

Calcul de la transmission de radiation à travers le limbe de l’atmosphère d’une exoplanète géante gazeuse: Exotrans

Sébastien Bélanger-Nantel

Résumé

Nous présentons un module python permettant de calculer le taux de transmission d’une exoplanète en transit. En prévision des observations spectrales future, le module supporte des longueurs d’onde de l’ordre de 1.0 à 2.5 μm pour une résolution de $R = \lambda/\Delta\lambda = 140000$. Outre les propriétés physiques (masse et rayon) de l’exoplanète, le module supporte des atmosphères dominées- H_2 contenant les éléments absorbants supportés par la base de données ExoMol. CH_4 , CO et H_2O sont utilisés comme exemple pour une planète similaire à Jupiter et un profil de transmission est produit en $t \approx 6\text{s}$. Le module offre en plus la possibilité d’approximer l’effet de la pression sur la largeur des raies d’absorptions par convolution du profil Lorentzien.

1 Introduction

La dernière décennie fût particulièrement significative en ce qui concerne la détection d’exoplanètes candidates : les méthodes de détections par transit ou par vélocité radiale ont fait leur preuve avec près de 900 exoplanètes confirmées et 2300 possibles candidates, un autre volet de la recherche d’exoplanètes commence à faire surface : la caractérisation des exoplanètes observés est maintenant mis de l’avant comme étant la prochaine étape à nos observations. Cela comprend la détermination de la composition atmosphérique des exoplanètes observées : les molécules typiques que nous pouvons y retrouver ont des signatures spectrales caractéristiques, et ce même à petit ratio. Le transit de la planète devant son étoile devrait donc laisser une trace caractéristique à la composition de son atmosphère.

Nous misons notamment sur la révolution qu’amènera l’introduction des futures installations à plus haute résolution spectrale : les observations anticipées du JWST devraient nous permettre d’effectuer de la spectroscopie de transit de l’ordre de $R \sim 1000 - 3000$. La mise en service du EETL poussera même cette limite de résolution spectrale vers les $R \sim 10^5$. Cette perspective met de l’avant la caractérisation des atmosphères visés, notamment la composition de l’atmosphère.

Aux fins de détermination de la composition des atmosphères d’exoplanètes, nous proposons dans ce projet un module permettant de calculer le taux de transmission de radiation à travers le limbe de l’atmosphère d’une exoplanète. Ce dernier pourra ensuite être utilisé afin d’identifier les paramètres de compositions d’un atmsphère cible. Le module proposé permet de calculer le spectre de transmission à haute résolution en vue des futures données disponible. Les données d’opacité de l’atmosphère sont obtenus en utilisant la banque de données de sections efficaces du groupe ExoMol[1].

Nous proposons en plus une alternative au calcul ligne-par-ligne afin d’obtenir les valeurs approximative de sections efficaces dans le cas où l’élargissement des

raies d’absorption par la pression doit être pris en compte.

2 Théorie

2.1 Composition et stratification de l’atmosphère

Étant donné les paramètres initiales de l’atmosphère, soit le rapport de mélange des espèces composant l’atmosphère, la stratification de température de l’atmosphère, la masse et le rayon de l’exoplanète, nous dérivons la composition et le profil de pression de l’atmosphère sont calculé de manière discrète ; le nombre d’éléments discrétisés est déterminé par le paramètre de stratification (*strats*).

2.1.1 Poids moléculaire moyen

Soit le rapport de mélange C_x des espèces composant l’atmosphère où x correspond à l’indice de l’espèce. Le poids moléculaire moyen est calculé par :

$$\mu_{atm} = \sum_x C_x m_x \quad (1)$$

où m_x correspond à la masse moléculaire de l’espèce, en grammes.

2.1.2 Calcul de la hauteur d’échelle

La hauteur d’échelle, utilisée afin de caractériser la pression de l’atmosphère est donnée par[13] :

$$H = \frac{k_b T}{\mu_{atm} g} \quad (2)$$

où μ_{atm} est donné par l’équation 1, k_b la constante de Boltzmann et g l’accélération gravitationnelle, obtenu avec le rayon, la masse et calculée avec la loi universelle de gravitation. Dans le cas d’un atmosphère non-isotherme, nous prenons la valeur moyenne des températures données. Nous considérons cette approximation acceptable étant donnée que la température d’une atmosphère planétaire ne varie qu’un d’un léger facteur [9].

2.1.3 Calcul de la pression en fonction de la hauteur

Le profil de pression de l'atmosphère est obtenu avec l'équation dérivée de l'équilibre hydrostatique :

$$P(z) = P_0 e^{-z/H} \quad (3)$$

Ici, P_0 est considéré comme la pression à partir de laquelle l'atmosphère est complètement opaque : dans le cas d'une géante gazeuse, ce point est considéré comme étant la surface de l'atmosphère. La figure 2.1.3 démontre un exemple de stratification d'une atmosphère quelconque.

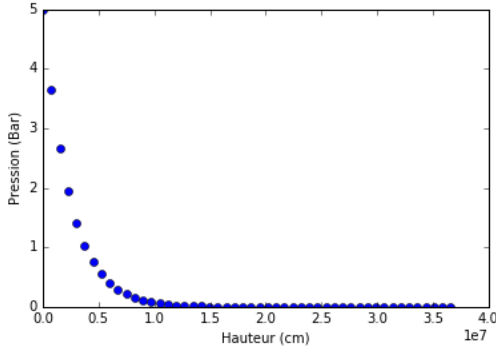


FIGURE 1 Pression d'une atmosphère planétaire avec $P_0 = 5.0$ bar. Le rayon et masse de Jupiter ont été utilisés comme référence dans le calcul de la hauteur d'échelle.

2.1.4 Calcul de la composition de l'atmosphère

Ayant maintenant les points de pression le long de l'atmosphère, en utilisant la loi des gaz parfaits, nous pouvons calculer la densité volumique des molécules à chaque points de pression (les conditions atmosphériques d'une atmosphère typique sont favorables à l'équation [11]) :

$$n_0 = \frac{P}{K_b T} \quad (4)$$

Nous obtenons ensuite la densité de chaque espèces de molécules avec la relation suivante :

$$n_x = C_x n_0 \quad (5)$$

où n_x est la densité d'une espèce x , C_x son rapport de mélange et n_0 la valeur obtenu par l'équation 4 à une pression P donnée. La figure 2.1.4 démontre un exemple de composition de H_2O , CO et CH_4 pour une exoplanète avec une atmosphère de type dominée- H_2 .

2.2 Profondeur optique

L'obtention de la profondeur optique d'une certain longueur d'onde λ à un rayon r du centre de la planète est calculé à partir de la relation suivante [13] :

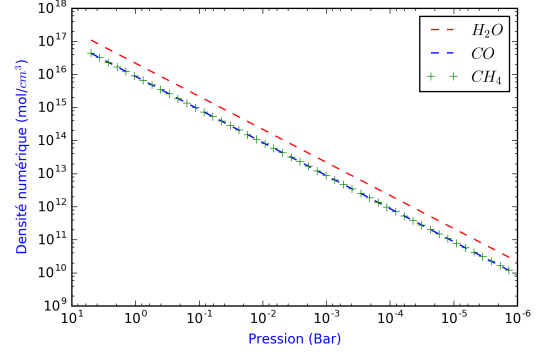


FIGURE 2 Profil de pression-composition moléculaire d'une atmosphère dominée par H_2 avec présence de H_2O , CO et CH_4 avec ratios de mélange de $5e^{-4}$, $2e^{-4}$ et $2e^{-4}$ respectivement.

$$\tau(r, \lambda) = 2 \int_0^{x_s} \sum_i n_i(r') \sigma_i[T(r'), P(r'), \lambda] dx \quad (6)$$

Où n_i correspond à la densité numérique de la molécule i , σ_i la section efficace en fonction de la température T , la pression P et de la longueur d'onde λ du faisceau incident à l'atmosphère.

Le chemin optique x_s dans les bornes de l'intégrale de l'équation 6 correspond au chemin traversé par le faisceau incident dans le limbe de l'atmosphère de l'exoplanète. Nous calculons les différents chemins pour chacune des couche de l'atmosphère par simple géométrie : soit une planète de rayon R et une hauteur du faisceau incident de z_2 , la distance parcouru afin que le faisceau atteigne la prochaine couche (soit z_3) est donné par :

$$x_{s23} = \sqrt{(R + z_3)^2 - (R + z_2)^2} \quad (7)$$

Où z_{23} correspond à la distance entre z_2 et l'intersecte avec la couche supérieur de l'atmosphère dans un chemin perpendiculaire à la hauteur z . La figure 2.2 résume la géométrie utilisée afin de calculer les points x_s du chemin optique.

Nous obtenons les valeur de n_i à l'aide de l'équation 5 (qui sont calculées pour toutes les différentes valeurs de P).

Pour ce qui en est de la valeur de σ_i , nous mettons de l'avant que le module présenté ne calcule pas les valeurs de sections efficaces : les données sont directement tirées de la base de données ExoMol. Les valeurs obtenues correspondent à des valeurs de lignes spectrale élargies uniquement par effet de Doppler (température)[6]. Les effets de la pression sur la largeur des lignes ne sont pas pris en compte par défaut. Nous proposons une méthode alternative afin d'estimer l'effet de la pression dans la section 3.3. Les sources de données spectrales d'ExoMol varient de molécule en molécule ; pour les molécules initiales d'intérêt, soit le CH_4 , CO et H_2O , les sources

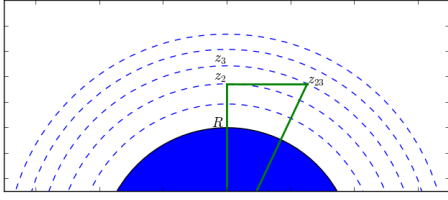


FIGURE 3 Exemple de la géométrie du calcul des éléments x_s pour le chemin optique du faisceau incident à l'atmosphère.

de liste de transitions proviennent respectivement des bases de données *YT10to10* [7], *BT2* [3] and *HITEMP* [8].

2.3 Transmission

Une fois que nous avons obtenus la liste de profondeurs optiques en fonction de la hauteur r de l'atmosphère et de la longueur d'onde λ , nous en calculons la transmittance à l'aide de la loi de Beer-Lambert :

$$T(r, \lambda) = e^{-\tau(r, \lambda)} \quad (8)$$

Il ne nous reste qu'à appliquer la transmission au faisceau incident correspondant géométriquement à l'anneau que forme le limbe de l'atmosphère. Nous effectuons ce calcul en premièrement, déterminant la surface que représente le limbe de l'atmosphère (sans transmission) :

$$F_i = \pi((z_{max} + R)^2 - R^2) \quad (9)$$

où z_{max} correspond à la hauteur maximal de l'atmosphère à partir sa surface ; définit par la pression minimal passé au module, et R le rayon de l'exoplanète.

Le flux transmis est ensuite calculé à l'aide d'une version légèrement simplifiée de l'équation du rayon apparent de l'exoplanète [13] :

$$F_t(\lambda) = \frac{2\pi}{F_i} \int_{z_0}^{z_{max}} rT(r, \lambda)dr \quad (10)$$

Où z_{max} correspond à la hauteur maximale dans l'atmosphère à partir de son centre (essentiellement le rayon, considérant la symétrie sphérique de la planète), r le rayon, $T(r, \lambda)$ la transmittance calculée en 8 et F_i la surface représentant le limbe de l'atmosphère. Le résultat, F_t , correspond au taux de transmission au travers du limbe de l'atmosphère variant de 0 pour un atmosphère complètement opaque à 1 pour complètement transparent à la longueur d'onde λ donnée.

3 Module : exotrans

3.1 Paramètres

Les paramètres de calcul du module doivent être passés à la fonction *exotran* du fichier *exomain.py*. Ce dernier retournera 2 listes de classe *numpy.ndarray*, respectivement la liste de nombres d'ondes d'intérêts ainsi que la liste des taux de transmission correspondants.

Les paramètres d'entrées doivent être passé sous forme de dictionnaire python. Le tableau 1 présente les paramètres requis ainsi que leurs unités.

Dans les cas de *mol_in* et *atm_in*, les informations moléculaires doivent être structurées sous forme de tuple. Par exemple, H_2 et CH_4 seraient déclarés de la façon suivante :

```
s1 = ('H2', 0.85, 2*1.6737236e-24)
s3 = ('12C-1H4', 2e-4, 2.66391311e-23)
```

Où le premier paramètre correspond au nom de la molécule avec nomenclature "iso-slug" tel que définit par ExoMol [1], comprenant le numéros d'isotope de l'atome. Le deuxième paramètre correspond au ratio de mélange de la molécule en question tandis que la troisième valeur correspond à la masse moléculaire.

Pour ce qui est de la température T , l'utilisateur doit fournir une liste de températures égalant au nombre de couches établis dans l'atmosphère et ce même dans le cas isotherme. Une manière simplifiée de passer le cas isotherme serait d'utiliser la syntaxe python suivante : `'T' : [1250] * 20`, qui passerait une liste 20 fois la température 1250K.

Nous notons que la stratification de l'atmosphère se fait de façon la façon suivante : la hauteur z_{max} est déterminée à partir des paramètres de pression et la hauteur d'échelle. Nous stratifions ensuite la liste de hauteurs z partant de 0 à z_{max} divisé en *strats* couches. Les pressions à ces points sont ensuite calculés. Cela pourrait poser problème considérant que les valeurs de la liste de température T doivent correspondent aux températures à ces couches.

3.2 Sous-module : exomol.py

Considérant que le module n'effectue pas de calcul de section efficace, un sous-module a été écrit afin de retrouver les valeurs nécessaires. La fonction *getMultExoData* est responsable d'obtenir les valeurs de sections efficaces pour plusieurs molécule à la fois.

Le sous-module procède de façon hiérarchique afin de retrouver les données : en premier lieu, le programme va tenter de lire le fichier de section efficace à partir du dossier d'installation du module. Si il ne trouve pas de fichier correspondant à la nomenclature établie des fichiers .sigma fournis par ExoMol [1], le programme procède ensuite en tentant de télécharger les valeurs à même le site web d'Exomol (<http://exomol.com/>). Les données téléchargées sont ensuite sauvegardé sur le disque dans le dossier créé par le programme,

TABLE 1 Paramètres d’entrées requis afin de calculer la transmission.

Paramètre	Unités	Description
v_min	cm^{-1}	Nombre d’onde minimum.
v_max	cm^{-1}	Nombre d’onde maximum.
dv	cm^{-1}	Espacement des nombres d’onde.
mol_in	Liste	Liste des molécules absorbantes de l’atmosphère.
atm_in	Liste	Liste des molécules composant l’atmosphère (non-absorbante, i.e. He , H_2).
strats	<i>Int</i>	Nombre de stratifications de l’atmosphère.
P_min	<i>Bar</i>	Pression minimum de l’atmosphère.
P_max	<i>Bar</i>	Pression maximale de l’atmosphère (à sa surface).
M	<i>g</i>	Masse de l’exoplanète.
R	<i>cm</i>	Rayon de l’exoplanète.
T	Liste (<i>K</i>)	Profil de température. Doit avoir le même nombre d’éléments que <i>strats</i> .
p_broad	<i>Bool</i>	<i>True</i> : Appliquer élargissement des raies par la pression.
lorz_width	<i>Int</i>	Multiple de la HWHM du profil de Lorentz.
res	<i>Int</i>	Résolution du profil de Lorentz.
mod	<i>Int</i>	Ignorer l’effet des $i^{èmes}$ couches de l’atmosphère. 0 correspond à toutes les couches, 1 ignore la première couche, etc.

/xsec_data. Cela permet donc aux futures exécutions du programme de directement obtenir les valeurs à partir des fichiers qui ont été téléchargées précédemment.

Bien que les données d’ExoMol sont considérées comme étant extensives [4], certaines limitations sont présentes sur les valeurs minimum et maximum du nombre d’onde, la température et la résolution. Nous incluons une étape de validation qui vérifie si les données présentées sont supportées par ExoMol. Dans le cas où un fichier aurait été modifié manuellement et que nous voudrions forcer le programme à continuer même si les paramètres ne sont pas supportés, l’option `val=False` peut être passée à la fonction `getMultExoData` afin d’ignorer l’étape de validation.

3.3 Sous-module : broadening.py

La première version du module ne prenait pas en compte l’élargissement des raies dû à la pression, en effet les données disponibles sur ExoMol ne sont qu’élargies par la température (Doppler) [1]. Une recherche plus profonde nous a révélé que l’élargissement des raies par la pression devient significatif et même domine la forme des raies lorsque nous sommes dans un régime de pression de l’ordre de ~ 1 bar, la largeur du profil Lorentzien (pression) domine sur celle du profil Gaussien (température) (Hedges, 2016, figure 2).

De plus, nous trouvons que l’augmentation de la résolution spectrale apporte un effet significatif sur la différence médiane des sections efficaces (Hedges, 2016, figure 13). Dans le passé, en raison des résolutions relativement basses des détecteurs en opération, il n’était généralement pas nécessaire de prendre en compte de l’effet de la pression sur les raies. En prédiction des plus hautes résolutions qu’ils nous seront disponibles, il devient évident que la pression doit être prise en considération.

Le sous-module `broadening.py` effectue essentiellement une convolution d’un profil Lorentzien sur les données de sections efficaces que nous avons obtenues d’ExoMol. Normalement, la valeur de section efface d’une certaine molécule serait donnée par [4] :

$$\sigma_{i,j,P,T}(\nu) = S_{i,j,P,T} \frac{f_\nu(\nu)}{\int_{-\infty}^{\infty} f_\nu(\nu) d\nu} \quad (11)$$

Où $f_\nu(\nu)$ correspond à un profil de Voigt, une convolution d’un profil Gaussien et Lorentzien. $S_{i,j,P,T}$ correspond à l’intensité de la ligne reliée à la transition d’un état i à j . Puisque les données que nous avons sont déjà élargies par le profil Gaussien, la convolution que nous effectuons sur les sections efficaces devrait donc correspondre à une bonne approximation de l’élargissement d’un profil de Voigt.

Nous évaluons le profil Lorentzien à l’aide de la formule [4][5] :

$$f_P = (\nu - \nu_0) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_L}{(\nu - \nu_0)^2 + \gamma_L^2} \quad (12)$$

γ_L correspond à la demi-largeur-demi-hauteur (HWHM) du profil de Lorentz, un paramètre obtenu par [4][5] :

$$\gamma_L = \left(\frac{T_{ref}}{T} \right)^n \left(\frac{P}{P_{ref}} \right) \sum_b \gamma_{L,b} p_b \quad (13)$$

Où T_{ref} et P_{ref} sont les valeurs de référence de température et pression, respectivement 296 K et 1 bar dans le cas d’ExoMol [1]. $\gamma_{L,b}$ et p_b correspondent à la HWHM de référence d’une molécule responsable de l’élargissement et de sa pression partielle. L’action de la pression sur une molécule donnée (ex. H_2O) peut donc être élargie par plus d’un gaz (H_2 et He généralement dans le cas d’une géante gazeuse). $\gamma_{L,b}$ et n sont disponibles dans la base de données ExoMol.

Les paramètres `lorz_width` et `res` du tableau 1 seront pris en considération si nous voulons appliquer l’élargissement de pression (en passant l’argument `'p_broad' = True`). Ils correspondent respectivement à la largeur du profil Lorentzien en multiples de HWHM et au nombre de points pour le profil. Il n’est généralement pas nécessaire d’avoir un profil Lorentzien couvrant la fonction complète tel que dans l’équation 12 ; la valeur des ailes du profil deviennent rapidement négligeables lorsque nous considérons leur contribution et l’impacte sur les performances.

De façon similaire au sous-module `exomol.py`, ce sous-module permet de retrouver les données d’élargissement à même le site d’ExoMol. Ce dernier nous donne accès aux données d’élargissement sous forme de fichier `.broad` qui sont automatiquement téléchargés dans le sous-dossier créé `./broad/`. La structure nous donne une liste de valeurs de l’exposant de température n et la largeur $\gamma_{L,b}$ de l’équation 13 sous la forme (colonne 2 et 3) :

a3	0.0381	0.273	13	13	3	6
a3	0.0283	0.197	20	21	5	6
a3	0.0404	0.292	12	12	2	5
a3	0.0381	0.273	13	13	4	7

Or, ces valeurs sont spécifiques à l’action d’un gaz élargissant sur une certaine molécule et sont reliées à une transition particulière (d’où les autres données du fichier qui les relient à une transition/état particulier). Puisque nous n’effectuons pas de calcul ligne-par-ligne dans ce modèle, nous avons décidé de prendre la valeur de défaut pour un certain gaz d’élargissement sur une molécule, la valeur disponible dans le fichier `.def` d’une molécule d’intérêt. Ces données de défaut peuvent être utilisées lorsque aucun autre paramètre d’élargissement est disponible.

4 Résultats

Bien que nous n’ayons pas de paramètre actuel afin de tester le programme, nous avons utilisé des données fictives pour une planète de taille et masse similaire à Jupiter. La figure 4 présente les résultats obtenus par le module pour les cas sans et avec élargissement par pression. Ces résultats sont obtenus avec un temps d’exécution $\sim 5s$.

Comme référence, nous avons également comparé certaines raies avec des résultats obtenus par Snellen et al. (2010)[12] en produisant des modèles de transmission similaires à ceux présentés par Snellen. Nous avons réussi à identifier des raies communes entre les deux modèles, mais avons aussi remarqué que les valeurs de transmission de référence semblent être inversées comparative-ment aux résultats que nous obtenons. Il a été conclu qu’il n’y a pas d’inversion des valeurs que nous obtenons. L’ordre de grandeur des raies a aussi été comparé afin de confirmer que nous sommes bel et bien dans le même régime de transmission.

TABLE 2 Effet du paramètre `mod` sur le patron de transmission

mod	Variation (%)	Temps d’exec. (s)
0	0.00	6.020
5	-0.48	5.691
8	-5.1	5.516
10	-12.9	5.343
15	-54.0	5.193

Nous avons de plus comparé l’effet de du paramètre `mod` sur les résultats en simplement comparant la somme totale des taux obtenus avec la valeur de référence à `mod=0`. La comparaison est décrite dans le tableau 2. Essentiellement, le fait de sauter les couches initiales correspond à considérer ces couches comme étant totalement opaque, et donc diminue les valeurs de transmission globalement.

4.1 Signifiante du taux de transmission

Nous jugeons nécessaire de brièvement discuter de la signification du taux de transmission donné par exo-tran. Le taux de transmission (%) correspond au pourcentage du flux incident qui traverse le limbe de l’atmosphère et *uniquement* le limbe : ce pourcentage est limité uniquement à la surface que représente le limbe de l’atmosphère entre la pression maximal et minimal donnée, soit un anneau. Il ne prend pas en compte, par exemple, le disque complet que représente la planète en transit devant son étoile : cela donnerais un taux plus petit car le disque opaque de l’exoplanète même coupe une large portion de la transmission.

5 Limitations, future développement et conclusion

Le modèle que nous proposons nous permet d’obtenir des modèles de transmission avec une grande flexibilité sur les paramètres du modèle : bien que le modèle a été construit avec la présence de CH_4 , CO et H_2O dans l’atmosphère d’une exoplanète de type géante gazeuse (atmosphère composée principalement de H_2 et He), nous avons construit le module avec un souci de flexibilité : essentiellement, les limitations du module correspondent aux molécules disponibles sur ExoMol, qui à ce jour, est considéré comme étant extensif (<http://exomol.com/data/molecules/>). Par contre, cette dépendance correspond aussi à une des faiblesses du modèle : le module ne pourrait fonctionner si le service ExoMol cessait d’exister. Le format des données de sections efficaces est heureusement assez simple : deux colonnes, nombre d’onde et section efficace ; le sous-module pourrait être aisément modifier afin d’utiliser une autre source similaire.

Dans cette conclusion, nous allons présenter ce que nous considérons comme étant les améliorations possibles au modèle ainsi que ses possibles points faibles

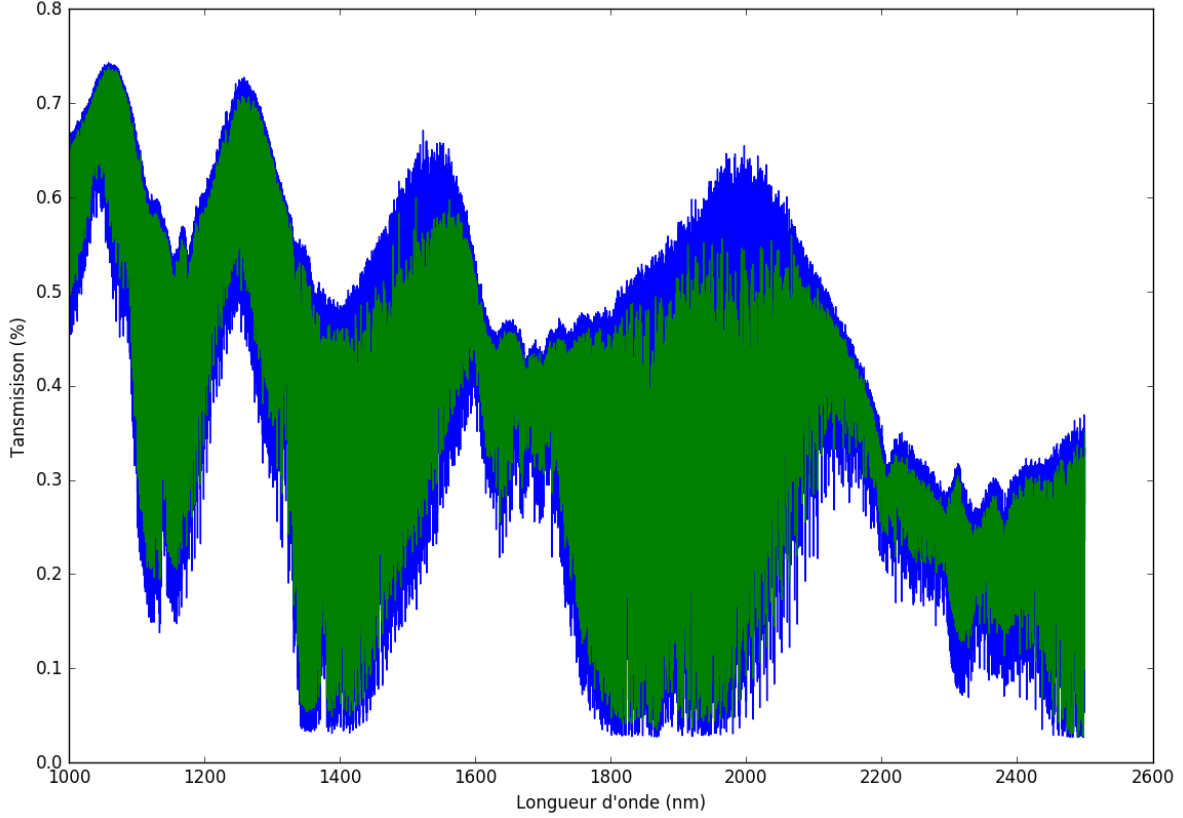


FIGURE 4 Transmission au travers du limbe de l'atmosphère d'une planète de masse $317.83M_{\oplus}$, rayon $11.209R_{\oplus}$, pour une atmosphère dominée- H_2 (ratio de mélange 0.85, 0.15 pour He) contenant du CH_4 (ratio $2e^{-4}$), CO (ratio $2e^{-4}$) et H_2O ($5e^{-4}$). Température isotherme de $1250K$. Stratification de l'atmosphère $strats=20$, pression à la surface (max) de 5.0 bar et à la limite de l'atmosphère de $1e^{-5}$ bar. **En bleu** : Sans élargissement par pression. **En vert** : Avec élargissement par pression.

afin de maximiser les capacités du modèle lorsque ce dernier sera utilisé dans un autre contexte.

5.1 Obtention des sections efficaces

Comme nous avons mentionné dans la section 3.2, le sous-module `exomol.py` procède par une hiérarchie de méthodes sous forme de :

```
try:
    method1()
except:
    try:
        method2()
    except:
        ...
```

Il est donc relativement facile de modifier l'ordre des méthodes et en introduire des nouvelles. Par exemple, ExoMol mentionne [1] un service de base de données TAP (Table Access Protocol) qui permettrait d'envoyer des requêtes directement sur la base de données via le protocole TAP, opération faisable en Python [2]. Ceci n'a pas été implémenté car au moment où ce projet a été effectué, le service ne semblait pas être disponible.

De plus, nous reconnaissons que dans certains cas, nous voudrions introduire du "padding" dans les données qui ont été téléchargées : par exemple dans le cas du CO , nous avons dû manuellement remplir le fichier avec des valeurs nulles de section efficace après avoir confirmé que ces dernières étaient effectivement 0 en dehors des nombres d'onde supportés par ExoMol. Une fonction permettant d'effectuer ce "padding" pourrait être utile.

Une autre fonction permettant de simplement lire un fichier étant donné simplement le nom d'un fichier par l'utilisateur serait à considérer.

5.1.1 ExoCross

Comme source alternative de valeurs de sections efficaces, les auteurs d'ExoMol mentionnent l'existence d'un programme permettant de calculer ces dernières à l'aide des données de transitions disponible sur ExoMol : ExoCross [14]. Il s'agit d'un programme Fortran permettant de calculer plusieurs paramètres spectroscopiques, tel que les sections efficaces. Nous avons testé le programme et ce dernier est en effet capable de produire des fichiers compatibles avec `exotrans`. Bien que peu de

documentation existe, le Wiki sur la page GitHub donne assez d'exemples afin d'être en mesure d'écrire un fichier `.inp` correspondant aux paramètres voulus.

Il serait aussi probablement possible d'intégrer Exocross dans notre module python à l'aide de modules disponible permettant de faire le lien entre les deux (numpy, F2Py) et ainsi complètement automatiser le module en le rendant indépendant du portail ExoMol.

5.1.2 Calcul ligne-par-ligne

Une autre source possible de sections efficaces serait simplement d'avoir le module calculer les intensités de chaque transitions. Effectivement, ExoMol nous donne accès à une large source de données spectroscopiques qui nous permettrait de calculer les intensités à la source.

Pour une molécule quelconque, l'intensité de la ligne $S_{i,j}$ en unités $cm^{-1}/(molecule \cdot cm^{-2})$ comporte une dépendance sur la fonction de partition $Q(T)$, le coefficient d'Einstein $A_{i,j}$, la dégénérescence de l'état supérieur g_i et l'énergie du niveau inférieur E_j [4][5]. Tout ces paramètres sont propres à une molécule et dépendent de la température. ExoMol nous fournis ces données sous forme de plusieurs types de fichier disponibles dans la base de données. Ces derniers sont structurés de la façon suivante [1] : nous partons d'un fichier de transitions `.trans` qui contient les transitions pour une plage de nombre d'onde. Ce dernier contient 3 colonnes : le *LowerStateID*, *UpperStateID* et le coefficient d'Einstein $A_{i,j}$ correspondant à cette transition. Les deux numéros d'identification pointent vers des états particuliers de la molécule qui sont décrits dans le fichier `.states`. Nous trouvons dans ce dernier l'énergie de l'état E_j ainsi que la dégénérescence g_i . La fonction de partition est donnée par le fichier `.pf` qui liste les différentes valeurs à des intervalles réguliers de température.

Bien que les données sont disponible et aisément manipulable, le nombre de transitions à prendre en compte dépasse le but de ce projet : le fichier de transition du CH_4 de 4000 à 4100 cm^{-1} uniquement comporte 45836433 transitions. Ceci étant dit, il serait entièrement possible de générer les valeurs à même le module.

5.2 Stratification et température non-isotherme

La manière dont le module interprète la stratification de température pourrait causer problème : en effet, la stratification effectués dans l'atmosphère (en fonction du paramètre `strats`) se fait de façon uniforme sur la hauteur z à partir de la surface jusqu'à la hauteur correspondante à la pression minimum de l'atmosphère. La figure 2.1.3 démontre bien comment la stratification est effectuée et comment les points de Pression-Hauteur sont répartis. N'étant pas au courant exactement comment les profils de températures non-uniforme seraient structurés lorsque passé au module, nous ne pouvons pas assumer que la liste de températures données s'ali-

gnera parfaitement avec les points z qui sont calculés par le module. Certaines modification pourraient être nécessaire soit au module lui-même ou au profil de température avant que ce dernier soit passé au module (en utilisant les fonctions de pression du fichier `exofunc.py`).

5.3 Prédétermination des nombres d'onde

La structure du modèle ne nous permet pas de sélectionner exactement quel nombre d'onde nous intéresse et en retrouver le taux de transmission : nous avons le contrôle uniquement sur le nombre d'onde initial, final et la résolution des pas. Cela pourrait poser problème si nous cherchons à retrouver les taux de transmissions pour une intervalle de nombre d'onde non-régulier. Présentement, les nombres d'ondes utilisés correspondent à ceux donnés par le fichier de sections efficace `.sigma`.

5.4 Élargissement des raies par pression

La méthode que nous avons proposée afin de prendre en considération l'élargissement dû à la pression ne s'agit que d'une approximation. Nous avons d'ailleurs rencontrer plusieurs problèmes d'implémentation en lien avec la normalisation du profil Lorentzien : une méthode différente de normalisation à dû être utilisée puisque nous effectuons une convolution discrète (à comparer avec une fonction continue, où une intégrale aurait suffi). Nous tenons à aviser que le sous-module `broadening.py` n'as pas été testé aussi rigoureusement que les autres volets du module ; nous avons confirmer que l'opération de convolution n'affecte pas l'amplitude d'une simple ligne horizontale, indiquant que la normalisation s'effectue correctement. Nous observons de plus des effets de bordure sur les patrons de transmission ; ces derniers devraient être étudiés afin de confirmer qu'il sont bel et bien voulu.

Une méthode sans faille serait d'introduire le profil de Voigt dans le calcul de ligne-par-ligne : bien que les données d'élargissement par pression soient peu nombreuses, ExoMol fournis néanmoins une quantité significative de données qui pourraient être prise en considération, mais comme mentionné précédemment, le volume de calcul nécessaire afin d'y arriver dépasse la portée de ce projet.

5.5 Conclusion

Beaucoup d'autre facteurs pourraient être pris en considération dans le calcul de transmission : nous ignorons le scattering atmosphérique, les effets de cycles jour-nuit, la présence de nuages de poussière dans l'atmosphère et l'opacité de condensat [10]. Ces derniers pourraient tous être pris en considération afin de présenter un modèle encore plus précis. Ceci étant dit, le modèle présenté offre une bonne approximation du patron de transmission de l'atmosphère d'une exoplanète, et ce de façon optimisé. La version courante du module a été produite avec le plus de flexibilité possible, permet-

tant, nous l'espérons bien, d'être la structure de base de future implémentations d'autant plus puissante, offrant des modèles de plus en plus précis envers la chasse de composition atmosphérique d'atmosphères d'exoplanètes.

Références

- [1] Jonathan Tennyson Sergei N. Yurchenk et AL. "The ExoMol database : Molecular line lists for exoplanet and other hot atmospheres". In : *Journal of Molecular Spectroscopy* 327 (2016). New Visions of Spectroscopic Databases, Volume {II}, p. 73 –94. ISSN : 0022-2852. DOI : <http://dx.doi.org/10.1016/j.jms.2016.05.002>. URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022285216300807>.
- [2] *Astroquery*. URL : <https://astroquery.readthedocs.io/en/latest/index.html>.
- [3] R. J. BARBER et al. "A high-accuracy computed water line list". In : *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 368.3 (2006), p. 1087. DOI : 10.1111/j.1365-2966.2006.10184.x. eprint : http://oup/backfile/Content_public/Journal/mnras/368/3/10.1111/j.1365-2966.2006.10184.x/3/mnras0368-1087.pdf. URL : [+http://dx.doi.org/10.1111/j.1365-2966.2006.10184.x](http://dx.doi.org/10.1111/j.1365-2966.2006.10184.x).
- [4] Christina HEDGES et Nikku MADHUSUDHAN. "Effect of pressure broadening on molecular absorption cross sections in exoplanetary atmospheres". In : *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 458.2 (2016), p. 1427. DOI : 10.1093/mnras/stw278. eprint : http://oup/backfile/Content_public/Journal/mnras/458/2/10.1093_mnras_stw278/2/stw278.pdf. URL : [+http://dx.doi.org/10.1093/mnras/stw278](http://dx.doi.org/10.1093/mnras/stw278).
- [5] Christian HILL. *HITRANonline*. URL : <http://www.hitran.org/docs/definitions-and-units/>.
- [6] Christian HILL, Sergei N. YURCHENKO et Jonathan TENNYSON. "Temperature-dependent molecular absorption cross sections for exoplanets and other atmospheres". In : *Icarus* 226.2 (2013), p. 1673 –1677. ISSN : 0019-1035. DOI : <http://dx.doi.org/10.1016/j.icarus.2012.07.028>. URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0019103512003041>.
- [7] A. V. NIKITIN, M. REY et V. G. TYUTEREV. "An efficient method for energy levels calculation using full symmetry and exact kinetic energy operator : Tetrahedral molecules". In : *The Journal of Chemical Physics* 142.9 (2015), p. 094118. DOI : 10.1063/1.4913520. eprint : <http://dx.doi.org/10.1063/1.4913520>. URL : <http://dx.doi.org/10.1063/1.4913520>.
- [8] L.S. ROTHMAN et al. "HITEMP, the high-temperature molecular spectroscopic database". In : *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 111.15 (2010). {XVIth} Symposium on High Resolution Molecular Spectroscopy (HighRes-2009)XVIth Symposium on High Resolution Molecular Spectroscopy, p. 2139 –2150. ISSN : 0022-4073. DOI : <http://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2010.05.001>. URL : <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002240731000169X>.
- [9] Sara SEAGER. *Exoplanet Atmospheres : Physical Processes*. Sous la dir. de David N. SPERGEL. Princeton University Press, 2010. Chap. 9, p. 186.
- [10] Sara SEAGER. *Exoplanet Atmospheres : Physical Processes*. Sous la dir. de David N. SPERGEL. Princeton University Press, 2010.
- [11] Megan I SHABRAM et al. "3d Opacity Profile and Model Transmission Spectra for Extrasolar Planet Atmospheres". In : 2009.
- [12] Ignas A. G. SNELLEN et al. "The orbital motion, absolute mass and high-altitude winds of exoplanet HD[thinsp]209458b". In : *Nature* 465.7301 (2010), p. 1049–1051. ISSN : 0028-0836. DOI : 10.1038/nature09111. URL : <http://dx.doi.org/10.1038/nature09111>.
- [13] Julien de WIT et Sara SEAGER. "Constraining Exoplanet Mass from Transmission Spectroscopy". In : *Science* 342.6165 (2013), p. 1473–1477. ISSN : 0036-8075. DOI : 10.1126/science.1245450. eprint : <http://science.sciencemag.org/content/342/6165/1473.full.pdf>. URL : <http://science.sciencemag.org/content/342/6165/1473>.
- [14] Sergey YURCHENKO. *Exocross*. <https://github.com/Trovemaster/exocross>. 2015.