shkolnik, E. L., Shporer, A., Sing, D. K., Todorov, K. O., Tucker, G. S. et Wakeford, H. R. (2016). « Transiting Exoplanet Studies and Community Targets for *JWST* 's Early Release Science Program ». *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 128.967. ISSN : 0004-6280, 1538-3873.
- Stone, J. V. (2004). *Independent component analysis : a tutorial introduction*. en. A Bradford book. Cambridge, Mass. : MIT Press. ISBN : 978-0-262-69315-8.
- Strugarek, A. (2018). « Models of Star-Planet Magnetic Interaction ». arXiv :1704.03254 [astro-ph].
- Strugarek, A. (2023). « Interactions of exoplanets with their environment ». en. *Comptes Rendus. Physique* 24.S2. ISSN : 1878-1535.
- The SAG21 committee, G., Rackham, B. V. et Espinoza, N. (2022). *The Effect of Stellar Contamination on Space-based Transmission Spectroscopy*.
- Thorngren, D. P. et Fortney, J. J. (2018). « Bayesian Analysis of Hot-Jupiter Radius Anomalies : Evidence for Ohmic Dissipation? » *AJ* 155.5, 214.
- Tichavský, P., Koldovsky, Z., Yeredor, A., Gomez-Herrero, G. et Doron, E. (2008). « A Hybrid Technique for Blind Separation of Non-Gaussian and Time-Correlated Sources Using a Multicomponent Approach ». *IEEE Transactions on Neural Networks* 19.3. ISSN : 1045-9227, 1941-0093.
- Tichavský, P. et Koldovský, Z. (2011). « Fast and accurate methods of independent component analysis : A survey ». en.
- Tilley, M. A., Segura, A., Meadows, V., Hawley, S. et Davenport, J. (2019). « Modeling Repeated M Dwarf Flaring at an Earth-like Planet in the Habitable Zone : Atmospheric Effects for an Unmagnetized Planet ». *Astrobiology* 19.1.
- Tinetti, G., Encrenaz, T. et Coustenis, A. (2013). « Spectroscopy of planetary atmospheres in our Galaxy ». en. *The Astronomy and Astrophysics Review* 21.1. ISSN : 0935-4956, 1432-0754.
- Tinetti, G., Tennyson, J., Griffith, C. A. et Waldmann, I. (2012). « Water in exoplanets ». en. *Philosophical Transactions of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 370.1968. ISSN : 1364-503X, 1471-2962.
- Trauger, J. T. et Traub, W. A. (2007). « A laboratory demonstration of the capability to image an Earth-like extra-solar planet ». en. *Nature* 446.7137. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- Tremblin, P., Amundsen, D. S., Mourier, P., Baraffe, I., Chabrier, G., Drummond, B., Homeier, D. et Venot, O. (2015). « Fingering convection and cloudless models for cool brown dwarf atmospheres ». en. *The Astrophysical Journal* 804.1. arXiv :1504.03334 [astro-ph]. ISSN : 2041-8213.
- Tremblin, P., Chabrier, G., Baraffe, I., Liu, M. C., Magnier, E. A., Lagage, P. .-, Alves de Oliveira, C., Burgasser, A. J., Amundsen, D. S. et Drummond, B. (2017). « Cloudless Atmospheres for Young Low-gravity Substellar Objects ». *The Astrophysical Journal* 850. ADS Bibcode : 2017ApJ...850...46T. ISSN : 0004-637X.
- Tremblin, P., Chabrier, G., Mayne, N. J., Amundsen, D. S., Baraffe, I., Debras, F., Drummond, B., Manners, J. et Fromang, S. (2017a). « Advection of Potential Temperature in the Atmosphere of Irradiated Exoplanets : A Robust Mechanism to Explain Radius Inflation ». *The Astrophysical Journal* 841.1. ISSN : 1538-4357.

- Tremblin, P., Chabrier, G., Mayne, N. J., Amundsen, D. S., Baraffe, I., Debras, F., Drummond, B., Manners, J. et Fromang, S. (2017b). « Advection of Potential Temperature in the Atmosphere of Irradiated Exoplanets : A Robust Mechanism to Explain Radius Inflation ». *ApJ* 841.1, 30.
- Triaud, A. H. M. J., Anderson, D. R., Cameron, A. C., Doyle, A. P., Fumel, A., Gillon, M., Hellier, C., Jehin, E., Lendl, M., Lovis, C., Maxted, P. F. L., Pepe, F., Pollacco, D., Queloz, D., Segransan, D., Smalley, B., Smith, A. M. S., Udry, S., West, R. G. et Wheatley, P. J. (2013). « WASP-80b : a gas giant transiting a cool dwarf ». en. *Astronomy & Astrophysics* 551. arXiv :1303.0254 [astro-ph]. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Triaud, A. H. M. J., Gillon, M., Ehrenreich, D., Herrero, E., Lendl, M., Anderson, D. R., Cameron, A. C., Delrez, L., Demory, B.-O., Hellier, C., Heng, K., Jehin, E., Maxted, P. F. L., Pollacco, D., Queloz, D., Ribas, I., Smalley, B., Smith, A. M. S. et Udry, S. (2015). « WASP-80b has a dayside within the T-dwarf range ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 450.3. arXiv :1503.08152 [astro-ph]. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Tsai, S.-M., Lee, E. K. H., Powell, D., Gao, P., Zhang, X., Moses, J., Hébrard, E., Venot, O., Parmentier, V., Jordan, S., Hu, R., Alam, M. K., Alderson, L., Batalha, N. M., Bean, J. L., Benneke, B., Bierson, C. J., Brady, R. P., Carone, L., Carter, A. L., Chubb, K. L., Inglis, J., Leconte, J., Line, M., López-Morales, M., Miguel, Y., Molaverdikhani, K., Rustamkulov, Z., Sing, D. K., Stevenson, K. B., Wakeford, H. R., Yang, J., Aggarwal, K., Baeyens, R., Barat, S., de Val-Borro, M., Daylan, T., Fortney, J. J., France, K., Goyal, J. M., Grant, D., Kirk, J., Kreidberg, L., Louca, A., Moran, S. E., Mukherjee, S., Nasedkin, E., Ohno, K., Rackham, B. V., Redfield, S., Taylor, J., Tremblin, P., Visscher, C., Wallack, N. L., Welbanks, L., Youngblood, A., Ahrer, E.-M., Batalha, N. E., Behr, P., Bert-Thompson, Z. K., Blecic, J., Casewell, S. L., Crossfield, I. J. M., Crouzet, N., Cubillos, P. E., Decin, L., Désert, J.-M., Feinstein, A. D., Gibson, N. P., Harrington, J., Heng, K., Henning, T., Kempton, E. M. .-, Krick, J., Lagage, P.-O., Lendl, M., Lothringer, J. D., Mansfield, M., Mayne, N. J., Mikal-Evans, T., Palte, E., Schlawin, E., Shorttle, O., Wheatley, P. J. et Yurchenko, S. N. (2023). « Photochemically produced SO₂ in the atmosphere of WASP-39b ». *Nature* 617.7961.
- Tsai, S.-M., Malik, M. et Kitzmann, D. (2021). « A Comparative Study of Atmospheric Chemistry with VULCAN ». *ApJ* 923.2. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Tsiaras, A., Waldmann, I. P., Rocchetto, M., Varley, R., Morello, G., Damiano, M. et Tinetti, G. (2016). « A new approach to analysing HST spatial scans : the transmission spectrum of HD 209458 b ». en. *The Astrophysical Journal* 832.2. arXiv :1511.07796 [astro-ph]. ISSN : 1538-4357.
- Tsiaras, A., Waldmann, I. P., Tinetti, G., Tennyson, J. et Yurchenko, S. N. (2019). « Water vapour in the atmosphere of the habitable-zone eight-Earth-mass planet K2-18 b ». en. *Nature Astronomy* 3.12. ISSN : 2397-3366.
- Turbet, M., Bolmont, E., Bourrier, V., Demory, B.-O., Leconte, J., Owen, J. et Wolf, E. T. (2020). « A Review of Possible Planetary Atmospheres in the TRAPPIST-1 System ». *SSRv* 216.5, 100.
- Turbet, M., Bolmont, E., Leconte, J., Forget, F., Selsis, F., Tobie, G., Caldas, A., Naar, J. et Gillon, M. (2018). « Modeling climate diversity, tidal dynamics and the fate of volatiles on TRAPPIST-1 planets ». *Astron. Astrophys.* 612, A86.
- Turrini, D., Nelson, R. P. et Barbieri, M. (2015). « The role of planetary formation and evolution in shaping the composition of exoplanetary atmospheres ». en. *Experimental Astronomy* 40.2-3. ISSN : 0922-6435, 1572-9508.
- University of Washington (2018). *VPL Spectral Explorer*.
- Van Eylen, V., Agentoft, C., Lundkvist, M. S., Kjeldsen, H., Owen, J. E., Fulton, B. J., Petigura, E. et Snellen, I. (2018). « An asteroseismic view of the radius valley : stripped cores, not born rocky ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 479.4. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.

- Venot, O. (2014). « Chemical modeling of exoplanet atmospheres ». en.
- Venot, O., Hébrard, E., Agúndez, M., Dobrijevic, M., Selsis, F., Hersant, F., Iro, N. et Bounaceur, R. (2012). « A chemical model for the atmosphere of hot Jupiters ». en. *A&A* 546. arXiv :1208.0560 [astro-ph]. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Vidal-Madjar, A., Des Etangs, A. L., Désert, J.-M., Ballester, G. E., Ferlet, R., Hébrard, G. et Mayor, M. (2003). « An extended upper atmosphere around the extrasolar planet HD209458b ». en. *Nature* 422.6928. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- Vidal-Madjar, A., Désert, J.-M., Etangs, A. L. D., Hbrard, G., Ballester, G. E., Ehrenreich, D., Ferlet, R., McConnell, J. C., Mayor, M. et Parkinson, C. D. (2004). « Detection of Oxygen and Carbon in the Hydrodynamically Escaping Atmosphere of the Extrasolar Planet HD 209458b ». en. *The Astrophysical Journal* 604.1. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Wakeford, H. R., Sing, D. K., Kataria, T., Deming, D., Nikolov, N., Lopez, E. D., Tremblin, P., Amundsen, D. S., Lewis, N. K., Mandell, A. M., Fortney, J. J., Knutson, H., Benneke, B. et Evans, T. M. (2017). « HAT-P-26b : A Neptune-mass exoplanet with a well-constrained heavy element abundance ». en. *Science* 356.6338. ISSN : 0036-8075, 1095-9203.
- Waldmann, I. P. (2012). « OF “COCKTAIL PARTIES” AND EXOPLANETS ». en. *The Astrophysical Journal* 747.1. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Waldmann, I. P. (2013). « ON SIGNALS FAINT AND SPARSE : THE ACICA ALGORITHM FOR BLIND DE-TRENDING OF EXOPLANETARY TRANSITS WITH LOW SIGNAL-TO-NOISE ». en. *The Astrophysical Journal* 780.1. ISSN : 0004-637X, 1538-4357.
- Waldmann, I. (2022). *The Ariel Machine Learning Data Challenge*. other. display.
- Walsh, C., Nomura, H. et Van Dishoeck, E. (2015). « The molecular composition of the planet-forming regions of protoplanetary disks across the luminosity regime ». en. *Astronomy & Astrophysics* 582. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Wang, F., Li, H. et Li, R. (2006). « Applications of Wavelet to Independent Component Analysis ». *2006 6th World Congress on Intelligent Control and Automation*. T. 1.
- Webb, N. A., Coriat, M., Traulsen, I., Ballet, J., Motch, C., Carrera, F. J., Koliopanos, F., Authier, J., De La Calle, I., Ceballos, M. T., Colomo, E., Chuard, D., Freyberg, M., Garcia, T., Kolehmainen, M., Lamer, G., Lin, D., Maggi, P., Michel, L., Page, C. G., Page, M. J., Perea-Calderon, J. V., Pineau, F.-X., Rodriguez, P., Rosen, S. R., Santos Lleo, M., Saxton, R. D., Schwoppe, A., Tomás, L., Watson, M. G. et Zakardjian, A. (2020). « The *XMM-Newton* serendipitous survey : IX. The fourth *XMM-Newton* serendipitous source catalogue ». *A&A* 641. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Welbanks, L., Madhusudhan, N., Allard, N. F., Hubeny, I., Spiegelman, F. et Leininger, T. (2019). « Mass-Metallicity Trends in Transiting Exoplanets from Atmospheric Abundances of H₂O, Na, and K ». en. *The Astrophysical Journal Letters* 887.1. arXiv :1912.04904 [astro-ph]. ISSN : 2041-8205, 2041-8213.
- Wilkins, A. N., Delrez, L., Barker, A. J., Deming, D., Hamilton, D., Gillon, M. et Jehin, E. (2017). « Searching For Rapid Orbital Decay of WASP-18b ». en. *The Astrophysical Journal* 836.2. arXiv :1702.01123. ISSN : 2041-8213.
- Winn, J. N. (2014). *Transits and Occultations*. en. arXiv :1001.2010 [astro-ph].

RÉFÉRENCES

- Woitke, P., Helling, C., Hunter, G. H., Millard, J. D., Turner, G. E., Worters, M., Blecic, J. et Stock, J. W. (2018). « Equilibrium chemistry down to 100 K - Impact of silicates and phyllosilicates on carbon/oxygen ratio ». en. *Astronomy & Astrophysics* 614. arXiv :1712.01010 [astro-ph]. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Wolf, E. T. (2017). « Assessing the Habitability of the TRAPPIST-1 System Using a 3D Climate Model ». Publisher : arXiv Version Number : 2.
- Wolszczan, A. et Frail, D. A. (1992). « A planetary system around the millisecond pulsar PSR1257 + 12 ». en. *Nature* 355.6356. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- Wordsworth, R. et Kreidberg, L. (2022). « Atmospheres of Rocky Exoplanets ». en. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* 60.1. arXiv :2112.04663 [astro-ph]. ISSN : 0066-4146, 1545-4282.
- Wright, G. S., Wright, D., Goodson, G. B., Rieke, G. H., Aitink-Kroes, G., Amiaux, J., Aricha-Yanguas, A., Azzollini, R., Banks, K., Barrado-Navascues, D., Belenguier-Davila, T., Bloemmart, J. A. D. L., Bouchet, P., Brandl, B. R., Colina, L., Detre, Ö., Diaz-Catala, E., Eccleston, P., Friedman, S. D., García-Marín, M., Güdel, M., Glasse, A., Glauser, A. M., Greene, T. P., Groezinger, U., Grundy, T., Hastings, P., Henning, T., Hofferbert, R., Hunter, F., Jessen, N. C., Justtanont, K., Karnik, A. R., Khorrami, M. A., Krause, O., Labiano, A., Lagage, P.-O., Langer, U., Lemke, D., Lim, T., Lorenzo-Alvarez, J., Mazy, E., McGowan, N., Meixner, M. E., Morris, N., Morrison, J. E., Müller, F., Nørgaard-Nielsen, H.-U., Olofsson, G., O'Sullivan, B., Pel, J.-W., Penanen, K., Petach, M. B., Pye, J. P., Ray, T. P., Renotte, E., Renouf, I., Ressler, M. E., Samara-Ratna, P., Scheithauer, S., Schneider, A., Shaughnessy, B., Stevenson, T., Sukhatme, K., Swinyard, B., Sykes, J., Thatcher, J., Tikkanen, T., Van Dishoeck, E. F., Waelkens, C., Walker, H., Wells, M. et Zhender, A. (2015). « The Mid-Infrared Instrument for the *James Webb Space Telescope*, II : Design and Build ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 127.953. ISSN : 00046280, 15383873.
- Wright, G. S., Rieke, G. H. et al. (2023). « The Mid-infrared Instrument for JWST and Its In-flight Performance ». en. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific* 135.1046. ISSN : 0004-6280, 1538-3873.
- Wright, J. T. (2018). « Radial Velocities as an Exoplanet Discovery Method ». en. arXiv :1707.07983 [astro-ph].
- Wytttenbach, A., Ehrenreich, D., Lovis, C., Udry, S. et Pepe, F. (2015). « Spectrally resolved detection of sodium in the atmosphere of HD 189733b with the HARPS spectrograph ». *Astronomy & Astrophysics* 577. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.
- Yip, K. H., Changeat, Q., Nikolaou, N., Morvan, M., Edwards, B., Waldmann, I. P. et Tinetti, G. (2021). « Peeking inside the Black Box : Interpreting Deep-learning Models for Exoplanet Atmospheric Retrievals ». *The Astronomical Journal* 162.5. ISSN : 0004-6256, 1538-3881.
- Yip, K. H., Changeat, Q., Al-Refai, A. et Waldmann, I. (2022). *An Alternative Approach to Sampling : Retrieving Exoplanetary Spectra with Variational Inference and Normalising Flow*. other. display.
- Yip, K. H., Waldmann, I. P., Changeat, Q., Morvan, M., Al-Refai, A. F., Edwards, B., Nikolaou, N., Tsiaras, A., Oliveira, C. A. de, Lagage, P.-O., Jenner, C., Cho, J. Y.-K., Thiyagalingam, J. et Tinetti, G. (2022). *ESA-Ariel Data Challenge NeurIPS 2022 : Inferring Physical Properties of Exoplanets From Next-Generation Telescopes*. en. arXiv :2206.14642 [astro-ph, physics :physics].
- Yurchenko, S. N. et Tennyson, J. (2014). « ExoMol line lists IV : The rotation-vibration spectrum of methane up to 1500 K ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 440.2. arXiv :1401.4852 [astro-ph]. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.

-
- Zhou, G., Bayliss, D., Kedziora-Chudczer, L., Tinney, C. G., Bailey, J., Salter, G. et Rodriguez, J. (2015). « Secondary eclipse observations for seven hot-Jupiters from the Anglo-Australian Telescope ». en. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 454.3. arXiv : 1509.04147. ISSN : 0035-8711, 1365-2966.
- Zieba, S., Kreidberg, L., Ducrot, E., Gillon, M., Morley, C., Schaefer, L., Tamburo, P., Koll, D. D. B., Lyu, X., Acuña, L., Agol, E., Iyer, A. R., Hu, R., Lincowski, A. P., Meadows, V. S., Selsis, F., Bolmont, E., Mandell, A. M. et Suissa, G. (2023). « No thick carbon dioxide atmosphere on the rocky exoplanet TRAPPIST-1 c ». en. *Nature*. ISSN : 0028-0836, 1476-4687.
- Zingales, T., Falco, A., Pluriel, W. et Leconte, J. (2022). « Toward a multidimensional analysis of transmission spectroscopy : III. Modeling 2D effects in retrievals with TauREx ». en. *Astronomy & Astrophysics* 667. ISSN : 0004-6361, 1432-0746.