

# Klasifikacija zvezdnih spektrov

2. domača naloga pri predmetu *Praktikum strojnega učenja v fiziki*

Domen Vaupotič

## 1 Galaktična arheologija

V nalogi bomo obravnavali zvezdne spektre, ki so bili posneti na angleško-avstralskem teleskopu (AAT) znotraj opazovanja GALAH (*GALactic Archaeology with Hermes*). Spektroskop HERMES omogoča, da hkrati izmerimo svetlobni spekter več kot 400 nebesnih teles v štirih spektralnih pasih. Osrednji namen opazovanja GALAH je določiti časovni razvoj kemijske strukture naše galaksije. Našo galaksijo sestavlja okoli 100 milijard zvezd, ki so večidel zbrane v diskasti ravnini in krožijo okoli središča galaksije. Zvezde in medzvezdni prah sestavljajo različni elementi periodnega sistema, od katerih sta pomembnejša vodik in helij, ki sta nastala pred štirinajstimi milijardami let kmalu po prapoku, vse nadaljnje pa imenujemo kar kovine (ali težki elementi), saj so nastali kasneje v zvezdah.

Podobno kot pri zemeljski arheologiji lahko s preučevanjem zvezd ugotovljamo razmere v preteklosti. Ob nastanku zvezde njena sestava odraža kemijske razmere v okolici ob tistem času. Starejše zvezde imajo tako manjši delež kovin kot mlajše zvezde, za zvezdi s podobno sestavo pa lahko sklepamo, da sta nastali v bližnji okolici.

## 2 Zvezdni spektri

Traven et al. (2017) so s postopkom klasificiranja podatkov iz opazovanja GALAH določili šest različnih morfoloških skupin spektrov. Podobne skupine bomo obravnavali tudi v tej nalogi, in sicer:

★ **MAB** – zvezde z molekulskimi absorpcijskimi črtami

Nastanek molekul v zvezdah je pogojen z dovolj nizko temperaturo zvezde (tipično pod 6000 K). Tipične molekule so dvoatomne, in sicer raznovrstni hidridi ( $\text{H}_2$ ,  $\text{MgH}$ ,  $\text{FeH}$ ) ter oksidi ( $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{TiO}$ ,  $\text{SiO}$ ,  $\text{NO}$ ), najdemo pa tudi kompleksnejše molekule, kot sta acetilen ( $\text{C}_2\text{H}_2$ ) in metan ( $\text{CH}_4$ ).

★ **BIN** – dvojne zvezde

Dvojne zvezde lahko delimo glede na način, s katerim jih zaznamo. V prvo skupino sodijo dvojne zvezde, ki jih razločimo že s teleskopom. Takšni zvezdi sta običajno znatno oddaljeni druga od druge in le šibko gravitacijsko interagirata. Spektroskopske binarne zvezde lahko ločimo šele z analizo spektra, v katerem se zaradi tangentnega gibanja glede na teleskop izmenjujejo modri in rdeči premiki spektra za vsako izmed zvezd. V tretjo skupino sodijo dvojne zvezde, ki jih zaznamo zaradi spremembe intenzivnosti (mrk), sicer pa obstajajo še bolj eksotični tipi dvojnih zvezd.

★ **TRI** – trojne zvezde

Podobno kot pri dvojnih zvezdah se v spektru sistemov trojnih zvezd pojavijo trojne črte.

★ **HFR** – vroče, hitro vrteče se zvezde

V to skupino sodijo zvezde zgodnjega tipa (v astronomskem žargonu to pomeni vroče zvezde), s temperaturami znatno nad temperaturo Sonca.

★ **HAE** – zvezde z emisijo  $H_\alpha$

Prisotna je značilna absorpcijska črta vodika pri valovni dolžini  $\lambda_{H_\alpha} = 6563 \text{ \AA}$ .

★ **CMP** – hladne zvezde z malo kovinami

Skupina poznih (hladnih) zvezd, ki imajo nizko vsebnost kovin. Kvantitativno to ovrednotimo s parametrom kovinskost:

$$[\text{Fe}/\text{H}] = \log_{10}(\text{N}_{\text{Fe}}/\text{N}_{\text{H}})_{\text{zvezda}} - \log_{10}(\text{N}_{\text{Fe}}/\text{N}_{\text{H}})_{\text{sonce}}.$$

V to skupino sodijo zvezde s kovinskostjo znatno pod Sončevo ( $-4,5 < [\text{Fe}/\text{H}] < -0,5$ ). Zaradi majhne vsebnosti kovin je celokupno manjše število absorpcijskih črt oziroma so te manj izrazite (spekter deluje bolj gladek).

★ **DIB** – vroče zvezde z močnejšimi medzvezdnimi absorpcijami

Spektri imajo razpršene absorpcijska območja (*diffuse interstellar bands*), ki nastanejo zaradi absorpcije svetlobe na medgalaktični snovi. Izvor teh absorpcijskih črt so pogosto večje organske molekule, npr. aromatski ogljikovodiki, potrjene pa so bile tudi absorpcijske črte fullerena,  $\text{C}_{60}^+$ .

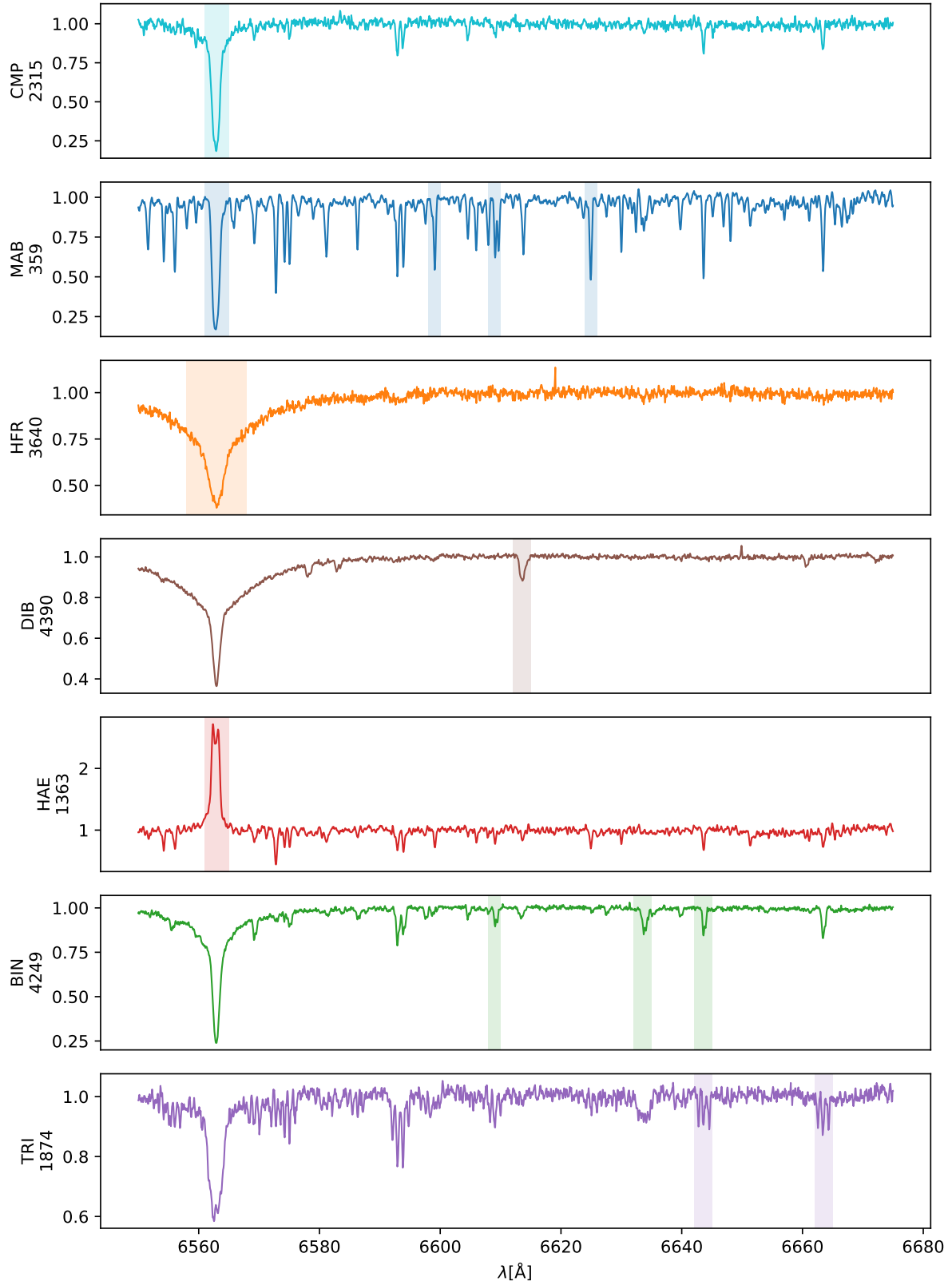
Oglejmo si za začetek nekaj tipičnih primerov vsake izmed skupin spektrov, ki so prikazani na sliki 1. Na vsakem spektru sem označil nekaj lastnosti, ki so ključne značilnosti dane zvezdne skupine, npr. razširjenost črt glede na temperaturo, prisotnost dvojnih in trojnih črt ipd.

## 3 Zmanjševanje dimenzij

Pomembno področje metod strojnega učenja predstavljajo metode za zmanjševanje dimenzij. Z njimi podatke iz več dimenzij preslikamo v manj dimenzij. Metode so še posebej primerne za vizualno predstavitev visokodimenzionalnih podatkov. V splošnem jih ločimo na linearne in nelinearne – v nalogi bo primer linearne metode analiza PCA, nelinearne pa metoda t-SNE.

### 3.1 Analiza poglavitnih komponent (PCA)

Analiza poglavitnih komponent (*principal component analysis*) je linearna metoda, s katero zmanjšamo dimenzionalnost točk. Rezultat metode je  $\mathbf{p}$  med seboj pravokotnih vektorjev, ki kar najbolje opisujejo podatke – povprečna razdalja točk do premic, ki jih podajajo vektorji, je najmanjša možna. Intuitivno si analizo PCA najlažje predstavljamo kot prileganje  $n$ -dimenzionalnega elipsoida na podatke, pri čemer njegove glavne osi predstavljajo izhodne vektorje analize PCA. Algoritem je razmeroma preprosto implementirati, njegova učinkovitost pa zavisi od algoritma za iskanje lastnih vrednosti matrike.



Slika 1: Tipični primer spektra za vsako zvezdno skupino. Označena območja predstavljajo pomembnejše značilnosti spektra.

1.  $n$  točk v  $p$  s  $p$  komponentami zložimo v matriko  $X$  dimenzije  $n \times p$ .
2. Izračunamo odstopanja podatkov od povprečja in jih shranimo v vektor  $\mathbf{u}$ :

$$u_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_{ij}.$$

3. Podatke centriramo in pridemo novo matriko  $B$ :

$$B = X - \mathbf{h}\mathbf{u}^T,$$

pri čemer je  $\mathbf{h}$  vektor enic.

4. Izračunamo kovariančno matriko matrike  $B$ :

$$C = \frac{1}{n-1} B^T B.$$

5. Poiščemo lastne vrednosti matrike  $C$ , tako da pridobimo lastne vrednosti  $\lambda_k$  in lastne vektorje  $\mathbf{v}_k$ :

$$V^{-1} C V = D.$$

6. Izberemo  $q$  največjih lastnih vrednosti in pripadajočih lastnih vektorjev. Lastne vektorje zložimo v stolpce nove matrike  $W$ .

7. Podatke projiciramo na novo bazo  $W$ :

$$T = XW.$$

Oglejmo si analizo PCA na dveh primerih. V prvem primeru, prikazanem na sliki 2 sem generiral 500 točk, naključno porazdeljenih po zavrti elipsi z različnima polosema. Analiza PCA nam vrne ravno (približne) vektorje v smeri polos. Projekcija točk nazaj na dve dimenziji se odraža zgolj v rotaciji točk, tako da osi elipse sovpadajo s koordinatnimi. Sedaj vzemimo točke v dveh dimenzijah, ki so združene v več gruči, in jih projicirajmo na eno dimenzijo. Na sliki 3 vidimo pripadajoče vektorje in projekcijo na premico. Projekcija vsebuje dve gruči, kar pomeni, da smo eno gručo izgubili, saj se je združila z drugo.

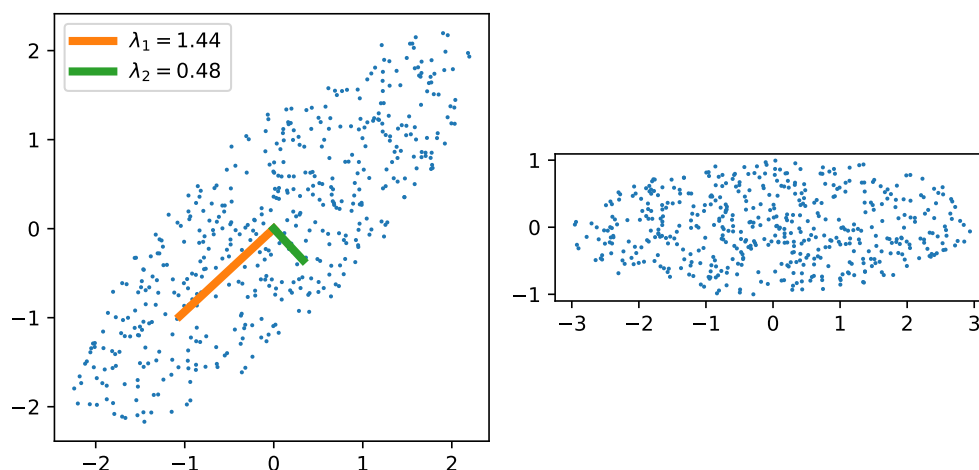
## 3.2 Metoda t-SNE

Metoda t-SNE (*t-distributed stochastic neighbour embedding*) je zelo zmogljiva nelinearna metoda za zmanjševanje dimenzij, še posebej primerna za vizualizacijo, pri kateri podatke preslikamo v dve (ali redkeje tri) dimenzije. Metodo sestavljata dva osrednja koraka:

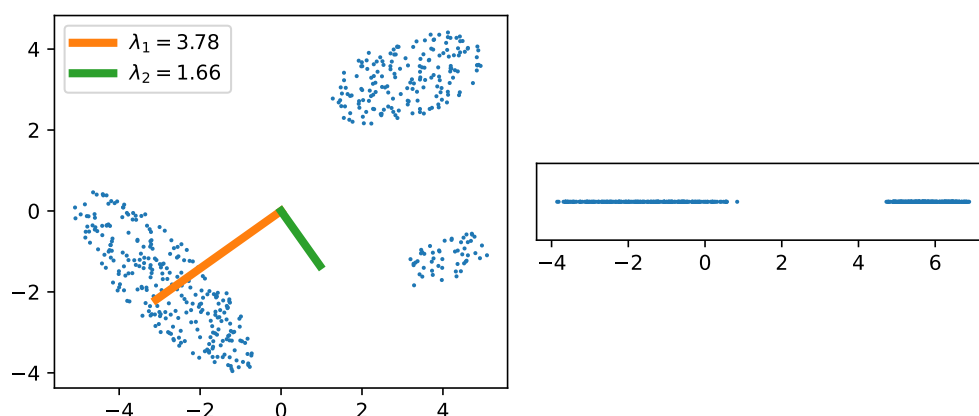
1. Sestavljanje pogojnih parskih verjetnosti  $p_{ij}$  v prvotnem prostoru.

Definirajmo količino  $p_{ij}$ :

$$p_{ij} = \delta_{ij} \frac{\exp\left(-|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|^2 / (2\sigma_i^2)\right)}{\sum_{k \neq i} \exp\left(-|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_k|^2 / (2\sigma_i^2)\right)}$$



Slika 2: Naključno porazdeljenih 500 točk po elipsi in pripadajoča vektorja iz analize PCA (levo). Projekcija točk na isto število dimenzij (desno).



Slika 3: Tri gručice točk in pripadajoča vektorja iz analize PCA (levo). Projekcija točk na premico (desno).

Količina  $p_{ij}$  je pogojna verjetnost in predstavlja podobnost točke  $\mathbf{x}_j$  in točke  $\mathbf{x}_i$ . Predstavljamo si jo takole: Izberimo si neko točko  $\mathbf{x}_i$ . Vse ostale točke imenujemo sosedi točke  $\mathbf{x}_i$ . Sedaj naključno izberemo enega izmed sosedov,  $\mathbf{x}_j$ . Verjetnost, da ga izberemo, izračunamo iz Gaussove porazdelitve, ki je odvisna od razdalje med točkama  $\mathbf{x}_i$  in  $\mathbf{x}_j$ , z varianco  $\sigma_i^2$ .

Opazimo, da je zgornja definicija pogojne verjetnosti dobra, saj je  $\sum_j p_{j|i} = 1$ . Definirati moramo še varianco  $\sigma_i^2$ , ki se med točkami razlikuje. Intuitivno si lahko predstavljamo, da z večjo varianco lažje dosežemo oddaljene sosede in tako zajamemo bolj globalno strukturo, medtem ko z manjšo varianco dajemo večjo pomembnost bližjim sosedom in lokalni strukturi. Ker pa so podatki skoraj zmeraj porazde-

ljeni po prostoru nehomogeno in se združujejo v različno velike skupke, želimo te razlike v gostoti izravnati, tako da varianco ustrezno prilagodimo lokalni gostoti točk. Dodatno uvedemo še skalirni parameter, imenovan *perpleksnost*, ki približno predstavlja število pomembnih sosedov točke. Perpleksnost  $\mathcal{P}$  za našo diskretno verjetnostno porazdelitev je definirana s Shannovo entropijo kot:

$$\mathcal{P}_i = 2^{-\sum_j p_{ji} \log_2 p_{ji}}.$$

Metoda t-SNE mora torej učinkovito najti  $\sigma_i$ , ki da porazdelitev z izbrano perpleksnostjo, kar opravi z dvojiškim iskanjem. Vrednost perpleksnosti običajno nastavimo med 5 in 50.

Izkaže se, da bo v naslednjem koraku težavo predstavljala minimizacijska funkcija. Ključna prednost metode t-SNE pred njeno predhodnico SNE je v uporabi *simetriziranih* pogojnih verjetnosti:

$$p_{ij} = \frac{p_{ji} + p_{ij}}{2N}.$$

2. Sestavljanje pogojnih parskih verjetnosti  $q_{ij}$  v nizkodimenzionalnem prostoru in minimizacija divergence KL.

Sedaj želimo v nizkodimenzionalnem prostoru (naključno) izbrati take točke, ki bodo odražale značilnosti prvotnega prostora, torej najbolj podobno porazdelitev prvotni porazdelitvi. Točke v novem prostoru bi lahko izbrali po Gaussovi porazdelitvi, a se izkaže, da to vodi v znatno gnečenje točk, saj ima Gaussova porazdelitev zelo kratek rep. Tukaj vstopi v igro druga ključna prednost metode t-SNE, ki namesto Gaussovih porazdelitev uporablja Studentovo porazdelitev, ta pa ima debelejši rep. Definirajmo torej najprej (simetrizirano) pogojno verjetnost v nizkodimenzionalnem prostoru med točkama  $\mathbf{y}_i$  in  $\mathbf{y}_j$ :

$$q_{ij} = \delta_{ij} \frac{\left(1 + |\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j|^2\right)^{-1}}{\sum_{k \neq l} \left(1 + |\mathbf{y}_k - \mathbf{y}_l|^2\right)^{-1}}$$

Glavni korak je sedaj najti nabor točk  $\mathbf{y}_i$  v nizkodimenzionalnem prostoru, da bo verjetnostna porazdelitev  $q_{ij}$  karseda podobna prvotni porazdelitvi  $p_{ij}$ . Podobnost porazdelitev iz vrednotimo s Kullback-Leiblerjevo divergenco, KL, ki hkrati predstavlja kriterijsko funkcijo, C:

$$C = \text{KL}(P, Q) = \sum_{i \neq j} p_{ij} \log \frac{p_{ij}}{q_{ij}}.$$

Ta izraz moramo minimizirati, kar metoda stori z gradientnim spustom. S krajšim računom lahko iz vrednotimo gradient divergence KL:

$$\frac{\delta C}{\delta \mathbf{y}_i} = 4 \sum_j (p_{ij} - q_{ij})(\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j) \left(1 + |\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j|^2\right)^{-1}.$$

Pomembno je poudariti, da divergenca KL *ni* konveksna, zaradi česar se pri minimizaciji lahko ujamemo v lokalne minimume, z različnimi ponovitvami pa – zaradi stohastičnosti metode! – pridemo do različnih končnih rezultatov.

Metodo t-SNE moramo sedaj še nekoliko dopolniti. Prvi dodatek je začetno umetno napihovanje razdalj med točkami, tako da v kriterijsko funkcijo dodamo člen kazenski člen ( $L^2$ ), s čimer preprečimo prehitro nastanek gruč. Ta člen po nekaj korakih umaknemo iz kriterijske funkcije. Naslednji pomembni dejavnik je hitrost učenja  $\eta$ , ki določa hitrost gradientnega spusta. Premajhna hitrost učenja lahko vodi v neoptimalne lokalne minimume.

Ostane še nekaj tehničnih podrobnosti. Gradientni spust lahko inicializiramo z naključnimi točkami (Gaussovske razporejenimi), ali pa naredimo PCA in točke razporedimo skladno z največjima dobljenima vektorjema iz PCA. Prav tako lahko v izračunu  $p_{ij}$  in  $q_{ij}$  uporabimo neevklidsko metriko.

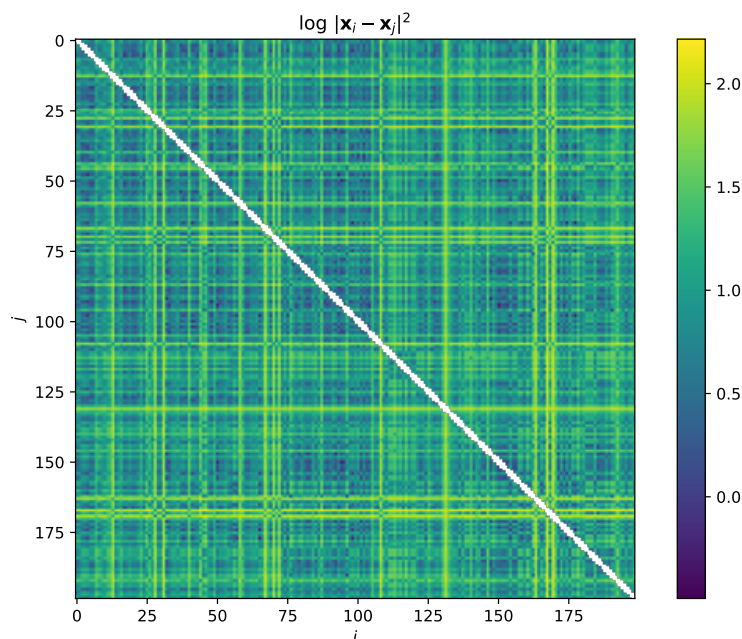
### 3.2.1 Aproksimacija Barnes-Hut

Ker ima metoda t-SNE veliko računsko zahtevnost  $\mathcal{O}(dN^2)$ , pri čemer je  $d$  število izhodnih dimenzij in  $N$  število točk, se pogosto poslužimo aproksimacije Barnes-Hut, ki deluje, kadar je število končnih dimenzij kvečjemu 3. Časovna zahtevnost aproksimacije Barnes-Hut se zmanjša na  $\mathcal{O}(dN \log N)$ . Dodatni parameter, ki ga uvede aproksimacija, je kot (*angle*), ki podaja kompromis med hitrostjo metode in točnostjo. Aproksimacija Barnes-Hut je sicer splošnejši primer aproksimacijskega algoritma, ki je še posebej uporaben pri večdelčnih simulacijah gibanja.

## 4 Rezultati

### 4.1 Razlike med spektri

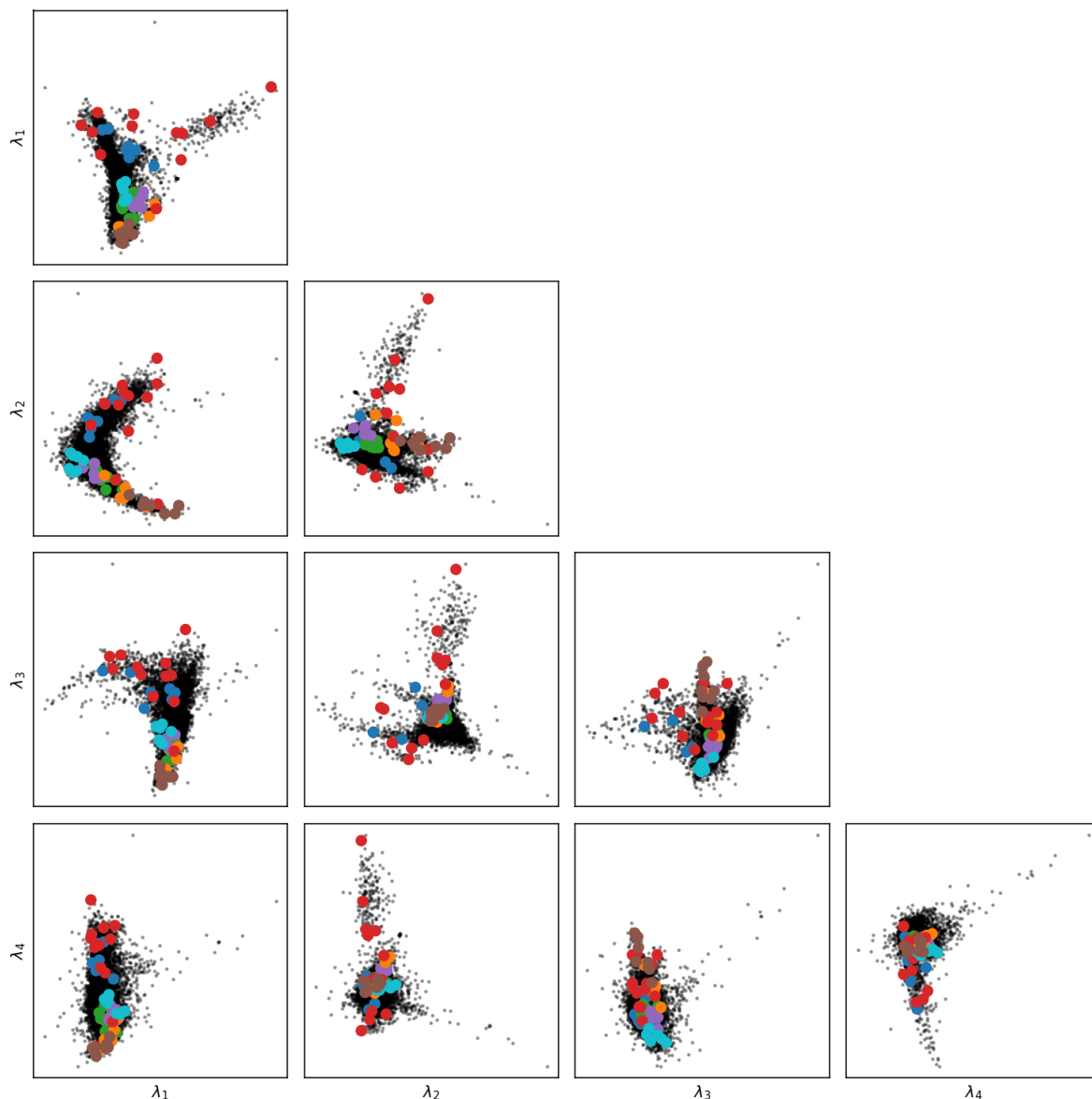
Za začetek si oglejmo, kako se med sabo razlikujejo spektri. Na sliki 4 so prikazane parske razlike za prvih 200 spektrov, izračunane po evklidski metriki. Opazimo prisotnost rumenih črt pri spektrih, ki se močno razlikujejo od večine ostalih spektrov.



Slika 4: Parske razlike za prvih 200 spektrov.

## 4.2 PCA

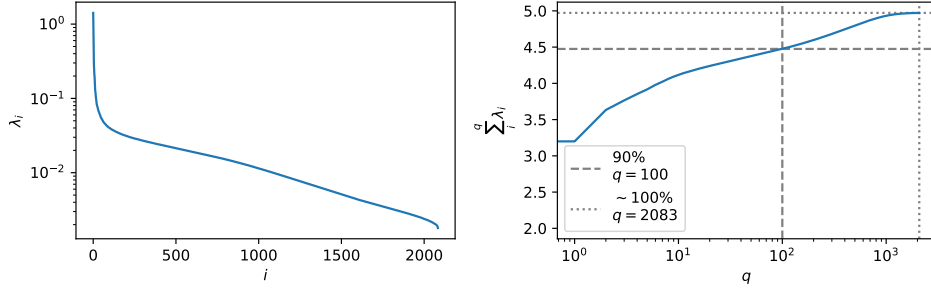
Posvetimo se sedaj zmanjševanju dimenzij s PCA. Na sliki 5 so prikazani rezultati PCA, tako da so prikazane najpomembnejše štiri dimenzije. Opazimo, da v splošnem dobimo samo eno veliko gručo, znotraj katere je sicer opazno lokalno gručenje podobnih spektrov. V določenih smereh se skupina nekaterih zvezd HAE rahlo loči od osrednje skupine. Ugotovimo torej, da metoda ne daje dobrih rezultatov.



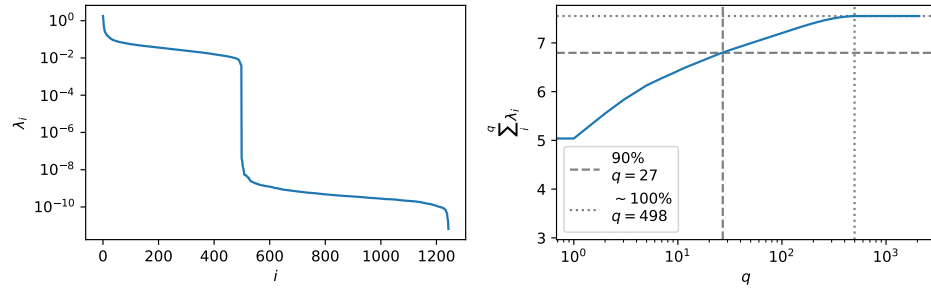
Slika 5: Spektri, preslikani na najpomembnejše 4 dimenzije z metodo PCA.

Na slikah 6 in 7 so prikazane še lastne vrednosti, ki jih dobimo z metodo PCA. Opazimo, da lastne vrednosti padajo potenčno, a je – zanimivo – hitrost padanja skokovito različna. Kadar vzamemo manj spektrov (500), pride do stodontnega nasičenja delnih vsot prej, torej lahko praktično popolnoma opišemo sistem z manj dimenzijami. V primeru celotnega nabora spektrov (10000), do nasičenja ne pride, a že zelo hitro (po 100 dimenzijah) dosežemo 90 % celotnega spektra.





Slika 6: Lastne vrednosti (levo) in kumulativne vsote lastnih vrednosti (desno) za celoten nabor spektrov.

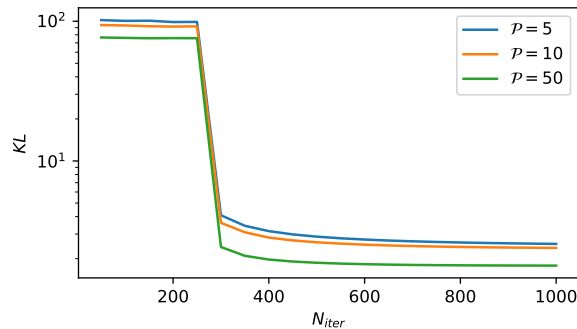


Slika 7: Lastne vrednosti (levo) in kumulativne vsote lastnih vrednosti (desno) za prvih 500 spektrov.

### 4.3 t-SNE

Preselimo se sedaj na nelinearno metodo, za katero pričakujemo boljše rezultate. Uporabil sem funkcijo TSNE iz knjižnice `sklearn.manifold`. Projiciral sem zmeraj na dve dimenziji s hitrostjo učenja  $\eta = 100$ , uporabljal evklidsko metriko in aproksimacijo Barnes-Hut s parametrom  $\theta = 0,5$  (sodeč po dokumentaciji, metoda ni posebej občutljiva na spremembe  $\theta$  med 0,2 in 0,8) ter inicializacijo začetnih točk s PCA.

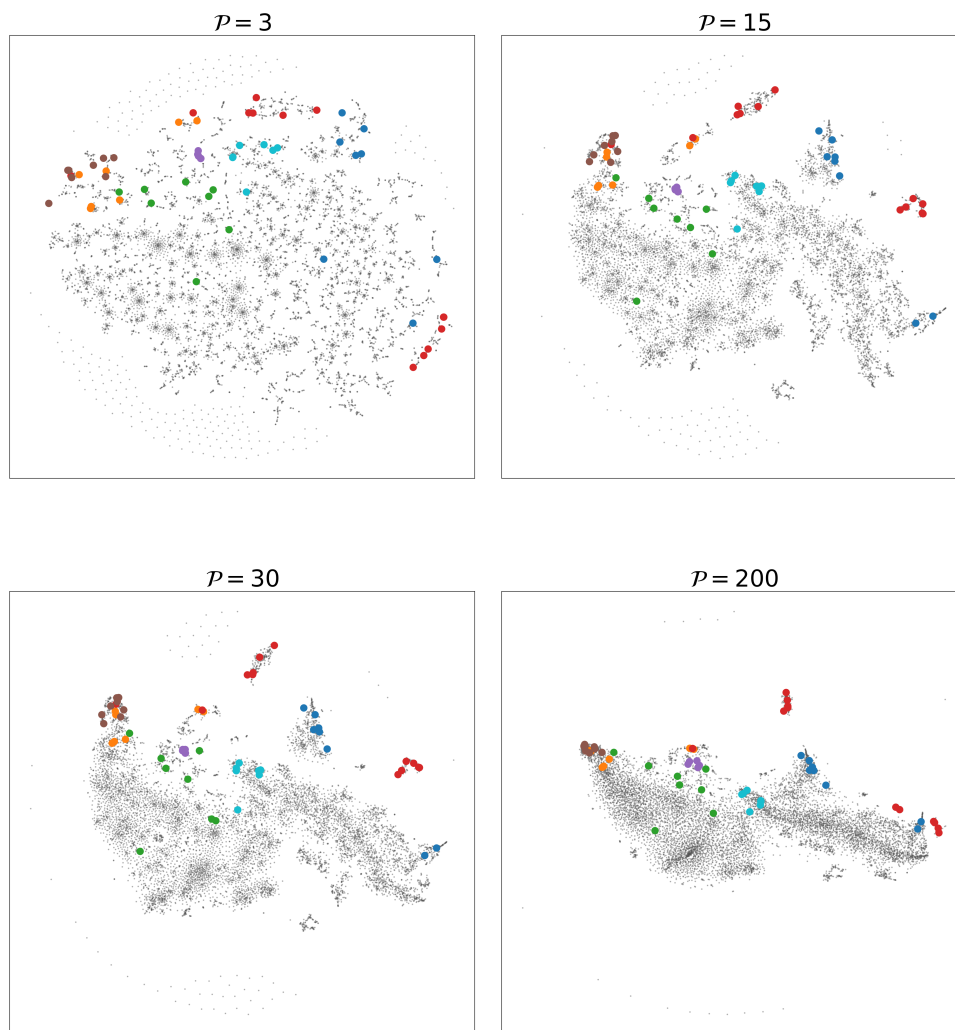
Na sliki 8 je prikazana konvergenca cenovne funkcije (Kullback-Leiblerjeve divergence) med iteracijami. Vrednost perpleksnosti ne vpliva znatno na hitrost konvergence, vpliva pa nekoliko na končni rezultat – višja perpleksnost vodi v nižjo vrednost KL. Opazna je tudi zelo visoka vrednost KL v prvih 250 iteracijah, ki je posledica umetnega napihovanja razdalj, s katerimi se prepreči prehitel nastanek lokalnih gruč.



Slika 8: Konvergenca cenovne funkcije za različne perpleksnosti  $\mathcal{P}$ .

### 4.3.1 Vpliv perpleksnosti na rezultat

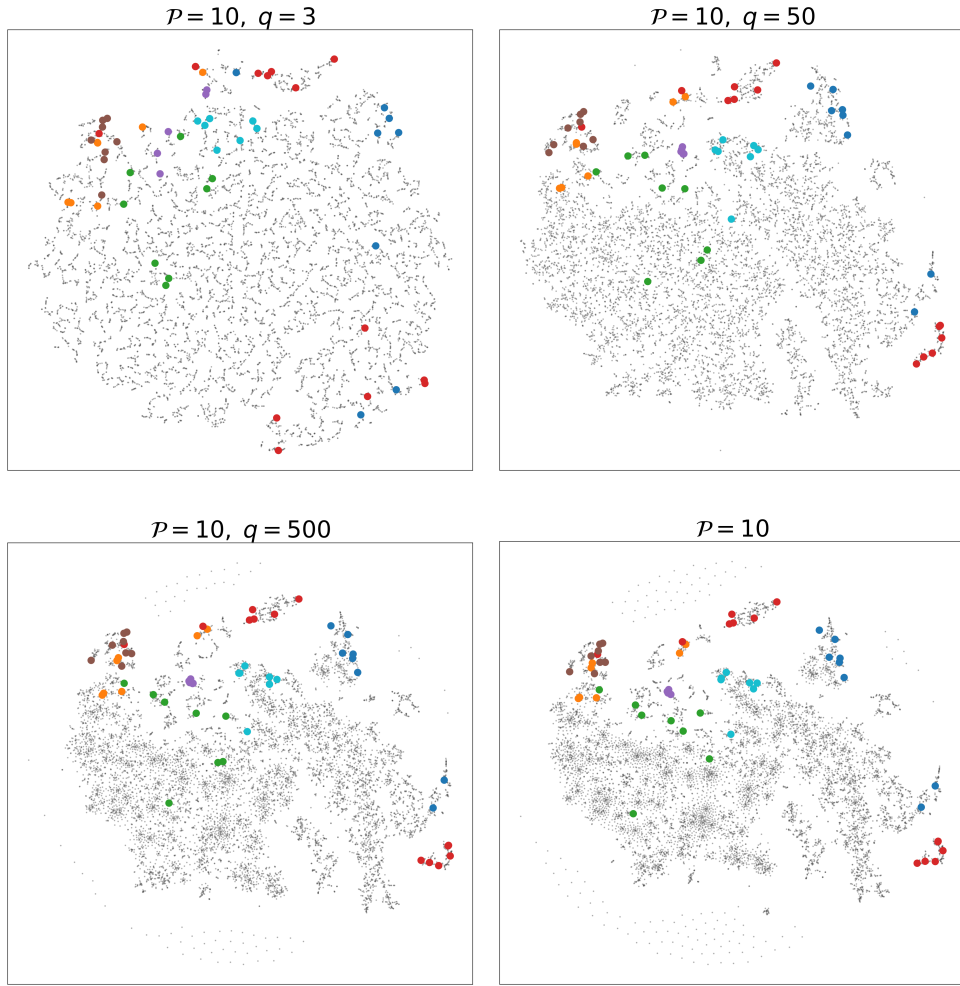
Oglejmo si sedaj, kakšen vpliv ima parameter  $\mathcal{P}$  na končni rezultat, kar je prikazano na sliki 10. Nižja vrednost  $\mathcal{P}$  vodi k razdrobljeni strukturi, kjer se točke združujejo v veliko majhnih gruč. Visok  $\mathcal{P}$  vodi k nastanku (ene) večje gmote, znotraj katere sicer še vedno obstajajo dobro ločena območja različnih tipov. Poiskati moramo torej kompromis, pri katerem bodo točke združene v zadosti velike gruč, a ne zlite v enotno gmoto.



Slika 10: Vpliv perpleksnosti  $\mathcal{P}$  na rezultat.

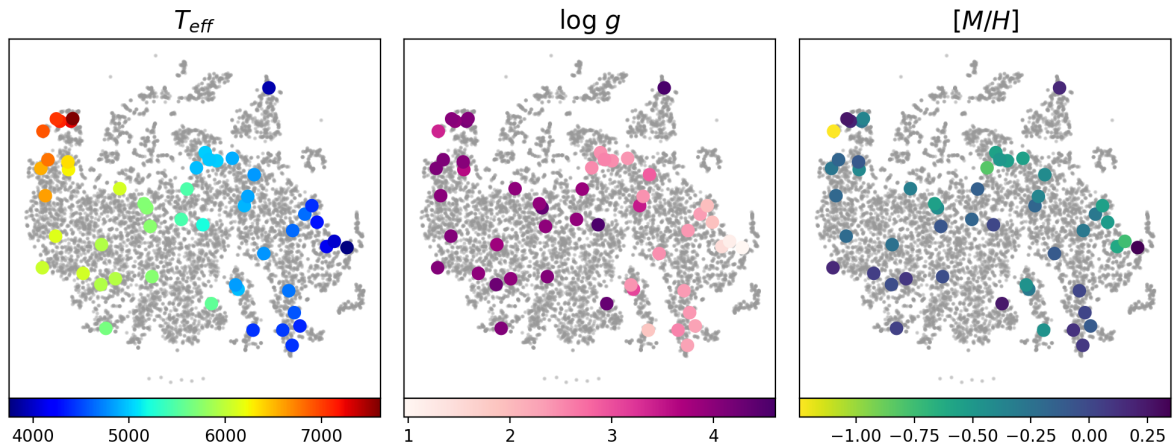
Metoda tSNE je razmeroma občutljiva na prisotnost prevelikega šuma, kar lahko vodi v slabo ločljivost najdenih skupin. Temu se lahko nekoliko izognemo, če podatke prej filtriramo, npr. z metodo PCA, tako da kot vhod za metodo tSNE uporabimo podatke, projicirane na  $q$  najpomembnejših vektorjev. Na sliki 12 je za  $\mathcal{P} = 10$  prikazan vpliv števila pomembnih komponent ( $q$ ). Opazimo, da s premalo dimenzijami dobimo praktično naključno nametane točke v krogu. Izbrati moramo torej zadosti veliko število dimenzij. Predhodno zmanjševanje dimenzij pa je sicer koristno tudi za zmanjševanje časovne zahtevnosti algoritma tSNE. Najdemo torej kompromis med hitrostjo in ločljivostjo.

Po občutku sem določil, da dobre rezultate daje kombinacija parametrov  $\mathcal{P} = 10$  in  $q = 100$ , zato bodo vsi nadaljnji rezultati prikazani za to izbiro parametrov. Na sliki 13 je prikazana porazdeljenost treh znanih parametrov v končnem rezultatu. Za vse tri



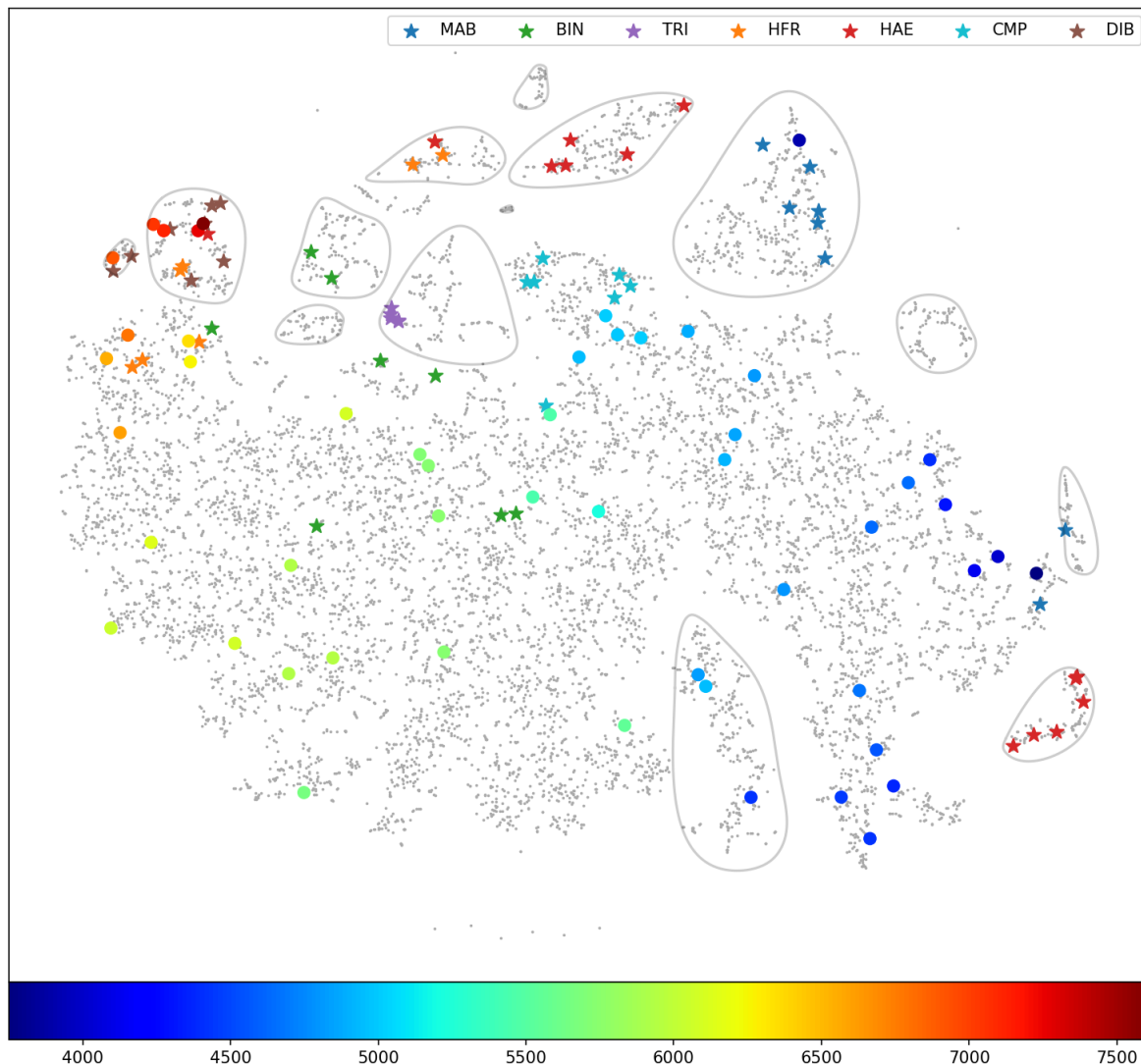
Slika 12: Vpliv uporabljenih komponent  $q$  iz analize PCA na rezultat.

parametre opazimo zelo jasen gradient znotraj osrednje gmote, tako da so toplejše zvezde z večjim gravitacijskim privlakom na levi in hladnejše z manjšim na desni. Pri kovinskosti je trend viden nekoliko slabše, izstopa pa ena zvezda z izjemno majhno kovinskostjo.



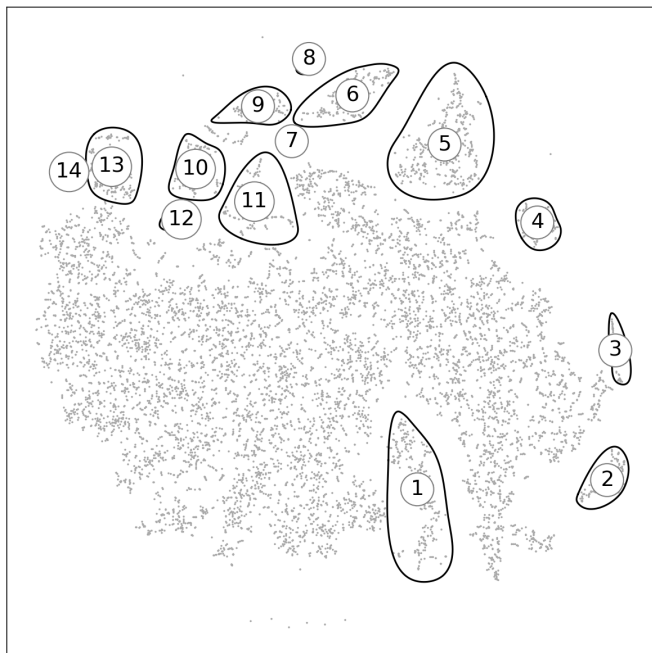
Slika 13: Porazdeljenost zvezdnih parametrov  $T_{\text{eff}}$  (efektivna temperatura),  $\log g$  (gravitacijski pospešek) in  $[M/H]$  (kovinskost).

Slika 14 prikazuje osrednji rezultat, kjer sem na eni sliki združil znane tipe zvezd in znane temperature. Subjektivno sem tudi določil gruč zvezd, ki so zadovoljivo ločene od preostalih. Opazimo, da večina skupin vsebuje vsaj eno zvezdo znanega tipa, prav tako pa se v vsaki skupini nahajajo le zvezde podobnega tipa.



Slika 14: Temperatura zvezd in tip zvezd. Obkrožene so samostojne gruč.

Slika 15 prikazuje oštevilčenje izbranih gruč. Za nekaj izmed gruč sem nato na sliki 16 zbral spektre vseh njenih zvezd in izračunal tudi povprečni spekter. V skupini 11 so tako na posameznih spektrih kot na izpovprečenem spektru vidne trojne črte. Skupini 4 in 5 predstavljata neznani skupini zvezd, znotraj katerih nimamo nobenega podatka ali zvezde znanega tipa. Zaradi nezadovoljivega poznavanja astronomije in zvezdnih tipov ne morem podati nobenih vsebinskih zaključkov o zvezdah znotraj teh skupin.



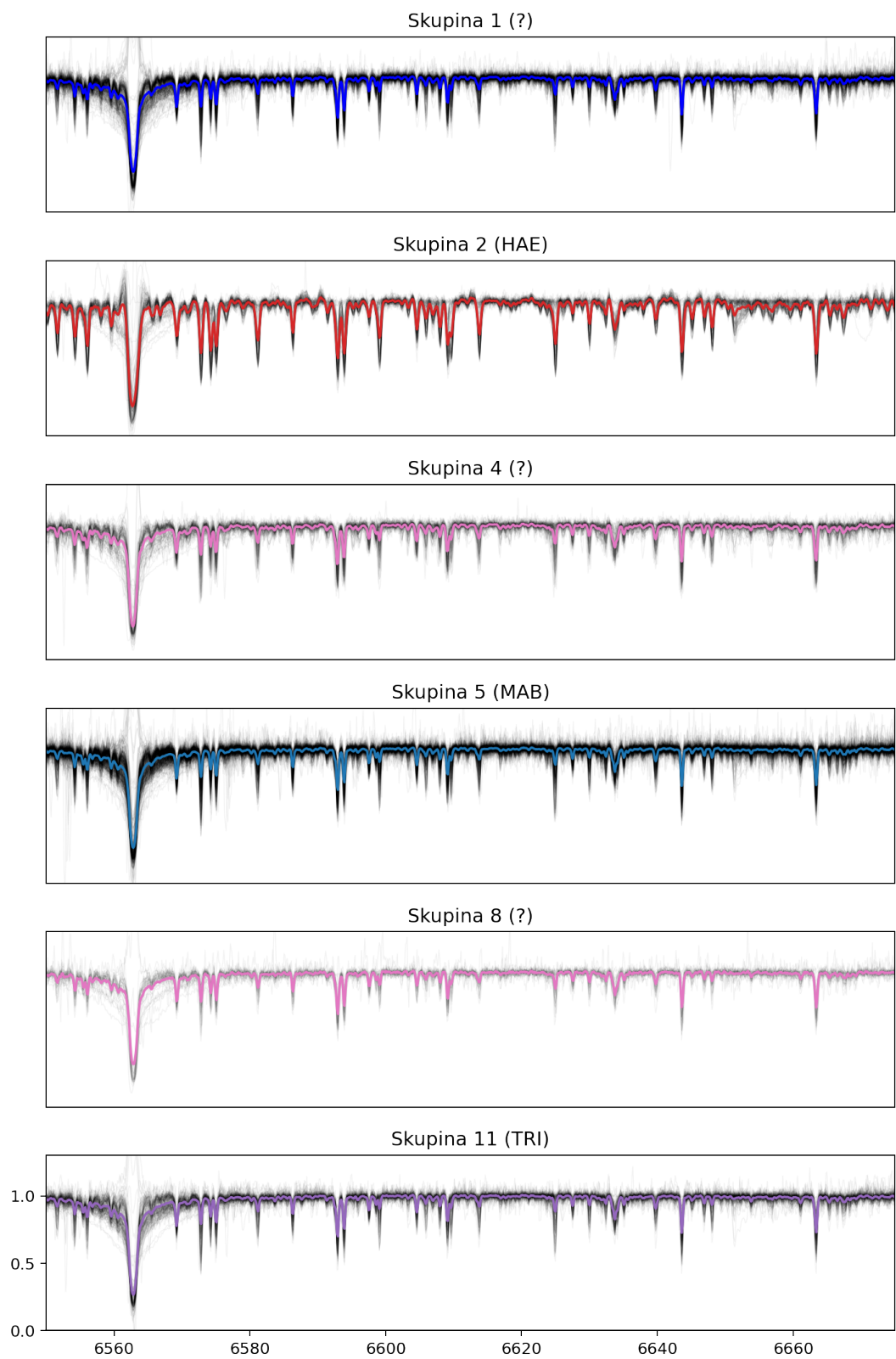
Slika 15: Označene ločene skupine.

#### 4.4 Klasifikacija brez $H_{\alpha}$

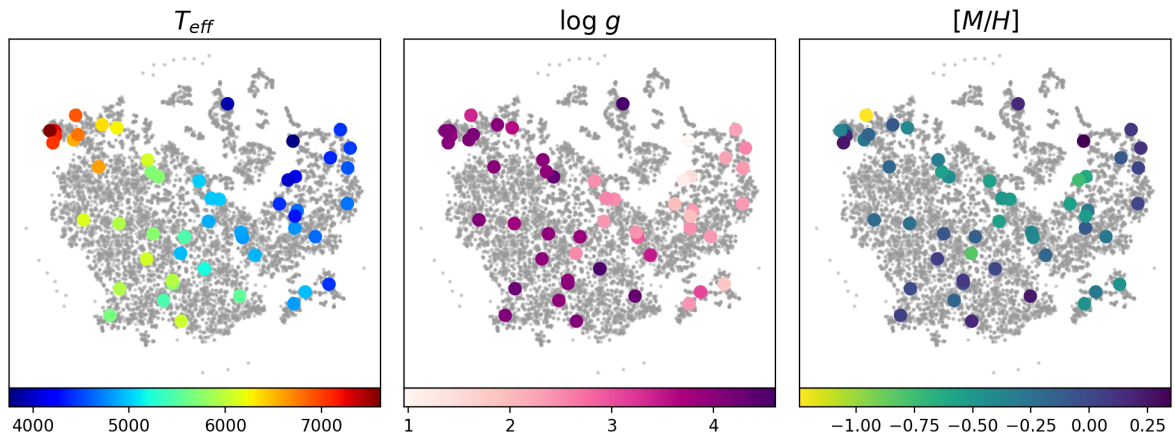
Za konec sem si ogledal še klasifikacijo spektrov, ki jim odrežemo območje okoli črte  $H_{\alpha}$ . Spektre sem tako odrezal pri valovni dolžini  $6570 \text{ \AA}$  in uporabil zgolj večje valovne dolžine. Rezultat je prikazan na slikah 18 in ??.

#### 4.5 Zaključek

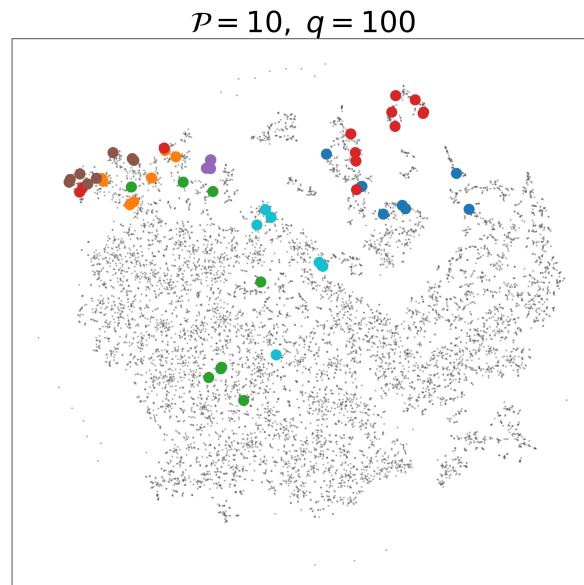
V nalogi smo se posvečali zbirki 10000 zvezdnih spektrov iz opazovanja GALAH, ki smo jih poskušali z metodami nenadzorovanega strojnega učenja klasificirati v več različnih skupin. Metoda PCA je zaradi svoje linearnosti in posledično omejene zmogljivosti bila povsem neuporabna, medtem ko je metoda tSNE dala presenetljive rezultate. Zvezdni parametri so bili elegantno razporejeni po osrednji gmoti končnega rezultata, od nje pa se je dobro ločilo tudi nekaj posameznih zvezdnih gruč. Gruč, znotraj katere ni bilo nobenega znanega primera, zaradi pomanjkanja astronomskega znanja nismo nadalje klasificirali.



Slika 16: Spektri zvezd znotraj posamezne gruče ter izpovprečen spekter.



Slika 17: Porazdelitev zvezdnih parametrov za spektre brez  $H_\alpha$ .



Slika 18: Porazdelitev zvezdnih tipov za spektre brez  $H_\alpha$ .