UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

VALERIA RODRIGUES VALLE

ELABORAÇÃO DE MODELO COMPUTACIONAL PARA SÍNTESE DE POPULAÇÕES ESTELARES

VOLTA REDONDA

2025

VALERIA RODRIGUES VALLE

ELABORAÇÃO DE MODELO COMPUTACIONAL PARA SÍNTESE DE POPULAÇÕES ESTELARES

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação de Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia da Universidade Federal Fluminense como requisito parcial para a obtenção do Grau de Mestre em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia. Área de concentração: Física

Orientador: TIBÉRIO BORGES VALE

Coorientador: WAGNER RAMBALDI TELLES

VOLTA REDONDA

2025

Ficha catalográfica automática - SDC/BEM Gerada com informações fornecidas pelo autor

V181e	Valle, Valeria Rodrigues Elaboração de Modelo Computacional para Síntese de Populações Estelares / Valeria Rodrigues Valle 2025. 134 p.: il.
	Orientador: Tiberio Borges Vale. Coorientador: Wagner Rambaldi Telles. Dissertação (mestrado)-Universidade Federal Fluminense, Escola de Engenharia Industrial e Metalúrgica de Volta Redonda, Volta Redonda, 2025.
	1. Astrofísica Extragaláctica. 2. Síntese de Populações Estelares. 3. Método de Minimização SLSQP. 4. Análise de Componentes Principais. 5. Produção intelectual. I. Vale, Tiberio Borges, orientador. II. Telles, Wagner Rambaldi, coorientador. III. Universidade Federal Fluminense. Escola de Engenharia Industrial e Metalúrgica de Volta Redonda. IV. Título.
	CDD - XXX

Bibliotecário responsável: Debora do Nascimento - CRB7/6368

VALERIA RODRIGUES VALLE

ELABORAÇÃO DE MODELO COMPUTACIONAL PARA SÍNTESE DE POPULAÇÕES ESTELARES

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação de Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia da Universidade Federal Fluminense como requisito parcial para a obtenção do Grau de Mestre em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia. Área de concentração: Física

Aprovada em 22 de Janeiro de 2025.



TIBERIO BORGES VALE Data: 18/03/2025 11:22:25-0300 Verifique em https://validar.iti.gov.br

Prof. Tibério Borges Vale - Orientador, UFF



Documento assinado digitalmente Andre Luiz de Amorim Data: 19/03/2025 11:10:27-0300 CPF: ***.315.729-** Edu Werifique as assinaturas em https://v.ufsc.br

Prof. André Luiz Amorim, UFSC Documento assinado digitalmente CLEBER DE ALMEIDA CORREA JUNIOR Data: 20/03/2025 14:50:03-0300 Verifique em https://validar.iti.gov.br

Prof. Cleber de Almeida Correa Junior, UFF

Volta Redonda 2025

Agradecimentos

Gostaria de expressar, primeiramente, minha profunda gratidão aos meus pais, por sempre me apoiarem incondicionalmente e confiarem no meu potencial. Sua dedicação, amor e ensinamentos foram fundamentais em todas as etapas da minha vida, proporcionando não apenas as oportunidades necessárias, mas também a base sólida de valores que me guiaram até aqui. Sou imensamente grata por serem meu porto seguro e minha inspiração diária.

Ao meu esposo, Leandro, cuja parceria tem sido o nosso alicerce ao longo dessa jornada juntos. E que durante este último ano, marcado por desafios pessoais e problemas de saúde, sua presença foi fundamental. Com seu carinho, otimismo contagiante e apoio constante, foi uma fonte de força nos momentos mais difíceis encorajando-me a persistir e seguir em frente.

Estendo meus agradecimentos aos meus amigos Karina, Márcia e José Felipe, que estiveram ao meu lado durante esses anos de mestrado, sua companhia e apoio, tanto no âmbito acadêmico quanto pessoal, foram indispensáveis. Compartilhamos não apenas os desafios, mas também as conquistas e alegrias dessa trajetória.

Por fim, ao meu orientador, professor Tibério, registro meu sincero agradecimento por sua paciência e dedicação. Seu voto de confiança foi essencial para que eu acreditasse na minha capacidade de concluir este trabalho. Sou imensamente grata por sua orientação e incentivo ao longo deste percurso. Como aluna e colega de profissão, reconheço e admiro o seu comprometimento em proporcionar um ensino de excelência.

Resumo

Esta dissertação aborda a síntese de populações estelares e sua aplicação na recuperação do histórico de formação estelar de galáxias, com foco no desenvolvimento e aplicação de metodologias que combinam modelos teóricos de espectros de Populações Estelares Simples (SSP) para reproduzir espectros de Populações Estelares Compostas (CSP). São utilizados algoritmos de otimização, como (i) o Sequential Least Squares Quadratic Programming (SLSQP), para minimizar a função de χ^2 calculada com base na diferença entre espectros de galáxias (simuladas ou observadas) e os espectros sintetizados, e (ii) o método de Análise de Componentes Principais (PCA), para a redução da dimensionalidade da biblioteca de modelos espectrais teóricos, afim de excluir modelos teóricos de populações estelares simples que apresentam espectros semelhantes. São apresentados os fundamentos teóricos da espectroscopia, abrangendo linhas espectrais, classificação estelar, extinção galáctica e o efeito Doppler, seguidos por uma introdução à astronomia extragaláctica, com destaque para o espectro de galáxias e as características das populações estelares. A metodologia incluiu a preparação e correção de dados observacionais, a construção de modelos espectrais teóricos com uso do *software* GALAXEV, e a aplicação do método de PCA. O método SLSQP foi empregado para ajuste espectral. A faixa de ajuste espectral analisada compreende 3800 Å a 7000 Å. Os resultados indicam que o SLSQP recuperou o histórico de formação estelar de maneira precisa em dados simulados, enquanto o PCA reduziu a precisão dos resultados nesses dados; entretanto, para o cubo de dados real não houve prejuízo na qualidade do ajuste espectral quando a síntese espectral foi realizada com o conjunto reduzido de modelos teóricos, selecionados através do PCA. A redução do custo computacional necessário para a execução da síntese espectral foi significativa. Para trabalhos futuros, recomenda-se investigar as possíveis perdas associadas ao uso do PCA na redução do conjunto de modelos teóricos de populações estelares simples, bem como aprimorar as metodologias de correção aplicadas aos dados observacionais.

Palavras-chave: Astrofísica Extragaláctica; Síntese de Populações Estelares; Método de Minimização SLSQP; Análise de Componentes Principais.

Abstract

This dissertation addresses the synthesis of stellar populations and its application in the recovery of the star formation history of galaxies, focusing on the development and application of methodologies that combine theoretical models of spectra of Simple Stellar Populations (SSP) to reproduce spectra of Composite Stellate Populations (CSP). Optimization algorithms are used, such as (i) the Sequential Least Squares Quadratic Programming (SLSQP), to minimize the χ^2 function calculated based on the difference between galaxy spectra (simulated or observed) and the synthesized spectra, and *(ii)* the *Principal* Component Analysis (PCA) method, to reduce the dimensionality of the library of theoretical spectral models, in order to exclude theoretical models of simple stellar populations that present similar spectra. The theoretical foundations of spectroscopy are presented, covering spectral lines, stellar classification, galactic extinction and the Doppler effect, followed by an introduction to extragalactic astronomy, with emphasis on the spectra of galaxies and the characteristics of stellar populations. The methodology included preparation and correction of observational data, construction of theoretical spectral models using the GALAXEV software, and application of PCA method. The SLSQP method was used for spectral fitting. The spectral fitting range analyzed comprises 3800 Å $\,$ to 7000 Å. The results indicate that SLSQP recovered the star formation history accurately in simulated data, while PCA reduced the accuracy of the results in these data; however, for the real data cube there was no loss in the quality of the spectral fitting when the spectral synthesis was performed with the reduced set of theoretical models, selected through PCA. The reduction in the computational cost required to perform the spectral synthesis was significant. For future work, it is recommended to investigate the possible losses associated with the use of PCA in the reduction of the set of theoretical models of simple stellar populations, as well as to improve the correction methodologies applied to observational data.

Keywords: Extragalactic Astrophysics; Stellar Population Synthesis; SLSQP Minimization Method; Principal Component Analysis.

Lista de Figuras

1	Local da ficha catalográfica	
2	Espectro Solar	24
3	Tipos de espectros.	25
4	Gráfico da Lei de Planck para diferentes temperaturas	26
5	Diferentes tipos de transição entre os níveis de energia	28
6	Diagrama HR esquemático	33
7	Diagrama HR com indicação das linhas de raio	35
8	Exemplo de Diagrama HR	36
9	Princípio do espectrógrafo de fenda	36
10	Sequência de Hubble	39
11	Diagrama de Hubble	40
12	Espectros de diferentes tipos de galáxias	43
13	Elementos da síntese de população estelar	47
14	Isócronas estelares em diferentes momentos	50
15	Modelo de formação estelar exponencialmente decrescente	52
16	Evolução das cores estelares em função da taxa de formação e metalicidade	53
17	Função x^4 e sua decomposição em Polinômios de Chebyshev $\ldots \ldots \ldots$	59
18	Gráficos dos Polinômios de Chebyshev	60
19	Remoção do avermelhamento.	80
20	Correção do <i>redshift.</i>	81
21	Templates biblioteca espectral - tabela	82
22	<i>Templates</i> biblioteca espectral - gráfico	83

23	Ajuste do contínuo pelos polinômios de Chebyshev
24	Aplicação das máscaras de linhas de emissão
25	Resultado do espectro modelado
26	Templates cubo simulado 1
27	Templates cubo simulado 2
28	Mapas de distribuição de populações cubos simulados
29	Curvas de distribuição de populações cubos simulados
30	Mapa de resíduos - SLSQP - 45 modelos
31	Ajuste espectral <i>spaxel</i> A - SLSQP - 45 modelos
32	Ajuste espectral <i>spaxel</i> B - SLSQP - 45 modelos
33	Comparação entre populações spaxel A - SLSQP - 45 modelos $\ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ $
34	Comparação entre populações spaxel B - SLSQP - 45 modelos $\ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ . \ $
35	Comparação entre modelos de populações estelares simples de 11 e 13 bi- lhões de anos
36	Templates sologionados polo PCA tabola
00	$T_{completes Selectoriados pero I CA - tabela \dots \dots$
37	<i>Templates</i> selecionados pelo PCA - gráfico
38	Ajuste espectral spaxel A - SLSQP - 15 modelos PCA - Cubo 1 104
39	Ajuste espectral <i>spaxel</i> B - SLSQP - 15 modelos PCA - Cubo 1 105
40	Mapa de resíduos - SLSQP - 15 modelos PCA - Cubo 1 106
41	Comparação entre populações $spaxel$ A - 15 modelos PCA - Cubo 1 $\ .\ .\ .\ .$ 106
42	Comparação entre populações $spaxel$ B - 15 modelos PCA - Cubo 1 $\ .\ .\ .\ .$ 107
43	Comparação entre 4 templates da base do cubo simulado 1 108
44	Mapa de resíduos - SLSQP - 15 modelos - Cubo 2 109
45	Ajuste espectral spaxel A - SLSQP - 15 modelos PCA - Cubo 2 109
46	
10	Ajuste espectral <i>spaxel</i> B - SLSQP - 15 modelos PCA - Cubo 2 110

48	Comparação entre populações spaxel B - 15 modelos PCA - Cubo $2 \ \ldots \ 111$
49	Mapa de resíduos - SLSQP - 45 modelos - Cubo real
50	Ajuste espectral spaxel A - SLSQP - 45 modelos - Cubo real \ldots
51	Ajuste espectral spaxel B - SLSQP - 45 modelos PCA - Cubo real $\ .\ .\ .\ .\ 116$
52	Populações <i>spaxel</i> A - SLSQP - 45 modelos PCA - Cubo real
53	Populações <i>spaxel</i> B - SLSQP - 45 modelos PCA - Cubo real
54	Mapa de resíduos - SLSQP - 45 modelos - Cubo real
55	Mapa da diferença entre resíduos χ^2 - cubo real com 45 e 15 modelos $~$ 118
56	Ajuste espectral spaxel A - SLSQP - 45 modelos - Cubo real \ldots
57	Ajuste espectral spaxel B - SLSQP - 15 modelos PCA - Cubo real $\ .$ 119
58	Populações <i>spaxel</i> A - SLSQP - 15 modelos PCA - Cubo real
59	Populações <i>spaxel</i> B - SLSQP - 15 modelos PCA - Cubo real
60	Populações <i>spaxel</i> A - LIneA MaNGA Portal
61	Populações <i>spaxel</i> B - LIneA MaNGA Portal

Lista de Tabelas

1	Classes espectrais	30
2	Índices de populações utilizadas para construção do cubo simulado 1. $\ .\ .$	95
3	Índices de populações utilizadas para construção do cubo simulado 2	96

Lista de Abreviaturas e Siglas

CCD Charge-Coupled Device

CSP Composite Stellar Population

EQP Equality-Constrained Quadratic Programming

FITS Flexible Image Transport System

HR Hertzsprung-Russell

IFU Integral Field Units

IMF Initial Mass Function

ISM Interstellar Medium

LP Linear Programming

MaNGA Mapping Nearby Galaxies at Apache Point Observatory

NLP Nonlinear Programming

PCA Principal Component Analyses

SDSS Sloan Digital Sky Survey

SED Spectral Energy Distribution

SFH Star Formation History

SFR Star Formation Rate

SLSQP Sequential Least Squares Quadratic Programming

SNR Signal-to-Noise Ratio

- ${\bf SPS} \ Stellar \ Population \ Synthesis$
- ${\bf SQP} \ Sequential \ Quadratic \ Programming$
- **SSP** Simple Stellar Population

Sumário

			ii
1	Intr	odução	19
			19
	1.1	Objetivos	20
	1.2	Trabalhos recentes e o presente trabalho	21
2	Esp	ectroscopia	23
			23
	2.1	O espectro e as linhas espectrais	23
			23
	2.2	Temperatura das estrelas	25
			25
	2.3	A estrutura atômica e a sua relação com as linhas espectrais	26
			26
	2.4	O efeito Doppler	28
			28
	2.5	Tipos espectrais e a classificação de Harvard	29
			29
	2.6	Diagrama de Hertzsprung-Russell	31
	2.7	Os espectrógrafos	34
			34
		2.7.1 Fenda longa e unidades de campo integral	37

			37
3	Astr	conomia Extragaláctica e as populações estelares	38
			38
	3.1	A Astronomia Extragaláctica	38
			38
	3.2	Expansão do universo e a lei de Hubble	39
			39
	3.3	Espectro de uma galáxia (ou Espectro galáctico)	41
			41
		3.3.1 Extinção galáctica	42
			42
	3.4	Síntese de populações estelares	45
			45
		3.4.1 Função de massa inicial	48
			48
		3.4.2 Isócronas estelares	49
			49
		3.4.3 Histórico de formação estelar	51
			51
		3.4.4 Metalicidade	53
			53
		3.4.5 Populações estelares simples	55
			55
		3.4.6 Populações estelares compostas	56
			56

4 Métodos matemáticos e computacionais		58		
				58
	4.1	Polinĉ	òmios de Chebyshev	58
				58
	4.2	Progra	amação Quadrática Sequencial	62
				62
		4.2.1	O Subproblema Quadrático	64
		4.2.2	O algoritmo básico	67
				67
			4.2.2.1 A Direção de Busca	67
				67
			4.2.2.2 Análise de convergência	68
				68
		4.2.3	O algoritmo Sequential Least Squares Quadratic Programming (SLSQF	P) 69
	4.3	Anális	se de Componentes Principais (PCA)	71
				71
		4.3.1	Padronização	71
				71
		4.3.2	Matriz de covariância	73
				73
		4.3.3	Auto-valores e auto-vetores	74
				74
		4.3.4	Vetor de propriedades ou vetor característico	74 75
		4.3.4	Vetor de propriedades ou vetor característico	74 75 75
		4.3.4 4.3.5	Vetor de propriedades ou vetor característico	74 75 75 76

5

Met	odologi	a	77
			77
5.1	A amo	ostra	77
			77
	5.1.1	Descrição dos dados	78
			78
	5.1.2	Correção dos dados observacionais	78
			78
		5.1.2.1 Validação	79
			79
		5.1.2.2 Avermelhamento ou Excesso de cor	79
			79
		5.1.2.3 Redshift	80
			80
5.2	Model	los de populações estelares simples	82
			82
5.3	Síntes	e espectral	83
			83
	5.3.1	Identificação das linhas espectrais	83
			83
		5.3.1.1 Ajuste de contínuo	84
			84
		5.3.1.2 Máscara de linhas de emissão	85
			85
	5.3.2	Método de otimização	87
			87

		5.3.3	Implementação do Principal Component Analyses (PCA) para re-		
			dução da dimensionalidade da biblioteca espectral	89	
				89	
			5.3.3.1 Decomposição e ordenação	89	
				89	
			5.3.3.2 Critério de seleção das PCs	90	
				90	
			5.3.3.3 Identificação dos templates relevantes	90	
				90	
		5.3.4	Apresentação do algoritmo implementado	90	
				90	
6	Res	ultados		94	
				94	
	6.1	Result	ados obtidos para os cubos simulados	94	
		6.1.1	Análise ajuste espectral com método SLSQP	94	
				94	
		6.1.2	Análise ajuste espectral após aplicação do Método de PCA	102	
				102	
	6.2	Result	ados obtidos para o cubo real	112	
		6.2.1	Análise aplicação do SLSQP ao cubo real	112	
				112	
		6.2.2	Análise aplicação após aplicação do Método de PCA ao cubo real .	114	
				114	
7	Con	clusões	e trabalhos futuros	121	
				121	
	71	Avalia	cão do desempenho do método SUSOP	191	
	1.1	rivana		141	

REFEF	RÊNCIAS 12	27
7.4	Trabalhos futuros	24
7.3	Considerações sobre o uso do método PCA na redução da dimensionalidade da biblioteca espectral 12	23
		22
7.2	Avaliação do tratamento de dados observacionais	22
		21

1 Introdução

Populações estelares, que compreendem estrelas de várias idades, metalicidades e estágios evolutivos, são unidades fundamentais dos sistemas galácticos. A compreensão de suas propriedades e distribuições é crucial para desvendar os processos ocorridos na formação e evolução das galáxias.

Conforme destacado por [15], o estudo da formação de galáxias trata, essencialmente, da compreensão dos processos que transformaram um universo originalmente homogêneo em um universo heterogêneo. Os autores evocam uma diversidade de fenômenos físicos envolvidos nesse processo, desde o crescimento de flutuações primordiais no universo inicial, passando pelo resfriamento e condensação de gás em nuvens moleculares que levam à formação de estrelas, até o surgimento de buracos negros supermassivos, os quais emitem intensas quantidades de radiação conforme se desenvolvem nos bojos galácticos.

Devido à grande complexidade dos processos físicos envolvidos, a Astrofísica Extragaláctica ainda enfrenta desafios na compreensão dos mecanismos responsáveis pela formação das populações estelares que compõem as galáxias. Além das estrelas, outro elemento crucial presente nas galáxias são as nuvens de gás e poeira, que também (re)emitem radiação observável em várias faixas do espectro eletromagnético. Uma compreensão aprofundada dos processos de formação estelar facilitará o estudo da *Spectral Energy Distribution* (SED) das galáxias, permitindo a separação eficaz da emissão estelar dos demais componentes presentes nos espectros observados.

Os métodos pioneiros de síntese de populações estelares eram complexos e possuíam muitos parâmetros livres, o que dificultava tanto sua aplicação quanto a interpretação dos resultados, além de fornecerem estimativas frequentemente inconsistentes e pouco precisas. Esses métodos baseavam-se na combinação de espectros de estrelas com diferentes características, como massas, idades e composições químicas, para tentar replicar o espectro observado [14]. As abordagens mais modernas seguem a metodologia da síntese populacional evolutiva, que busca reproduzir o espectro observado de uma galáxia através da combinação de modelos teóricos de populações estelares, baseados na evolução de estrelas com diferentes massas, idades e composições químicas.

Nas últimas décadas, levantamentos astronômicos de grande escala, como o *Sloan Digital Sky Survey* (SDSS), têm realizado extensos mapeamentos de objetos celestes, disponibilizando um vasto volume de dados para a comunidade científica. Esse cenário, aliado à diversidade de combinações de idades e metalicidades que podem compor um *Star Formation History* (SFH), torna imprescindível a otimização dos algoritmos de análise espectral voltados para a síntese de populações estelares, uma vez que a quantidade de dados disponíveis para análise tem crescido exponencialmente.

Nesse contexto, identifica-se uma lacuna em termos de *softwares* especializados em análise espectral que incorporem ferramentas de otimização eficientes para recuperar o SFH registrado na SED das galáxias.

1.1 Objetivos

Os objetivos deste projeto podem ser elencados na seguinte forma:

- Contribuir para a compreensão dos processos de formação estelar no histórico de formação de galáxias;
- Desenvolver uma arquitetura de software capaz de analisar conjuntos de dados espectroscópicos de Integral Field Units (IFU), de modo a incluir modelos de evolução estelar, dados observacionais e estruturas teóricas;
- Implementar algoritmos para sintetizar populações estelares com alta fidelidade, considerando parâmetros como idade, metalicidade, função de massa inicial e trilhas de evolução estelar;
- Projetar uma interface de usuário amigável para entrada de parâmetros, visualização de populações sintetizadas e análise de suas propriedades;
- Validar o software comparando populações sintetizadas com dados observacionais de diversos levantamentos astrofísicos da literatura científica;
- 6. Analisar a aplicação do método de Análise de Componentes Principais (PCA) para redimensionamento da base espectral de *templates* a ser usada na síntese de populações estelares; e

 Otimizar o software para escalabilidade e eficiência, permitindo análise de grandes conjuntos de dados e sistemas estelares complexos.

1.2 Trabalhos recentes e o presente trabalho

Uma etapa fundamental para o desenvolvimento deste trabalho foi a revisão de pesquisas recentes. Entre os estudos examinados no campo da síntese de populações estelares, destacam-se o ULySS [46], o MOPED [65] e o STARLIGHT [24]. O ULySS foi elaborado para determinar parâmetros atmosféricos estelares e reconstituir o histórico de formação estelar de galáxias, porém, conforme descrito [46], apresenta limitações quando aplicado à síntese de populações estelares devido ao número restrito de idades de populações que podem ser definidas nos modelos combinados [46]. O MOPED, por sua vez, foi desenvolvido com foco na recuperação do histórico de formação estelar de galáxias, assim como o presente trabalho, mas difere pela sua estratégia de otimização, que se baseia na razão S/N para estimar os coeficientes iniciais de contribuição de cada espectro modelado. Posteriormente, utiliza um método de máxima verossimilhança para determinar a melhor combinação de vetores ortogonais que representam o espectro observado, descartando dados irrelevantes para os parâmetros de estudo [65]. Diante disso, o STARLIGHT se destaca como o mais amplamente aceito pela comunidade científica, sendo empregado em uma vasta gama de pesquisas para análise espectral e síntese de populações estelares [26, 53, 17, 25, 23, 3]. Considerando seu amplo reconhecimento e número significativo de citações, este trabalho utiliza o STARLIGHT como base, mas com um enfoque voltado para a aplicação de técnicas de modelagem e otimização computacional. Ao contrário do STARLIGHT, o código desenvolvido aqui será disponibilizado à comunidade científica, permitindo futuras contribuições e o aprimoramento contínuo da ferramenta.

A dissertação está organizada da seguinte forma: O Capítulo 1 aborda a introdução ao tema e apresenta os objetivos principais do trabalho. No Capítulo 2, são discutidos os fundamentos de espectroscopia, incluindo a definição de espectros e suas linhas, a temperatura estelar e sua relação com as classificações espectrais e o efeito Doppler. O Capítulo 3 explora a Astronomia Extragaláctica e a síntese de populações estelares, detalhando aspectos como a função de massa inicial, isócronas estelares e histórico de formação estelar. No Capítulo 4, são apresentados os métodos matemáticos e computacionais utilizados, como os Polinômios de Chebyshev, a teoria geral da Programação Quadrática Sequencial com a descrição do algoritmo SLSQP e o método de Análise de Componentes Principais (PCA). O Capítulo 5, por sua vez, descreve a amostra de dados, os modelos de populações estelares simples, os procedimentos de síntese espectral e uma descrição resumida do código desenvolvido. Finalmente, os resultados obtidos são discutidos no Capítulo 6, e as conclusões e possíveis trabalhos futuros são apresentados no Capítulo 7.

2 Espectroscopia

A espectroscopia é uma ferramenta indispensável para o estudo das propriedades físicas e químicas dos objetos astrofísicos, permitindo a extração dos dados espectrais e a sua transformação em informações sobre as características dos objetos astronômicos. Este capítulo dedica-se a explorar os conceitos fundamentais relacionados ao espectro e às linhas espectrais, bem como a relação entre a temperatura estelar e as características espectrais observadas. Também são explorados aspectos da estrutura atômica e sua conexão com as linhas espectrais, o efeito Doppler e sua relevância na análise das linhas espectrais, além dos tipos espectrais de estrelas e a classificação de Harvard. Por fim, apresenta-se uma visão geral sobre os espectrógrafos e suas variações, incluindo o uso de fenda longa e unidades de campo integral (IFU).

2.1 O espectro e as linhas espectrais

Em 1666, Isaac Newton decompôs a luz solar com a utilização de um prisma, formando um espectro. Mais tarde, em 1814, Joseph Fraunhofer observou linhas escuras no espectro solar e passou a utilizar a observação de tais linhas para garantir a qualidade dos prismas que produzia. Ao constatar que uma variação na composição do vidro provocava um deslocamento nas linhas observadas, Fraunhofer relacionou o índice de refração dos vidros com a sua composição. Fraunhofer identificou 574 linhas no espectro solar e as classificou como forte e fraca, nomeando-as com letras maiúsculas e minúsculas respectivamente [44, 45]. A Figura 2 apresenta um espectro solar no qual é possível observar as linhas de absorção.

Após a descoberta do espectro com o passar dos anos alguns químicos notaram a relação entre as linhas espectrais e os elementos químicos através de experiências chamadas de "testes de chama", que consistiam em queimar certas substâncias e observar o espectro produzido. Porém, havia um inconveniente nessas experiências: os elementos químicos presentes nas chamas influenciavam no espectro gerado. Somente em 1860 os físicos



Figura 2: Espectro solar de alta resolução criado a partir de um atlas digitalizado, com base em uma série de observações realizadas no Kitt Peak Observatory, Arizona Fonte: [59]

Gustav Robert Kirchhoff e Robert Bunsen conseguiram correlacionar as linhas espectrais a elementos químicos isolados, utilizando um queimador que não emitia luz, concluindo assim que cada elemento químico poderia ser identificado pelo seu padrão único de linhas espectrais [45, 20],

A partir de tais experiências, foram formuladas as três leis empíricas da espectroscopia, que são conhecidas como Leis de Kirchhoff:

1 - Um corpo opaco quente (sólido, líquido ou gasoso e denso) emite um espectro contínuo.

2 - Um gás aquecido com baixa densidade produz um espectro de linhas brilhantes (linhas de emissão). O número e a posição destas linhas depende dos elementos químicos presentes no gás.

3 - Quando um espectro contínuo de uma fonte aquecida atravessa um gás a uma temperatura inferior, o gás mais frio provoca o aparecimento de linhas escuras (linhas de absorção). A quantidade e a localização dessas linhas são determinadas pelos elementos químicos presentes no gás.

A partir das Leis de Kirchhoff compreendeu-se o espectro solar observado como fruto da interação entre o espectro contínuo produzido internamente pelo Sol (corpo quente e gasoso de alta densidade) que atravessa a atmosfera solar (composta por gases mais frios que a superfície solar, onde parte da luz é absorvida) resultando em um espectro de absorção. O esquema de formação dos diferentes tipos de espectros está ilustrado na Figura 3.



Figura 3: Tipos de espectros. Fonte: [31]

Com base nas descobertas sobre a formação das linhas espectrais, a observação de espectros estelares começou a ganhar destaque em 1860 com Giovanni Battista Donati e, subsequentemente, com outros astrônomos como Lewis Morris Rutherfurd e George Biddel Airy. Em 1862, Anders Jonas Ångström identificou linhas de hidrogênio no Sol, enquanto Sir Joseph Norman Lockyer descobriu a linha de hélio em 1868. O elemento hélio, inicialmente identificado no Sol por Lockyer e Pierre-Jules-César Janssen, só foi encontrado na Terra em 1895 por Sir William Ramsay, o qual, junto com Lord Rayleigh, recebeu o prêmio Nobel por suas contribuições à química e à física, respectivamente [45].

2.2 Temperatura das estrelas

Estudos posteriores constataram que a curva de distribuição de energia de um espectro contínuo tem comportamento análogo ao de um corpo negro, ou seja, obedece à Lei de Planck. Conforme descrito por Schneider em seu livro [73], a Lei de Planck estabelece a distribuição da radiação emitida por um corpo negro em função do comprimento de onda e da temperatura. A fórmula que estabelece a Lei de Planck e que rege essa distribuição de radiação emitida por:

$$B_{\lambda}(T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1}$$
(2.1)

onde $B_{\lambda}(T)$ é a radiância espectral, h é a constante de Planck, c é a velocidade da luz, λ é o comprimento de onda, k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura do corpo negro. Vale destacar que a Lei de Planck também pode ser escrita em termos de frequência emitida e da temperatura. Essa equação mostra que, com o aumento da temperatura, a intensidade da radiação emitida aumenta e o comprimento de onda no qual a radiação atinge seu pico diminui. Esta mudança é quantificada pela Lei de Wien, que relaciona o comprimento de onda no qual ocorre o pico ou o máximo de intensidade (λ_{max}) com a temperatura. A Lei de Wien é expressa pela equação:

$$\lambda_{\max} \cdot T = b \tag{2.2}$$

onde b é a constante de deslocamento de Wien, com valor 0,0028976 $m \cdot K$. A aplicação dessas leis foi crucial para a interpretação dos espectros estelares, permitindo a determinação da temperatura superficial das estrelas. A Figura 4 mostra o comportamento do espectro de acordo com a variação da temperatura.



Figura 4: Gráfico da Lei de Planck para diferentes temperaturas. Fonte: [45]

2.3 A estrutura atômica e a sua relação com as linhas espectrais

A partir do século XX os avanços sobre os conhecimentos a cerca da estrutura dos átomos e a natureza da luz permitiram uma maior compreensão sobre a formação das linhas espectrais [45]. O modelo atômico proposto por Rutherford sustentava que os elétrons giravam em torno do núcleo em órbitas circulares. Porém, essa abordagem não explicava a estabilidade dos átomos, pois a aceleração dos elétrons levaria à instabilidade dos átomos, uma vez que causaria a perda de energia e faria com que os elétrons espiralassem em direção ao núcleo, resultando na emissão de radiação em todos os comprimentos de onda. O autor relata que os espectros de emissão indicavam que os átomos emitiam radiação apenas em comprimentos de onda específicos e não em todos, o que impulsionou o desenvolvimento da mecânica quântica, pois revelou que as leis da mecânica clássica não se aplicavam plenamente aos átomos.

Em 1900, o cientista alemão Max Planck apresentou o modelo da quantização da luz, de acordo com o qual a matéria emite luz em pacotes de energia chamados quanta. Albert Einstein, em 1905, utilizou a ideia da quantização para analisar o efeito fotoelétrico, considerando que cada quantum de luz, ou fóton, possui uma energia específica. Desta forma, entendeu-se que quando um átomo transita entre níveis de energia, a radiação eletromagnética é emitida ou absorvida e, se a energia do átomo diminui por um valor ΔE , ele emite um fóton com frequência ν , conforme a equação abaixo [45]:

$$\Delta E = h \,\nu \tag{2.3}$$

onde h é a constante de Planck. Analogamente, se o átomo absorve um fóton de frequência ν , sua energia aumenta em $\Delta E = h \nu$.

Dado que os níveis de energia dos elétrons são quantizados, então um átomo emite ou absorve radiação em frequências específicas, pois não pode assumir níveis de energia arbitrários. As transições entre os níveis de energia dos átomos e moléculas podem ser categorizadas em diferentes tipos de processos físicos, cada um envolvendo mecanismos distintos de troca de energia. A absorção ocorre quando um átomo ou molécula capta um fóton e um elétron é promovido de um nível de energia mais baixo (E_i) para um nível de energia mais alto (E_f). Em contraste, a emissão acontece quando um elétron retorna a um nível de energia inferior, liberando um fóton correspondente à diferença de energia entre os níveis ($\Delta E = E_f - E_i$). A ionização é o processo em que um elétron é removido completamente do átomo, passando de um nível de energia bem definido para um estado de alta energia, formando um íon positivo. A recombinação é o fenômeno oposto, onde um elétron é capturado por um íon positivo e o sistema retorna a um estado neutro, frequentemente emitindo radiação. Finalmente, o processo livre-livre ocorre quando elétrons livres interagem com campos elétricos, resultando na emissão ou absorção de radiação sem transições discretas entre níveis de energia, mas em uma faixa contínua. Cada um desses processos contribui para a compreensão dos espectros atômicos e moleculares e é fundamental para a investigação de fenômenos astronômicos. A Figura 5 ilustra os diferentes tipos de transição entre os níveis de energia [44].



Figura 5: Diferentes tipos de transição entre os níveis de energia excitados e nível fundamental, para linhas de absorção, linhas de emissão, linhas de ionização, linhas de recombinação e entre estados livres.

Fonte: [44]

2.4 O efeito Doppler

Em 1842, Christian Doppler descobriu que a variação no comprimento de onda observado em relação ao comprimento de onda original (ou próprio) é uma consequência do deslocamento relativo entre a fonte emissora e o observador. Quando a distância entre o objeto emissor e o observador aumenta, o comprimento de onda medido se torna superior ao comprimento de onda próprio, manifestando-se como um desvio para o vermelho. Em contraste, quando a distância diminui, o comprimento de onda medido é reduzido em relação ao comprimento de onda próprio, resultando em um desvio para o azul [41]. Desta forma, a análise do efeito Doppler nas linhas espectrais permite estimar a velocidade radial do objeto, ou seja, a velocidade do objeto ao longo da linha de visada, sendo desde então uma ferramenta para a determinação das velocidades relativas de corpos celestes em relação ao observador [45, 57, 20].

O deslocamento do comprimento de onda de uma fonte que está se movimentando com velocidade v em relação ao observador é definido por [45] pela equação:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{v}{c}\cos\theta \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2} \tag{2.4}$$

onde θ é o ângulo entre o vetor velocidade da fonte e a linha de visada. Para velocidades muito menores que a velocidade da luz ($v \ll c$), considerando v_r como a componente de velocidade radial na direção do observador, o deslocamento de onda é dado pela equação [45]:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{v_r}{c} \tag{2.5}$$

2.5 Tipos espectrais e a classificação de Harvard

Com o avanço da espectroscopia, tornou-se claro que diferentes estrelas exibem padrões espectrais distintos. No início do século XX, Edward Charles Pickering, então diretor do Observatório de Harvard, iniciou a coleta sistemática de espectros estelares por meio de fotografias, com o objetivo de facilitar a catalogação das estrelas [44]. Nesse processo, Annie Jump Cannon, uma de suas principais colaboradoras, destacou-se ao realizar a classificação espectral, categorizando aproximadamente 225.000 estrelas até a magnitude 9 entre 1918 e 1924. Seus resultados foram publicados no Henry Draper Catalogue, uma obra nomeada em homenagem a Henry Draper, pioneiro na fotografia do espectro da estrela Vega e figura importante no campo da espectroscopia, cuja família financiou parte do projeto de catalogação estelar.

Os esforços de classificação espectral realizados em Harvard culminaram na definição de sete tipos espectrais, designados como O, B, A, F, G, K e M. Estes tipos estão organizados em uma sequência que reflete a variação de temperatura das estrelas, começando com o tipo O, que corresponde às estrelas mais quentes e azuladas, e indo até o tipo M, que engloba as estrelas mais frias e avermelhadas. Cada tipo espectral é subdividido em 10 classes, numeradas de 0 a 9, onde 0 representa a subclasse mais quente e 9 a mais fria dentro de cada tipo. No entanto, durante os anos 1990, foram descobertas estrelas com temperaturas ainda mais baixas do que as do tipo M9. Em resposta, foram introduzidas novas classes espectrais, L e T [20, 44, 45].

Conforme relatado por [44], ao longo dos anos houve a introdução de duas novas classes espectrais, C e S. Estas classes são ramificações paralelas aos tipos G–M e se diferenciam principalmente pela composição química superficial das estrelas. A Tabela 1 apresenta a correlação entre a classe espectral, a temperatura e as principais características espectrais.

Tipo	Temperatura (K)	Principais Características
	20,000-35,000	Espectro com linhas de átomos múltiplamente io-
Ο		nizados, como He II, C III, N III, O III, Si V. He
		I visível, linhas de H I fracas.
		Linhas de He II desaparecem, linhas de He I (403
		nm) mais fortes no tipo B2, depois ficam mais fra-
В	$\approx 15,000$	cas e desaparecem no tipo B9. Linha K de Ca II
		visível a partir do tipo B3. Linhas de H I ficam
		mais fortes. Linhas de O II, Si II e Mg II visíveis.
		Linhas de H I muito fortes no tipo A0 e dominam
		todo o espectro, depois ficam mais fracas. Linhas
А	$\approx 9,000$	H e K de Ca II ficam mais fortes. He I não é
		mais visível. Linhas de metais neutros começam a
		aparecer.
		Linhas de H I ficam mais fracas, linhas H e K de
F	~ 7.000	Ca II ficam mais fortes. Muitas outras linhas de
T	\sim 1,000	metais, como Fe I, Fe II, Cr II, Ti II, claras e ficam
		mais fortes.
		Linhas de H I continuam a enfraquecer, linhas H
		e K muito fortes, sendo mais fortes no tipo G0.
G	$\approx 5,500$	Linhas de metais ficam mais fortes. Banda G cla-
		ramente visível. Linhas de CN vistas em estrelas
		gigantes.
		Espectro dominado por linhas de metais. Linhas
	$\approx 4,000$	de H I insignificantes. Linha Ca I 422.7 nm clara-
K		mente visível. Linhas fortes de H e K e banda G.
		Bandas de TiO tornam-se visíveis a partir do tipo
		K5.
м	~ 3.000	Bandas de TiO ficam mais fortes. Linha Ca I 422.7
111	\sim 3,000	nm muito forte. Muitas linhas de metais neutros.
		As bandas de TiO e VO desaparecem para as clas-
L	$\approx 2,000$	ses L iniciais. Linhas muito fortes e largas de Na
		I e K I.
Т	≈ 1.000	Bandas de absorção molecular muito fortes de CH_4
L	\sim 1,000	$e H_2O.$
		Estrelas muito vermelhas, com bandas moleculares
C	$\approx 3,000$	fortes, como C_2 , CN e CH. Sem bandas de TiO.
		Espectro de linha semelhante aos tipos K e M.
		Estrelas vermelhas de baixa temperatura. Bandas
S	$\approx 3,000$	de ZrO muito claras. Também outras bandas mo-
		leculares, como YO, LaO e TiO.

Tabela 1: Classes espectrais

As classes também são subdivididas numericamente de 0 a 9, e, em alguns casos, são

empregadas casas decimais para uma discriminação mais precisa entre as subdivisões.

2.6 Diagrama de Hertzsprung-Russell

O Diagrama de Hertzsprung–Russell (HRD), também conhecido como diagrama cormagnitude (CMD), é uma das ferramentas mais importantes da astrofísica estelar. Ele permite a visualização da distribuição das estrelas de acordo com seus parâmetros físicos fundamentais, como luminosidade, temperatura efetiva, tipo espectral e magnitude absoluta. Esse diagrama foi desenvolvido independentemente por Ejnar Hertzsprung e Henry Norris Russell, no início do século XX, e revolucionou a compreensão sobre a estrutura e a evolução estelar [20, p. 220].

No diagrama HR, conforme descrito por [73, p. 425], a magnitude absoluta de uma estrela é representada no eixo vertical, de modo que o brilho aumenta para cima, enquanto o tipo espectral é disposto no eixo horizontal, com a temperatura crescente para a esquerda. Essa organização reflete a relação fundamental entre a luminosidade e a temperatura superficial das estrelas, permitindo a identificação de padrões evolutivos e estruturais no diagrama.

De acordo com [20, p. 221] entre 80% e 90% das estrelas de um Diagrama HR se encontram dispostam em uma faixa bem definida chamada de sequência principal. Essa sequência se estende da região superior esquerda, onde estão as estrelas quentes e brilhantes do tipo O, até a região inferior direita, onde se encontram as estrelas frias e pouco luminosas do tipo M. Conforme [73, p. 426], o fato da maioria das estrelas estarem dispostas ao longo de uma sequência unidimensional é apresentado como uma das descobertas mais significativas da astronomia, pois esse padrão indica que as propriedades estelares não são independentes, mas, em grande parte, determinadas por um único parâmetro fundamental: a massa da estrela. Na sequência principal, estrelas mais massivas são mais luminosas e mais quentes, enquanto estrelas menos massivas são mais frias e menos luminosas. Para as estrelas da sequência principal, a relação entre luminosidade e massa pode ser descrita aproximadamente por :

$$L \approx L_{\odot} \left(\frac{M}{M_{\odot}}\right)^{3.5} \tag{2.6}$$

o que implica que uma estrela de $10M_{\odot}$ pode ser cerca de 3000 vezes mais luminosa que o Sol [73, p. 426].

Estrelas evoluídas e mais brilhantes que a sequência principal ocupam a região das gigantes e supergigantes no diagrama HR. As gigantes, como Aldebaran, apresentam raios dezenas de vezes maiores que o do Sol, enquanto as supergigantes, como Betelgeuse, podem ter raios 700 a 1000 vezes maiores. Essas estrelas seguem uma trajetória evolutiva que as leva a aumentar de tamanho à medida que consomem seu combustível nuclear [20, p. 221].

Por último, temos as estrelas muito mais evoluídas, chamadas de anãs brancas, que são originadas a partir das estrelas de baixa massa da sequência principal. A região das anãs brancas, também chamada se sequência de resfriamento, encontra-se abaixo da sequência principal, representando objetos de baixa luminosidade, alta densidade e alta temperatura. Essas estrelas são remanescente estelares densos, compostos predominantemente de carbono e oxigênio, que já não sustentam reações nucleares ativas em seus interiores. Apesar do nome, nem todas as anãs brancas são brancas, podendo apresentar colorações azuladas ou avermelhadas, dependendo da temperatura superficial [20, p. 221].

A Figura 6 apresenta um esquema do diagrama de cor e magnitude, no qual podem ser identificadas as regiões correspondentes à sequência principal, ao ramo das gigantes e supergigantes, bem como à região das anãs brancas.

Ainda na Figura 6 é possível observar algarismos romanos, os quais representam a classe de luminosidade das estrelas, conforme estabelecido pelo sistema Morgan-Keenan (M-K) em 1943. Esse sistema foi desenvolvido com o propósito de diferenciar estrelas que possuem o mesmo tipo espectral, mas apresentam luminosidades distintas. Sua formulação teve como base os estudos iniciais de Hertzsprung, sendo posteriormente refinada por William W. Morgan e Phillip C. Keenan, culminando na publicação do *Atlas of Stellar Spectra* [73, p. 426].

A classificação no sistema MK é fundamentada na largura das linhas espectrais, uma vez que, para estrelas de mesmo tipo espectral, aquelas mais luminosas apresentam linhas espectrais mais estreitas. Esse critério constitui um aspecto essencial para a determinação da luminosidade estelar, possibilitando a distinção entre estrelas da sequência principal, gigantes e supergigantes com base apenas na análise espectral. As classes de luminosidade das estrelas, segundo o sistema MK, são organizadas da seguinte forma [73, p. 426]:

 Classe I – Supergigantes: As estrelas mais luminosas, geralmente em estágios finais de evolução. São subdivididas em Ia (mais brilhantes) e Ib (ligeiramente menos brilhantes).



Figura 6: Diagrama HR com indicação dos tipos espectrais e as classes de luminosidade. Fonte: [73, p. 427]

- Classe II Gigantes Brilhantes: Estrelas extremamente luminosas, representando um estágio intermediário entre as gigantes comuns e as supergigantes.
- Classe III Gigantes: Estrelas que evoluíram da sequência principal, expandindose significativamente, aumentando sua luminosidade e diminuindo sua temperatura superficial.
- Classe IV Subgigantes: Estrelas em transição entre a sequência principal e a fase de gigante, apresentando um aumento gradual na luminosidade.
- Classe V Sequência Principal (Anãs): Estrelas que ainda estão na fase de fusão do hidrogênio em seus núcleos, como o Sol (G2V), cuja classificação indica tipo espectral G2 e classe de luminosidade V.

 Classe VI – Subanãs: Estrelas menos luminosas que as da sequência principal, geralmente pobres em metais e situadas ligeiramente à esquerda da sequência principal no diagrama de Hertzsprung-Russell.

O raio de uma estrela pode ser estimado a partir de sua posição no diagrama HR, uma vez que a relação entre luminosidade, temperatura e raio estelar é descrita pela lei de Stefan-Boltzmann. De acordo com essa relação, para duas estrelas com a mesma temperatura superficial, aquela que for 100 vezes mais luminosa terá um raio 10 vezes maior, visto que o raio estelar é proporcional à raiz quadrada da luminosidade (lembrando que a luminosidade possui uma variação logarítmica no diagrama HR). No diagrama HR, as estrelas com mesmo raio distribuem-se ao longo de linhas diagonais aproximadamente paralelas à sequência principal, representando as linhas de raio constante [20, p. 220]. O autor observa que as estrelas da sequência principal apresentam uma variação significativa em seus tamanhos, desde aproximadamente $\sim 20R_{\odot}$ na extremidade superior esquerda do diagrama até $\sim 0.1R_{\odot}$ na extremidade inferior direita. Já as estrelas gigantes possuem raios que variam entre $\sim 10R_{\odot}$ e $\sim 100R_{\odot}$, evidenciando o aumento de tamanho associado às fases evolutivas mais avançadas. A Figura 7 apresenta um diagrama HR teórico com as linhas de raio pontilhadas.

Após a compreensão das principais características do diagrama HR a Figura 8 apresenta um exemplo representativo contendo aproximadamente 22.000 estrelas do Catálogo Hipparcos, juntamente com 1.000 estrelas de baixa luminosidade (anãs vermelhas e anãs brancas) extraídas do Catálogo Gliese de estrelas próximas. No diagrama, estão indicadas as classes espectrais e de luminosidade conforme o sistema MK, além dos valores de luminosidade expressos em unidades solares, permitindo uma análise detalhada da distribuição estelar em diferentes fases evolutivas [57, p. 37].

2.7 Os espectrógrafos

Os espectrógrafos são instrumentos que decompõem a luz em seus diversos comprimentos de onda, permitindo a análise detalhada da emissão ou absorção ao longo do espectro.

Conforme detalhado por [57], a partir das observações espectroscópicas os espectros dos objetos são extraídos, ou seja, suas distribuições de energia espectral (SEDs) f_{λ} ou f_{ν} , são definidas de maneira que $f_{\lambda} d\lambda$ e $f_{\nu} d\nu$ representem os fluxos recebidos nas regiões de comprimento de onda $d\lambda$ e de frequência $d\nu$, respectivamente. Considerando a relação



Figura 7: Diagrama HR com indicação das linhas de raio. Fonte: [20, p. 223]

entre comprimento de onda e frequência, $\lambda = \frac{c}{\nu}$, é formulada a equação:

$$f_{\nu} = \frac{\lambda^2 f_{\lambda}}{c} \quad \text{e} \quad f_{\lambda} = \frac{\nu^2 f_{\nu}}{c} \tag{2.7}$$

O funcionamento de um espectrógrafo é descrito em [44] como fundamentado no princípio da dispersão da luz, um processo que pode ser realizado através de diversos mecanismos ópticos. Segundo o texto, o primeiro componente do espectrógrafo é o colimador, cuja função é transformar a luz divergente — que pode originar-se de uma abertura, como uma fenda — em um feixe de luz colimado, onde os raios se tornam paralelos.

Após a colimação do feixe, este é direcionado para um elemento dispersivo, que pode ser um prisma ou uma rede de difração. Conforme [44, p. 68], o prisma realiza a separação da luz através do fenômeno da refração, enquanto a rede de difração utiliza a difração e a interferência para obter uma separação espectral mais precisa e com maior resolução. Uma vez dispersa em diferentes comprimentos de onda, a luz é focalizada de maneira que ondas com um comprimento de onda específico (λ) que incidem em diversos pontos do dispersor convirjam para um único ponto no detector. De acordo com o autor este detector


Figura 8: Exemplo de Diagrama HR com 22.000 estrelas do Catálogo Hipparcos, juntamente com 1.000 estrelas de baixa luminosidade (anãs vermelhas e anãs brancas) extraídas do Catálogo Gliese de estrelas próximas.

Fonte: [57, p. 37]

pode ser um *Charge-Coupled Device* (CCD), que captura a intensidade da luz em cada comprimento de onda e, assim, gera o espectro. Tem-se na Figura 9 um espectroscópio de fenda, com a representação dos feixes de luz.



Figura 9: Princípio do espectrógrafo de fenda Fonte: [44, p. 68]

2.7.1 Fenda longa e unidades de campo integral

No contexto da espectroscopia astronômica duas metodologias distintas são frequentemente utilizadas para capturar a luz proveniente de objetos e interpretar essas informações: a imagem de fenda longa e as unidades de campo integral - IFUs. A imagem de fenda longa é uma técnica clássica na qual a luz é filtrada através de uma fenda estreita, projetando um espectro de alta resolução ao longo de uma linha de uma região específica do céu. Em contraste, as IFUs oferecem uma abordagem mais abrangente ao mapear a luz proveniente de um campo de visão completo, permitindo a obtenção simultânea de informações espectrais e espaciais para cada pixel da imagem.

Desenvolvida no século XIX, a técnica de fenda longa tem suas raízes na espectroscopia de fenda, onde a luz de uma fonte astronômica é canalizada através de uma fenda estreita e longa, criando uma imagem linear de um espectro de alta resolução. A limitação da aplicação dessa técnica reside na sua cobertura espacial restrita como citado por [6], o que pode ser uma desvantagem quando se deseja analisar a variabilidade ou a estrutura de objetos com dimensões mais amplas ou com características não uniformes.

Segundo [5], durante as últimas décadas do século XX um avanço fundamental para o progresso na compreensão de fenômenos astronômicos e no desenvolvimento de novos estudos e observações foram as IFUs. Conforme descrito pelo autor as IFUs permitem a captura simultânea de dados espectrais e espaciais de um campo de visão completo.

Em uma IFU, a luz proveniente de cada ponto na imagem de um objeto é direcionada para um ponto distinto na fenda, utilizando, por exemplo, fibras ópticas. Esse processo resulta em um cubo de dados tridimensional, com duas dimensões espaciais e uma dimensão para o comprimento de onda. Esse cubo de dados tridimensional permite a exploração detalhada da estrutura interna e da cinemática de objetos astronômicos complexos como galáxias e nebulosas [57, 5].

3 Astronomia Extragaláctica e as populações estelares

A Astronomia Extragaláctica tem sido determinante para a Cosmologia e para o entendimento da formação e evolução das galáxias e de suas populações estelares. Por isso, neste capítulo são discutidos alguns princípios que regem a expansão do universo tais como a lei de Hubble, seguidos por uma análise das propriedades dos espectros galácticos, incluindo os efeitos da extinção galáctica. Também são explorados os principais aspectos da síntese de populações estelares, como a função de massa inicial, isócronas estelares, histórico de formação estelar, metalicidade e as diferenças entre populações estelares simples e compostas. Esses conceitos, em conjunto com os conceitos apresentados no Capítulo 2, fornecem a base teórica necessária para as investigações que serão desenvolvidas ao longo do presente trabalho.

3.1 A Astronomia Extragaláctica

Astrônomos começaram a observar corpos difusos no céu no século XVIII. Inicialmente nomeados como "nebulosas" esses objetos mais tarde receberam classificações diversas, tais como, nuvens de gás iluminadas por estrelas e aglomerados estelares, além de algumas serem galáxias individuais. As primeiras especulações sobre a existência de galáxias além da Via Láctea foram feitas pelo astrônomo amador inglês Thomas Wright e pelo filósofo alemão Immanuel Kant. Em 1750, Wright publicou "An Original Theory of the Universe", sugerindo que a Via Láctea era uma camada estelar plana e especulando sobre outras "Vias Lácteas". Kant, em 1755, ampliou essas ideias em seu trabalho "História Natural e Teoria do Céu", propondo que algumas nebulosas eram sistemas estelares comparáveis à nossa Galáxia [45, p. 591].

Em 1923, Edwin Powell Hubble ao identificar e analisar as estrelas variáveis Cefeidas na nebulosa de Andrômeda, foi capaz de determinar que a distância até ela era muito maior do que a dimensão da nossa Galáxia, estabelecendo que Andrômeda era um sistema estelar independente [44]. Posteriormente em 1926 Hubble propôs uma classificação baseada nas características morfológicas das galáxias, organizando-as em três tipos principais: elípticas, lenticulares e espirais. Segundo o autor, as galáxias espirais foram subdivididas em normais e barradas, com base na presença ou ausência de uma estrutura em forma de barra atravessando o núcleo. Além disso, Hubble incluiu uma categoria para galáxias irregulares, que não se encaixam nos tipos principais. A Figura 10 ilustra os tipos de galáxias de acordo com a sequência de Hubble.



Figura 10: Sequência de Hubble Fonte: [44, p. 368]

3.2 Expansão do universo e a lei de Hubble

O estudo das galáxias requer o conhecimento aprofundado dos processos físicos aos quais esses objetos estão sujeitos. Entre esses processos, o movimento, a velocidade e a direção são fundamentais para uma compreensão precisa dos dados observacionais. A Lei de Hubble, que descreve a expansão do universo e o movimento relativo das galáxias, exerce influência direta sobre a leitura da distribuição espectral de energia - SED. Conhecer a Lei de Hubble é essencial para entender o avermelhamento causado pela velocidade de recessão das galáxias e como isso influência nos dados espectrais das galáxias.

Segundo os autores [73, 44], a velocidade radial das galáxias, medida por meio do deslocamento Doppler das linhas espectrais, indica que a maioria das galáxias se afastam de nós, com valores positivos de velocidade radial. Ainda de acordo com os autores, foi em 1928 que Edwin Hubble descobriu que essa velocidade de recessão das galáxias aumenta proporcionalmente com sua distância, estabelecendo uma relação linear entre a velocidade radial, v e a distância, D, o que posteriormente se tornou conhecida como a Lei de Hubble e representada pela equação:

$$v = H_0 D \tag{3.1}$$

onde H_0 é uma constante. A Figura 11 apresenta um diagrama de Hubble, no qual encontram-se representadas as velocidades radiais das galáxias em função das suas respectivas distâncias. É possível notar que os pontos se dispõem em torno do uma reta, sendo a inclinação dessa reta determinada pela constante de Hubble H_0 [73].



Figura 11: Diagrama de Hubble. Fonte: [73, p. 10]

O fato de as galáxias aparentarem se afastar de nós com uma velocidade que aumenta proporcionalmente à sua distância é interpretado como uma evidência da expansão do universo [44, 73].

O valor da constante de Hubble, H_0 , é relatado na literatura como estando no intervalo de 60 km s⁻¹Mpc⁻¹ < H_0 < 80 km s⁻¹Mpc⁻¹ conforme os livros [73, 44]. No entanto, de acordo com [33], o valor atual de H_0 é estimado em 69.8±0.6 (stat)±1.6 (sys) km s⁻¹Mpc⁻¹. Outros trabalhos mais recentes indicam o intervalo de valores entre 67,4 km s⁻¹Mpc⁻¹ até 75 km s⁻¹Mpc⁻¹ [75], a depender do método adotado para realizar a medição da Constante de Hubble H_0 .

Assumindo a validade da Equação (3.1), [73, p. 10] afirma que a velocidade radial de uma galáxia pode ser usada para estimar sua distância, sendo o desvio para o vermelho z definido pela mudança no comprimento de onda das linhas espectrais como mostra a equação:

$$z = \frac{\lambda_{\rm obs} - \lambda_0}{\lambda_0},\tag{3.2}$$

onde $\lambda_{obs} = (1 + z)\lambda_0 e \lambda_0$ é o comprimento de onda da transição espectral no sistema de referência em repouso do emissor, enquanto λ_{obs} é o comprimento de onda observado. O texto ressalta que para pequenos desvios em direção ao vermelho define-se a relação entre a v e z como:

$$v \approx zc \tag{3.3}$$

onde, c é a velocidade da luz. O autor adverte que essa relação necessita ser ajustada para grandes desvios. Deste modo, combinando as Equações (3.1) e (3.3), obtém-se a equação:

$$D \approx \frac{zc}{3000} \approx 3000 \, z \, h^{-1}$$
 (3.4)

onde a incerteza na determinação de H_0 é parametrizada pela fator de escala h, definido por [73, p. 10] como na equação:

$$H_0 = h \, 100 \,\mathrm{km \, s^{-1} \, Mpc^{-1}}.$$
(3.5)

Determinações de distância baseadas no desvio para o vermelho sempre terão um fator de h^{-1} , como visto na Equação (3.4). Conforme [73, p. 156] a Equação (3.4) é válida apenas para $z \ll 1$. No entanto, o autor afirma que z também é uma medida de distância para grandes desvios para o vermelho ($z \gg 1$) mas com uma abordagem matemática diferente da Equação (3.4).

Outros indicadores secundários de distância costumam ser adotados na literatura, como por exemplo as supernovas tipo Ia, flutuações de brilho superficial de galáxias, nebulosas planetárias e relações de escala (plano fundamental em galáxias elípticas e relação de Tully-Fisher em galáxias espirais). [73, p. 116].

3.3 Espectro de uma galáxia (ou Espectro galáctico)

O espectro de uma galáxia exibe um componente de variação gradual, conhecido como contínuo [57, p. 30]. Esse contínuo é resultado da superposição dos espectros das

estrelas, alterados pela interação com o gás e a poeira presentes no meio interestelar. O autor caracteriza as diferentes regiões do contínuo com base em suas principais fontes de emissão, as quais são:

- No intervalo que vai do ultravioleta ao infravermelho próximo, o contínuo é dominado por transições *bound-free* nas fotosferas estelares.
- No infravermelho médio e distante, o contínuo é dominado por grãos de poeira em regime térmico.
- Na faixa de rádio, o contínuo provém de elétrons relativísticos difusos e elétrons térmicos, da galáxia.
- Nos raios-X, a principal contribuição ao contínuo advém da acreção de gás em remanescentes estelares compactos ou buracos negros centrais.

Por fim, acrescenta-se que as linhas de emissão e absorção são originadas por transições bound-bound em átomos, íons e moléculas, ocorrendo tanto nas fotosferas das estrelas quanto no gás presente no meio interestelar.

A largura das linhas de emissão segundo [73] ocorre devido ao movimento randômico de alta velocidade dos átomos do gás que emite essas linhas e, com base na análise das linhas de emissão é possível derivar a *Star Formation Rate* (SFR) e a metalicidade de uma população estelar. No que diz respeito ao estudo das linhas de emissão, [57] complementa que a temperatura, a densidade e a composição química do gás interestelar podem ser obtidas através da intensidade das linhas de emissão visto que a intensidade de uma determinada linha de emissão depende da abundância do estado excitado que a produz, o que, por sua vez, depende não apenas da abundância do elemento correspondente, mas também da temperatura e do estado de ionização do gás. A Figura 12 ilustra diferentes espectros de galáxias de diferentes tipos de galáxias, seguindo a classificação dada pela sequencia de Hubble.

3.3.1 Extinção galáctica

A extinção galáctica é a diminuição ou atenuação na intensidade da radiação que chega na Terra vinda de um objeto astrofísico (pontual ou extenso) externo à Via Láctea. Este efeito é causado pela absorção e dispersão da radiação por partículas de poeira interestelar na nossa galáxia e moléculas de gás ao longo do caminho entre o objeto emissor e a Terra,



Figura 12: Espectros de diferentes tipos de galáxias Fonte: [73, p. 138]

afetando principalmente os comprimentos de onda menores. A correção da atenuação é necessária para recuperar a cor original da radiação emitida e compensar as alterações na cor da luz observada.

Segundo [73, p. 40] a absorção e dispersão da luz pela poeira interferem na relação entre magnitude absoluta e aparente, fazendo com que a fonte pareça mais fraca no caso da absorção. Como a extinção varia com o comprimento de onda, o espectro e a cor observada da estrela também sofrem alterações. Portanto, o autor conclui que como a extinção está associada a essa mudança de cor, é possível estimar a absorção se houver dados suficientes sobre a cor intrínseca da fonte ou de um conjunto de fontes.

A partir da equação de transferência radiativa para absorção ou dispersão pura, a Equação (3.6) demonstra a relação entre a atenuação e a distância percorrida pelo feixe de luz [73, p. 40].

$$\frac{dI_{\nu}}{ds} = -\kappa_{\nu}I_{\nu} \tag{3.6}$$

onde I_{ν} representa a intensidade específica na frequência ν , κ_{ν} é o coeficiente de absorção, e s é a coordenada de distância ao longo do feixe de luz. Através da Equação (3.6) nota-se que a intensidade I_{ν} do feixe de luz é reduzida de forma proporcional à intensidade inicial e ao comprimento do caminho ds. Assim, κ_{ν} atua como a constante de proporcionalidade. Em [73] conclui-se que ao longo da distância ds, uma fração $\kappa_{\nu} ds$ de todos os fótons na frequência ν é absorvida ou dispersada para fora do feixe e, apresenta como solução para a Equação (3.6) a sua a reescrita conforme a equação a seguir:

$$d\ln I_{\nu} = \frac{dI_{\nu}}{I_{\nu}} = -\kappa_{\nu}ds \tag{3.7}$$

e integrando de 0 a s:

$$\ln I_{\nu}(s) - \ln I_{\nu}(0) = -\int_{0}^{s} \kappa_{\nu}(s') \, ds' \equiv -\tau_{\nu}(s), \qquad (3.8)$$

onde τ_{ν} é definido como a profundidade óptica. Isso resulta em:

$$I_{\nu}(s) = I_{\nu}(0)e^{-\tau_{\nu}(s)}.$$
(3.9)

Ou seja, a intensidade específica é reduzida pelo fator $e^{-\tau_{\nu}}$ devido à absorção. Para o fluxo medido pelo observador, temos:

$$S_{\nu} = S_{\nu}(0)e^{-\tau_{\nu}(s)}, \qquad (3.10)$$

onde S_{ν} é o fluxo observado a uma distância s da fonte, e $S_{\nu}(0)$ é o fluxo da fonte sem absorção.

Sabendo que a relação entre fluxo e magnitude é dada por $m = -2.5 \log S + \text{const}$, ou $S \propto 10^{-0.4m}$, se encontra:

$$\frac{S_{\nu}}{S_{\nu,0}} = 10^{-0.4(m-m_0)} = e^{-\tau_{\nu}} = 10^{-\log(e)\tau_{\nu}}, \qquad (3.11)$$

o que leva à seguinte expressão para a extinção:

$$A_{\nu} := m - m_0 = -2.5 \log\left(\frac{S_{\nu}}{S_{\nu,0}}\right) = 2.5 \log(e)\tau_{\nu} \approx 1.086\tau_{\nu} \tag{3.12}$$

onde A_{ν} representa o coeficiente de extinção, que descreve a mudança na magnitude aparente *m* em comparação ao valor sem absorção m_0 .

O coeficiente de extinção está relacionado ao excesso de cor, que é definido como:

$$E(X - Y) := A_X - A_Y = (X - X_0) - (Y - Y_0) = (X - Y) - (X - Y)_0$$
(3.13)

medindo a variação no índice de cor (X - Y), onde X e Y representam dois filtros diferentes.

A absorção e dispersão da luz pela poeira impactam a relação entre a magnitude absoluta e a magnitude aparente, fazendo com que a fonte pareça mais fraca devido à absorção [73, p.40]. O espectro e a cor observada do objeto em estudo também são afetados pela variação da extinção em função do comprimento de onda. A conclusão do autor é que, em virtude da relação entre a extinção e as alterações na cor, é possível estimar a absorção, desde que existam dados suficientes sobre a cor intrínseca da fonte ou de um conjunto de fontes.

Ao longo dos anos, diversos estudos foram desenvolvidos com o objetivo de estimar o efeito da extinção da luz em meios interestelares, resultando nas conhecidas leis de extinção. Essas leis descrevem como a radiação emitida por fontes astrofísicas é absorvida e dispersada pelo meio interestelar, modificando sua intensidade e distribuição espectral. Um dos modelos mais amplamente utilizados é o modelo de Cardelli [18], conhecido como CCM89, que estabelece uma relação paramétrica para a curva de extinção da Via Láctea, baseada no coeficiente R_V , que se caracteriza pela razão entre a extinção A_V (na banda V) e o excesso de cor E(B - V), sendo dado por:

$$R_V = \frac{A_V}{E(B-V)} \,. \tag{3.14}$$

Como alternativa a esse modelo, encontra-se na literatura o modelo de Fitzpatrick [32] que desenvolveu uma abordagem que permite uma maior flexibilidade na descrição da extinção interestelar, admitindo váriações nas curvas de extinção de acordo com os ambientes Galácticos. Além dessas, outras leis foram propostas para descrever a extinção em diferentes tipos de galáxias e condições físicas, como os modelos de Calzetti [16], voltados para galáxias com intensa formação estelar, e os modelos de Gordon [39], aplicáveis a galáxias como as Nuvens de Magalhães.

3.4 Síntese de populações estelares

As informações essenciais para compreensão da formação e evolução das galáxias podem ser derivadas a partir do investigação das suas SEDs. Na luminosidade integral das galáxias estão codificadas propriedades das populações estelares tais como, a história de formação estelar (SFH), a metalicidade, o padrão de abundância estelar, a função de massa inicial (*Initial Mass Function* (IMF)), a massa total em estrelas, e a quantidade de poeira e gás [26].

Inicialmente, as abordagens para a interpretação das distribuições espectrais das galáxias, conforme descrito por [14], envolviam a tentativa de reproduzir o espectro observado combinando os espectros de estrelas com diferentes massas, idades e composições químicas. Esses métodos apresentavam numerosos parâmetros livres, o que tornava sua aplicação e interpretação complexas e frequentemente imprecisas. Atualmente, os modelos mais avançados adotam a técnica de síntese populacional evolucionária, que substituiu as abordagens anteriores e tem como principais parâmetros ajustáveis a IMF, SFR e, em alguns casos, a taxa de enriquecimento químico.

Segundo [73], a teoria da síntese de população estelar interpreta o espectro das galáxias como uma superposição dos espectros estelares individuais, salientando que a distribuição de estrelas muda ao longo do tempo (devido a evolução dos espectros estelares individuais), o que resulta em alterações na distribuição espectral da população. Deste modo o texto conclui que a SED de uma galáxia reflete o seu histórico de formação e a sua evolução estelar. Assim, a simulação de vários SFHs e a comparação com os espectros observados das galáxias fornecem dados valiosos para entender a evolução das galáxias.

De outro modo, a síntese de populações estelares é apresentada por [24, 65, 46], que descreve a síntese espectral como o processo de decomposição de um espectro observado por meio da superposição de um conjunto de *Simple Stellar Populations* (SSPs), com diferentes idades e metalicidades. Os autores ressaltam que, por meio da *Stellar Population Synthesis* (SPS), é possível derivar os SFHs e a evolução química de uma galáxia, além de obter informações sobre sua extinção e dispersão de velocidade.

Nesta trabalho, serão utilizados espectros de populações estelares simples para a construção do espectro observado, conforme descrito por [24], seguindo o que [14] denomina como técnica de síntese populacional evolucionária. Os principais elementos necessários para a realização do processo de síntese de populações estelares conforme a técnica de síntese populacional evolucionária estão ilustrados na Figura 13, onde apresenta-se uma visão geral da técnica de síntese de populações estelares.

Com base na Figura 13 observa-se que em (a), são destacados os ingredientes necessários para a construção de SSPs, que incluem a IMF, isócronas abrangendo uma variedade de idades e metalicidades, além de espectros estelares que cobrem uma ampla gama de temperatura efetiva (T_{eff}), luminosidade bolométrica (L_{bol}) e metalicidade. Já em (b), são apresentados os componentes essenciais para a construção de populações estelares com-



Figura 13: Elementos da síntese de população estelar. Fonte: [26]

postas *Composite Stellar Populations* (CSPs), que incluem SFHs, evolução química, SSPs e um modelo para a atenuação (extinção Galática) e emissão por poeira. Finalmente, em (c), observa-se o resultado final das CSPs, tanto antes quanto depois da aplicação do modelo de poeira.

3.4.1 Função de massa inicial

A função de massa inicial, *Initial Mass Function* (IMF), é descrita por [73] como sendo a distribuição das massas das estrelas no momento de seu nascimento. Em outras palavras, $\phi(m) dm$ representa a fração de estrelas com massa dentro de um intervalo de largura dm ao redor de m, sendo que a distribuição é normalizada de forma que a soma total das estrelas seja igual a 1. Portanto, apresenta-se a equação:

$$\int_{m_{\rm L}}^{m_{\rm U}} {\rm d}m \ m \ \phi(m) = 1 \ M_{\odot}$$
(3.15)

onde o limite mínimo de massa, $m_{\rm L}$, é aproximadamente $0,1 M_{\odot}$ porque estrelas menos massivas não iniciam a fusão de hidrogênio, e a massa máxima, $m_{\rm U}$, é aproximadamente $100M_{\odot}$ por não haver observação de estrelas mais massivas, o que pode ser justificado pelo seu curto tempo de vida.

A IMF foi formulada por [68] de acordo com a equação:

$$dN = \xi(m) \, d(\log m) \, \frac{dt}{T_0} \tag{3.16}$$

onde dN é o número de estrelas em uma faixa dm criadas em um intervalo de tempo dt por pc^3 .

Nos trabalhos de [22, 14, 57, 73] apresenta-se a Equação (3.17) como uma aproximação por lei de potências da Equação (3.16).

$$\phi(m) = \frac{dN}{d\log m} = m^{-2.35} \tag{3.17}$$

De acordo com a Equação (3.17) tem-se que, para 300 estrelas com massa de 1 M_{\odot} , há apenas uma estrela com 10 M_{\odot} [45].

No contexto da síntese de população estelar, a IMF impacta os seguintes aspectos [26]:

- A normalização geral da razão massa-luminosidade das estrelas (M/L);
- A taxa de evolução da luminosidade de uma população estelar que evolui passivamente;

- A SED das populações estelares compostas (CSPs);
- A forma da SED de populações estelares simples (SSPs), com um efeito relativamente pequeno.

A IMF de Salpeter é uma boa descrição para estrelas com massas em torno de 1 M_{\odot} [73, 22]. No entanto os autores advertem que para estrelas com massas inferiores a $1M_{\odot}$, a IMF observada desvia da forma de Salpeter, apresentando uma inclinação menos acentuada.

Para uma revisão mais aprofundada sobre a IMF, recomenda-se consultar os trabalhos de [71], [70], [49] e [22], que têm contribuído significativamente para o melhor entendimento desta temática.

3.4.2 Isócronas estelares

Isócronas estelares são curvas em diagramas de Hertzsprung-Russell (HR) ou cormagnitude (CMD) que representam a localização de estrelas com a mesma idade, mas com diferentes massas. Elas são usadas para traçar a evolução das estrelas em termos de luminosidade e temperatura efetiva ao longo do tempo. Cada isócrona corresponde a uma idade específica, mostrando como estrelas de diferentes massas evoluem e mudam suas propriedades ao longo do tempo [73, 4].

A técnica de síntese de isócronas está fundamentada na ideia de que qualquer população estelar independente do seu histórico de formação estelar pode ser decomposta em uma série de eventos de nascimento instantâneo [14]. Essas populações de mesma idade são denominadas populações estelares simples (SSP). Exemplos de populações estelares simples são os aglomerados globulares da Via Láctea, que são um conjunto de estrelas que se formaram simultaneamente a partir da mesma nuvem gasosa. O estudo afirma que a energia espectral de uma SSP é obtida pela soma dos espectros individuais das estrelas ao longo da isócrona. Além disto, cada estágio evolutivo de uma isócrona é ocupado por estrelas com diferentes massas iniciais, sendo que essa distribuição de massas é determinada pela IMF [14]. A Figura 14 apresenta isócronas para uma variação de idades.

De acordo com [14] e [73], dada uma taxa de formação estelar (SFR) $\psi(t)$, que representa a massa de gás convertida em estrelas por unidade de tempo, e uma lei de enriquecimento da metalicidade, Z(t), a metalicidade Z do meio interestelar determina



Figura 14: Isócronas estelares em diferentes momentos indicados em unidades de 10⁹ anos. Fonte: [73, p. 134]

a metalicidade das novas estrelas, influenciando diretamente suas propriedades. Os autores descrevem que à medida que as estrelas evoluem, elas liberam matéria enriquecida com metais no meio interestelar (*Interstellar Medium* (ISM)) através de ventos estelares, nebulosas planetárias e supernovas, resultando em um enriquecimento de metalicidade Z(t) crescente. Deste modo, a SED em um tempo t para uma população estelar pode ser expressa como [73, p. 133]:

$$F_{\lambda}(t) = \int_{0}^{t} \mathrm{d}t' \,\psi(t - t') \,S_{\lambda, Z(t - t')}(t') \tag{3.18}$$

sendo $S_{\lambda,Z}(t')$ a energia emitida por unidade de comprimento de onda e por intervalo de tempo, normalizada para uma massa total inicial de $1 M_{\odot}$, proveniente de um grupo de estrelas com metalicidade inicial Z e idade t'. O autor [73] estabelece que a função $S_{\lambda,Z(t-t')}(t')$, que descreve essa emissão em qualquer instante t, leva em consideração as diferentes trajetórias evolutivas das estrelas no diagrama Hertzsprung-Russell (HR), e que essa função também considera a metalicidade inicial das estrelas (no tempo t - t'), a qual resulta da evolução química do ISM da galáxia em questão.

Existem diversas tabelas de isócronas amplamente reconhecidas na literatura. De acordo com [35], os modelos de Padova e BaSTI destacam-se como os que abrangem uma

ampla gama de idades e composições estelares. Para o estudo de estrelas de alta massa o autor cita que os modelos de Genebra são particularmente adequados, contudo ressalta que esses modelos não abrangem a evolução de estrelas de baixa massa. Ainda segundo o autor para a evolução das estrelas nas fases da sequência principal, gigante vermelha e ramo horizontal, os modelos Y2, Dartmouth e Victoria-Regina são frequentemente utilizados. Já para estrelas de massa muito baixa e anãs marrons, ele sugere os modelos de Lyon.

Para um entendimento mais aprofundado sobre as tabelas de isócronas e suas respectivas aplicações, recomenda-se a leitura dos seguintes trabalhos: [28], [38], [77], [63], [55], [76] e [10].

3.4.3 Histórico de formação estelar

Uma vez que a formação estelar em uma galáxia ocorre ao longo de um intervalo de tempo finito, é possível observar que, conforme o processo de formação avança, a matéria disponível para a formação de novas estrelas vai sendo gradualmente alocada nas estrelas já formadas. Consequentemente, a quantidade de matéria disponível para a formação de novas estrelas diminui progressivamente. Portanto, é previsto que a taxa de formação estelar apresente um comportamento decrescente ao longo do tempo [73].

Com base na afirmação anterior e partindo da premissa de que o histórico de formação de uma galáxia seja desconhecido, [73, p. 136] apresenta a Equação (3.19) como um modelo padrão para uma taxa de formação estelar exponencialmente decrescente.

$$\psi(t) = \tau^{-1} \exp\left[-\frac{(t-t_f)}{\tau}\right] H(t-t_f),$$
(3.19)

onde τ é a duração característica, ele determina o tempo para a função $\psi(t)$ decair a fator de 1/e t_f é o início da formação estelar e o último fator na equação é a função degrau de *Heaviside*, H(x), que é igual a 1 para $x \ge 0$ e 0 para x < 0. Por fim complementa-se que esta função leva em consideração que $\psi(t) = 0$ para $t < t_f$. A Figura 15 apresenta o comportamento do modelo exponencialmente decrescente definido pela 3.19 para diferentes períodos de duração característica.

Para ilustrar a relação entre as cores e a taxa de evolução das galáxias, [73, p. 137] apresenta a Figura 16. Nesta figura, observa-se que a cor das galáxias é fortemente influenciada pelo parâmetro τ , que representa a duração da formação estelar. Galáxias com grandes valores de τ não se tornam muito vermelhas, pois a fração de estrelas azuis



Figura 15: Representação do modelo de formação estelar exponencialmente decrescente com tempo de inicio (t_f) da formação em 2 bilhões de anos e duração característica (τ) iguais a 1, 2 e 4 bilhões de anos.

Fonte: Autora

permanece alta. As cores das galáxias espirais tipo Sc não podem ser explicadas por uma SFR constante, a menos que a luz seja fortemente atenuada pela poeira, o que sugere ser improvável. Para explicar as cores das galáxias de tipo E0, o autor aponta que é necessário um valor de τ em torno de 4×10^9 anos. Assim, de acordo com os modelos, as galáxias evoluem para cores mais vermelhas quando a idade t é muito maior que τ , pois a luminosidade azul diminui rapidamente com a idade, enquanto a luminosidade vermelha é menos afetada. Conclui-se em [73] que a SED das galáxias é essencialmente determinada pela razão entre a taxa de formação estelar atual e a taxa média passada, $\frac{\psi(\text{hoje})}{\langle\psi\rangle}$).

De acordo com [73], o modelo τ é amplamente utilizado para explicar as cores atuais das galáxias com idade aproximada de 10 bilhões de anos. No entanto, salienta-se que esse modelo está sujeito a interpretações ambíguas, pois diferentes histórias de formação estelar $\psi(t)$ podem gerar padrões de cor semelhantes. O estudo [61] complementa que outra limitação do modelo SED, que emprega SFHs de um único componente, é que as estrelas jovens e brilhantes tendem a ofuscar as mais antigas e menos luminosas.

Em uma investigação mais aprofundada, [51] pesquisou os SEDs de galáxias simuladas de alto *redshift* e concluiu que os modelos de SFHs com decaimento exponencial (τ) resultavam em subestimações das taxas de formação estelar e superestimações das idades médias. Em [26] é relatado que estudos subsequentes corroboraram essas descobertas mostrando que modelos com SFHs crescentes ajustam de maneira mais precisa os SEDs observados de alto *redshift* e fornecem SFRs mais alinhadas com outros indicadores.



Figura 16: Evolução das cores entre $0 \le t \le 17 \times 10^9$ anos para uma população estelar com uma taxa de formação estelar descrita pela Equação (3.19), considerando cinco valores de τ , onde $\tau = \infty$ representa uma taxa constante. As cores de quatro tipos morfológicos de galáxias estão representadas, e a evolução para cada τ começa com uma população azul no canto inferior esquerdo. A linha tracejada marca $t = 10^{10}$ anos, e setas indicam o efeito da extinção (E(B - V) = 0.1) e do aumento da metalicidade, ambos resultando em cores mais avermelhadas.

Fonte: [73, p. 137]

Os estudos de [54, 52, 79] são recomendados para uma revisão mais aprofundada sobre o tema.

3.4.4 Metalicidade

Na Astronomia todos os elementos químicos mais pesados que o hélio são classificados como "metais". A metalicidade de um componente bariônico, como gás quente, gás frio ou estrelas, refere-se à fração de sua massa que é composta por metais [57]. O livro descreve que durante os primeiros três minutos do Universo, a nucleossíntese primordial resultou principalmente na formação de hidrogênio (75%) e hélio (25%), com uma quantidade muito pequena de metais, predominantemente lítio. Além disso, todos os metais adicionais presentes no Universo foram formados posteriormente por meio de reações nucleares nas estrelas [57].

A metalicidade é uma medida que nos dá a proporção de elementos químicos pesa-

dos de uma estrela em relação ao Hidrogênio, comparativamente à proporção solar deste mesmo elemento químico. Para definirmos a metalicidade precisamos especificar matematicamente o que são essas proporções de elementos químicos em relação ao Hidrogênio, chamadas de abundâncias. Abundâncias químicas são quantidades relativas de cada elemento químico em relação ao Hidrogênio, encontrados nos objetos astronômicos. A abundância de um elemento químico X pode ser calculada como a razão entre as densidades numéricas do elemento químico em questão, n(X), dividida pela densidade numérica do Hidrogênio, n(H). Assim, a metalicidade será dada pela diferença dos logaritmos dessas razões (abundâncias) [73, p. 44], tal como:

$$[X/H] \equiv \log\left(\frac{n(X)}{n(H)}\right)_* - \log\left(\frac{n(X)}{n(H)}\right)_{\odot}$$
(3.20)

Considerando que, nos primórdios do universo, este era composto predominantemente de hidrogênio e hélio, as primeiras estrelas formaram-se exclusivamente a partir desses elementos. Com a evolução das estrelas de primeira geração, metais mais pesados começaram a ser sintetizados, e parte desses elementos retornou ao ISM por meio de explosões de supernovas ou ventos estelares. Os metais pesados presentes no ISM foram, então, incorporados às gerações subsequentes de estrelas. Dessa forma, o ISM foi gradualmente enriquecido com metais pesados, resultando em gerações subsequentes de estrelas sendo formadas por elementos mais pesados [44].

Estrelas com baixa massa possuem um tempo de vida longo, enquanto estrelas de alta massa possuem evolução rápida e tempo de vida reduzido. Considerando longevidade das estrelas de baixa massa, [44] observa que as estrelas de baixa massa de primeira geração por terem vida longa, elas continuam a existir ao lado de estrelas mais jovens das gerações subsequentes, as quais possuem uma maior abundância de metais pesados em sua composição. Além disso, a composição química de uma estrela reflete a composição do ISM no qual essa estrela se formou.

Ao realizar a análise das populações estelares, [57] salienta três aspectos de uma população estelar que são influenciados pela evolução da composição química do gás e das estrelas nas galáxias. São eles:

- A luminosidade e a cor de uma população estelar, que são determinadas pela idade, Função de Massa Inicial IMF e metalicidade das estrelas.
- A eficiência do resfriamento do gás, que depende da sua metalicidade, com gases mais enriquecidos em metais resfriando mais rapidamente.

• O efeito da poeira interestelar, onde grãos de poeira absorvem luz estelar e a reemitem no infravermelho, reduzindo significativamente o brilho da galáxia.

Visto todos os aspectos influenciáveis pela metalicidade, percebe-se a importância da estimativa deste indicador. De acordo com [26] a estimativa de metalicidades estelares é mais robusta quando se utilizam características espectroscópicas, uma vez que os espectros ópticos de galáxias são ricos em absorções atômicas e moleculares visíveis mesmo com baixa resolução espectral ($R \approx 1.0$ Å). A intensidade dessas características depende tanto da metalicidade geral Z quanto do padrão detalhado de abundância de elementos, o que pode complicar a interpretação dos espectros. No entanto, os modelos de SSPs que permitem variações tanto na metalicidade quanto no padrão de abundância possibilitam a identificação de combinações de características que são relativamente robustas contra essas variações [26].

3.4.5 Populações estelares simples

A população estelar simples (*Simple Stellar Population* (SSP)) é definida como um grupo de estrelas que se formaram ao mesmo tempo, ou seja, possuem mesma idade, e que possuem a mesma composição química inicial. A construção de modelos espectrais de SSPs envolve a combinação de uma IMF, a teoria da evolução estelar, representada pelas isócronas, e uma biblioteca espectral que fornece os espectros de estrelas com seus parâmetros físicos.

A SED de um conjunto de estrelas de mesma idade, com metalicidade Z, no tempo tapós o nascimento, pode ser descrita por [27] pela equação:

$$S(t,Z) = \int_{M_i^l}^{M_i^u(t)} \Phi(M_i) \Lambda[L(M_i,Z,t), T(M_i,Z,t), Z] \, dM_i,$$
(3.21)

onde M_i é a massa inicial (na Sequência Principal de Idade Zero - ZAMS), $M_i^l \in M_i^u$ são os limites inferior e superior de massa, Φ é a IMF, Λ é um espectro da biblioteca estelar, e $L \in T$ são a luminosidade bolométrica e a temperatura efetiva de uma estrela de massa M_i e metalicidade Z. Ademais, observa-se que $M_i^u(t)$, $L(t) \in T(t)$ são determinados pela evolução estelar.

Assim, a Equação (3.21) está relacionada a uma SED de uma SSP dependente da luminosidade bolométrica, ou seja, integrada em todos os comprimentos de onda λ possíveis. Por sua vez, Equação (3.18) está relacionada à combinação de múltiplas SSP, gerando a SED de uma CSP relacionada à SFR daquela população estelar. Além disso, na Equação (3.18) temos uma dependência com a emissão específica em cada comprimento de onda λ e, portanto, será relacionada a uma grandeza específica, ou seja, não bolométrica.

No estudo [27] após a definição da SED de uma SSP, se estabelece a massa de um conjunto de estrelas coevas (de mesma idade), pela equação:

$$M(t) = \int_{M_i^l}^{M_i^u(t)} \Phi(M_i) M_{\text{evol}}(M_i) \, dM_i + M_{\text{rem}}, \qquad (3.22)$$

onde $M_{\text{evol}}(M_i)$ é a massa evoluída de uma estrela de massa inicial M_i e M_{rem} é a quantidade de massa retida em remanescentes, incluindo anãs brancas, estrelas de nêutrons e buracos negros.

Com base na Equação (3.21), nota-se que a escolha da biblioteca espectral estelar desempenha um papel importante na construção de uma SSP. Segundo proposto por [25], uma biblioteca espectral é definida como uma coleção de espectros homogêneos, sejam observados ou modelados, disponíveis na literatura. O autor argumenta que, para estudos de populações estelares, uma biblioteca ideal deve cobrir completamente o diagrama HR e deve fornecer parâmetros atmosféricos precisos, como temperatura efetiva, gravidade superficial, padrões de abundâncias, rotação e velocidades turbulentas. Além disso, uma biblioteca espectral deve equilibrar adequadamente a cobertura de comprimento de onda, resolução espectral e relação sinal-ruído Signal-to-Noise Ratio (SNR). Por fim, destaca-se que tanto bibliotecas empíricas quanto teóricas têm sido amplamente empregadas, cada uma apresentando suas próprias vantagens e desvantagens [25].

Os espectros de SSPs são elementos fundamentais para qualquer análise de síntese espectral, pois atuam como ferramentas para traduzir as propriedades físicas das estrelas em dados espectroscópicos que podem ser comparados com observações astronômicas. Através dessas comparações, é possível extrair parâmetros físicos de galáxias e determinar suas SFHs [23].

3.4.6 Populações estelares compostas

As populações estelares compostas são construídas com base nas SSPs, e de acordo com [26] existem três diferenças entre as SSPs e as CSPs que são:

- A CSP possui uma população estrelar que apresenta estrelas com idades diversas, idades estas determinadas pelo histórico de formação estelar SFH. A SSP é composta por uma população estelar onde todas as estrelas possuem a mesma idade.
- A CSP apresenta estrelas com múltiplas metalicidades, onde a metalicidade de uma estrela sofre influência do tempo, enquanto a SSP possui metalicidade homogênea.
- A existência da poeira é considerada apenas para a construção das CSP

A combinação dos componentes que constituem as CSPs é apresentada por [26] pela equação:

$$f_{\rm CSP}(t) = \int_{t'=0}^{t'=t} \int_{Z=0}^{Z=Z_{\rm max}} {\rm SFR}(t-t') P(Z,t-t') f_{\rm SSP}(t',Z) e^{-\tau_d(t')} + A f_{\rm dust}(t',Z) \, dt' \, dZ,$$
(3.23)

onde de acordo com a Equação (3.23), as variáveis de integração correspondem à idade da população estelar, t', e à metalicidade, Z. O estudo [26] relata que a atenuação causada pela poeira, dependente do tempo, é modelada pela profundidade óptica da poeira, $\tau_d(t')$, enquanto a emissão proveniente da poeira é representada pela função f_{dust} . Por fim, o texto detalha que a constante de normalização A é estabelecida com base no equilíbrio entre a luminosidade absorvida pela poeira e a luminosidade total reemitida pela poeira.

4 Métodos matemáticos e computacionais

Este capítulo apresenta os métodos matemáticos e computacionais aplicados neste trabalho. São discutidos os polinômios de Chebyshev, empregados no ajuste de contínuo espectral, a Programação Quadrática Sequencial (SLSQP), que permite a otimização dos pesos na síntese espectral, e a Análise de Componentes Principais (PCA), utilizada para redução da dimensionalidade da biblioteca espectral.

4.1 Polinômios de Chebyshev

Os Polinômios de Chebyshev se aplicam em contextos como a teoria da aproximação, a integração numérica e a resolução de equações diferenciais [8]. A afirmação de que qualquer polinômio p(x) de grau n, pode ser expresso como uma combinação linear de Polinômios de Chebyshev presente no estudo de [19], reforça a importância dos Polinômios de Chebyshev nos problemas de aproximação. Deste modo, usaremos os Polinômios de Chebyshev para modelar a parte de contínuo dos espectros nos cubos de dados de IFU descritos no Capítulo 2.

A Figura 17 apresenta como exemplo o gráfico de $f(x) = x^4$ e sua decomposição em Polinômios de Chebyshev.

A série de Chebyshev, conforme destacado por [13, p. 10], representa a forma transformada mais notável da série de Fourier, configurando-se essencialmente como uma expansão de cossenos de Fourier a partir de uma mudança de variável. Em casos de incerteza, o texto recomenda o uso dos Polinômios de Chebyshev, exceto quando a solução apresentar periodicidade espacial, situação em que a série de Fourier ordinária é apontada como a escolha mais adequada.

A transformação entre a série de Chebyshev e a série de Fourier de cossenos pode ser



Figura 17: A função x^4 (linha contínua) e sua decomposição em Polinômios de Chebyshev (linhas tracejadas).

Fonte: [56, p. 35]

expressa da seguinte forma [13, p. 46]:

$$z = \cos \theta$$

Sob essa transformação, a série de Chebyshev:

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n T_n(z)$$

é equivalente à série de Fourier de cossenos:

$$f(\cos \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \cos(n\theta).$$

Portanto, o autor estabelece que os coeficientes de uma série de Chebyshev a_n são idênticos aos coeficientes de cossenos de Fourier da função $f(\cos \theta)$.

Os Polinômios de Chebyshev do primeiro tipo, T_n são representados pela equação a seguir [56, p. 14] [13, p. 10]:

$$T_n(x) = \cos(n\theta)$$
 quando $x = \cos\theta$ (4.1)

de modo que $T_n(1) = 1$. Tem-se $k_0 = 1$, $k_n = 2^{n-1}$ (para $n \ge 1$) e $h_0 = \pi$, $h_n = \frac{1}{2}\pi$ (para $n \ge 1$). Dessa forma, $|T_n| \le 1$ em [-1, 1].

Ainda de acordo com [56, p. 14] se o intervalo da variável $x \in [-1, 1]$, então o intervalo da variável correspondente θ pode ser considerado como $[0, \pi]$. O texto frisa que $\cos(n\theta)$

é um polinômio de grau n em cos θ . O que fornece os seguintes elementos iniciais para a série dos polinômios de Chebyshev:

$$T_0(x) = 1,$$

$$T_1(x) = \cos \theta,$$

$$T_2(x) = 2\cos^2 \theta - 1,$$

$$T_3(x) = 4\cos^3 \theta - 3\cos \theta,$$

$$T_4(x) = 8\cos^4 \theta - 8\cos^2 \theta + 1.$$



Figura 18: Gráficos dos Polinômios de Chebyshev $T_1(x), T_2(x), T_3(x) \in T_4(x)$ no intervalo [-1, 1]. Fonte: [9]

Os Polinômios de Chebyshev do primeiro tipo são apresentados no estudo [19] como sendo uma família de polinômios ortogonais gerados pela relação recursiva dada por:

$$T_{n+1}(x) = 2x T_n(x) - T_{n-1}(x)$$
(4.2)

 com $T_0(x) = 1$ e $T_1(x) = x$, onde $T_n(x)$ representa o Polinômio de Chebyshev de ordem n.

A ortogonalidade em \mathbb{R} dos polinômios de Chebyshev é estabelecida em relação à função de peso $\frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}}$ a qual deve satisfazer as seguintes condições [19]:

$$\int_{-1}^{1} T_n(x) T_m(x) \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2}} \, dx = \begin{cases} 0, & n \neq m \\ 1/2, & n = m \neq 0 \\ 1, & n = m = 0 \end{cases}$$
(4.3)

O Polinômio de Chebyshev do segundo tipo, U_n , é definido por [34, p. 28] e [8] pela equação: in [(n + 1)0]

$$U_n(x) = U_n(\cos\theta) = \frac{\sin\left\lfloor (n+1)\theta\right\rfloor}{\sin\theta}$$
(4.4)

onde os itens da série de Polinômios de Chebyshev são $U_0(x) = 1$, $U_1(x) = 2x$, e para $n \ge 2$, representados através da relação de recursividade dada pela equação a seguir [8].

$$U_n(x) = 2x U_{n-1}(x) - U_{n-2}(x).$$
(4.5)

A partir da Equação (4.5), [8] deriva os termos seguintes da série dos Polinômios de Chebyshev do segundo tipo como sendo:

$$U_0(x) = 1,$$

$$U_1(x) = 2x,$$

$$U_2(x) = 4x^2 - 1,$$

$$U_3(x) = 8x^3 - 4x,$$

$$U_4(x) = 16x^4 - 12x^2 + 1,$$

$$U_5(x) = 32x^5 - 32x^3 + 6x.$$

4.2 Programação Quadrática Sequencial

A Programação Quadrática Sequencial (Sequential Quadratic Programming (SQP)) apresenta-se como uma abordagem eficaz para a resolução de problemas de otimização com restrições não lineares [11]. O SQP não se configura como um algoritmo singular, mas sim como uma metodologia conceitual a partir da qual diversos algoritmos foram desenvolvidos. O método SQP é descrito como a aproximação de um problema de programação Nonlinear Programming (NLP) através de um subproblema de programação quadrática. A partir de uma solução aproximada, X_k , que é utilizada para refinar a aproximação, gera-se uma nova estimativa, X_{k+1} [11]. Esse processo iterativo visa a convergência para a solução ótima.

Assim, este método se apresenta como o ideal para ser aplicado na decomposição dos espectros observados analisados, com consequente identificação das contribuições dos espectros de SSP (teóricos). Ou seja, usando o método SQP poderemos encontrar quais são os percentuais de contribuição de cada espectro teórico para formar o espectro combinado que melhor se assemelha ao espectro observado.

Os problemas de programação NLP com restrições gerais, incluindo restrições de igualdade e desigualdade podem ser expressos como [48]:

(NLP):
$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$$

sujeito à: $g_j(x) = 0, \quad j = 1, \dots, m_e,$
 $g_j(x) \ge 0, \quad j = m_e + 1, \dots, m_e$

onde os limites inferiores e superiores das variáveis são:

$$l_i \leq x_i \leq u_i, \quad i = 1, \dots, n.$$

e $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ e $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ são funções continuamente diferenciáveis e que não apresentam um padrão definido.

A reformulação do problema de otimização do tipo NLP com restrições, utilizando o método de Lagrange e a função de Lagrange $L(x, \lambda)$ é apresentada por [40] como:

$$L(x,\lambda) = f(x) - \sum_{j=1}^{m} \lambda_j g_j(x)$$

$$\underset{x,\lambda}{\operatorname{Min}} L(x,\lambda) \quad \text{onde}, x_l \le x \le x_u$$

$$(4.6)$$

A função Lagrangeana escalar desempenha um papel fundamental na teoria de otimização com restrições [11]. A partir deste ponto, as restrições de igualdade serão representadas por h(x) e as de desigualdade por de desigualdade por g(x). Neste contexto, a função Lagrangeana escalar é definida pela seguinte equação:

$$\mathcal{L}(x, u, v) = f(x) + u^t h(x) + v^t g(x)$$
(4.7)

onde $u \in \mathbb{R}^m$ e $v \in \mathbb{R}^p$ são os vetores multiplicadores.

Para qualquer solução local específica do problema de programação não linear (NLP), representada por x^* , [11] apresenta as seguintes condições necessárias que se aplicam a tal solução:

- Condições de Otimalidade de Primeira Ordem: Existem multiplicadores ótimos u* e v* ≥ 0 tais que ∇L(x*; u*, v*) = ∇f(x*) + ∇h(x*)u* + ∇g(x*)v* = 0, ou seja, a derivada da função Lagrangiana com respeito a x se anula.
- Independência Linear: As colunas da matriz $G(x^*)$ são linearmente independentes, garantindo a viabilidade do ponto x^* .
- Complementaridade Estrita: Se $g_i(x^*) = 0$, então $v_i^* > 0$; ou seja, os multiplicadores associados às restrições ativas são estritamente positivos.
- Hessiana Positiva Definida: A hessiana da função Lagrangiana com respeito a x é positiva definida no espaço nulo de $G(x^*)^t$, assegurando que x^* seja um mínimo local isolado.

O autor observa que as condições listadas asseguram que x^* seja um mínimo local isolado do NLP e que os vetores multiplicadores ótimos u^* e v^* sejam únicos.

Na discussão sobre a convergência dos algoritmos SQP, [11] estabelece parâmetros de convergência de modo que uma sequência $\{x^k\}$ convergindo para x^* seja classificada como:

• Linear se existir uma constante $\xi < 1$ tal que

 $||x^{k+1} - x^*|| \le \xi ||x^k - x^*|| \quad \forall k \text{ suficientemente grande.}$

• Superlinear se houver uma sequência de constantes $\xi_k \to 0$ satisfazendo

$$||x^{k+1} - x^*|| \le \xi^k ||x^k - x^*|| \quad \forall k \text{ suficientemente grande.}$$

• Quadrática se existir uma constante ξ tal que

$$||x^{k+1} - x^*|| \le \xi ||x^k - x^*||^2.$$

4.2.1 O Subproblema Quadrático

Os algoritmos fundamentados na teoria da SQP operam de maneira iterativa, onde cada iteração é conduzida pela resolução de um Subproblema Quadrático. Conforme destacado por [11], esse subproblema reflete, em certa medida, as propriedades locais do problema original. Os autores apontam que subproblemas com função objetivo quadrática e restrições lineares são relativamente fáceis de resolver, além de capturar as não linearidades inerentes ao problema original, dado o caráter quadrático da função objetivo.

O Subproblema Quadrático pode ser formulado através da linearização das restrições do problema original nas proximidades de x^k , onde x^k representa a iteração atual [11, 37]. De acordo com [11, 37] essa abordagem é uma escolha razoável, na qual a formulação do Subproblema Quadrático é apresentada conforme a equação:

$$\min_{dx} (r^k)^t dx + \frac{1}{2} dx^t B_k dx$$

sujeito à $\nabla h(x^k)^t dx + h(x^k) = 0$
 $\nabla g(x^k)^t dx + g(x^k) \le 0$ (4.8)

onde $dx = x - x^k$, a matriz simétrica B_k e o vetor r^k são estabelecidos com base na aproximação quadrática local da função $f \text{ em } x^k$. Neste contexto, B_k representa a Hessiana de $f e r^k$ corresponde ao gradiente de $f \text{ em } x^k$.

Na presença de restrições não lineares, a escolha de uma aproximação quadrática pode revelar-se inadequada. Para levar em consideração as não linearidades nas restrições, mantendo a linearidade das restrições no subproblema, o método SQPs adota um modelo quadrático da função Lagrangiana como função objetivo [11]. Conforme destacado pelo estudo esta escolha se justifica com base nas condições de otimalidade de primeira ordem, juntamente com a positividade definida da Hessiana, as quais implicam que x^* é um mínimo local do problema. A função Lagrangiana é uma combinação especial das funções objetivo e de restrição, e sua Hessiana contém informações sobre a curvatura das funções de restrição [37]. A Equação (4.9) apresenta a formulação com a adoção do modelo quadrático da função Lagrangiana [11].

$$\min_{x} \quad \mathcal{L}(x, u^{*}, v^{*})$$

sujeito à $h(x) = 0$
 $g(x) \leq 0.$ (4.9)

Na formulação da Equação (4.9), mesmo que os multiplicadores ótimos não sejam conhecidos, aproximações $u^k e v^k$ para os multiplicadores podem ser mantidas como parte do processo iterativo. Assim, dada uma iteração atual (x^k, u^k, v^k) , a aproximação quadrática da série de Taylor em x para a função Lagrangiana é [11]:

$$\mathcal{L}(x^k, u^k, v^k) + \nabla \mathcal{L}(x^k, u^k, v^k)^t dx + \frac{1}{2} dx^t H \mathcal{L}(x^k, u^k, v^k) dx$$
(4.10)

Uma motivação relevante para usar a função Lagrangeana como a função objetivo no subproblema quadrático é que quando aplicada à condição necessária de otimalidade de primeira ordem e às equações de restrição (incluindo restrições de desigualdade ativas) ela gera iterações idênticas às do método de Newton [11]. Os autores declaram que isso garante boas propriedades de convergência local, no entanto, eles observam que, é importante considerar alternativas à Hessiana real da Lagrangiana, como matrizes de aproximação que possibilitem a resolução do subproblema quadrático em qualquer iteração x_k e permitam uma análise de convergência global do algoritmo resultante. Assim, denotase B_k como uma aproximação de $H\mathcal{L}(x^k, u^k; v^k)$ reescrevendo o subproblema quadrático conforme a equação:

$$\min_{x} \quad \nabla \mathcal{L}(x^{k}, u^{k}, v^{k})^{t} dx + \frac{1}{2} dx^{t} B_{k} dx$$

sujeito à:
$$\nabla h(x^{k})^{t} dx + h(x^{k}) = 0 \qquad (4.11)$$
$$\nabla g(x^{k})^{t} dx + g(x^{k}) \leq 0:$$

O subproblema quadrático mais usual na literatura, é apresentado pela equação a seguir [11]:

$$\min_{dx} \nabla f(x^k)^t dx + \frac{1}{2} dx^t B_k dx$$

sujeito à: $\nabla h(x^k)^t dx + h(x^k) = 0$
 $\nabla g(x^k) dx + g(x^k) \le 0.$ (4.12)

A matriz B_k conforme apresentado por [58] é geralmente uma aproximação da Hessiana da função Lagrangiana dada pela Equação (4.13), onde λ são estimativas para os multiplicadores de Lagrange.

$$\mathcal{L}(x,\lambda) = F(x) - \lambda^T c(x) \tag{4.13}$$

Para problemas com apenas restrições de igualdade, [11] afirmam que as Equações (4.11) e (4.12) são equivalentes devido às restrições linearizadas, uma vez que, o termo $\nabla h(x_k)^T dx$ se torna constante . Porém, os autores salientam que na existência de restrições de desigualdade as Equações (4.11) e (4.12) são equivalentes apenas para os casos em que a estimativa do multiplicador v_k seja zero para todas as restrições lineares inativas. Por fim o texto sustenta que o (QP) é equivalente a Equação (4.11) para à formulação com variáveis de folga do problema de programação não linear apresentado pela equação:

$$\begin{array}{ll}
\min_{x,z} & f(x) \\
\text{sujeito à:} & h(x) = 0 \\
& g(x) + z = 0 \\
& z \ge 0,
\end{array}$$
(4.14)

onde $z \in \mathbb{R}^p$ representa o vetor das variáveis de folga.

Para gerar uma nova iteração x_{k+1} ao dar um passo de x_k na direção de dx com comprimento α , utiliza-se a solução dx do (QP) e a cada nova iteração, as estimativas dos multiplicadores precisam ser atualizadas [11]. O estudo indica a utilização dos multiplicadores ótimos do subproblema quadrático, denotados por u_{qp} e v_{qp} para realização das atualizações de (x, u, v), que podem ser escritas pela equação:

$$x^{k+1} = x^{k} + \alpha dx$$

$$u^{k+1} = u^{k} + \alpha (u_{qp} - u^{k})$$

$$v^{k+1} = v^{k} + \alpha (v_{qp} - v^{k})$$
(4.15)

As funções do problema e suas derivadas são avaliadas após a construção das novas iterações e uma escolha prescrita de B_{k+1} é calculada [11].

4.2.2 O algoritmo básico

O algoritmo inicia com um dado vetor de parâmetros x^0 , após a inicialização o $(k+1)^{\text{th}}$ iterado x^{k+1} será obtido a partir de x^k pelo passo definido através da seguinte equação [47]:

$$x^{k+1} := x^k + \alpha^k d^k \tag{4.16}$$

onde afirma-se que o problema NLP será resolvido de modo iterativo, e d^k é a direção de busca dentro do k^{th} passo e α^k é o comprimento do passo.

4.2.2.1 A Direção de Busca

A direção de busca é definida por meio da resolução do subproblema de programação quadrática (QP), o qual é formulado com base em uma aproximação quadrática da função Lagrangiana associada ao NLP e uma aproximação linear das restrições g_j [47]. Nessa abordagem a formulação do QP é dada por:

$$\mathcal{L}(x,\lambda) = f(x) - \sum_{j=1}^{m} \lambda_j g_j(x)$$
(4.17)

Ainda de acordo com [47] o QP segue a forma padrão de programação quadrática apresentada pela equação:

$$(QP): \min_{d \in \mathbb{R}^{n}} \frac{1}{2} d^{T} B^{k} d + \nabla f(x^{k}) d$$

sujeito à: $\nabla g_{j}(x^{k}) d + g_{j}(x^{k}) = 0, \quad j = 1, \dots, m$
 $\nabla g_{j}(x^{k}) d + g_{j}(x^{k}) \ge 0, \quad j = m_{e} + 1, \dots, m.$ (4.18)

A resolução do QP é necessária para a execução dos passos do algoritmo SQP e para garantir que o subproblema quadrático tenha uma solução, é necessário que o sistema de restrições do QP tenha um conjunto viável não vazio e que a função objetivo quadrática seja limitada inferiormente nesse conjunto [11]. Os autores asseguram que há consistência quando x_k está próximo de x^* , conforme a condição necessária da independência linear, mas pode falhar em pontos mais distantes.

4.2.2.2 Análise de convergência

As propriedades de convergência são geralmente classificadas como locais ou globais. De acordo com [11] os teoremas relacionados à convergência local são derivados do método de Newton, enquanto os teoremas de convergência global são fundamentados em métodos decrescentes.

Os resultados de convergência local partem da suposição de que a iteração inicial x_0 está próxima de uma solução x^* e que a aproximação inicial da hessiana está, em certo sentido, próxima de $H\mathcal{L}^*$ [11]. De acordo com os autores as condições relacionadas aos esquemas de atualização são formuladas para garantir que x_k e B_k se mantenham próximos de x^* e H_L^* . Deste modo, essa proximidade permite inferir que o subproblema quadrático representa adequadamente o NLP em cada iteração e o sistema de equações do QP aproxima-se do sistema do NLP em x^* .

A convergência global refere-se ao processo de convergência que se inicia a partir de um ponto distante [11]. Para assegurar a convergência global o algoritmo SQP possui como indicador de progresso a função mérito ϕ e o algoritmo estabelece a redução da função mérito como o critério que sinaliza avanços em direção a uma solução. E afim de garantir que ϕ diminua em cada passo do algoritmo, os autores sustentam que é necessária a implementação de um procedimento que ajuste o parâmetro de comprimento de passo. Desta forma conclui-se que, embora a iteração inicial x_0 não esteja próxima de uma solução viável, a redução de ϕ permite estabelecer que, sob determinadas condições, as iterações tendem a convergir para uma solução potencial.

Após elucidar os principais pontos da execução do SQP apresenta-se o seguinte algoritmo estruturado [11]:

- 1. Defina os valores iniciais (x^0, u^0, v^0) , B_0 , uma função mérito ϕ e inicialize as iterações com k = 0.
- 2. Obtenha (dx, du, dv) através da formulação e resolução de QP.
- 3. Defina o tamanho do passo α de forma que:

$$\phi(x^k + \alpha dx) < \phi(x^k)$$

4. Atualize as variáveis:

$$x^{k+1} = x^k + \alpha dx$$
$$u^{k+1} = u^k + \alpha du$$
$$v^{k+1} = v^k + \alpha dv$$

- 5. Se a convergência for atingida pare.
- 6. Calcule a matriz B_{k+1} .
- 7. Atualize k := k + 1 e retorne ao passo 2.

4.2.3 O algoritmo SLSQP

O método de Programação Sequencial por Mínimos Quadrados SLSQP foi introduzido pela primeira vez por Dieter Kraft em 1988 no relatório técnico intitulado "A Software Package for Sequential Quadratic Programming" do Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR), o Centro Aeroespacial Alemão [47]. Este trabalho apresentou uma implementação do método, destacando sua aplicabilidade em problemas de programação não linear com restrições .

A estratégia do SLSQP baseia-se na resolução de dois subproblemas a cada iteração: um programa linear (*Linear Programming* (LP)) e um programa quadrático com restrições de igualdade (*Equality-Constrained Quadratic Programming* (EQP)) [40]. Nessa abordagem, o LP determina as restrições de desigualdade que estão ativas no ponto atual da solução, ou seja, aquelas em que a desigualdade se torna uma igualdade [47]. De acordo com o autor este processo forma o "conjunto ativo"de restrições, que representa as condições que devem ser respeitadas na próxima iteração. Essa etapa reduz a complexidade do conjunto de restrições consideradas, simplificando o problema.

Uma vez identificado o conjunto ativo de restrições pelo LP, o EQP é empregado para calcular o passo total (Δx) dentro do espaço viável [47]. Esse passo é determinado resolvendo um subproblema de programação quadrática que utiliza uma aproximação local da função objetivo e trata as restrições ativas como igualdades. O autor afirma que essa formulação considera o gradiente da função objetivo e uma matriz Hessiana (ou sua aproximação), o que dessa forma assegura que o deslocamento calculado respeita tanto a função objetivo quanto as restrições.

Por meio da decomposição da matriz simétrica B em três componentes, onde L é uma matriz triangular inferior com elementos distintos de zero em sua diagonal principal, D é uma matriz diagonal, e L^T é a transposta de L, resultando na fatoração LDL^T , o subproblema de programação quadrática QP é substituído por um subproblema de mínimos quadrados linear conforme equação apresentada [47]:

(LSEI):
$$\min_{d \in \mathbb{R}^n} \left\| (D^k)^{1/2} (L^k)^T d + (D^k)^{-1/2} (L^k)^{-1} \nabla f(x^k) \right\|$$
 (4.19)

Sujeito a:

$$\nabla g_j(x^k)d + g_j(x^k) = 0, \quad j = 1, \dots, m_e,$$
(4.20)

$$\nabla g_j(x^k)d + g_j(x^k) \ge 0, \quad j = m_e + 1, \dots, m.$$
 (4.21)

A substituição do subproblema QP por um subproblema de mínimos quadrados linear simplifica a solução numérica, utilizando a fatoração LDL^T para garantir estabilidade computacional. Essa abordagem considera L^k como uma matriz triangular inferior e D^k como uma matriz diagonal [47].

4.3 Análise de Componentes Principais (PCA)

O método conhecido como Análise de Componentes Principais (PCA) é tradicionalmente utilizado em problemas onde se faz necessário realizar uma redução de dimensionalidade de uma dada amostra, pela transformação de um grande conjunto de dados em um conjunto menor, mas que preserve as principais características estatísticas do conjunto maior de dados [62]. O objetivo do método é identificar as direções principais das distribuições dos dados e avaliar as projeções da amostra nessas direções, de modo a identificarmos quais são as direções (ou componentes) mais relevantes para a análise da amostra. Tais direções estarão associadas às principais características da amostra e serão chamadas de componentes principais [62]. As componentes principais serão na verdade as direções com a maior variância na amostra original.

De acordo com o trabalho [66], algumas características importantes na aplicação do método são:

- O número total de componentes principais será menor ou igual ao número de características da amostra;
- 2. As componentes principais representarão eixos ortogonais entre si;
- A importância de cada componente principal para descrever os dados decresce a medida que o número de componentes aumenta.

A aplicação do método se divide basicamente em 4 etapas: (i) Padronização, (ii) Cálculo da matriz de covariância, (iii) Cálculo dos auto-valores e auto-vetores e, por último, (iv) Obtenção dos vetores de propriedades da amostra ou vetor característico. As quatro etapas serão descritas nas subseções a seguir. Ao final serão apresentados os *scores* e *loadings*, ou seja, os pesos e as projeções da amostra. Devido à aplicação deste método em diversas áreas do conhecimento [36], a terminologia adotada para resolução de cada etapa costuma variar e abordaremos nas etapas a seguir tanto a terminologia convencional quanto a terminologia matemática adequada.

4.3.1 Padronização

A etapa inicial segundo [36] se resume a padronizar os dados para aplicação do método. Deste modo, toma-se a média das componentes dos dados como referência e subtrai-se essa média dos dados. O texto afirma que isso equivale a fazer uma transformação de
coordenadas nos dados, passando a descrevê-los em um novo sistema de referência onde o valor da translação é dada pela média das componentes em cada dimensão. E posteriormente, um reescalonamento é feito pela divisão do desvio padrão das componentes, para se evitar que a análise contenha algum viés. Ou seja, se uma componente tiver valores no intervalo entre 0 e 100 e outra componente tiver intervalo de valores entre 0 e 1, a primeira componente tenderá a dominar sobre a segunda, levando a resultados equivocados. Qualquer problema de viés nas análises é suprimido dividindo cada componente por seu respectivo desvio padrão.

Se cada ponto que descreve os dados da amostra possui D componentes, onde Dé o total de dimensões do espaço amostral, então o ponto médio da amostra pode ser calculado obtendo-se a média de cada componente dos pontos que compõem a amostra. Depois subtrai-se esse valor médio da amostra para se obter a nova amostra (da mesma forma como em uma transformação de coordenadas, realizada pela translação da origem do sistema de coordenadas). Por último, é imperativo analisar cada componente de acordo com quanto esta se desvia da média de cada componente e, por isso, a divisão pelo desvio padrão de cada componente se faz necessário.

Por exemplo, para um espaço tridimensional (D = 3), os pontos observados são dados por:

$$A_{1} = (x_{11} , x_{21} , x_{31})$$

$$A_{2} = (x_{12} , x_{22} , x_{32})$$

$$A_{3} = (x_{13} , x_{23} , x_{33})$$

$$A_{4} = (x_{14} , x_{24} , x_{34})$$

$$\vdots$$

$$A_{n} = (x_{1n} , x_{2n} , x_{3n})$$

Assim o ponto médio é dado por:

$$M = \frac{1}{n} \left(\sum_{j=1}^{n} x_{1j} , \sum_{j=1}^{n} x_{2j} , \sum_{j=1}^{n} x_{3j} \right) = (\bar{x}_1, \bar{x}_2, \bar{x}_2) = (M_1, M_2, M_3)$$
(4.22)

Deste modo, a transformação de coordenadas por translação (também chamada de padronização) é feita pela diferença entre a os dados da amostra original A e a média M.

Assim a nova amostra será $B = \{B_i\}$ descrita por $B_i = A_i - M_i$, ou seja:

$$B_{1} = \begin{pmatrix} x_{11} - \bar{x}_{1} & , & x_{21} - \bar{x}_{2} & , & x_{31} - \bar{x}_{3} \end{pmatrix}$$

$$B_{2} = \begin{pmatrix} x_{12} - \bar{x}_{1} & , & x_{22} - \bar{x}_{2} & , & x_{32} - \bar{x}_{3} \end{pmatrix}$$

$$B_{3} = \begin{pmatrix} x_{13} - \bar{x}_{1} & , & x_{23} - \bar{x}_{2} & , & x_{33} - \bar{x}_{3} \end{pmatrix}$$

$$\vdots \qquad \vdots$$

$$B_{n} = \begin{pmatrix} x_{1n} - \bar{x}_{1} & , & x_{2n} - \bar{x}_{2} & , & x_{3n} - \bar{x}_{3} \end{pmatrix}$$

Após subtrair a média, é requerida a padronização da amostra dividindo todas as componentes pelo respectivo desvio padrão. O desvio padrão de cada componente é calculado como [64, p. 56]:

$$\sigma_i = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_i)^2} \quad \text{, onde } i = 1, 2, \dots, D$$
(4.23)

Deste modo, os dados modificados ou padronizados serão dados por $C = B/\sigma$, ou seja:

$$C_{1} = \begin{pmatrix} \frac{x_{11} - \bar{x}_{1}}{\sigma_{1}} & , \frac{x_{21} - \bar{x}_{2}}{\sigma_{2}} & , \frac{x_{31} - \bar{x}_{3}}{\sigma_{3}} \end{pmatrix}$$

$$C_{2} = \begin{pmatrix} \frac{x_{12} - \bar{x}_{1}}{\sigma_{1}} & , \frac{x_{22} - \bar{x}_{2}}{\sigma_{2}} & , \frac{x_{32} - \bar{x}_{3}}{\sigma_{3}} \end{pmatrix}$$

$$C_{3} = \begin{pmatrix} \frac{x_{13} - \bar{x}_{1}}{\sigma_{1}} & , \frac{x_{23} - \bar{x}_{2}}{\sigma_{2}} & , \frac{x_{33} - \bar{x}_{3}}{\sigma_{3}} \end{pmatrix}$$

$$\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots \qquad C_{n} = \begin{pmatrix} \frac{x_{1n} - \bar{x}_{1}}{\sigma_{1}} & , \frac{x_{2n} - \bar{x}_{2}}{\sigma_{2}} & , \frac{x_{3n} - \bar{x}_{3}}{\sigma_{3}} \end{pmatrix}$$

4.3.2 Matriz de covariância

Após a padronização, deve-se efetuar o cálculo da matriz de covariância de C. Cada termo da matriz de covariância demonstra a variância entre duas coordenadas ou componentes. Conforme definido no texto [64, p. 255], uma covariância positiva indica que existe uma correlação entre as variáveis, de modo que o aumento de uma tende a ser acompanhado pelo aumento da outra. Por outro lado, uma covariância negativa sugere que, caso uma variável aumente (ao longo do tempo, por exemplo), a outra necessariamente diminuirá. Assim, pode-se notar que a covariância entre as variáveis x e y devem dar o mesmo resultado que a covariância entre y e x.

Portanto, os termos fora da diagonal da matriz de covariância deverão ser simétricos

e, implicando que esta será uma matriz simétrica, onde todos os termos acima da diagonal terão termos simétricos (iguais entre si) abaixo da diagonal da matriz. As variâncias serão exatamente os valores da diagonal da matriz de covariância. A covariância fornece detalhes da orientação dos dados, ao passo que a variância fornece detalhes sobre a distância média dos dados em relação à média.

A covariância entre duas variáveis arbitrárias $x = \{x_k\} \in y = \{y_k\}$ (dadas como dois conjuntos de valores medidos) é calculada como [64, p. 255]:

$$\operatorname{cov}_{xy} = \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^{n} (x_k - \bar{x})(y_k - \bar{y}).$$
(4.24)

A matriz de covariância é formada pelos valores cov_{xy} calculados entre as variáveis. No exemplo dado inicialmente, a matriz de covariância será:

$$\operatorname{cov} = \left(\begin{array}{ccc} \operatorname{cov}_{11} & \operatorname{cov}_{12} & \dots \\ \operatorname{cov}_{21} & \operatorname{cov}_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{array} \right)$$

onde

$$\operatorname{cov}_{ij} = \frac{1}{n-1} \sum_{k=1}^{n} (x_{ik} - \bar{x}_i)(x_{jk} - \bar{x}_j).$$
(4.25)

4.3.3 Auto-valores e auto-vetores

Em álgebra linear, denominam-se auto-vetores aqueles vetores associados a um operador matemático que preservam suas direções originais quando sofrem transformações lineares por tal operador, podendo sofrer alterações apenas em sua intensidade e sentido. A intensidade e sentido da alteração será definida pelos auto-valores, que são valores escalares que surgem na aplicação do operador matemático de transformação linear. Assim, se um operador A (por exemplo, uma matriz) atuar sobre um auto-vetor \vec{v} , tem-se o seguinte resultado [12, p. 180]:

$$A.\vec{v} = \lambda \vec{v} \tag{4.26}$$

onde λ é o auto-valor associado ao auto-vetor \vec{v} .

O resultado almejado são os auto-valores e auto-vetores associados à matriz de covariância. O modo clássico de encontrar os auto-valores e auto-vetores de um operador é analisar a diferença $A.\vec{v} - \lambda \vec{v} = 0$, onde conclui-se que:

$$A.\vec{v} - \lambda \vec{v} = 0$$
$$(A - \lambda \mathbb{1}) \vec{v} = 0$$

dessa forma, pode-se inferir que a matriz $A - \lambda \mathbb{1} = 0$. Esta expressão leva a um polinômio de λ , o que permite encontrar suas raízes e, por fim, os auto-valores λ . Nota-se que os valores de λ serão únicos pois a matriz dada por $A - \lambda \mathbb{1} = 0$ deverá ser singular (com determinante nulo, det $(A - \lambda \mathbb{1}) = 0$) e, portanto, não admitirá matriz inversa, conforme pode ser conferido em [12, p. 187].

No caso da matriz de covariância, os auto-valores estarão relacionados com a variância em cada componente. Deste modo, quanto maior for o auto-valor, maior será a distribuição dos dados observados na direção do auto-vetor associado ao respectivo autovalor. Assim, a importância de cada auto-vetor será medida pelo auto-valor associado. As componentes principais nada mais são do que as direções definidas pelos auto-vetores encontrados. O auto-vetor com maior auto-valor associado será a primeira componente principal e as demais componentes serão relacionadas em ordem decrescente, dada pelos respectivos auto-valores em ordem decrescente.

A identificação dos auto-vetores corresponde à identificar as direções de maior variância da amostra, mas também corresponde a encontrar os novos eixos coordenados nos quais a amostra se distribui melhor, em relação aos eixos original. Em outras palavras, o processo todo corresponde a aplicar uma transformação de coordenadas (uma rotação) em torno da nova origem definida no processo de padronização (que havia sido definida pela subtração da média M e divisão pelos desvios padrões de cada componente das variáveis da amostra).

4.3.4 Vetor de propriedades ou vetor característico

É possível ainda escolher quantas componentes principais serão adotadas baseado nos auto-valores. Por exemplo, se os 6 maiores auto-valores somados correspondem a mais de 99,9% da soma de todos os auto-valores encontrados, então apenas as 6 primeiras componentes principais serão necessárias para se alcançar o mesmo percentual de representatividade das características da amostra. Foi exatamente este o método adotado neste trabalho para determinar quantas componentes principais serão utilizadas em cada análise. Após a determinação dos auto-valores e seus respectivos auto-vetores, torna-se viável proceder à análise das principais propriedades da amostra. O vetor característico é definido como uma matriz quadrada composta pelos auto-vetores organizados em colunas. Caso tenham sido identificados n auto-vetores, é possível optar por manter apenas p auto-vetores para as análises subsequentes, desde que estes representem um alto percentual da variância dos dados da amostra original. Essa abordagem permite a efetiva redução dimensional nas análises.

4.3.5 Scores e Loadings

Na literatura, *scores* são as projeções dos dados originais nas direções definidas pelas componentes principais (ou auto-vetores de maior auto-valor associado) [1]. Mas obter apenas os *scores* não é suficiente, pois é preciso também saber a posição relativa entre as origens dos dois sistemas de coordenadas (tanto o original quanto o transformado, dado pelas componentes principais). Assim, é necessário calcular os *loadings*, ou carregamentos, que nada mais são que os cossenos diretores das projeções dos eixos antigos sobre os novos eixos (definidos pelas componentes principais) [1].

Neste trabalho, foi aplicada a regra de corte para determinar os *loadings* significativos. A regra de corte define que um *loading* é considerado significativo quando seu valor absoluto excede um limiar pré-estabelecido [62]. Com base no estudo [67], adotou-se o valor de 0.30 como critério de seleção dos *templates*. Essa abordagem permite uma interpretação automatizada das componentes principais.

Desta forma com base nos *scores* e *loadings* a amostra original é reescrita em termos das componentes principais de maior relevância, finalizando a redução dimensional desejada.

5 Metodologia

Neste capítulo, são apresentados os métodos utilizados para a correção dos dados observacionais, bem como o processo de síntese espectral. Este processo tem como objetivo a construção de um espectro representativo de uma população estelar composta, que reproduza da forma mais fiel possível o espectro observado em um determinado ponto da galáxia. A construção desse espectro é realizada a partir de modelos espectrais de populações simples, os quais são ajustados por meio do algoritmo de minimização SLSQP.

5.1 A amostra

O projeto Mapping Nearby Galaxies at Apache Point Observatory (MaNGA) é um mapeamento de galáxias próximas realizado pelo Observatório Apache Point e abrange um levantamento de 10.000 galáxias em uma extensa faixa de massas estelares, ambiente e SFR, com uma cobertura radial uniforme e com redshift entre 0.03 < z < 0.10. A ampla cobertura de comprimento de onda do MaNGA, que vai de 3600 a 10300 Å permite um ajuste completo dos modelos ao capturar uma grande variedade de características espectrais. Além disso, a cobertura do MaNGA no infravermelho próximo (Near-IR) oferece uma visão detalhada das galáxias em diferentes faixas espectrais. O MaNGA faz parte da quarta geração do SDSS, ele foi iniciado em 1º de julho de 2014 e teve uma duração de 6 anos [15].

De acordo com [15] o MaNGA tem como objetivo principal entender os mecanismos físicos que impulsionam a evolução das galáxias. Segundo o autor, o projeto investiga como os componentes das galáxias são montados, investiga a regulação do crescimento galáctico por meio da formação estelar, fusões e extinções e examina a influência desses processos na abundância química de estrelas e gás. O autor destaca que o estudo oferece *insights* sobre o colapso gravitacional, a infusão e dissipação de gás, a formação estelar e a sua regulação por mecanismos de *feedback*, a fusão galáctica, a evolução secular e a acreção em buracos negros supermassivos. Seguindo os diversos trabalhos que nortearam o desenvolvimento desta dissertação [35, 17, 53] e visando as características avançadas do MaNGA para investigar mais a fundo as populações estelares e suas propriedades físicas, para esta dissertação optouse pela investigação dos cubos de dados do MaNGA, *Data Release Pipeline* 3.1.1, pois, o uso desses dados permite explorar com maior precisão os SFH e SFR das galáxias, considerando a cobertura espectral abrangente que o projeto oferece.

5.1.1 Descrição dos dados

Os cubos IFU de dados analisados podem ser descritos como estruturas tridimensionais que contêm informações sobre a intensidade da luz em uma variedade de comprimentos de onda, resultando em uma representação tridimensional do espaço observacional.

O arquivo com os dados observacionais fornecido pelo MaNGA está no formato *Flexible Image Transport System* (FITS). O arquivo inclui um cabeçalho com os metadados essenciais sobre os dados armazenados e um bloco de dados multidimensional ou cubo de dados.

Antes de dar seguimento a descrição da metodologia é necessário esclarecer os termos "cubo", "pixel" e "spaxel". De forma conveniente, utiliza-se o termo cubo de dados para descrever o que, de fato, trata-se de uma matriz multidimensional. O cubo possui as coordenadas $x \, e \, y$, que mapeiam os pixels da imagem e que no contexto da Astronomia são os spaxels. Cada spaxel contém um vetor que armazena os dados do fluxo em função do comprimento de onda, ou seja, a distribuição espectral de energia SED. No vetor atribuído a cada spaxel, o intervalo de comprimento de onda é denominado pixel.

Nos cubos disponibilizados pelo MaNGA, os espectros associados a cada *spaxel* possuem uma resolução de 1 Å por pixel, e a intensidade de fluxo específica por *spaxel* é medida como $1 \times 10^{-17} \text{ erg s}^{-1} \text{ cm}^{-2} \text{ Å}^{-1}$.

5.1.2 Correção dos dados observacionais

Dados astronômicos observacionais enfrentam diversas interferências e transformações desde a emissão pela fonte até a captura da radiação eletromagnética pelo telescópio e sua conversão em cargas elétricas que depois são registradas em computadores como dados espectrais. Para interpretar adequadamente esses dados, é fundamental realizar correções de modo a assegurar que as informações reflitam o objeto emissor em estudo. Antes do tratamento dos dados cada *spaxel* do cubo foi submetido a testes de validação dos dados. O espectro de cada *spaxel* considerado válido teve o efeito do extinção galáctica corrigido, adotando $R_V = 3,1$. Posteriormente trazido para o referencial de repouso utilizando os valores de *redshifts* presentes no banco de dados do SDSS-IV. Os espectros foram amostrados no intervalo de 3800 a 7000 Å, com passos de 1 Å. Por fim, os espectros foram normalizados pelo fluxo em 5000 Å.

A descrição detalhada de cada etapa de validação dos dados, correção e a metodologia aplicada, será apresentada nas seções seguintes.

5.1.2.1 Validação

Nesta etapa do desenvolvimento do trabalho, a validação dos dados é realizada de forma simplificada, verificando-se apenas a presença de valores de fluxo. Espectros que apresentam uma extensa faixa de valores de fluxo nulos são classificados como inválidos. Esse procedimento tem por objetivo evitar o processamento de regiões do cubo de dados que não contêm informações observacionais do objeto em análise.

Outra verificação é em relação a razão sinal ruído, espectros com razão sinal-ruído (SNR) abaixo de 10 não são tratados pelo processo de ajuste espectral.

5.1.2.2 Avermelhamento ou Excesso de cor

A caracterização e o mapeamento da distribuição da poeira no ISM da nossa galáxia representam um desafio da Astronomia. A poeira interestelar dispersa e absorve a radiação eletromagnética, especialmente no intervalo do ultravioleta ao infravermelho, conforme descrito pela lei de avermelhamento da poeira [72]. Além disso, o autor complementa que a poeira reemite a energia absorvida na forma de fótons térmicos no infravermelho distante.

No estudo [18], utilizando dados de Fitzpatrick e Massa para o ultravioleta e diversas fontes para as regiões do óptico e infravermelho próximo, foi estabelecida uma lei de extinção média $A(\lambda)/A(V)$, válida para o intervalo de comprimento de onda $3.5 \,\mu\text{m} >$ $\lambda > 0.125 \,\mu\text{m}$. Esta lei aplica-se tanto a regiões difusas quanto densas do meio interestelar e depende de um único parâmetro, $R_V = A(V)/E(B - V)$, que quantifica a extinção em função do excesso de cor. No estudo também notou-se que, para o meio interestelar difuso, R_V é aproximadamente 3,1 mas valores de R_V podem apresentar desvios em relação à lei de extinção quando medidos para diferentes linhas de visada. Seguindo a abordagem de [24, 3, 53, 69, 43], para este trabalho adotou-se a lei de extinção galáctica proposta por Cardelli, Clayton e Mathis (1989) [18], frequentemente referida como CCM89. A implementação desta lei foi realizada a partir da utilização da a biblioteca extinction [7].

O efeito causado pela remoção do avermelhamento pode ser observado a partir da Figura 19 onde, nota-se que após a remoção do avermelhamento o espectro resultante apresentou fluxo maior em todos os comprimentos de onda, sendo a que a diferença entre os espectros é mais acentuada nos comprimentos de onda menores.



Figura 19: Remoção do avermelhamento. Fonte: Autor

5.1.2.3 Redshift

O avermelhamento cosmológico, ou *redshift*, é resultante da expansão do universo, o qual faz com que as galáxias se afastem umas das outras, causando o alargamento no comprimento de onda da luz emitida e o deslocamento do espectro para comprimentos de onda mais vermelhos.

Conforme discutido no Capítulo 3, Seção 3.2, a Lei de Hubble descreve uma relação entre o desvio para o vermelho, ou a componente radial da velocidade relativa, e a distância de um objeto em relação ao observador. Portanto, com base no valor de *redshift* do objeto em análise é possível ajustar o espectro observado, de modo a trazer seus valores para o referencial de repouso e assegurar uma interpretação precisa das propriedades intrínsecas do objeto.

Os valores de *redshift* aplicados foram obtidos a partir das tabelas DRPall (*Data Reduction Pipeline All*), disponíveis na base de dados do levantamento MaNGA. Optou-

se por efetuar a correção do espectro observado aplicando uma correção com valor de *redshift* negativo, trazendo deste modo os dados observados para o referencial de repouso. A correção do *redshift* foi implementada por meio da biblioteca specutils, utilizando a função redshift_spec1D.shift_spectrum_to [2].

A Figura 20 ilustra um espectro observado em um dado *spaxel*, bem como o mesmo espectro observado após efetuada a correção do *redshift* e com um deslocamento positivo de fluxo de 0.6 (essa adição é feita apenas para melhor visualização na respectiva figura). Esse acréscimo de fluxo ao espectro observado foi implementado exclusivamente para evitar a sobreposição dos espectros, facilitando assim, a visualização dos dados. Com base nos espectros apresentados é possível observar que o espectro após a correção apresenta um formato comprimido em relação ao espectro original. Isso ocorre devido ao alargamento causado pela expansão do universo. Outra consideração refere-se ao posicionamento das linhas de emissão. Observa-se a partir das linhas de maior fluxo, que, após a correção do *redshift*, elas se deslocaram em direção a comprimentos de onda menores (mais azuis). Isso indica que, em decorrência do efeito de *redshift* causado pela expansão do universo, quando observadas sem qualquer correção, essas linhas se localizam em comprimentos de onda maiores (mais vermelhos) do que os comprimentos relativos ao referencial de repouso.



Figura 20: Correção do *redshift*, onde foi adicionado o valor constante de 0.6 no fluxo, criando uma deslocamento positivo. A adição é feita apenas para melhor visualização dos espectros.

Fonte: Autor

Após a correção do *redshift*, os comprimentos de onda sofrem um deslocamento e, devido ao alargamento espectral, os intervalos entre os comprimentos de onda amostrados tornam-se desiguais. Para mitigar esse efeito, foi selecionada uma subamostra espectral no intervalo de 3800 a 7000 Å utilizando a função manipulation.extract_region da biblioteca specutils [2]. Posteriormente, os valores de comprimento de onda foram reamostrados em intervalos regulares de 1 Å por meio da função interp, disponível na biblioteca NumPy [42], garantindo uma distribuição uniforme dos dados espectrais para posterior manipulação e análise.

5.2 Modelos de populações estelares simples

Os modelos de populações estelares simples, SSP têm grande importância no processo de síntese espectral. Esses modelos são combinados de maneira a representar o espectro observado. E é através do arranjo ideal dos modelos que podem ser derivadas as propriedades de idade e metalicidade do objeto astrofísico observado.

Conforme discutido no Capítulo 3, a literatura apresenta diversas bibliotecas de modelos de SSP, cada uma com suas especificidades e adequações para diferentes enfoques de pesquisa. Em alinhamento com os trabalhos de síntese de populações estelares (SPS) que fundamentaram este estudo, como os trabalhos [53] e [24], e visando a comparação dos resultados, optou-se pelos modelos de Bruzual e Charlot (2003) [14] que foram produzidos utilizando o *software* Galaxev.

Os espectros de SSP foram gerados conforme o estudo [53], sendo 45 populações estelares simples, abrangendo 15 idades (0.001, 0.003, 0.005, 0.010, 0.025, 0.040, 0.101, 0.286, 0.640, 0.905, 1.43, 2.50, 5.00, 11.00 e 13.00 Gyrs) e três metalicidades (0.1, 1.6 e 2.5 Z_{\odot}). As metalicidades escolhidas acima equivalem a Z igual a 0.001, 0.019 e 0.030, respectivamente. Como biblioteca espectral, optou-se pela Pádova(2000) com IMF de Salpeter. A distribuição dos *templates* de acordo com a metalicidade e idade está representada na Figura 21 e a Figura 22 apresenta o espectro de todos os *templates* que compõem a biblioteca espectral teórica que foi construída para o desenvolvimento deste trabalho.

71 - 2	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
ZIE-3	1.00E06	3.01E06	5.01E06	9.99E06	2.51E07	4.00E07	1.01E08	2.86E08	6.40E08	9.04E08	1.13E09	2.50E09	5.00E09	13 1.10E10 28 1.10E10 43 1.10E10	1.30E10
7105 0	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29
Z19E-2	1.00E06	3.01E06	5.01E06	9.99E06	2.51E07	4.00E07	1.01E08	2.86E08	6.40E08	9.04E08	1.13E09	2.50E09	5.00E09	13 1.10E10 28 1.10E10 43 1.10E10	1.30E10
7005 0	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44
Z30E-3	1.00E06	3.01E06	5.01E06	9.99E06	2.51E07	4.00E07	1.01E08	2.86E08	6.40E08	9.04E08	1.13E09	2.50E09	5.00E09	1.10E10	1.30E10
		-													-

Figura 21: Distribuição dos *templates* que compõem a biblioteca espectral teórica construída para utilização neste trabalho.

Fonte: Autora



Figura 22: Gráfico dos *templates* que compõem a biblioteca espectral teórica construída para utilização neste trabalho.

Fonte: Autora

5.3 Síntese espectral

A metodologia utilizada para a síntese espectral, com o objetivo de determinar o histórico de formação estelar, segue o procedimento descrito por [24]. Este método envolve o ajuste de um espectro modelo, M_{λ} , ao espectro observado. Para a construção do espectro modelo M_{λ} , o código computacional estabelece uma combinação de N_{\star} populações estelares simples SSPs, resultando em um vetor populacional final \vec{x} . As componentes deste vetor representam as contribuições fracionárias de cada SSP ao fluxo sintético total no comprimento de onda λ_0 .

5.3.1 Identificação das linhas espectrais

As galáxias são compostas por estrelas, nuvens de gás e poeira, além de matéria escura. O foco deste trabalho é a análise das populações estelares, que consistem em estrelas que emitem um espectro contínuo com linhas de absorção geradas pela atmosfera estelar. Dependendo da fase evolutiva da estrela, seu entorno apresentará nuvens compostas por materiais que foram ejetados por elas mesmas, que também absorvem parte da radiação, gerando linhas de absorção em seu espectro. Outras linhas de absorção também serão originadas pelas nuvens de poeira e gás interestelar frio, dispersos na galáxia observada.

No entanto, o espectro resultante da observação de uma galáxia possui linhas de absorção e linhas de emissão. As linhas de emissão se formam em regiões onde há gás aquecido por diferentes processos astrofísicos (tais como, regiões H II presentes no ISM, ou gás aquecido no entorno de núcleos ativos de galáxias AGNs, ou ainda em torno de remanescentes das explosões de supernovas). Logo, para uma análise com foco nos elementos relacionados as estrelas e suas fases evolutivas, apenas as regiões de contínuo e de absorção são de interesse. Deste modo, as regiões do espectro com linhas de emissão não devem ser consideradas no momento da interpretação dos dados.

Modelos espectrofotométricos não contemplam a previsão de linhas de emissão, e a inclusão das regiões espectrais que apresentam essas linhas seria viável apenas mediante a ampliação do espaço paramétrico a ser investigado [65]. Com o intuito de decifrar a História de Formação Estelar (SFH) das galáxias em questão, sem incorrer no ônus de expandir os parâmetros a serem analisados, optou-se pela metodologia proposta nos trabalhos de [30] e [65]. Esses estudos sugerem a exclusão das regiões de linhas de emissão para a execução do processo de síntese espectral.

5.3.1.1 Ajuste de contínuo

Na metodologia descrita em [30], prevê-se o fornecimento dos comprimentos de onda correspondentes às regiões que devem ser excluídas no ajuste entre o espectro observado e o modelado, o qual o autor designa como "máscara de linhas espectrais". Para a implementação do código deste trabalho, foi decidido desenvolver uma rotina que permita a identificação automática das regiões com a presença de linhas de emissão possibilitando sua posterior exclusão, sem que o usuário necessite fornecer informações sobre as regiões.

O primeiro passo na rotina de identificação das linhas de emissão consiste em efetuar o ajuste do contínuo estelar, de maneira que os valores correspondentes ao contínuo possam ser subtraídos a fim de permitir a identificação das regiões que contêm linhas de emissão (valores que sobressaem ao contínuo).

Durante o desenvolvimento deste trabalho, foram testadas diferentes abordagens para o ajuste do contínuo estelar. Inicialmente, utilizou-se a função numpy.polyfit, cujos resultados não foram satisfatórios. Posteriormente, empregou-se a função de ajuste de contínuo disponível na biblioteca specutils, que apresentou boa qualidade no ajuste, porém com elevado custo computacional, tanto em tempo de processamento quanto em alocação de memória.

Visando otimizar esse processo, analisou-se o funcionamento da função fit_generic_continuum da biblioteca specutils [2], identificando-se o uso de polinômios de Chebyshev. Com base nessa observação, testou-se os polinômios de Chebyshev diretamente, por meio da função polynomial.chebyshev.Chebyshev.fit, disponível na biblioteca NumPy [42], que apresentou enorme redução no tempo de processamento, com reduzida alocação de memória. Esse método permite ajustar um polinômio de Chebyshev de grau definido pelo usuário a um conjunto de dados, dentro de um intervalo especificado.

Para a identificação do contínuo estelar, aplicou-se esse ajuste aos espectros observados, previamente corrigidos para *reddening* e *redshift*, adotando-se um polinômio de grau 4. A descrição detalhada do método de ajuste utilizando polinômios de Chebyshev encontra-se no Capítulo 4, Seção 4.1.

A partir da Figura 23, observa-se que o polinômio ajustado apresentou um comportamento satisfatório de forma sistemática nos espectros. Nesse ajuste, foi possível proceder à subtração dos valores do contínuo, permitindo a continuidade do processo de identificação das linhas de emissão.



Figura 23: Ajuste do contínuo pelos polinômios de Chebyshev aplicado a um dos espectros do cubo IFU.

Fonte: Autora

5.3.1.2 Máscara de linhas de emissão

Após a subtração dos valores de contínuo, procede-se à execução da rotina de criação da máscara para as linhas de emissão, onde cada *spaxel* terá a sua própria máscara identificando as linhas de emissão presentes no *spaxel*. Essa rotina é estruturada em um laço iterativo, no qual os fluxos residuais (após subtração de contínuo), são comparados com o desvio padrão do resíduo, previamente calculado para todo o intervalo espectral explorado (3800 a 7000 Å). São então excluídos os comprimentos de onda cujos valores de fluxo residual superam duas vezes o desvio padrão do resíduo.

A cada iteração, subsequente a exclusão dessas regiões, o desvio padrão é recalculado e comparado ao valor anterior. Caso o novo desvio padrão seja menor que o valor precedente, a rotina é executada novamente. O laço continuará a ser iterado até que o desvio padrão recalculado seja igual ou superior ao valor anterior. Uma segunda condição para interrupção do laço também foi incluída para evitar a ocorrência de *loops* infinitos, onde se estabeleceu um limite máximo de 10 repetições para o laço, mais do que suficientes para identificação das linhas.

Essa abordagem iterativa tem como objetivo assegurar que as regiões do espectro correspondentes aos comprimentos de onda que apresentam fluxos associados às linhas de emissão e absorção sejam progressivamente eliminadas, permitindo que a síntese espectral ao final seja realizada exclusivamente nas regiões livres de linhas de emissão. As áreas excluídas durante o processo de identificação das linhas passam por uma rotina de classificação entre emissão e absorção. As regiões de linhas de emissão são reunidas na máscara de linhas de emissão e, posteriormente, a máscara é aplicada tanto aos modelos espectrais de SSP quanto ao espectro observado, zerando os fluxos nas regiões que compõem a máscara. Assim, garante-se que as linhas de emissão não interfiram na síntese do espectro modelado. A Figura 24 apresenta um espectro observado e o mesmo espectro observado após a aplicação da máscara de linhas de emissão.



Figura 24: Aplicação das máscaras de linhas de emissão. Fonte: Autora

5.3.2 Método de otimização

O objetivo geral deste trabalho é realizar a síntese de populações estelares a partir da SED de galáxias seguindo a metodologia descrita por [24]. Para isso, foi implementado um código que ajusta um espectro observado O_{λ} a uma combinação de N espectros de SSP, concebidos a partir da teoria de síntese evolutiva. Após a correção dos dados observacionais (*redshift* e extinção), com os modelos de SSP gerados e disponíveis, e a identificação e exclusão das linhas de emissão no espectro observado e nos modelos SSP, a rotina de busca pela combinação ideal dos espectros de SSP é executada. Esta rotina busca combinar os modelos de SSP de modo a aproximar-se do espectro observado da melhor forma possível.

Como algoritmo de otimização e minimização, foi escolhida a função optimize.minimize, disponível na biblioteca scipy [78]. A função objetivo a ser minimizada pela função optimize.minimize é o valor de χ^2 , calculado com base na diferença entre o espectro observado e o espectro modelado. Inicialmente, foram atribuídos pesos iguais a todos os espectros de modelos de SSP e as restrições impostas ao processo de otimização incluem que a soma dos coeficientes dos modelos que compõem o espectro sintetizado deve ser igual a 1, além de que todos os coeficientes devem ser não negativos. A função $f(\vec{x})$ representa o erro quadrático entre a combinação ponderada dos modelos de populações estelares simples e o espectro observado, sendo o NLP a ser resolvido pelo método de otimização proposto neste trabalho. A formulação do χ^2 é dada pela equação a seguir:

$$\chi^2 = f(\vec{x}\,) = \sum_{\lambda=1}^m \left\{ \left[\left(\sum_{j=1}^n T_{\lambda j} x_j\right) - O_\lambda \right] w_\lambda \right\}^2 \tag{5.1}$$

onde:

- $T_{\lambda j}$ são os espectros teóricos do j-ésimo modelo SSP,
- x_j são os pesos associados a cada modelo de SSP,
- O_{λ} o espectro observado,
- w_{λ} é o conjunto de coeficientes da máscara das linhas de emissão, dado por \vec{w} ,
- m é o número total de comprimentos de onda,
- n é o número total de modelos de SSP.

Sujeito a:

1. Restrição de igualdade (a soma dos pesos deve ser 1):

$$\sum_{j=1}^{n} x_j = 1$$

2. Limites (os pesos não podem ser negativos):

$$x_j \ge 0$$
 para $j = 1, 2, \ldots, n$

De acordo com a documentação da biblioteca scipy [78], a função optimize.minimize implementa a metodologia de otimização SQP, conforme descrito no Capítulo 4, Seção 4.2. O algoritmo utilizado é o SLSQP [47, 48], cujo detalhamento encontra-se no Capítulo 4, Seção 4.2.3.

Visando ilustrar os resultados da síntese espectral a partir da aplicação do algorítimo SLSQP apresenta-se a Figura 25. Nessa figura o espectro modelado é composto pelos espectros de SSP combinados de acordo com o vetor de contribuição que a função optimize.minimize retorna após a sua execução.



Figura 25: Resultado do espectro modelado. Fonte: Autora

5.3.3 Implementação do PCA para redução da dimensionalidade da biblioteca espectral

O ruído presente nos dados observacionais tende a mascarar pequenas diferenças entre os espectros de populações estelares simples [30]. Esse efeito ocorre devido à atenuação de certas características espectrais pelo ruído, o que dificulta a distinção entre elas [29]. Esse fenômeno é particularmente evidente em pares específicos de combinações entre idade e metalicidade, nos quais algumas configurações apresentam sobreposição espectral significativa.

Com base na metodologia aplicada por [29], que consistiu em identificar modelos espectrais com alta correlação, eliminando sobreposições e mantendo apenas os modelos mais relevantes (que apresentam menor correlação), optou-se no presente trabalho por utilizar o método de PCA para selecionar os *templates* significativos dentro do conjunto de 45 *templates* construídos para este trabalho. Essa abordagem permite reduzir a dimensionalidade da biblioteca de modelos espectrais disponível, otimizando o processo de síntese espectral. A sugestão de inclusão do método de PCA para redução das dimensões da base de *templates* foi proposta pelo Prof. Rogério Riffel (UFRGS) durante a etapa de qualificação do presente trabalho, na qual o referido professor integrou a banca.

Na etapa inicial da rotina que realiza a redução das dimensões da biblioteca de modelos espectrais, os modelos de SSP são dispostos em colunas e os seus dados são padronizados, ou seja, a média de cada coluna (*template*) é calculada e subtraída dos valores de fluxo das respectivas colunas, bem como são dividas pelos seus respectivos desvios padrões. Deste modo é realizado a transformação de coordenadas nos dados espectrais, passando a descrevê-los em um novo sistema de referência onde o valor da translação é dada pela média das componentes em cada dimensão. Em seguida, é calculada a matriz de covariância, essencial para quantificar a variação conjunta entre os *templates*, utilizando a função cov da biblioteca NumPy [42].

5.3.3.1 Decomposição e ordenação

A decomposição da matriz de covariância foi realizada com base nos seus auto-valores e auto-vetores. Os cálculos dos auto-vetores e auto-valores foram efetuados com a utilização da função linalg.eigh da biblioteca NumPy [42]. Esta função foi escolhida por ser a mais indicada para cálculo de auto-valores e auto-vetores de matrizes complexo conjugadas (Hermitiana) e matrizes reais simétricas. Além disso, esta função usa o método de decomposição matricial de Cholesky, devolvendo auto-vetores reais, o que nem sempre ocorre com a função linalg.eig também da biblioteca NumPy, a qual usa outro método de decomposição matricial e, dependendo dos auto-valores encontrados, devolve auto-vetores em um espaço de números complexos C. Ambas as funções linalg.eig e linalg.eigh da biblioteca NumPy utilizam rotinas da biblioteca LAPACK para realização de seus cálculos.

A função linalg.eigh da biblioteca NumPy retorna os auto-vetores (que indicam as direções das componentes principais de maior variância) e retorna os auto-valores (que indicam a magnitude dessas variâncias). Posteriormente, os auto-valores são ordenados em ordem decrescente utilizando a função argsort da biblioteca NumPy [42] para identificar os índices ordenados das Componentes Principais (PCs) que explicam a maior variância nos dados.

5.3.3.2 Critério de seleção das PCs

Para determinar o número de PCs necessárias, os auto-valores são normalizados pela soma total dos auto-valores. A soma cumulativa dos auto-valores já normalizados é calculada, e o número mínimo de PCs capaz de explicar 99,97% da variância dos dados é identificado com a função numpy.cumsum combinada com numpy.where [42], a qual identifica em qual o índice a partir do qual a soma cumulativa assume valor superior ao percentual pré-estipulado de 99,97%.

5.3.3.3 Identificação dos templates relevantes

Os auto-vetores associados às PCs selecionadas são utilizados para criar uma matriz de carregamentos (*loadings*) e para identificar os *templates* mais relevantes, utiliza-se um critério de filtragem baseado em um limiar definido como 0.3 [67]. Essa filtragem é realizada iterando sobre os valores absolutos dos carregamentos e identificando aqueles superiores ao limiar.

Ao final da rotina, obtém-se os *templates* mais significativos para cada PC com carregamentos acima do limiar.

5.3.4 Apresentação do algoritmo implementado

Nesta seção, apresenta-se o algoritmo desenvolvido para a análise e síntese espectral a partir de um cubo de dados espectroscópicos. Esse procedimento tem como objetivo calcular a contribuição de cada SSP para a compor da população estelar presente na linha de visada de cada *spaxel*, resultando em um espectro sintético final que mais se assemelha ao espectro observado em análise. O algoritmo é estruturado em várias etapas que incluem o carregamento de dados observacionais, correção de *redshift* e extinção, normalização e ajuste de contínuo, criação de máscaras espectrais, identificação dos modelos espectrais mais significativos da biblioteca espectral e, finalmente, a execução da síntese espectral através do processo de minimização χ^2 otimizado. Cada etapa foi delineada considerando as características dos dados visando uma representação precisa das populações estelares em questão. A descrição das etapas está a seguir:

- 1: Entrada: Cubo de dados espectroscópicos .(MANGACUBE.fits), *Redshift*, Modelos de Populações Estelares
- 2: Saída: Pesos ajustados para as populações estelares e espectro sintético final.

3: procedure Carregar Dados Observacionais

- 4: Abrir o cubo de dados espectroscópicos e extrair os metadados.
- 5: Carregar os valores do *redshift* a partir do arquivo de configuração.
- 6: Extrair o cubo de dados e validar cada *spaxel*.
- 7: end procedure
- 8: procedure Correção de Redshift e Extinção
- 9: for cada *spaxel* válido do
- 10: Obter o espectro observado.
- 11: Corrigir o *redshift*, movendo o espectro para o sistema de repouso.
- 12: Aplicar a correção de extinção.
- 13: Extrair a região de análise definida.
- 14: **end for**

15: end procedure

16: procedure Normalização e Ajuste do Contínuo

- 17: **for** cada *spaxel* válido **do**
- 18: Interpolar o espectro para coincidir com a grade de comprimentos de onda.
- 19: Normalizar o espectro em 5000 Å.
- 20: Ajustar o contínuo com polinômios de Chebyshev de ordem 4.
- 21: Subtrair o contínuo para obter o espectro residual.
- 22: end for
- 23: end procedure
- 24: procedure Criação das Máscaras de Linhas de Emissão
- 25: **for** cada *spaxel* válido **do**
- 26: Criar uma máscara baseada no desvio padrão iterativo do contínuo.

27: end for

28: end procedure

29: procedure Montar Biblioteca de Modelos de Populações Estelares

30: Carregar os modelos de populações estelares com diferentes idades e metalicidades.

31: end procedure

32: procedure Rotina de PCA para Seleção dos Templates

33: Carregar os modelos espectrais como matrizes de fluxos.

- 34: Centralizar os dados subtraindo a média de cada coluna.
- 35: Calcular a matriz de covariância e realizar a decomposição em auto-valores e autovetores.
- 36: Ordenar os auto-valores e determinar o número de componentes principais (PCs) necessários para explicar 99.97% da variância.
- 37: Identificar os *templates* mais significativos com base nos *loadings* superiores a um limiar pré-definido (0.3).
- 38: Atualizar biblioteca espectral mantendo apenas os *templates* identificados como mais significativos.
- 39: end procedure

40: procedure Aplicar a máscara de linhas de emissão

41: **for** cada *spaxel* válido do cubo **do**

- 42: **for** cada modelo de SSP da biblioteca espectral **do**
- 43: Aplicar a máscara de linhas de emissão aos espectros dos *templates* da biblioteca espectral.

44: **end for**

45: **end for**

46: end procedure

47: procedure Síntese Espectral

- 48: for cada *spaxel* válido do
- 49: Aplicar a máscara ao espectro observado e aos modelos selecionados.
- 50: Ajustar os pesos dos *templates* utilizando o método SLSQP.
- 51: Calcular o espectro sintético final como combinação linear dos *templates*.
- 52: end for
- 53: end procedure

O procedimento "Rotina de PCA para Seleção dos *Templates*", descrito entre as linhas 32 e 39 do algoritmo, pode ser configurada para ser executada a parte (como preparação prévia da base reduzida de *templates* a ser usada nos ajustes) ou pode ser desativada no

algoritmo acima (para que seja usada a base original maior de *templates*).

6 Resultados

Nesse capítulo apresentamos as principais análises e interpretações obtidas ao longo do desenvolvimento deste trabalho, com destaque para a comparação entre os espectros modelados e os dados dos cubos simulados ou observados. Este capítulo também aborda os resultados obtidos a partir do emprego do método de minimização SLSQP, avaliando a qualidade dos ajustes realizados, bem como a confiabilidade das idades e metalicidades derivadas para as populações estelares. Ademais, é detalhada a aplicação do método de PCA, utilizado como ferramenta para a redução da dimensionalidade do conjunto teórico de modelos de populações estelares simples, afim de reduzir o custo computacional do processo de síntese espectral.

Os 45 templates serão referenciados pela união das 15 idades e 3 metalicidades selecionadas. Por exemplo, o template de idade equivalente a 2.5 Gyrs e metalicidade Z = 0.030será referenciado pelo código 2.50E09Z30E - 3.

Neste capítulo, aplicaremos o método de Análise de Componentes Principais (PCA) aos espectros de *templates* da base espectral de populações estelares simples (SSPs) para reduzir a dimensionalidade do espaço de vetores, antes do ajuste de χ^2 de cada espectro dos *spaxels* a serem analisados nos IFUs.

6.1 Resultados obtidos para os cubos simulados

6.1.1 Análise ajuste espectral com método SLSQP

A fim de avaliar a eficácia do método SLSQP, foram gerados dois cubos simulados contendo espectros compostos de populações estelares. Esses espectros foram construídos a partir da combinação de modelos espectrais de populações estelares simples, sem a inclusão de ruído e sem a interferência de poeira.

O primeiro cubo simulado foi gerado a partir dos seguintes templates: 5.00E09Z1E-3,

1.10E10Z1E-3, 6.40E08Z19E-3, 2.50E09Z19E-3, 3.01E06Z30E-3 e 2.51E07Z30E-3. De forma análoga, o segundo cubo simulado foi construído utilizando os *templates*: 1.30E10Z1E-3, 9.04E08Z19E-3, 5.00E09Z19E-3, 1.00E06Z30E-3, 4.00E07Z30E-3 e 1.01E08Z30E-3. As Figuras 26 e 27 ilustram os *templates* selecionados para a construção dos cubos 1 e 2, respectivamente.

715.2	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
21E-3	1.00E06	3.01E06	5.01E06	9.99E06	2.51E07	4.00E07	1.01E08	2.86E08	6.40E08	9.04E08	1.13E09	2.50E09	5.00E09	1.10E10	1.30E10
			1										1		
7105 2	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29
Z19E-3	1.00E06	3.01E06	5.01E06	9.99E06	2.51E07	4.00E07	1.01E08	2.86E08	6.40E08	9.04E08	1.13E09	2.50E09	5.00E09	1.10E10	1.30E10
7005 0	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44
230E-3	1.00E06	3.01E06	5.01E06	9.99E06	2.51E07	4.00E07	1.01E08	2.86E08	6.40E08	9.04E08	1.13E09	2.50E09	5.00E09	1.10E10	1.30E10

Figura 26: Seleção dos *templates* utilizados para construção dos espectros simulados de populações estelares compostas do cubo 1.

Fonte: Autora

715.2	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
ZIE-3	1.00E06	3.01E06	5.01E06	9.99E06	2.51E07	4.00E07	1.01E08	2.86E08	6.40E08	9.04E08	1.13E09	2.50E09	5.00E09	1.10E10	1.30E10
7105 2	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29
2196-2	1.00E06	3.01E06	5.01E06	9.99E06	2.51E07	4.00E07	1.01E08	2.86E08	6.40E08	9.04E08	1.13E09	2.50E09	5.00E09	1.10E10	1.30E10
			1												
7005 0	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44
Z30E-3	1.00E06	3.01E06	5.01E06	9.99E06	2.51E07	4.00E07	1.01E08	2.86E08	6.40E08	9.04E08	1.13E09	2.50E09	5.00E09	1.10E10	1.30E10

Figura 27: Seleção dos *templates* utilizados para construção dos espectros simulados de populações estelares compostas do cubo 2.

Fonte: Autora

A distribuição das populações estelares nos cubos simulados foi estabelecida com base em três regras de distribuição radial arbitrárias, separadas por idade das populações e combinadas posteriormente, de modo a gerar uma população estelar composta. A seguir, para a criação dos cubos 1 e 2, apresentamos as Tabelas 6.1.1 e 6.1.1 onde indicamos os índices de 1 a 6 que foram adotados para cada distribuição espacial.

População	Índice	Template
1	12	5.00E09Z1E - 3
2	13	1.10E10Z1E - 3
3	23	6.40E08Z19E - 3
4	26	2.50E09Z19E - 3
5	31	3.01E06Z30E - 3
6	34	2.51E07Z30E - 3

Tabela 2: Índices de populações utilizadas para construção do cubo simulado 1.

A primeira regra rege a distribuição das populações 1 e 2, caracterizando uma menor concentração no centro da galáxia, com um aumento progressivo à medida que a distância do centro cresce. A distribuição das populações 1 e 2 pode ser expressa matematicamente

População	Índice	Template
1	14	1.30E10Z1E - 3
2	24	9.04E08Z19E - 3
3	27	5.00E09Z19E - 3
4	30	1.00E06Z30E - 3
5	35	4.00E07Z30E - 3
6	36	1.01E08Z30E - 3

Tabela 3: Índices de populações utilizadas para construção do cubo simulado 2.

pela seguinte distribuição espacial $\rho_{1,2}(r)$:

$$\rho_{1,2}(r) = 1 - \exp\left(-\frac{0.1}{R}r^2\right) \tag{6.1}$$

onde R representa o raio máximo (fixo) da galáxia simulada e r é a distância ao centro.

A segunda regra estabelece a distribuição da população 3, que apresenta um perfil semelhante, com concentração reduzida no centro e crescimento na periferia, embora com menor contribuição total e crescimento menos acentuado. A equação da distribuição $\rho_3(r)$ é dada por:

$$\rho_3(r) = 0.3 \, r \tag{6.2}$$

Por fim, a terceira regra rege a distribuição das populações 4, 5 e 6, cuja concentração é máxima no centro do cubo e decresce à medida que se afasta do centro, seguindo a equação:

$$\rho_{4.5.6}(r) = 20.48 - 0.01 r^2 \tag{6.3}$$

Os mapas que apresentam o perfil de distribuição das populações estelares simples estão ilustrados na Figura 28 e as curvas de distribuição radial referente à cada mapa, seguindo as distribuições dadas pelas Equações (6.1), (6.2) e (6.3), estão ilustradas na Figura 29.

As simulações consideraram galáxias de formato circular, cujo ponto central coincide com o centro do cubo. Dessa forma, não há contribuição de populações estelares fora da região delimitada pelo raio da galáxia simulada. Como consequência, as curvas apresentadas na Figura 29 assumem valor zero quando a distância ao centro ultrapassa o valor definido para o raio, fixado em 20 unidades para construção de ambos os cubos.

Ressaltamos que o procedimento mais correto, que geraria um cubo de dados simulado mais fidedigno à uma galáxia real, seria aquele que usasse as regras de distribuição espacial das estrelas e depois integrasse numericamente o brilho superficial, ao longo da linha de



Figura 28: Mapas de distribuição de populações estelares simples que compuseram os cubos simulados 1 e 2.

Distribuição radial das populações estelares Populações 1 e 2 População 3 0.20 Populações 4, 5 e 6 Centro do cubo 0.15 Valor do Peso 0.10 0.05 0.00 10 20 40 50 60 0 Posição no eixo X

Fonte: Autora

Figura 29: Curvas de distribuição radial das populações estelares simples que compuseram os cubos simulados 1 e 2.

Fonte: Autora

visada específica de cada pixel, tal como feito para dados fotométricos. Além disso, seria necessário ainda repetir o procedimento de integração numérica da contribuição das estrelas em cada pequeno intervalo de comprimento de onda, de modo a reproduzir um cubo de dados de IFU. Como este procedimento seria muito custoso do ponto de vista computacional e de tempo disponível para elaboração da dissertação de mestrado, então optamos por fazer uma análise simplificada, conforme apresentado neste trabalho.

Com os cubos simulados, foram realizados testes de síntese espectral utilizando o conjunto de 45 modelos de populações estelares simples composto conforme descrito no Capítulo 5, Seção 5.2, para avaliar a eficácia do método de minimização SLSQP em identificar as populações estelares que compõem os espectros simulados. Esse procedimento permitiu verificar a capacidade do algoritmo em recuperar o SFH da galáxia simulada,



Figura 30: Mapa de resíduos da diferença entre cubo simulado e o cubo de espectros sintetizados via método SLSQP utilizando 45 modelos aplicados ao cubo simulado 1. Fonte: Autora

identificando as populações estelares empregadas na construção dos espectros e suas respectivas contribuições.

É importante destacar que, na aplicação do método SLSQP aos cubos de dados simulados, o código utilizado não incluiu a rotina de mascarar as regiões correspondentes às linhas de emissão, uma vez que os modelos espectrais utilizados na construção dos cubos simulados não apresentavam tais linhas. Essa característica simplificou a análise, concentrando-se exclusivamente na avaliação do ajuste dos modelos estelares.

A Figura 30 apresenta o mapa de resíduos, calculado com base nos valores de χ^2 entre os espectros simulados e os espectros sintetizados em cada posição do cubo. Observase que as regiões centrais do cubo exibem menores valores de resíduos, enquanto esses valores aumentam progressivamente à medida que a distância do centro cresce. Contudo, todos os pixels do mapa de resíduos apresentaram valores de χ^2 da ordem de $10^{-5} ergs^2 s^{-2} cm^{-4} \text{Å}^{-2}$, com unidade de fluxo ao quadrado. Consideramos este resultado satisfatório, especialmente nas regiões periféricas, por se manter baixo em relação ao cubo real, onde há ruído mais elevado.

Os pontos A e B destacados na Figura 30 foram selecionados para uma análise detalhada dos ajustes espectrais e da identificação das populações estelares associadas. As Figuras 31 e 32 apresentam os resultados dos ajustes espectrais para cada ponto, evidenciando a superposição do espectro sintetizado com o espectro do cubo simulado. Esses resultados indicam a obtenção de um ajuste espectral satisfatório, confirmando a precisão do método empregado.



Figura 31: Resultado do ajuste de síntese espectral na posição do *spaxel* A, y=30 e x=32, utilizando o método SLSQP com 45 modelos aplicado ao cubo simulado 1. Fonte: Autora



Figura 32: Resultado do ajuste de síntese espectral na posição do spaxel A, y=48 e x=50, utilizando o método SLSQP com 45 modelos aplicado ao cubo simulado 1. Fonte: Autora



Figura 33: Composição das populações estelares presentes nos espectros simulados e sintetizados pelo SLSQP para a posição do *spaxel* A quando utilizados 45 modelos de populações estelares simples. Fonte: Autora



Comparação entre os resultados de populações Spaxel B (Coordenadas: Y=48, X=50) - Cubo 1

Figura 34: Composição das populações estelares presentes nos espectros simulados e sintetizados pelo SLSQP para a posição do *spaxel* B quando utilizados 45 modelos de populações estelares simples. Fonte: Autora

A utilização do cubo simulado nos testes permitiu avaliar se o SFH foi devidamente recuperado, com base na identificação das populações estelares presentes na construção dos espectros simulados. As Figuras 33 e 34 ilustram a comparação entre as populações presentes no espectro simulado e as populações que foram identificadas pelo SLSQP como sendo necessárias para compor o espectro sintetizado, dispondo no eixo x as características das populações (idade e metalicidade) e no eixo y o percentual de contribuição de cada uma. Para facilitar a interpretação, foram incluídas nos gráficos apenas as populações com contribuição superior a 0.5%.

A Figura 33 evidencia que o algoritmo foi eficiente na identificação de todas as populações simples presentes no espectro simulado, apresentando diferenças mínimas entre os percentuais de contribuição simulados e sintetizados. No entanto, nota-se a inclusão do template 2.50E09Z1E - 3 na construção do espectro sintetizado, embora esse modelo não esteja presente no cubo simulado. Ainda assim, sua contribuição é insignificante e não compromete a qualidade geral do ajuste.

Na Figura 34 também é possível observar que todas as populações presentes no espectro simulado foram identificadas, porém o template 1.10E10Z1E - 3 apresentou uma diferença proeminente entre os percentuais de contribuição do espectro simulado e o sin-



Figura 35: Comparação entre os espectros de populações estelares simples com idades de 11 e 13 bilhões de anos.

Fonte: Autora

tetizado. E além da diferença no percentual de contribuição do template 1.10E10Z1E-3 nota-se a presença do template 1.30E10Z1E-3. A discordância nesses templates justifica-se pela similaridade entre os espectros dessas populações, o que permite que possam ser substituídos no espectro sintetizado sem que a qualidade do ajuste espectral seja comprometida. A alta correlação entre os templates 1.10E10Z1E-3 e 1.30E10Z1E-3 pode ser observada através da Figura 35.

6.1.2 Análise ajuste espectral após aplicação do Método de PCA

A partir de um conjunto inicial de 45 modelos espectrais, o método de PCA identificou 15 modelos relevantes, correspondendo a um terço do conjunto original. Os modelos ou *templates* selecionados pelo método de PCA estão apresentados nas Figuras 36 e 37.

715.0	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
ZIE-3	1.00E06	3.01E06	5.01E06	9.99E06	2.51E07	4.00E07	1.01E08	2.86E08	6.40E08	9.04E08	1.13E09	2.50E09	5.00E09	1.10E10	1.30E10
7105 0	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29
Z19E-3	1.00E06	3.01E06	5.01E06	9.99E06	2.51E07	4.00E07	1.01E08	2.86E08	6.40E08	9.04E08	1.13E09	2.50E09	5.00E09	1.10E10	1.30E10
7005 0	30	31	32	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44
Z30E-3	1.00E06	3.01E06	5.01E06	9.99E06	2.51E07	4.00E07	1.01E08	2.86E08	6.40E08	9.04E08	1.13E09	2.50E09	5.00E09	1.10E10	1.30E10

Figura 36: Distribuição dos *templates* que foram selecionados pelo método de PCA. Fonte: Autora



Figura 37: Gráfico dos *templates* que foram selecionados pelo método de PCA. Fonte: Autora

Um aspecto relevante a ser considerado é o tempo de execução do processo de síntese para todos os *spaxels* do cubo. Utilizando a biblioteca teórica composta por 45 modelos espectrais, o tempo total necessário foi de 272,65 segundos, indicando um elevado custo computacional. Diante disso, e considerando que alguns espectros de populações simples apresentam alta correlação, permitindo substituições entre eles sem prejudicar a precisão do ajuste espectral, foi aplicado o método PCA para reduzir a dimensionalidade do conjunto de modelos.

Essa redução na dimensionalidade da biblioteca espectral resultou em uma diminuição expressiva no custo computacional: para o ajuste completo do cubo simulado 1 analisado anteriormente, o tempo necessário foi de 39,82 segundos, em contraste com os 272,65 segundos requeridos ao utilizar o método SLSQP com todos os 45 modelos. Essa diferença representa uma otimização significativa no tempo de execução do processo de síntese espectral.

As Figuras 38 e 39 ilustram os resultados dos ajustes espectrais realizados em dois *spaxels* do cubo simulado 1, utilizando um conjunto reduzido de 15 modelos selecionados por meio da análise de componentes principais (PCA).

Os espectros apresentados nas Figuras 38 e 39 exibem, visualmente, uma boa sobre-

posição entre os espectros sintetizados e simulados, indicando o espectro construído pelo processo de síntese espectral é uma representação consistente dos dados simulados. Para uma avaliação mais detalhada da qualidade do ajuste em todos os pontos do cubo simulado, a Figura 40 apresenta o mapa de resíduos, onde se observa uma redução sistemática no valor do erro χ^2 à medida o ponto em análise que se afasta do centro do cubo. Ressaltase que o erro χ^2 , nesse mapa, encontra-se na ordem de magnitude de 10^{-2} , em contraste com o mapa de resíduos ilustrado pela Figura 30, que apresentou erros na ordem de 10^{-5} .

O aumento na magnitude do erro χ^2 observado nos resultados obtidos pelo processo de síntese espectral com a biblioteca espectral reduzida pode ser atribuído à exclusão de determinados modelos espectrais utilizados na construção dos espectros simulados. Esses modelos, durante o processo de seleção pelo método de PCA, não foram classificados como relevantes e, portanto, não integram o conjunto reduzido.



Figura 38: Resultado do ajuste de síntese espectral na posição do *spaxel* A, y=30 e x=32, utilizando o método SLSQP com apenas 15 modelos selecionados através do PCA aplicado ao cubo simulado 1. Fonte: Autora



Figura 39: Resultado do ajuste de síntese espectral na posição do *spaxel* B, y=48 e x=50, utilizando o método SLSQP com apenas 15 modelos selecionados através do PCA aplicado ao cubo simulado 1. Fonte: Autora

A ausência de alguns desses *templates* de populações estelares simples, que compuseram os espectros simulados mas não foram selecionados pelo PCA, pode ser observada nas Figuras 41 e 42. Esses gráficos, apresentados para dois *spaxels* A e B no cubo simulado 1 (conforme demonstrados por quadrados vermelhos na Figura 40), consideram o conjunto reduzido de 15 modelos de SSP.

Na Figura 41, observa-se que apenas as populações dadas pelos templates 3.01E06Z30E - 3 e 2.51E07Z30E - 3, presentes no espectro simulado, foram empregadas na composição do espectro ajustado, enquanto os demais templates não foram recuperados. De forma semelhante, na Figura 42, apenas as populações dadas pelos templates 3.01E06Z30E - 3 e 2.51E07Z30E - 3 foram identificadas no espectro sintetizado, em ambos os spaxels A e B.

Apesar de nem todos os espectros usados para criar o cubo simulado 1 terem sido selecionados pelo método de PCA, o processo de síntese espectral se mostrou satisfatório $(\chi^2 \approx 10^{-2} \text{ por } spaxel)$. Isso ocorre porque o processo de síntese espectral usou *templates* selecionados pelo PCA muito similares aos *templates* usados para criar o cubo simulado 1. Por exemplo, na Figura 41 referente ao *spaxel* A, vemos que o *template* de 2.50*E*09*Z*19*E* – 3 que foi usado para criar o cubo simulado 1 (com um valor de peso de cerca de 32%)



Figura 40: Mapa de resíduos da diferença entre cubo simulado 1 e o cubo de espectros sintetizados via método SLSQP utilizando apenas os 15 modelos selecionados pelo método do PCA aplicados ao cubo simulado 1.

Fonte: Autora



Figura 41: Composição das populações estelares presentes nos espectros simulados e sintetizados pelo SLSQP para a posição do *spaxel* A, do cubo simulado 1, quando utilizados apenas os 15 modelos de populações estelares simples selecionados pelo PCA.



Comparação entre os resultados de populações Spaxel B (Coordenadas: Y=48, X=50) - Cubo 1

Figura 42: Composição das populações estelares presentes nos espectros simulados e sintetizados pelo SLSQP para a posição do *spaxel* B, do cubo simulado 1, quando utilizados apenas os 15 modelos de populações estelares simples selecionados pelo PCA. Fonte: Autora

na composição do espectro deste spaxel) e o processo de síntese espectral identificou o melhor ajuste com os template 2.50E09Z30E - 3 (com peso de 20%, mesma idade mas metalicidade diferente), o template 1.30E10Z1E - 3 (com peso de cerca de 2.5%, que apesar de ter idade e metalicidade diferente, possui alta correlação e semelhança com o espectro 2.50E09Z19E - 3) e o template 1.10E10Z19E - 3 (com peso de 5%, o qual já se diferencia do template 2.50E09Z19E - 3 mas ainda representa uma população velha mas com baixa metalicidade, tendo *slope* crescente em pequenos comprimentos de onda e *slope* decrescente em altos valores de comprimento de onda). A soma dos pesos dos 3 templates se aproxima do peso original do template de 2.50E09Z19E - 3 usado para criar o spaxel A do cubo simulado 1. A Figura 43 mostra a comparação entre os 4 templates a fim de ilustrar tal argumentação.

Deste modo, podemos dizer qualitativamente que o processo de síntese espectral com aplicação do PCA para redução da base de *templates* apresenta menor custo computacional e menor tempo de execução, ele não resgata fielmente os espectros usados para criar o cubo simulado 1, mas apresenta ajuste razoável dos espectros dos *spaxels* do cubo simulado usando a base reduzida de 15 templates e nos dá uma análise qualitativa razoável sobre a idade das populações, nem tanto sobre suas metalicidades. A análise da metalici-


Figura 43: Comparação entre 4 *templates* da base do cubo simulado 1, dentre os 15 *templates* de modelos de populações estelares simples selecionados pelo PCA.

dade pode ser complementada através de observáveis de mais alto nível, como frações de populações jovens *versus* populações velhas, idade media e metalicidade média. Os mapas de gaivota (*Seagull Wings Diagrams*) são ferramentas visuais usadas para representar a evolução de populações estelares ao longo do tempo, o que auxilia na compreensão da evolução química, permitindo a melhor determinação da metalicidades. Isto foge ao escopo do presente trabalho e por isso não será abordado.

Com o objetivo de confirmar a eficácia do método SLSQP combinado com a estratégia de redução da dimensionalidade da biblioteca de modelos espectrais de populações simples por meio do PCA, foi realizada a síntese espectral para o cubo simulado 2, utilizando o conjunto reduzido de 15 modelos selecionados após a aplicação do PCA. A Figura 44 apresenta o mapa de resíduos que, assim como os mapas de resíduos mostrados nas Figuras 30 e 40, exibiu um padrão consistente, com os valores de diferença entre os espectros diminuindo gradualmente à medida que se afastam do centro. Os valores do erro χ^2 apresentaram uma magnitude da ordem de 10^{-1} , mantendo-se muito distante aos valores observados na Figura 30, superior em 4 ordens de magnitude.

De maneira similar ao cubo simulado 1, os pontos A e B do cubo simulado 2 apresentaram um ajuste espectral satisfatório, conforme ilustrado nas Figuras 45 e 46.



Figura 44: Mapa de resíduos da diferença entre cubo simulado 2 e o cubo de espectros sintetizados via método SLSQP utilizando apenas os 15 modelos selecionados pelo método do PCA aplicados ao cubo simulado 2.

Fonte: Autora



Figura 45: Resultado do ajuste de síntese espectral na posição do spaxel A, y=30 e x=32, utilizando o método SLSQP com apenas 15 modelos selecionados através do PCA aplicado ao cubo simulado 2. Fonte: Autora



Figura 46: Resultado do ajuste de síntese espectral na posição do spaxel B, y=45 e x=15, utilizando o método SLSQP com apenas 15 modelos selecionados através do PCA aplicado ao cubo simulado 2. Fonte: Autora

O mapa de resíduos do cubo simulado 2, juntamente com os ajustes espectrais dos pontos A e B, sinalizam que os resultados da síntese espectral obtidos pelo método de otimização SLSQP com a aplicação do PCA foram satisfatórios.



Figura 47: Composição das populações estelares presentes nos espectros simulados e sintetizados pelo SLSQP para a posição do *spaxel* A, do cubo simulado 2, quando utilizados apenas os 15 modelos de populações estelares simples selecionados pelo PCA. Fonte: Autora



Figura 48: Composição das populações estelares presentes nos espectros simulados e sintetizados pelo SLSQP para a posição do *spaxel* B, do cubo simulado 2, quando utilizados apenas os 15 modelos de populações estelares simples selecionados pelo PCA. Fonte: Autora

De modo semelhante a comparação entre *templates* referentes a populações estelares simples que compõem os espectros simulados e sintetizados apresentados pelas Figuras 41 e 42, as Figuras 47 e 48 indicam que nem todas as populações presentes nos espectros simulados foram utilizadas na construção dos espectros sintetizados. Na Figura 47, observa-se que, para o *spaxel* A, apenas duas populações presentes no espectro simulado também compõem o espectro sintetizado. Por outro lado, na Figura 48, quatro populações coincidem entre os espectros simulados e sintetizados. Essa maior correspondência de populações no *spaxel* B reflete-se em um resíduo de χ^2 menor em comparação ao *spaxel* A, conforme ilustrado na Figura 44 apresentada anteriormente.

Fica evidente que a síntese de populações estelares jovens é mais comprometida do que as populações velhas quando se faz uso do PCA para redução da base de *templates*. Mas não fica evite se isso se deve a limitações do método de síntese espectral via SLSQP ou à uma falha no método de PCA para selecionar corretamente a base de *templates*. Na verdade, quando examinamos os 15 espectros selecionados pelo método de PCA, observamos que há *templates* de mesma idade jovem e diferentes metalicidades selecionados, ou seja, não há variação nas idades jovens. Já para *templates* populações velhas há boa variações de idade e metalicidade. Isso se deve ao fato de populações reais jovens tem espectros altamente dependentes da metalicidade, enquanto populações velhas reais tendem a ter pouca influência da metalicidade em seus espectros. Os *templates* adotados foram criados com base nas idades descritas na Tabela 21 da Seção 5.2 com 45 espectros. Mas talvez o método de PCA se mostre importante se a base fosse composta por um número muito maior de *templates* e se ao final da aplicação do PCA os *templates* selecionados representassem pares de idade e metalicidade mais diversificados, especialmente nos casos de *templates* de populações jovens.

6.2 Resultados obtidos para o cubo real

6.2.1 Análise aplicação do SLSQP ao cubo real

Para análise de dados observados, foi escolhido o cubo de dados da galáxia NGC 2783, extraído da base de dados do MaNGA. A NGC 2783 é uma galáxia elíptica do tipo E3, com coordenadas RA = 09h13m39.5s e DEC = +29d59m35s (Equatorial J2000.0), de magnitude 13.4 no filtro *Gunn* g, sem massa estimada na literatura, com brilho superficial $\mu 23.86mag^2$ [74, 60]. Nesse cubo de dados, foi executado o algoritmo completo de síntese espectral. Esse procedimento incluiu a correção dos dados, abrangendo a remoção



Figura 49: Mapa de resíduos da diferença entre cubo real observado da galáxia NGC 2783 e o cubo de espectros sintetizados via método SLSQP utilizando os 45 modelos de populações estelares simples

Fonte: Autora

do avermelhamento, da extinção e correção do avermelhamento cosmológico (expansão do universo), bem como a exclusão das regiões correspondentes às linhas de emissão para o processo de síntese espectral. Observou-se que, para os *spaxels* localizados na região central da galáxia, os ajustes espectrais apresentaram desempenho superior quando comparado aos ajustes dos *spaxels* nas regiões periféricas, onde o espectro apresenta maior presença de ruído. Esse comportamento mais consistente para o ajuste espectral na região central pode ser observado na Figura 49 onde é apresentado o mapa de resíduos, calculado com base na diferença entre o espectro observado e o sintetizado pelo método SLSQP com a utilização dos 45 modelos de SSP (ou seja, sem aplicação do método de PCA).

As Figuras 50 e 51 apresentam exemplos de ajustes espectrais realizados para os spaxels A e B situados em diferentes regiões da galáxia.

Nota-se que o espectro observado na Figura 51 apresenta uma maior ruído em comparação ao espectro mostrado na Figura 50, o que influencia na qualidade do ajuste espectral.

A síntese espectral aplicada ao cubo real utilizando os 45 modelos de populações estelares simples apresentou um tempo de execução de 41,27 segundos. A composição populacional dos *spaxels* A e B no cubo de dados da galáxia NGC 2783 é apresentada nas Figuras 52 e 53. A análise dessas figuras revela que o *spaxel* A possui uma composição populacional mais velha, sendo majoritariamente composta pelos *templates* 1.13E09Z30E - 3, com uma contribuição de 52%, e 2.50E09Z30E - 3, com 29%. Em contraste, o *spaxel* B apresenta uma composição populacional relativamente mais jovem, com maior contribuição dos *templates* 6.40E08Z30E - 3 que representa 42% e 1.13E09Z30E - 3 que contribuição com 43%.

6.2.2 Análise aplicação após aplicação do Método de PCA ao cubo real

Para otimizar o tempo de execução realizou-se a seleção dos modelos espectrais pelo PCA e quando a síntese espectral foi realizada apenas com os 15 modelos selecionados pelo PCA o tempo foi reduzido para 8,12 segundos. A Figura 54 exibe o mapa do erro χ^2 calculado para os espectros sintetizados a partir dos 15 modelos selecionados pelo método PCA.

Observa-se, com base na Figura 54, que os valores do erro χ^2 permanecem similares aos da Figura 49, indicando que a redução na quantidade de modelos de SSP não comprometeu a qualidade do ajuste espectral.

A Figura 55 ilustra a comparação dos valores de χ^2 obtidos ao utilizar o conjunto completo de modelos em relação àqueles gerados com o conjunto reduzido de 15 modelos selecionados pelo método PCA. Verifica-se que a diferença entre os resíduos é pequena, com a maioria dos valores próximos de zero.

Para confirmar que a redução no número de modelos de populações simples não afetou a qualidade do ajuste espectral, as Figuras 56 e 57 apresentam comparações entre os espectros observados e modelados para os mesmos *spaxels* das Figuras 50 e 51.

Visualmente comparando as Figuras 50 e 51 com as Figuras 56 e 57 respectivamente, percebe-se que não há diferenças significativas entre os ajustes espectrais obtidos com o conjunto completo de modelos e aqueles realizados utilizando apenas os 15 modelos selecionados pelo método PCA.

As Figuras 58 e 59 apresentam a composição populacional dos *spaxels* A e B, obtida a partir da síntese espectral utilizando o conjunto de *templates* selecionados pelo método de PCA. Ao comparar esses resultados com os das Figuras 52 e 53, que representam a composição populacional dos mesmos *spaxels* com o uso dos 45 *templates*, observa-se que a distribuição em termos de idade média dos *templates* foi preservada. A Figura 58, referente ao *spaxel* A, continua apresentando uma população mais velha em comparação com o *spaxel* B, representado na Figura 59.



Figura 50: Resultado do ajuste de síntese espectral na posição do *spaxel* A, localizado na região central da galáxia NGC 2783, utilizando o método SLSQP com 45 modelos espectrais de populações simples. Fonte: Autora



Figura 51: Resultado do ajuste de síntese espectral na posição do *spaxel* B, localizado na região periférica da galáxia NGC 2783, utilizando o método SLSQP com 45 modelos espectrais de populações simples.Fonte: Autora



Figura 52: Resultado das populações estelares na posição do *spaxel* A, localizado na região central da galáxia NGC 2783, utilizando o método SLSQP com 45 modelos espectrais de populações simples.

Fonte: Autora



Figura 53: Resultado das populações estelares na posição do *spaxel* B, localizado na região central da galáxia NGC 2783, utilizando o método SLSQP com 45 modelos espectrais de populações simples.



Fonte: Autora

Figura 54: Mapa de resíduos da diferença entre cubo real observado da galáxia NGC 2783 e o cubo de espectros sintetizados via método SLSQP utilizando apenas os 15 modelos de populações estelares simples selecionados pelo método PCA. Fonte: Autora



Figura 55: Mapa da diferença dos resíduos χ^2 obtidos na síntese espectral do cubo real, comparando os resultados gerados com o conjunto completo de 45 modelos e com os 15 modelos selecionados pelo método PCA Fonte: Autora



Figura 56: Resultado do ajuste de síntese espectral na posição do *spaxel* A, localizado na região central da galáxia, utilizando o método SLSQP com apenas 15 modelos espectrais de populações simples selecionados pelo método PCA. Fonte: Autora



Figura 57: Resultado do ajuste de síntese espectral na posição do *spaxel* B, localizado na região periférica da galáxia, utilizando o método SLSQP com apenas 15 modelos espectrais de populações simples selecionados pelo método PCA. Fonte: Autora



Figura 58: Resultado das populações estelares na posição do *spaxel* A, localizado na região central da galáxia NGC 2783, utilizando o método SLSQP com apenas 15 modelos selecionados através do PCA. Fonte: Autora



Figura 59: Resultado das populações estelares na posição do *spaxel* B, localizado na região periférica da galáxia NGC 2783, utilizando o método SLSQP com apenas 15 modelos selecionados através do PCA. Fonte: Autora

7 Conclusões e trabalhos futuros

Este capítulo apresenta as principais conclusões obtidas ao longo do desenvolvimento deste trabalho, destacando a análise do desempenho do método SLSQP, o tratamento aplicado aos dados observacionais e o uso do método PCA para a redução da dimensionalidade da biblioteca espectral. Além disso, são discutidas as limitações encontradas e propostas para trabalhos futuros, com foco no aprimoramento das técnicas empregadas e na exploração de novas estratégias para otimização computacional e modelagem espectral. Esses aspectos fornecem uma base consistente para a continuidade da pesquisa, buscando melhorar tanto a precisão dos ajustes espectrais quanto a eficiência no processamento dos dados.

7.1 Avaliação do desempenho do método SLSQP

A aplicação método SLSQP revelou-se uma alternativa eficiente para a síntese espectral, utilizando a minimização do χ^2 entre os espectros observados ou simulados e os espectros sintetizados. Para sinais isentos de ruído e com valores de referência de laboratório, como os espectros simulados, o SLSQP obteve excelentes resultados, com apenas pequenas diferenças entre a composição das populações sintetizadas e as simuladas. As discrepâncias decorrem da alta correlação entre os modelos espectrais, um fenômeno que ocorre, por exemplo, em populações muito jovens com valores de metalicidades próximos ou em populações muito velhas com metalicidade inicial muito baixa.

O tempo de execução da síntese espectral pelo SLSQP para um cubo de dados real foi inferior a 1 minuto ao utilizar o conjunto completo de 45 modelos, um resultado considerado satisfatório, especialmente devido à ausência de estratégias adicionais de otimização. Além disso, a análise do tempo de execução do SLSQP aponta para a possibilidade de explorar a viabilidade de implementar otimizações computacionais, como o processamento via GPU, para aprimorar o desempenho do algoritmo reduzindo ainda mais o seu custo computacional. O processamento via GPU foi uma estratégia analisada e que teve algumas tentativas frustradas durante a execução deste trabalho. Um dos problemas encontrados foi a dimensão dos dados a serem manipulados, impossibilitando o processamento em GPUs.

A tentativa de processamento via GPU foi realizada utilizando-se a biblioteca Pytorch. Além dos complicadores naturais devido a diferença entre como se lida com laços na programação procedural linear (na CPU) e paralelizada (na GPU), o agravante principal foi o fato de que algumas das funções da biblioteca NumPy ainda não foram portadas para a biblioteca Pytorch, provocando um aumento significativo no tempo de desenvolvimento de código para se criar funções análogas a serem utilizadas na GPU. Com isso, acabamos neste trabalho por nos limitarmos na maior parte do código a adotar programação procedural linear e em poucos trechos fizemos uso de programação orientada a objeto, ao usar algumas funções da biblioteca NumPy.

Futuramente, pretendemos aprofundar e refinar o código otimizando ainda mais alguns trechos procedurais e incluindo o uso da biblioteca Pytorch.

7.2 Avaliação do tratamento de dados observacionais

Os espectros observados de uma galáxia passam por diversos processos que alteram seus formatos, tornando essencial a compreensão dos fenômenos físicos e químicos envolvidos para que os dados possam ser corrigidos, viabilizando a interpretação precisa das características reais do objeto estudado. As emissões estelares dentro de uma galáxia sofrem atenuação e extinção devido ao meio intergaláctico da própria galáxia observada, bem como à poeira da Via Láctea ao atravessar o meio interestelar. A correção desses efeitos foi realizada de forma simplificada, utilizando aproximações disponíveis na literatura e adotando o valor de $R_v = 3,1$ [53].

O avermelhamento cosmológico ou *redshift*, resultante da expansão do universo, foi corrigido com base nos dados disponibilizados pelo MaNGA, utilizando funções da biblioteca Astropy. Essas correções apresentaram boa precisão e resultados satisfatórios.

Adicionalmente, a cinemática interna da galáxia também contribui para o alargamento espectral, um efeito descrito pelo parâmetro de dispersão de velocidade, σ_* . Contudo, essa correção não pôde ser realizada de forma confiável neste estudo. O trabalho de [50] que apresenta o *software* pyFIT3D foi investigado como referência para uma possível implementação futura. Durante o ajuste cinemático no pyFIT3D, o programa gera modelos espectrais baseados em bibliotecas de populações estelares simples e ajusta parâmetros como *redshift*, dispersão de velocidade σ_* e atenuação por poeira até que o modelo reproduza o espectro observado. Essa técnica de modelagem espectral é promissora, mas sua implementação requer estudos adicionais e maior aprofundamento.

7.3 Considerações sobre o uso do método PCA na redução da dimensionalidade da biblioteca espectral

Uma biblioteca de modelos espectrais de populações estelares simples diversificada e abrangente, requer a inclusão de uma extensa variedade de idades e metalicidades. Contudo, para algumas combinações desses parâmetros, os espectros resultantes tornam-se bastante similares. Isso ocorre, por exemplo, em populações estelares cujos parâmetros seguem trilhos evolutivos ou isócronas estelares próximas, nas quais as diferenças nas características espectrais são pouco perceptíveis. Um caso ilustrativo, apresentado no Capítulo 6, Seção 6.1.1, refere-se aos modelos espectrais das populações de 11 e 13 bilhões de anos com metalicidade Z = 0.001, que apresentam grande similaridade e podem ser intercambiados sem causar perdas significativas na qualidade do ajuste espectral.

Os resultados obtidos no processo de síntese espectral utilizando o SLSQP aplicados aos cubos de dados simulados, após a redução do conjunto de modelos espectrais, indicaram um aumento nos valores dos resíduos, ou seja, uma piora no ajuste espectral.

No entanto, ao aplicar a síntese espectral ao cubo de dados observado, não foi constatada redução na qualidade do ajuste. Os valores de χ^2 obtidos ao utilizar o conjunto completo de 45 modelos e aqueles gerados com apenas os 15 modelos selecionados pelos PCAs foram muito próximos entre si, indicando que a redução de modelos não comprometeu o desempenho do ajuste espectral. Mas os valores de χ^2 por *spaxel* obtidos para o cubo de dados observados foram muito superiores aos valores de χ^2 obtidos na aplicação do método SLSQP aos cubos simulados, com um fator da ordem de 10⁵.

As diferenças nas comparações de valores de χ^2 em cada caso (cubo observado ou cubo simulado) se devem basicamente ao fato de os cubos simulados não apresentarem ruído e o cubo observado (real) apresentar significativo ruído.

A aplicação do método PCA para a redução das dimensões da biblioteca espectral mostrou-se uma estratégia promissora para a otimização do processo de síntese espectral, especialmente para análises qualitativas onde se queira aproveitar o fato de o método PCA reduzir o custo computacional nas análises. A diminuição na quantidade de modelos a serem combinados resultou em uma redução significativa do tempo de processamento em todos os testes realizados. No entanto, é importante destacar que a confiabilidade dessa redução, especialmente no que se refere à recuperação da SFH, ainda exige estudos mais aprofundados. É necessário investigar possíveis perdas relacionadas à identificação das populações estelares. Uma solução poderia ser a aplicação do método de PCA a bases de *templates* muito maiores que os 45 modelos adotados. Neste trabalho, adotouse a premissa defendida por estudos anteriores [29, 30], que argumentam que pequenas diferenças entre os espectros de populações estelares simples podem ser desprezadas, dado o ruído inerente aos dados espectrais observacionais.

7.4 Trabalhos futuros

Considerando os extensos levantamentos de dados astronômicos em curso, o que tenham sido realizados nas últimas décadas, tal qual o MaNGA [15], a redução do custo computacional tornou-se uma prioridade cada vez mais relevante. Embora o método SLSQP apresente um tempo de processamento relativamente baixo, uma sugestão para trabalhos futuros é o desenvolvimento de códigos que permitam a implementação do processamento relacionado ao tratamento de dados e à síntese espectral utilizando métodos de paralelização em GPU, por exemplo via bibliotecas como Pytorch ou TensorFlow, que utilizem álgebra tensorial com forte aceleração de cálculos em placas gráficas (GPU), visando maior eficiência e desempenho computacionais.

No âmbito da correção dos dados espectrais, uma direção promissora para estudos futuros consiste no aprimoramento das técnicas de modelagem destinadas à determinação dos parâmetros (z_*, σ_*, A_V^*) , com o objetivo de estimar, de maneira mais precisa, os valores reais associados às galáxias analisadas. Além disso, o desenvolvimento de algoritmos específicos para a aplicação de filtros voltados à redução de ruídos, presentes de modo mais intenso nas regiões de borda das galáxias, apresenta-se como uma iniciativa de grande relevância para a melhoria da qualidade dos dados.

Um tentativa realizada durante este trabalho que se demonstrou promissora, mas teve que ser interrompida devido a falta de tempo, foi a tentativa de analisar o ajuste do método SLSQP aos espectros não no espaço de comprimentos de onda (geralmente com alguns milhares de *pixels* por espectro) mas aos espectros transformados em Polinômios de Chebyshev de alta ordem, por exemplo, 400. Assim os *templates* da base espectral também seriam transformados em Polinômios de Chebyshev de alta ordem e os ajustes de método SLSQP feitos neste coeficientes e não mais nos milhares de *pixels* de comprimentos de onda. Os algoritmos de ajuste de Polinômios de Chebyshev são muito eficientes. A transformação é feita de modo muito rápido para cada espectro e, com um número menor de pontos para ajuste, teremos um ganho no tempo de execução do método SLSQP.

Devido às limitações no processamento dos dados observacionais, não foi possível realizar comparações diretas entre os resultados da síntese espectral aplicada ao cubo de dados real e os estudos disponíveis na literatura. No entanto, por meio de uma análise qualitativa dos resultados das composições de populações estelares apresentados nas imagens fornecidas pelo LIneA MaNGA Portal [21], Figuras 52, 59, 58 e 59, comparando os resultados encontrados pela equipe do MaNGA com os nossos resultados , conclui-se que os resultados obtidos utilizando o método SLSQP, com e sem a aplicação do PCA, mostram-se consistentes com as informações disponíveis no portal. Essa consistência é evidenciada pelo fato de o percentual referente às populações estelares mais velhas (xo_light) no gráfico do spaxel A ser superior ao observado no gráfico do spaxel B, assim como os resultados descritos no Capítulo 6.

Bined Population Vectors



x=33, y=29

Figura 60: Composição da população estelar na posição do *spaxel* A, localizado na região central da galáxia NGC 2783, disponibilizado pelo LIneA MaNGA Portal. Fonte: [21]

Como propostas de pesquisa complementar, sugere-se aprofundar a investigação sobre



Bined Population Vectors

x=26, y=42

Figura 61: Composição da população estelar na posição do *spaxel* B, localizado na região periférica da galáxia NGC 2783, disponibilizado pelo LIneA MaNGA Portal. Fonte: [21]

a aplicação do método PCA para a redução da dimensionalidade da biblioteca de modelos espectrais, utilizando uma base maior de *templates*, incluindo comparações com estudos publicados. Essa abordagem deve buscar a redução do custo computacional de análises de síntese de populações estelares sem comprometer a precisão e a consistência dos resultados obtidos.

Todas as propostas apresentadas acima estarão presentes em artigo científico a ser submetido para publicação.

REFERÊNCIAS

- H ABDI e L. J. WILLIAMS. "Principal component analysis". Em: Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics 2 (4 jul. de 2010), pp. 433–459. ISSN: 19395108. DOI: 10.1002/wics.101.
- [2] Astropy Collaboration et al. Specutils: Spectral Analysis Tools for Astropy. Versão 1.15.0. 2024. URL: https://specutils.readthedocs.io/.
- B. H. ANDREWS e P. MARTINI. "The mass-metallicity relation with the direct method on stacked spectra of SDSS galaxies". Em: Astrophysical Journal 765 (2 mar. de 2013). ISSN: 15384357. DOI: 10.1088/0004-637X/765/2/140.
- [4] R. ANGUS et al. "Toward Precise Stellar Ages: Combining Isochrone Fitting with Empirical Gyrochronology". Em: *The Astronomical Journal* 158 (5 nov. de 2019), p. 173. ISSN: 0004-6256. DOI: 10.3847/1538-3881/ab3c53.
- [5] R. BACON et al. "3D spectrography at high spatial resolution. I. Concept and realization of the integral field spectrograph TIGER." Em: Astronomy and Astrophysics Supplement, v. 113, p. 347 113 (1995), p. 347.
- [6] R. BACON et al. "The SAURON project. I. The panoramic integral-field spectrograph". Em: Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 326 (2001), pp. 23– 35.
- K. BARBARY. extinction v0.4.6. https://github.com/kbarbary/extinction.
 Available at: https://github.com/kbarbary/extinction. 2021.
- [8] A. T. BENJAMIN et al. "Combinatorial trigonometry with Chebyshev polynomials".
 Em: Journal of Statistical Planning and Inference 140 (2010), pp. 2157–2160.
- P. BERGAMO et al. "Security of public-key cryptosystems based on Chebyshev polynomials". Em: *IEEE Transactions on Circuits and Systems I: Regular Papers* 52 (7 2005), pp. 1382–1393. ISSN: 10577122. DOI: 10.1109/TCSI.2005.851701.
- [10] G. BERTELLI et al. "Theoretical isochrones from models with new radiative opacities". Em: Astronomy and Astrophysics Supplement Series 106 (1994), pp. 275– 302.

- P. T. BOGGS e J. W. TOLLE. "Sequential Quadratic Programming". Em: Acta Numerica 4 (1995), pp. 1–51. ISSN: 14740508. DOI: 10.1017/S0962492900002518.
- [12] José Luiz BOLDRINI et al. Álgebra Linear. Harper & Row, 1980.
- J. P. BOYD. Chebyshev and Fourier Spectral Methods. 2nd. DOVER Publications, Inc., 2000. URL: http://www-personal.engin.umich.edu/.
- [14] G. BRUZUAL e S. CHARLOT. "Stellar population synthesis at the resolution of 2003". Em: Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 344 (4 out. de 2003), pp. 1000–1028. ISSN: 00358711. DOI: 10.1046/j.1365-8711.2003.06897.x.
- K. BUNDY et al. "Overview of the SDSS-IV MaNGA survey: Mapping Nearby Galaxies at Apache Point Observatory". Em: Astrophysical Journal 798 (1 jan. de 2015). ISSN: 15384357. DOI: 10.1088/0004-637X/798/1/7.
- [16] D. CALZETTI et al. "The Dust Content and Opacity of Actively Star-Forming Galaxies". Em: The Astrophysical Journal 533 (2000), pp. 682–695.
- M. CAPPELLARI. "Improving the full spectrum fitting method: Accurate convolution with Gauss-Hermite functions". Em: Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 466 (1 abr. de 2017), pp. 798-811. ISSN: 13652966. DOI: 10.1093/mnras/stw3020.
- [18] J. A. CARDELLI, G. C. CLAYTON e J. S. MATHIS. "The relationship between infrared, optical, and ultraviolet extinction." Em: *The Astrophysical Journal* 345 (1989), pp. 245–256.
- [19] A. CARINI e G. L. SICURANZA. "A study about Chebyshev nonlinear filters". Em: Signal Processing 122 (mai. de 2016), pp. 24–32. ISSN: 01651684. DOI: 10.1016/j. sigpro.2015.11.008.
- [20] B. W. CARROLL e D. A. OSTLIE. An introduction to modern astrophysics. Cambridge University Press, 2007.
- [21] LINEA Brazilian Science Data Center. MaNGA Data Explorer. Acesso em: 10 jan.
 2025. 2025. URL: https://manga.linea.org.br/explorer/1106.
- [22] G. CHABRIER. "Galactic Stellar and Substellar Initial Mass Function 1". Em: Publications of the Astronomical Society of the Pacific 115 (2003), pp. 763–795.
- [23] R. CID FERNANDES et al. "Resolving galaxies in time and space: II. Uncertainties in the spectral synthesis of datacubes". Em: Astronomy and Astrophysics 561 (jan. de 2014). ISSN: 00046361. DOI: 10.1051/0004-6361/201321692.

- [24] R. CID FERNANDES et al. "Semi-empirical analysis of Sloan Digital Sky Survey galaxies-1. Spectral synthesis method". Em: Mon. Not. R. Astron. Soc 358 (2005), pp. 363–378. DOI: 10.111.
- [25] P. R. T. COELHO, G. BRUZUAL e S. CHARLOT. "To use or not to use synthetic stellar spectra in population synthesis models?" Em: *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 491 (2 jan. de 2020), pp. 2025–2042. ISSN: 13652966. DOI: 10.1093/mnras/stz3023.
- [26] C. CONROY. "Modeling the panchromatic spectral energy distributions of galaxies".
 Em: Annual Review of Astronomy and Astrophysics 51 (ago. de 2013), pp. 393-455.
 ISSN: 00664146. DOI: 10.1146/annurev-astro-082812-141017.
- [27] C. CONROY, J. E. GUNN e M. WHITE. "The propagation of uncertainties in stellar population synthesis modeling. I. the relevance of uncertain aspects of stellar evolution and the initial mass function to the derived physical properties of galaxies". Em: Astrophysical Journal 699 (1 2009), pp. 486–506. ISSN: 15384357. DOI: 10.1088/0004-637X/699/1/486.
- [28] D. CORDIER et al. "A large stellar evolution database for population synthesis studies. III. Inclusion of the full asymptotic giant branch phase and web tools for stellar population analyses". Em: *The Astronomical Journal* 133 (2007), pp. 468– 478. URL: http://terri1.oa-teramo.inaf.it.
- [29] N. Z. DAMETTO et al. "Probing the circumnuclear stellar populations of starburst galaxies in the near-infrared". Em: Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 443 (2 2014), pp. 1754–1778. ISSN: 13652966. DOI: 10.1093/mnras/stu1243.
- [30] R. C. FERNANDES et al. "The star formation history of Seyfert 2 nuclei". Em: Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 355 (1 nov. de 2004), pp. 273– 296. ISSN: 00358711. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2004.08321.x.
- [31] Instituto de Física da UFRGS. Espectros Estelares Astrofísica. http://astro. if.ufrgs.br/rad/espec/espec.htm. Accessed: 2024-10-19. n.d.
- [32] E. L. FITZPATRICK. "Correcting for the Effects of Interstellar Extinction". Em: Publications of the Astronomical Society of the Pacific 111 (1999), pp. 63–75.
- [33] W. L. FREEDMAN. "Measurements of the Hubble constant: tensions in perspective". Em: *The Astrophysical Journal* 919 (1 set. de 2021), p. 16. ISSN: 0004-637X. DOI: 10.3847/1538-4357/ac0e95.

- [34] W. GAUTSCHI. Orthogonal polynomials: computation and approximation. OUP Oxford, 2004.
- [35] J. GE et al. "Recovering stellar population parameters via different population models and stellar libraries". Em: Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 485 (2 fev. de 2019), pp. 1675–1693. ISSN: 13652966. DOI: 10.1093/mnras/stz418.
- [36] F. L. GEWERS et al. "Principal Component Analysis: A Natural Approach to Data Exploration". Em: ACM Computing Surveys (CSUR) 54 (2021), pp. 1-34.
 DOI: 10.1145/3447755. URL: http://arxiv.org/abs/1804.02502%20http: //dx.doi.org/10.1145/3447755.
- [37] P. E. GILL et al. "Some Issues in Implementing A Sequential Quadratic Programming Algorithm". Em: ACM Signum Newsletter 20 (1985), pp. 13–19.
- [38] L. GIRARD et al. "Evolutionary tracks and isochrones for low-and intermediatemass stars: From 0.15 to 7 M, and from Z = 0.0004 to 0.03". Em: Astronomy and Astrophysics Supplement Series 141 (2000), pp. 371–383.
- [39] K. D. GORDON et al. "A quantitative comparison of the Small Magellanic Cloud, Large Magellanic Cloud, and Milky Way ultraviolet to near-infrared extinction curves". Em: *The Astrophysical Journal* 594.1 (2003), p. 279.
- [40] M. GUPTA e B. GUPTA. "An Ensemble Model for Breast Cancer Prediction Using Sequential Least Squares Programming Method (SLSQP)". Em: 2018 Eleventh International Conference on Contemporary Computing (IC3). IEEE, 2018, pp. 1–3. ISBN: 9781538668351.
- [41] D. Halliday, R. Resnick e J. Walker. Fundamentals of physics. John Wiley & Sons, 2013.
- [42] C. R. HARRIS et al. "Array programming with NumPy". Em: Nature 585.7825 (2020), pp. 357-362. DOI: 10.1038/s41586-020-2649-2. URL: https://doi.org/10.1038/s41586-020-2649-2.
- [43] B. D. JOHNSON et al. "Stellar Population Inference with Prospector". Em: The Astrophysical Journal Supplement Series 254 (2 jun. de 2021), p. 22. ISSN: 0067-0049. DOI: 10.3847/1538-4365/abef67.
- [44] H. KARTTUNEN et al. Fundamental Astronomy. Springer, 2007. ISBN: 9783540341437.
- [45] S. O. F. KEPLER e M. F. O. SARAIVA. Astronomia e Astrofísica. Livraria da Fisica, jan. de 2014.

- [46] M. KOLEVA et al. "ULySS: A full spectrum fitting package". Em: Astronomy and Astrophysics 501 (3 2009), pp. 1269–1279. ISSN: 00046361. DOI: 10.1051/0004-6361/200811467.
- [47] D. KRAFT. "A software package for sequential quadratic programming". Em: Forschungsbericht Deutsche Forschungs- und Versuchsanstalt f
 ür Luft- und Raumfahrt (1988).
- [48] D. KRAFT. "Algorithm 733: TOMP–Fortran modules for optimal control calculations". Em: ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS) 20 (1994), pp. 262–281.
- [49] P. KROUPA. "On the variation of the initial mass function". Em: Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 322 (2 abr. de 2001), pp. 231–246. ISSN: 00358711. DOI: 10.1046/j.1365-8711.2001.04022.x.
- [50] E. A. D. LACERDA et al. "pyFIT3D and pyPipe3D The new version of the integral field spectroscopy data analysis pipeline". Em: New Astronomy 97 (2022), p. 101895. ISSN: 1384-1076. DOI: 10.1016/j.newast.2022.101895. URL: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1384107622000859.
- [51] S. K. LEE et al. "Biases and uncertainties in physical parameter estimates of Lyman break galaxies from broadband photometry". Em: Astrophysical Journal, Supplement Series 184 (1 2009), pp. 100–132. ISSN: 00670049. DOI: 10.1088/0067-0049/184/1/100.
- S. K. LEE et al. "The estimation of star formation rates and stellar population ages of high-redshift galaxies from broadband photometry". Em: Astrophysical Journal 725 (2 dez. de 2010), pp. 1644–1651. ISSN: 15384357. DOI: 10.1088/0004-637X/ 725/2/1644.
- N. D. MALLMANN et al. "The first 62 AGN observed with SDSS-IV MaNGA -II. Resolved stellar populations". Em: Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 478 (4 ago. de 2018), pp. 5491–5504. ISSN: 13652966. DOI: 10.1093/mnras/ sty1364.
- [54] C. MARASTON et al. "Star formation rates and masses of z 2 galaxies from multicolour photometry". Em: Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 407 (2 2010), pp. 830–845. ISSN: 13652966. DOI: 10.1111/j.1365-2966.2010. 16973.x.

- [55] P. MARIGO et al. "Evolution of asymptotic giant branch stars: II. Optical to farinfrared isochrones with improved TP-AGB models". Em: Astronomy and Astrophysics 482 (3 mai. de 2008), pp. 883–905. ISSN: 00046361. DOI: 10.1051/0004-6361: 20078467.
- [56] J. C. MASON e D. C. HANDSCOMB. Chebyshev polynomials. Chapman & Hall/CRC, 2003, p. 341. ISBN: 0849303559.
- [57] H. MO, V. D. F. BOSCH e S WHITE. Galaxy Formation and Evolution. Cambridge University Press, 2010.
- [58] W. MURRAY. "Sequential Quadratic Programming Methods for Large-Scale Problems". Em: Computational Optimization and Applications 7 (1997), pp. 127–142.
- [59] NASA Science. The Solar Spectrum. https://science.nasa.gov/resource/thesolar-spectrum/. Accessed: 2024-10-19. n.d.
- [60] NASA/IPAC Extragalactic Database (NED). NGC 2783 NASA/IPAC Extragalactic Database. Acessado em: 7 de março de 2025. 2025. URL: https://ned. ipac.caltech.edu/cgi-bin/objsearch?search_type=Obj_id&objid=19325& objname=4&img_stamp=YES&hconst=73.0&omegam=0.27&omegav=0.73&corr_z=1.
- [61] C. PAPOVICH, M. DICKINSON e H. C. FERGUSON. "The stellar populations and evolution of Lyman break galaxies." Em: *The Astrophysical Journal* 559 (2001), pp. 620–653.
- [62] P. R. PERES-NETO, D. A. JACKSON e K. M. SOMERS. "Giving meaningful interpretation to ordination axes: Assessing loading significance in principal component analysis". Em: *Ecology* 84 (9 2003), pp. 2347–2363. ISSN: 00129658. DOI: 10.1890/00-0634.
- [63] A. PIETRINFERNI et al. "A large stellar evolution database for population synthesis studies. I. Scaled solar models and isochrones". Em: *The Astrophysical Journal* 612 (2004), pp. 168–190.
- [64] João PINHEIRO et al. *Probabilidade e estatística: quantificando a incerteza*. Elsevier Brasil, 2013.
- [65] C. REICHARDT, R. JIMENEZ e A. F. HEAVENS. "Recovering physical parameters from galaxy spectra using MOPED". Em: Monthly Notices of the Royal Astronomical Society 327 (2001), pp. 849-867. URL: https://academic.oup.com/ mnras/article/327/3/849/964993.

- [66] T. V. RICCI, J. E. STEINER e R. B. MENEZES. "Integral field unit spectroscopy of 10 early-type galactic nuclei - I. principal component analysis tomography and nuclear activity". Em: *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society* 440 (3 2014), pp. 2419–2441. ISSN: 13652966. DOI: 10.1093/mnras/stu441.
- [67] M. B. RICHMAN. "A cautionary note concerning a commonly applied eigenanalysis procedure". Em: *Tellus B* 40 B (1 1988), pp. 50–58. ISSN: 16000889. DOI: 10.1111/j.1600-0889.1988.tb00212.x.
- [68] E. E. SALPETER. "The luminosity function and stellar evolution." Em: Astrophysical Journal 121 (1955), pp. 161–167.
- [69] S. F. SANCHEZ et al. "Pipe3D, a pipeline to analyze integral field spectroscopy data: I. New fitting philosophy of Fit3D". Em: *Revista mexicana de astronomía y* astrofísica 52 (2016), pp. 21–53. URL: http://pdl.perl.org/.
- [70] J. SCALO et al. "On the probability density function of galactic gas. I. Numerical simulations and the significance of the polytropic index". Em: *The Astrophysical Journal* 504 (1998), pp. 835–853.
- [71] J. M. SCALO. Fundamentals of Cosmic Physics. Vol. 11. Gordon e Breach, Science Publishers, Inc., 1986, pp. 1–278.
- [72] E. F. SCHLAFLY e D. P. FINKBEINER. "Measuring reddening with Sloan Digital Sky Survey stellar spectra and recalibrating SFD". Em: Astrophysical Journal 737 (2 ago. de 2011). ISSN: 15384357. DOI: 10.1088/0004-637X/737/2/103.
- [73] P. SCHNEIDER. Extragalactic astronomy and cosmology: an introduction. Springer, 2006. ISBN: 9783540331742.
- [74] TheSkyLive.com. NGC 2783 Galáxia Elíptica em Câncer. Acessado em: 7 de março de 2025. 2025. URL: https://theskylive.com/sky/deepsky/ngc2783-object.
- [75] R Brent Tully. "The Hubble Constant: A Historical Review". Em: *The Hubble Constant Tension*. Springer, 2024, pp. 7–26.
- [76] D. A. VANDENBERG e R. A. BELL. "Theoretical isochrones for globular clusters with predicted BVRI and Strömgren photometry". Em: *The Astrophysical Journal Supplement Series* 58 (1985), pp. 561–621.

- [77] D. A. VANDENBERG, P. A. BERGBUSCH e P. D. DOWLER. "The Victoria-Regina stellar models: evolutionary tracks and isochrones for a wide range in mass and metallicity that allow for empirically constrained amounts of convective core overshooting". Em: *The Astrophysical Journal Supplement Series* 162 (2006), pp. 375– 387. URL: http://www.cadc-ccda.hia-iha.nrc-cnrc.gc.ca.
- [78] P. VIRTANEN et al. "SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python". Em: Nature Methods 17 (2020), pp. 261–272. DOI: 10.1038/s41592-019-0686-2.
- [79] S. WUYTS et al. "On star formation rates and star formation histories of galaxies out to z 3". Em: Astrophysical Journal 738 (1 set. de 2011). ISSN: 15384357. DOI: 10.1088/0004-637X/738/1/106.