

Báriumcsillagok elemgyakoriságai gépi tanulással

Világos Blanka

ELTE TTK Fizika BSc III. évfolyam

Témavezetők:

Cseh Borbála

(tudományos segédmunkatárs, CSFK KTM CSI)

Dr. Kovács József

(tudományos főmunkatárs, ELTE GAO)



ELTE Csillagász TDK, 2021/22.
36. OTDK, 2023.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	3	4.6.4. Az elemtulajdonságok fontossága	22
2. A vizsgált asztrofizikai folyamatok	4	4.7. <u>Neurális háló (NN)</u>	24
2.1. A lassú neutronbefogásos folyamat (<i>s</i> -folyamat)	4	4.7.1. A neurális háló, mint gépi tanulási eljárás . . .	24
2.2. Az AGB fázis	6	4.7.2. A használt neurális hálók általános felépítése .	24
2.3. Báriumcsillagok	7	4.7.3. A használt neurális hálók részletes szerkezete .	26
3. A felhasznált adatok	8	4.8. További klasszifikátorok	28
3.1. Észlelt spektroszkópiai elemgyakoriságok	8	4.9. Bizonytalanságok	28
3.2. AGB nukleoszintézis modellek .	8	5. Eredmények	30
3.2.1. Monash	9	5.1. Elemgyakoriság ábrák	30
3.2.2. FRUITY	9	5.2. Elemarányok ábrája	31
3.2.3. A modellek összehasonlítása	11	5.3. Az elemarányok maradékának statisztikai ábrája	32
4. A klasszifikációs módszerek	13	5.3.1. Összehasonlítás a különböző klasszifikátorokra	34
4.1. A tavalyi munka	13	5.3.2. Elemgyakoriságok ($[X/Fe]$)	35
4.1.1. Újdonságok a tavalyi munkámhoz képest . . .	14	5.3.3. Az 1. csúcs elemeinek aránya	36
4.2. A keveredési faktor és a modellek transzformálása	14	5.3.4. Az 1. és 2. csúcsok elemarányai	37
4.3. Előfeldolgozás	16	5.3.5. A 2. csúcs elemeinek aránya	39
4.4. Az illeszkedés jósága (goodness of fit, <i>GoF</i>)	16	5.4. A csillagok tömegeloszlása . . .	40
4.5. <u>Legközelebbi módszer</u> (closest method, <i>CM</i>)	17	5.5. A keveredési faktor eloszlása . .	41
4.6. <u>Random forest (RF)</u>	18	5.6. A tömeg és a keveredési faktor kapcsolata	43
4.6.1. A random forest mint gépi tanulási eljárás . . .	18	6. Összefoglalás és kitekintés	44
4.6.2. A klasszifikátor lépései .	20	7. Függelék – ábrák	47
4.6.3. A RF klasszifikátor paraméterei	21		

1. Bevezetés

A nukleáris asztrofizika és talán az általános emberi kíváncsiság egyik legfontosabb kérdése az, hogy hol keletkeztek azok az elemek, atomok, molekulák, amik világunkat, mindennapi tárgyainkat, sőt, bennünket is alkotnak. A könnyű elemek keletkezési körülményeit érteni véljük – az ősrobbanás, majd csillagokban zajló fúzió lehetett érte a felelős. De hogyan keletkezhettek az arany, az ólom, a higany, és az összes többi, vasnál nehezebb elem, amelyek fúzió során nem alakulhattak ki? Azt tudjuk, hogy ezekért is asztrofizikai folyamatok felelősek, olyanok, amelyek óriási energiákon dűlnak. Évről évre egyre jobban megismerjük ezeket a folyamatokat, azonban még mindig bőven akad velük kapcsolatban felfedeznivaló.

A vasnál nehezebb elemek mintegy felének keletkezéséért kis- és közepes tömegű csillagok életének utolsó aktív szakaszát, az aszimptotikus óriásági (AGB) fázist tekintjük felelősnek, melyekben a lassú neutronbefogásos folyamat (*s*-folyamat) termeli a nehéz elemeket. Ezt a folyamatot rendkívül bonyolult és számításigényes, AGB csillagokat szimuláló modellek segítségével vizsgálhatjuk. Ugyan összességében ezek tényleg megfelelően visszaadják észlelési tapasztalatainkat, bőven találunk még hiányosságokat.

A báriumcsillagok (Ba csillagok) is mutatják az *s*-folyamat nyomait spektrumukban, azonban ezek a csillagok az AGB fázis előtt járnak, így magukban még nem termelhették őket. Mint kiderült, ezek a csillagok kettős rendszerek tagjai, ahol a társuk annak AGB fázisában szennyezte be őket. A Ba csillagok vizsgálata igen fontosnak bizonyult az *s*-folyamat működésének megértésében, mivel a spektrumuk könnyebben vizsgálható, mint az AGB csillagoké.

Munkámban ilyen Ba csillagok elemgyakoriságait felhasználva próbáltam megtalálni a megfelelő AGB modellt, amelyhez tartozó csillag beszennyezhetette az észlelt csillagot. 169 csillagon azok egyedi, valamint a minta statisztikai vizsgálatát is elvégeztem, mely alapján az AGB csillagok belsejében zajló folyamatok lehetséges modellezési hiányosságaira is rámutattam.

Tavalyi TDK munkám során ezt a feladatot már elkezdtem, és kialakítottam rá egy automatizált eljárást. Most azonban újabb, gyorsabb és pontosabb, gépi tanulást használó módszerrel kezeltem egy nagyobb adathalmazt. Így a tavalyi évemben megalapozott eljárást tovább tudtam fejleszteni, és azok eredményeivel megpróbáltam jobb megértést szolgáltatni az ilyen rendszerekben zajló folyamatokhoz.

Dolgozatomban felépítése a következő: a 2. fejezetben bemutatom a vizsgált asztrofizikai folyamatokat és azt, hogy miért is fontos a Ba csillagok vizsgálata. Ezután a 3. fejezetben a felhasznált észlelési adatokat és modelleket ismertetem. A 4. fejezet taglalja azt, hogy ezen adatokat milyen módszerekkel dolgoztam fel – a tavalyi munkámat, módszerem fizikai elvét, valamint a felhasznált eljárásokat. Ezután az 5. fejezet az eredményeimet mutatja be, ahol a többféle automatikusan generált ábrát és az azokról levonható következtetéseket tárgyalom. Végül a 6. fejezet a diszkussziót, összefoglalást és a további terveimet tartalmazza.

2. A vizsgált asztrofizikai folyamatok

A munkám középpontjában báriumcsillagok (Ba csillagok) állnak, melyek spektrumában az *s*-folyamatban keletkezett elemeket figyelhetünk meg. Ezek az elemek a kistömegű csillagok kései fejlődési fázisában, az aszimptotikus óriáságon (AGB) jönnek létre. A Ba csillagok azonban korábbi fejlődési állapotúak, amit a társcsillagról történt akkrécióval lehet magyarázni. Jelen fejezetben ezen folyamatok és jelenségek mibenlétébe szeretnék bevezetést nyújtani.

2.1. A lassú neutronbefogásos folyamat (*s*-folyamat)

A vasnál nehezebb elemek felépítésének körülményeit sokáig homály fedte. A vas ugyanis a legnagyobb rendszámú elem, ami közvetlenül létrejöhet csillagok belsejében fúzió során. Akkor mégis hogyan találkozhatunk a mindennapokban arannyal, higannyal és más nehéz elemekkel? Ezek keletkezéséért a neutron-, illetve protonbefogásos folyamatok felelősek. Dolgozatomban a neutronbefogásos folyamatokkal, azon belül is a **lassú neutronbefogásos, azaz *s*-folyamattal** foglalkoztam, ami a vasnál nehezebb elemek mintegy felének felépítéséért felel.

A neutronbefogás során egy A_ZX magból a befogás után keletkező ${}^{A+1}_ZX$ mag többségében radioaktív, ami β -bomlás segítségével elbomlik a periódusos rendszer következő, ${}^A_{Z+1}(X+1)$ elemévé – tehát benne egy neutron protonná alakul át, ami növeli a rendszámot. Így lehetséges az, hogy neutronbefogással a protonszám is nő.

A neutronbefogásos folyamatok három típusát ismerjük, melyeket a neutronkitettség mértéke választ el egymástól. Ugyanis ha kellően nagy neutronsűrűségű a környezet, az átlagos időtartam két neutronbefogás között kisebb, mint a keletkezett radioaktív magok várható élettartama – ellenkező esetben, ha elég kicsi a neutronsűrűség, a radioaktív magoknak van idejük stabil izotóppá bomlani a következő neutronbefogás előtt. A három típus az alábbi:

- Az ***s*-folyamat** (*slow neutron capture process, lassú neutronbefogásos folyamat*) esetén kicsi a neutronsűrűség, a két neutronbefogás közti átlagos időtartam hosszabb, mint a keletkezett radioaktív elemek átlagos élettartama. Ez azt jelenti, hogy az *s*-folyamat során a nehéz elemek a nukleáris stabilitási völgy mentén épülnek fel. Vagyis általában stabil atommagok reagálnak szabad neutronokkal, és a keletkező instabil magok ismét stabil atommagokká β -bomlanak, mielőtt újabb neutron foglalnának be.

Ez a folyamat tudásunk szerint az AGB csillagokban zajlik.

- Az ***r*-folyamatban** (*rapid neutron capture process, gyors neutronbefogásos folyamat*) a magok ezzel szemben általában befognak egy újabb neutron, mielőtt elbomolhatnának, így a stabilitási völgytől távoli, instabil, neutrongazdag magok épülhetnek fel.

Az *r*-folyamat pontos környezete egyelőre ismeretlen, de mindenképp nagyenergiájú asztrofizikai folyamat szükséges hozzá. A legvalószínűbb helyszínnek a neutroncsillagok összeolvadását tekintik.

- Az ***i*-folyamat** (*intermediate neutron capture process, köztes neutronbefogásos folyamat*) neutronsűrűsége az *s*- és az *r*-folyamat között van, ám ezen reakció létezése és körülményei jelenleg még tisztázatlanok. Mégis, méréseink arról árulkodnak, hogy

kellhet egy ilyen harmadik folyamat ahhoz, hogy teljesen meg tudjuk magyarázni a Naprendszer és a Világegyetem távolabbi régióinak összetételét.

A továbbiakban az s -folyamattal foglalkozom, hiszen ennek elemei találhatóak meg a Ba csillagok külső rétegeiben. Az s -folyamat során tehát a vasmagok a stabilitási völgy mentén épülnek egyre nagyobb tömegszámú elemekké neutronbefogás révén.

Az elemek ebben a reakcióban három csúcsban dúsulnak fel, amely mágikus neutronszámok körül alakulnak ki ($N = 50, 82$ és 126 neutronszám). Ezek a lezárt neutronhéjakhoz tartoznak, ami egy energetikailag kedvező állapot, így a neutronbefogásra mutatott hatás-keresztmetszet radikálisan lecsökken. Ennek köszönhetően az ilyen neutronszámmal bíró elemek további neutronbefogása jóval kisebb számban történik, mint az addigi felépülés, tehát a köztes tömegszámú elemekkel szemben nagymértékű dúsulásukat figyelhetjük meg. Ezek az alábbi elemek:

- Az első csúcs elemei – könnyű s -elemek (light s -process elements):
Sr, Y, Zr, Nb, Mo, Ru.
- A második csúcs elemei – nehéz s -elemek (heavy s -process elements):
Ba, La, Ce, Nd, Sm, Eu
- A harmadik csúcs az **Pb**-ből áll, ahol meg is reked ez a folyamat.

Kétféle reakció szolgálhat neutronforrásként jelenlegi ismereteink szerint az AGB csillagok belsejében:

- A kistömegű csillagokban a $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ ($^{13}_6\text{C} + {}^4_2\alpha \rightarrow {}^1_0\text{n} + {}^{16}_8\text{O}$) folyamat a legjelentősebb neutronforrás.
Ez a jelenlegi modellek szerint egy vékony rétegben, az ún. „ ^{13}C pocket”-ben zajlik az AGB csillagok belsejében (ld. a 2.2. alfejezet). Itt a ^{13}C keletkezését protonok és ^{12}C atomok reakciója szolgáltatja, amely α -részecskékkal (héliummagokkal) reagálva kellő számú szabad neutron bocsát ki a neutronbefogásos folyamat létrejöttéhez.
- A nagytömegű csillagokban inkább a $^{22}\text{Ne}(\alpha, n)^{25}\text{Mg}$ folyamat a jelentős neutronforrás. Ez a reakció nagy hőmérsékleteken, az ún. He-villanás során zajlik.

A kutatásomban kistömegű AGB csillagokkal dolgoztam, melyeknek neutronforrása így főként a ^{13}C pocketben zajló, $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ folyamatnak köszönhető. (Cseh et al., 2018)

A következő fejezetben merüljünk el egy kicsit részletesebben az AGB csillagok belső felépítésében, és hogy hol zajlik ez a folyamat!

2.2. Az AGB fázis

A kis- és közepes tömegű ($M < 8 M_{\odot}$) csillagok kései evolúcióján a központi He-fúzió utáni szakasz folyamatait értjük, egészen a fehér törpe (white dwarf, WD) kialakulásáig. Ebben a szakaszban éri el a csillag az aszimptotikus óriáságot (asymptotic giant branch, AGB), amely alatt a lassú neutronbefogásos folyamat is zajlik. (Részletesen ld. pl. Pols.)

Az aszimptotikus óriáságot (asymptotic giant branch, AGB) a kis- és közepes tömegű csillagok érik el fejlődésük végéhez közel. Ez az állapot az ilyen csillagok utolsó nukleárisan aktív szakasza, ami akkor kezdődik, mikor a középpontban már elfogyott a He, és egy C-O mag alakult ki. Egy kistömegű AGB csillag belső szerkezetét mutatja be az 1. ábra.

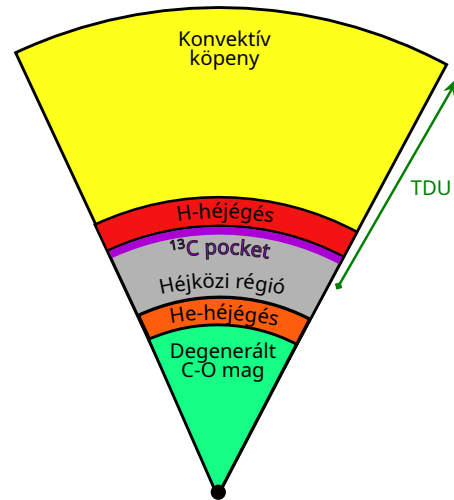
Legbelül egy (a későbbi szakaszokban már degenerált) C-O mag található, amelyet két nukleáris égést végző héj övez – a He-héjégés a maghoz közelebb, felett a H-héjégés. A két héj egy nukleárisan inaktív héjközi régiót fog közre. Az egész csillagot egy H-ben gazdag, konvektív köpeny fedi, mely sugarának mintegy 90%-át teszi ki.

Maga az *s*-folyamat a közvetlenül a H-égető héj alatti vékony sávban, a ^{13}C pocket-ben zajlik, az előző fejezetben taglalt $^{13}\text{C}(\alpha, n)^{16}\text{O}$ reakció neutronforrásának segítségével.

Az AGB fázis korai szakasza után, amikor a He-héjégés növeli a C-O magot annak degenerációjáig, beköszönt a termális pulzusok szakasza. A termális pulzusok során hol a H-, hol a He-héjégés indul be a csillag belsejében, egymást periodikusan váltva. Amikor a He mennyisége lecsökken a He-égető héjban, a felsőbb rétegek összehúzódnak, felhevülnek addig, amíg ismét be nem lobban a H-héjégés. Amikor a H-égés termékei elég nagy nyomást gyakorolnak a szunnyadó He-héjégés rétegre, abban belobban a fúzió, ami nagy luminozitású, ezt hívjuk „héjvillanásnak” („He shell flash”). A villanás konvekciót indít be a héjközi régióban, ami kitágul, így stabil He-égés következik.

Az *s*-folyamat termékei azonban nem kerülhetnének a felszínre, és az AGB csillag intenzív csillagszele nem szórhatná azokat szét a csillagközi térben (vagy egy társcsillag felszínén), ha nem lenne egy felkeveredési folyamat. Szerencsére a stabil He-égés során ez meg is történik, amikor a konvektív köpeny benyúlik a ^{13}C pocket alá. Ezt a folyamatot nevezzük „harmadik felkeveredésnek”, (third dredge-up, TDU). Ez nem szám szerint a harmadik felkeveredés, csupán a harmadik típusú, ilyen TDU-kból többet is átél a csillag a termális pulzusok során. A TDU után a He-héjégést ismét a H-égés váltja fel.

Az AGB fázis addig tart, amíg a csillag fel nem éli a külső köpenyét. Ez főképp rendkívül intenzív csillagszelének köszönhető, valamint a nukleáris folyamatok is egyre kijebbek tolják annak belső határát. A további tömegvesztés során ledobott anyag alkotja a leendő planetáris köd anyagát, majd a csillag C-O magja fehér törpeként marad jelen.



1. ábra. Az AGB csillagok belső felépítése.

Saját illusztráció
(minta: A. Karakas)

2.3. Báriumcsillagok

A báriumcsillagok (Ba csillagok) olyan, fősorozati vagy vörös óriásági csillagok, melyek spektrumában a többi csillaghoz képest kiugró mennyiségben találhatók az *s*-folyamatban keletkezett elemek. Nevük is onnan ered, hogy a legerősebb vonallal rendelkező *s*-elemet, a Ba-t azonosították be bennük szokatlanul nagy mennyiségben – elsőként 1951-ben figyelték meg őket (Bidelman and Keenan, 1951).

Ezen csillagok azonban az AGB-nél korábbi fejlődési fázisban járnak, így sokáig nagy rejtély volt, hogy mégis honnan szerezhették ezt a többletet, ha belsejükben még nem zajlik az *s*-folyamat. Emiatt mindenképpen egy külső folyamatnak köszönhetik ezt a többletet. Később kiderült, hogy valójában minden Ba csillag kettős rendszer tagja, melyben társa egy fehér törpe. A kettős természetet már számos publikáció bizonyította elegendően nagy mennyiségű Ba csillag mintán, mind radiálissebesség-változások révén (pl. Griffin and Griffin (1980), McClure (1983)), mind a halvány fehér törpe közvetlen megfigyelésével UV tartományban (pl. Boehm-Vitense (1980), Schindler et al. (1982)).

Tehát a társcsillag nagyobb tömegű volt, gyorsabban elfejlődött, AGB fázisában anyagot adott át a leendő Ba csillagnak, majd fehér törpévé alakult. A tömegátadás pontos mechanizmusa jelenleg ismeretlen – feltehetőleg az intenzív AGB-csillagszélnek, a Roche-térfogat átlépésének, vagy ezek kombinációjának köszönhető.

Nem csupán a Ba csillagok összetétele keletkezett így, kettős rendszerekben, elszívott AGB-anyag segítségével. A Ba csillagoknak, melyek fémessége nagyjából a Napénak tizedétől a Napéig terjed, léteznek fémszegényebb megfelelőik is, a CH- és a CEMP (carbon-enhanced metal-poor, széngazdag fémszegény) csillagok. Hasonló eredettel rendelkeznek a külső (extrinsic) S-csillagok is, melyek alacsony hőmérsékletű vörös óriások – az különbözteti meg őket az AGB csillagokat takaró belső (intrinsic) S-csillagoktól, hogy nincs jelen a felszínükön a rövid felezési idejű technécium, tehát nem maguk termelték a rajtuk található *s*-elemeket.

A Ba csillagok jelentősége megkérdőjelezhető lenne az *s*-folyamat vizsgálatában, hiszen köpenyünk egy bonyolult rendszer, melyben nem csupán az AGB csillagok anyagát találhatjuk meg, hanem az keveredik a Ba csillag kezdeti összetételével is. Ez egy nagyon bonyolult, sokváltozós rendszer, a tömegátadás pontos folyamatát sem ismerjük. Akkor mégis mi a hasznuk?

Az AGB csillagok közvetlen spektroszkópai észlelése számos problémával terhelt. Nem csupán rövid ideig tart a csillag életében ez a szakasz (tehát kevés ilyen csillagot láthatunk az égbolton), hanem a spektrumuk is tükrözi a csillagban zajló intenzív dinamikai folyamatokat, emellett a külső, hideg régiókban már por és molekulák is képződnek. A por főképp az infravörös tartományban figyelhető meg, amihez a földi légkör miatt űrtávcsövekre van szükségünk – ez szintén nagyban megnehezíti az AGB csillagokról készült spektrumok készítését és a pontos elemgyakoriságainak meghatározását.

Éppen ezért nagyon fontos a Ba csillagok vizsgálata, hiszen spektrumukban az egyes elemek nem molekulásvákként jelennek meg, ami által könnyebb az elemgyakoriságok meghatározása. Ezáltal közelebb kerülhetünk az AGB csillagok, az *s*-folyamat, és a kettős rendszerekben történő tömegátadás részleteihez is.

3. A felhasznált adatok

A munkámban 169 Ba csillag észlelt spektroszkópai elemgyakoriságát (ld. 3.1 alfejezet) vettem össze a numerikus AGB nukleoszintézis modellek (ld. 3.2 alfejezet) által szolgáltatott elemgyakoriságokkal. Ezeket az alábbi alfejezetekben részletesen ismertetem.

3.1. Észlelt spektroszkópai elemgyakoriságok

Munkámban az észleléseket egy homogén spektroszkópai mintából vettem. Ezt de Castro et al. (2016) cikke szolgáltatta, melynek eredményeit ugyanezen kutatócsoport felülvizsgálta, és azt a Roriz et al. (2021a) és Roriz et al. (2021b) publikációkban tették közzé. Az ezekben a publikációkban közölt elemgyakoriságokkal dolgoztam a továbbiakban. A 169 csillagra meghatározták az 1. táblázatban található 12, *s*-csúcs körüli elemre azok elemgyakoriságait, melyeket a szokványos spektroszkópai jelölés szerint $[\frac{X}{Fe}] = \log(\frac{X}{Fe}) - \log(\frac{X}{Fe})_{\odot}$ (ahol $\odot$ jelöli a Napra vonatkoztatott értéket) alakban adtak meg.

Fémesség	1. <i>s</i> -csúcs	2. <i>s</i> -csúcs
[Fe/H]	Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Mo, Ru	La, Ce, Nd, Sm, Eu

1. táblázat. A jelen dolgozatban vizsgált elemek. Ezek a szokásos [X/Fe] mértékegységben vannak kifejezve (a fémességet megadó [Fe/H]-t leszámítva).

Ezen észleléseket az ESO 1,52 és 2,2 átmérőjű La Silla-i távcsöveim működő FEROS (Fiber-fed Extended Range Optical Spectrograph) spektrográffal készítették, 1999-2010. között. Ez egy $R = 48000$ -es felbontású, 380 és 920 nm között működő műszer.

Ezen forrás rendkívül hasznosnak bizonyult a Ba csillagok vizsgálatához munkám során, ugyanis nagyszámú csillagra szolgáltatott jó minőségű, nagy felbontású spektrumon alapuló elemgyakoriságokat. Egyik legnagyobb előnye, hogy homogén minta, hiszen ugyanazon kutatócsoport ugyanazon módszerekkel dolgozta fel a spektrumokat – így a csillagok eltérő feldolgozásából (más feldolgozószoftver vagy különböző modell-légkörök használata) eredő hibáival nem kell foglalkoznunk. Veszélye azonban az, hogy a feldolgozás szisztematikus hibái, melyeket minden csillag elemgyakorisága őriz, nem tűnnek ki.

3.2. AGB nukleoszintézis modellek

A munkámban két különböző, napjainkban legelterjedtebben használt AGB-nukleoszintézis modellesaládot, a FRUITY és Monash modelleket használtam fel, mivel ezen modellek rendelkeznek jelenleg a legváltozatosabb tömeg- és fémességhálózattal. Ezeket különböző szerzők fejlesztették ki, így kissé más mechanizmust követnek.

Ezen AGB modellek ún. „utófeldolgozó nukleoszintézis-kódot” (post-processing nucleosynthesis code) használnak. Ez azt jelenti, hogy különböző tömegekre és fémességekre előre lefuttatják a csillag fejlődését leíró evolúciós egyenleteket csökkentett elemszámmal, csak a H és O közötti elemekkel (a számításigény kezelhetősége miatt), ezzel létrehozva egy AGB fázis előtti csillag szerkezetét. Ez megtehető, mivel a további elemek reakciói

nem szabadítanak fel akkora energiát, hogy az jelentősen befolyásolja a csillag belső szerkezetét.

Ezen számítások lefuttatása után különböző kezdeti paraméterekkel állítható be az utófeldolgozás kódja, amely már nagyszámú elemből álló nukleáris hálózattal rendelkezik. Ez a kód számítja ki a nehezebb elemek keletkezésének pontos folyamatait, és utólag tölti fel a csillag hozzávetőleges szerkezetét a megfelelő reakciókkal, majd fejleszti tovább annak szerkezetét és összetételét.

3.2.1. Monash

A Monash modellek (Monash Stellar Structure Code) napjaink egyik széles körben használt AGB modelles családja. (A működését leíró publikációk: Lugaro et al. (2012), Fishlock et al. (2014), Karakas and Lugaro (2016), Karakas et al. (2018)). A munkámban felhasznált Monash modelleket a 2. táblázat tartalmazza.

A Monash modellek a ^{13}C pocket képzését úgy végzik, hogy a héjközi régió felső részében extra exponenciális protonmennyiséget juttatnak be. Így bemeneti paramétereik között a különböző tömeg és fémesség mellett az M_{mix} paraméter is szabadon állítható, ami a megnövelt protonmennyiségű régió, tehát közvetlenül a ^{13}C pocket tömege.

A konvektív köpeny a pulzusok során az időtől függetlenül is benyúlhat a köpeny alá a TDU felkeveredési epizódok során. Ennek nagyságát a Monash modellekben az N_{ov} paraméter adja meg skálamagasságban. Ez az általam használt modellek közül csak a $[\text{Fe}/\text{H}] = 0,33$ dex eset egyes tömegeire releváns mennyiség (ld. 2. táblázat).

3.2.2. FRUITY

A FRUITY (Full-Network Repository of Updated Isotopic Tables & Yields) AGB nukleoszintézis modell napjaink másik legerjedtebb modellje AGB csillagokra, amely a legtöbb fémességet tartalmazó hálózattal rendelkezik. (A modelleket bemutató publikációk: Cristallo et al. (2009), Cristallo et al. (2011), Cristallo et al. (2015), Cristallo et al. (2016), Piersanti et al. (2013).) Ez egy publikus adatbázis, amelynek különböző bemeneti paraméterekkel végzett eredményei letölthetőek a kód weboldaláról.

A felhasznált FRUITY modelleket a 3. táblázat tartalmazza.

A FRUITY modellek 4 bemeneti paramétere az alábbi:

- M – kezdeti tömeg. A felhasznált értékeket ld. 3. táblázat.
- $[\text{Fe}/\text{H}]$ – fémesség. A felhasznált értékeket ld. 3. táblázat.
- IRV (initial rotational velocity) – kezdeti forgási sebesség a nullakorú fősorozaton. Legtöbb esetben $IRV = 0 \frac{\text{km}}{\text{s}}$ modellekkel dolgoztam, hiszen a forgási sebesség nem befolyásolja nagyban a Ba csillagok elemgyakoriságait (Cseh et al., 2018; den Hartogh et al., 2019).
- ^{13}C pocket – a ^{13}C pocket mérete „standard” vagy „extended”, utóbbi esetben a standard mérethez képest megnövelt.

A FRUITY modellek a ^{13}C pocketet természetesen képzik, egy β szabad paraméterű időfüggő „overshoot” (a konvektív zóna határán való túlnyúlás) révén.

A FRUITY modellek típusai és az általam továbbiakban használt jelölései:

- FRUITY – $IRV = 0 \frac{\text{km}}{\text{s}}$, ^{13}C pocket „standard” méretű.
- FRUITY ext – $IRV = 0 \frac{\text{km}}{\text{s}}$, ^{13}C pocket „extended” méretű.
- FRUITY rot – $IRV = 60 \frac{\text{km}}{\text{s}}$, ^{13}C pocket „standard” méretű.
 $[\text{Fe}/\text{H}] = 0 \text{ dex}$ és $M = 2,0 M_{\odot}$ esetén további modellekkel is rendelkezünk
 $IRV = 10 \frac{\text{km}}{\text{s}}$ és $IRV = 30 \frac{\text{km}}{\text{s}}$ esetekben is.
- FRUITY T60 – $IRV = 60 \frac{\text{km}}{\text{s}}$, ^{13}C pocket „extended” méretű.

M ($M_{\odot}$) \ $[\text{Fe}/\text{H}]$ (dex)	-0,70	-0,30	-0,15	0,00	0,33
1,25	20, 60				
1,50	20, 60	20 ⁽¹⁾		20 ⁽³⁾	
1,75	20	20 ⁽¹⁾		20 ⁽²⁾	
1,90		20			
2,00	20, 60		20	1, 10, 20, 40	
2,10		20			
2,25	20	20		20	
2,50	20, 40	20		20	20 ^(2.5)
2,75	20	20		20	20 ⁽²⁾
3,00	10, 20	10, 20	20	1, 10, 20	20 ⁽¹⁾
3,25	10	10		10, 20	10, 20
3,50	10	10		10	10
3,75		10		10	10
4,00	1	1, 10		1, 10	10
4,25		1		1, 10	1, 10
4,50	1	1		1, 10	1, 10
4,75				1	1
5,00				1	1

2. táblázat. A felhasznált Monash modellek.

Az adott tömeghez és fémességhez tartozó cellák az $M_{mix} \cdot 10^4 M_{\odot}$ értékeket mutatják.

Felső indexben N_{ov} értéke látható azon modelleknél, amelyek ilyen paramétert használtak. A táblázatból elhagytam az $M_{mix} = 0$ vagy $N_{ov} = 0$ -val rendelkező modelleket, mivel azokat az algoritmus kiszűri.

M ($M_{\odot}$) \ $[Fe/H]$ (dex)	-1,67	-1,15	-0,845	-0,670	-0,368	-0,243	-0,146	0,000	0,155
1,3	x		x		x		x		x
1,5	x		x	e	x	e	x	e	x
2,0	x		x	e	x	e	x	e	x
2,5	x		x		x		x		x
3,0	x		x		x		x		x
4,0	x		x		x		x		x
5,0	x		x		x		x		x
6,0	x		x		x		x		x

3. táblázat. A felhasznált FRUITY modellek.

Az egyes cellákban az 'x' a standard FRUITY, az 'e' a FRUITY ext,
az 'r' a FRUITY rot (r^* esetén $IRV = 10, 30, 60 \frac{km}{s}$ is),
a 't' pedig a FRUITY T60 modelleket jelöli
adott tömeghez és fémességhez tartozóan.

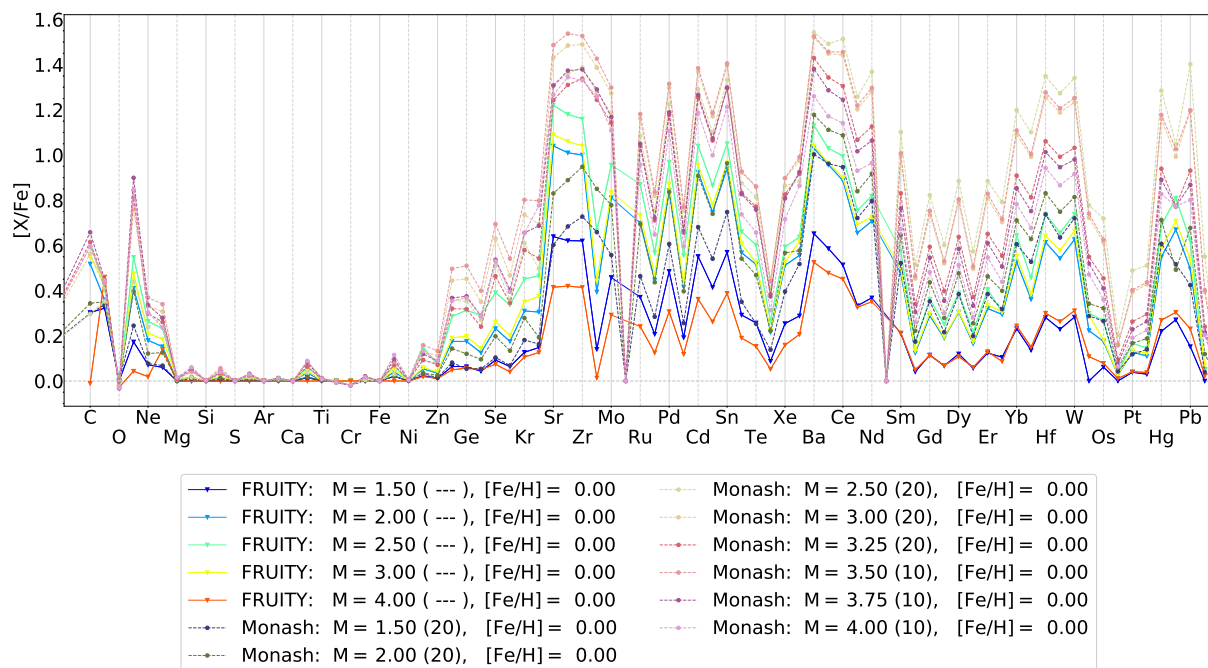
3.2.3. A modellek összehasonlítása

A FRUITY és Monash modellek meghatározó fizikai összefüggései azonosak, így a nagyskálájú eredményeik hasonlóak. Ez az önkonzisztens viselkedés megnyugtató eredmény az AGB csillagok modellezése területén. A két modelles család példaképp kiválasztott tagjaira ábrázolt elemgyakoriságokat a 2. ábra mutatja.

Az s -csúcsok alakja mindkét modelles családra hasonlóan bizonyul. Az is megfigyelhető mindkét esetben, hogy a fémesség csökkenésével a modellek termelési hatékonysága az első s -csúcstól egyre inkább a második felé tolódik.

A két modelles család mechanizmusa néhány ponton mégis eltér, így az általuk nyújtott elemgyakoriságok némileg különböznek. A modelles családok főbb különbségei:

- A ^{13}C pocket képzésének mechanizmusa, mint azt feljebb tárgyaltam.
- A FRUITY modellek a TDU hatékonysága miatt tipikusan alacsonyabb elemgyakoriságokat produkálnak, mint a Monash modellek. Így különböző mértékű keveredés, tehát más keveredési faktor szükséges a két modellescsoporthoz.
- A Monash modellek a FRUITY-val szemben tartalmazzák a leányelemek radioaktív bomlását is. Ezért figyelhetjük meg a későbbi ábrákon egyes elemek esetén, hogy a FRUITY-hoz képest az összes Monash modell jelentős alul- vagy felülbecslést produkál. (Például a nióbium a Monash modellek esetén magasabb értékkel rendelkezik, mert az 1,5 millió év felezési idejű ^{93}Zr bomlása során stabil ^{93}Nb -má alakul át.)



2. ábra. A felhasznált napfémességű FRUITY és Monash modellek egy részének elemgyakoriságai az elemek növekvő rendszámának függvényében. Jól megfigyelhető a különböző tömegekre jellemző eltérő mennyiség és mintázat, valamint, hogy az azonos tömegű FRUITY modellek kevesebbet termelnek az adott elemből a Monashoknál.

4. A klasszifikációs módszerek

Ezen fejezetben a fentebb vázolt problémára kifejlesztett eljárás elvét és különböző módszereit ismertetem. Ennek során klasszifikációt (osztályozást) végeztem, melyben Ba csillagok észlelési mintázatában azonosítottam a lehetséges AGB modelleket. Az ennek alápául szolgáló eddigi munkám és az elv ismertetése után a három felhasznált, egymástól független osztályozási eljárást (ezen túl *klasszifikátort*) mutatom be.

4.1. A tavalyi munka

Kutatásom alapjait már a tavalý bemutatott TDK dolgozatomban megkezdtem. Akkor kezdtem el azzal a problémával foglalkozni, hogy miként lehet Ba csillagok elemgyakoriságait közvetlenül összevetni AGB csillagok nukleoszintézis modelljeivel.

Ezt a feladatot a 4.2. fejezetben tárgyalt δ keveredési faktor analitikus átszámításával végeztem a Ce elemre. Ez egy első közelítésnek megfelelő, ám mindenképpen tovább fejlesztendő feltételezés a δ faktor ismeretlen értékére, melynek korlátait szintén a 4.2. fejezetben mutatom be.

Munkám során kifejlesztettem egy automatizált algoritmust ezen feladat elvégzésére, mely képes megkeresni a tűréshatáron belül megfelelően illeszkedő AGB modelleket az észlelésekre. Az észlelések és a modellek közvetlen összehasonlítását egy közös ábrán való feltüntetéssel biztosítottam (ezt idei munkámban is megtartottam, ld. 5.1. alfejezet)

Ezt az eljárást 55 db Ba csillagra alkalmaztam is, melyekre nem csupán kellő pontosságú spektrummal, de a szennyező AGB csillagok tömegbecslésével is rendelkezünk. Ezen csillagokra a kettős pályaparaméterek alapján Jorissen et al. (2019) megbecsülték (az inklináció hibájával terhelve) a komponensek tömegeit, melyből megadták ezen rendszerekre a fehér törpe AGB korban tapasztalt tömegét is. Ez szolgált tömegbecslésem kiindulópontjaként, valamint ezekhez hasonlítottam a megfelelőnek ítélt modelljeim tömegét is. Akkor még egy szabad paraméter volt a keresendő AGB modellek tömege, ami körül egy bizonyos tűréshatárral kerestem a megfelelő modelleket. Ez első feltevésben megegyezett az irodalmi AGB tömeggel, azonban ahol nem találtam egyezést, kibővítettem a keresést más tömegekre is. Ezen manuális korlátozásra azért volt szükség, mert különben túl sok modellt találhatott volna megfelelőnek az eljárás. Azonban ez az elv nyilvánvaló korlátokat szab, hiszen nem pusztán egy önkényes válogatás jelenik meg a rendszerben, de az időigényesnek is bizonyul. Ezért is volt fontos egy még nagyobb mértékben automatizált eljárás kifejlesztése.

Ez az eljárás nem csupán az egyes csillagok egyedi vizsgálatára nyújtott lehetőséget, hanem azok statisztikai mutatóira is. A legfontosabbnak talán a szennyező AGB csillagok tömegeloszlása bizonyult. Azt találtam, hogy az irodalmi tömegekkel ellentétben nincs olyan csillag, amit $4 M_{\odot}$ -nál nagyobb tömegű AGB modell jóslata adna vissza helyesen. Ez egy természetesebb, $2,5 M_{\odot}$ körül csúcsosodó eloszlást mutatott, mint az irodalmi tömegeké.

Céлом ezen eljárás továbbfejlesztése volt idei munkámban, felhasználva gépi tanulási módszereket, melyeket még több csillag észleléseire tudtam alkalmazni. Ezenfelül immár több csillag több elemére rendelkezünk elemgyakoriságokkal, ami a statisztikai vizsgálatához szükséges adatmennyiséget is jobban biztosította.

4.1.1. Újdonságok a tavalyi munkámhoz képest

Azonfelül, hogy az idei munkámban már a δ faktor kézi átszámítása helyett gépi tanulással azonosítottam be az elemgyakoriságok mintázatait, néhány további részlet is megváltozott. Ezek az alábbiak:

- Új észlelési adatok, még több csillagra.
- Új Monash AGB modellek érhetőek el, $[\text{Fe}/\text{H}] = -0,15$ fémességgel, 2 és 3 $M_{\odot}$ -ra. Új, fémszegény FRUITY modellek használata, $[\text{Fe}/\text{H}] = -1,15$ és $-1,67$ fémességgel minden tömegre.
- A keveredési faktor új kezelési módja, melyben a $[\text{Ce}/\text{Fe}]$ értékre való normálás helyett a δ faktor már szabad paraméterként jelenik meg (ld. 4.2. fejezet).
- Ezen új csillagokra (az eddigi munkámban érintett 28-at leszámítva) nem rendelkezünk a kettős-pályaparaméterek alapján becsült kezdeti AGB tömegekkel.

4.2. A keveredési faktor és a modellek transzformálása

Az óriáságon tartózkodó Ba csillagok (Ba óriások) konvektív külső köpennyel rendelkeznek. Így a társ-AGB csillagról akkrécióval érkező elemek összekeverednek a Ba csillag kezdeti anyagával, és ezt, az s -folyamat által feldúsított összetételt észleljük a spektroszkópiai mérések során. Jelen munkában csak Ba óriásokkal foglalkoztam, így a külső köpenyben valóban összekeveredett az elszívott és az eredeti anyag.

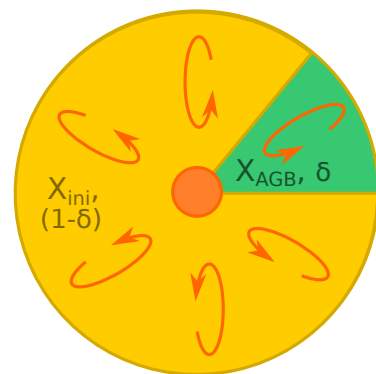
Azt, hogy a Ba csillag köpenye mekkora részben áll az elszívott AGB-anyagból, egy keveredési (δ , dilution) faktorról jellemezhetjük, az alábbi képlet szerint:

$$\delta = \frac{M_{AGB}^{akkr}}{M_*^{kopeny}} \quad (1)$$

Itt M_{AGB}^{akkr} az AGB csillagról akkrécióval elszívott tömeg, míg M_*^{kopeny} a Ba csillag köpenyének teljes tömege az akkréció végeztén. A jelenleg észlelt állapotok jó közelítéssel az akkréció utániakkal egyeznek meg.

Fizikailag értelmesnek a $\delta \lesssim 0,9$ eseteket tekintetjük, bár ez egy önkényesen kitüntetett szám. Mégis, igen kicsi a valószínűsége annak, hogy a csillag a köpenye anyagának több mint 90%-át a társcsillagról nyerte. Már a $\delta \approx 0,7$ eset is extrémnek számít, azonban létezhetnek olyan szoros ket-tősök, melyekben nem vethetjük el az ilyen magas értékeket sem. Azonban a 0,9 feletti értékek már valószínűleg olyan modelleket takarnak, melyeket az eljárás képtelen az észlelések értékeire elkeverni, így nem okozhatták a Ba csillag szennyezését. Emiatt a továbbiakban $\delta = 0,9$ feletti modellekkel nem is foglalkoztam.

Az AGB társ tömegátadása után tehát a köpeny δ hányada az AGB anyagát örökölte, míg $(1 - \delta)$ hányada a csillag eredeti összetételét őrzi. Ezt szemléltetem a 3. ábrán is. A valóságban homogén keveredést feltételezünk.



3. ábra. A keveredési jelenség és a δ faktor illusztrációja.

Forrás: saját illusztráció

Ez alapján a Ba csillag adott X elemének tömegarányára (azaz, hogy a csillag tömegének hanyadrészét alkotja az adott elem) felírható a következő összefüggés:

$$\left(\frac{X}{Fe}\right) = \left(\frac{X}{Fe}\right)_{ini} \cdot (1 - \delta) + \left(\frac{X}{Fe}\right)_{AGB} \cdot \delta \quad (2)$$

Itt $\left(\frac{X}{Fe}\right)_{ini}$ a Ba csillag kezdeti elemgyakorisága az adott X elemre, amelyet első rendben azonosnak vélünk a társ csillagával, mivel feltehetőleg egyazon csillagszülő felhőben keletkeztek. Így ezen értéknek az adott modell kezdeti elemgyakoriságát vehetjük.

Az $\left(\frac{X}{Fe}\right)_{AGB}$ tag az AGB csillagra modellezett végső TDU-ja (harmadik típusú felkeveredése) utáni elemgyakoriság. Feltételezzük, hogy az akkréció az utolsó TDU után vagy nem sokkal korábban következett be, így ilyen összetételű anyagot szívott el a Ba csillag, majd ez keveredett köpenyében.

A (2) egyenletet átírva a spektroszkópiában megszokott jelölés szerint:

$$\left[\frac{X}{Fe}\right] = \log \left(10^{[X/Fe]_{ini}} \cdot (1 - \delta) + 10^{[X/Fe]_{AGB}} \cdot \delta \right) \quad (3)$$

Ezt átrendezve a keveredési faktor kiszámítható, *obs* indexszel jelölve a Ba csillag megfigyelt, valamint *AGB* indexszel az AGB modell végső elemgyakoriságát:

$$\delta = \frac{10^{[X/Fe]_{obs}} - 10^{[X/Fe]_{ini}}}{10^{[X/Fe]_{AGB}} - 10^{[X/Fe]_{ini}}} \quad (4)$$

A probléma a keveredési faktorról az, hogy egy szabad paraméter, értéke ismeretlen minden Ba csillagra. Eddigi munkámban értékét úgy számoltam, hogy a Ce észleléseire a modellek értékét pontosnak vettem, onnan minden modellre kiszámítható volt a δ faktor. Ezek után a modellek összes többi elemét a Ce alapján kiszámolt δ faktorral kevertem a Ba csillag anyagával. Ez azonban egy pontatlan feltevés, akkor is, ha a Ce észlelések hibáin belül mindenhol el is végezzük ezt az eljárást. A Ce mérési hibája végzetes lehet a következtetéseink pontosságára. Nem csupán akkor lehet gond, ha a Ce egyedi csillagokra vett mérésében hiba történt – a feltételezés túl erős megkötést ad általánosságban is, mivel nem csak ez az egy elem vesz részt a keveredésben. A Ce mérése egy lehetséges szisztematikus hiba miatt is okozhat pontatlanságot, de több elemet figyelembe véve ezt kiküszöbölhetjük.

Éppen ezért jelen munkában a δ faktort már szabad paraméterként kezeltem. A 4.4. alfejeztben tárgyalt módon, az illeszkedés jószágának vizsgálatával választottam ki minden egyes modellhez a legjobb illeszkedéshez tartozó δ faktort. Így az elkevert modellek már nem tüntetik ki a Ce elemet, ami egy valósághoz közelebbi képet szolgáltat.

4.3. Előfeldolgozás

Az adatok előfeldolgozása az észlelések és az AGB modellek beolvasásából áll, melyet egy letisztázott formátumú fájlba ment ki az erre szánt programkód.

A modellek esetén a végső elemgyakoriságokat tároljuk el, melyeket előtte átszámolunk a Ba csillag rendszerébe különböző δ értékek esetén. Jelen esetben minden végső elemgyakoriságot egy 0 és 0,9 közötti, 0,002-es léptetéssel végzett δ -rácson számolunk ki. Ez egy nagyon finom felbontás, így több modell is teljesen megegyező elemgyakoriságokat mutat – azokat, melyek az első három tizedesjegyben megegyeznek egymással, kiszűrjük és eldobjuk, hiszen ez megzavarhatná a klasszifikátorokat, a tanítás során egyenlő súllyal szeretnénk kezelni minden eshetőséget.

Ez egy olyan klasszifikációs problémához vezet el minket, melyben az lesz a feladat, hogy az eljárás *a δ faktortól függetlenül felismerje az adott modell mintázatát*, ugyanis δ egy ismeretlen, szabad paraméter. Ezzel szemben a modell tömege és fémessége nagyban befolyásolja az elemek mintázatát.

Mindhárom klasszifikátor alkalmazása esetén külön kezeljük a FRUITY és Monash modelleket, ugyanis az eltérő fizikai tulajdonságok miatt azok más paraméterekkel végzik a tanulási folyamatot a különböző modelleszaládokra.

A három klasszifikátor bemutatása előtt ismerkedjünk meg az illeszkedést jóságát jellemző mérőszámmal! Ezen alapszik első klasszifikátorunk, noha a többi klasszifikátor által helyesnek ítélt modellek illeszkedését is ez az érték jellemzi.

4.4. Az illeszkedés jósága (goodness of fit, *GoF*)

Mint azt már a 4.2. fejezetben láthattuk, a δ faktor jelenleg egy szabad paraméter. Így minden egyes AGB modell különböző δ faktorokkal eltranszformált változata egy-egy lehetséges modell, aminek illeszkedését meg kell vizsgálni a megfigyelésekből levezetett elemgyakoriság-mintázatokra. Az illeszkedés jóságának jellemzésére bevezettünk egy mérőszámot (goodness of fit, **GoF**), ami szemléletesen azt adja meg, hogy az adott modell a többi modell hány százalékánál nyújt jobb illeszkedést az észlelésekre. Kiszámításának lépései az alábbiak:

1. Az elemgyakoriságok hibáinak mintavételezése:

de Castro et al. (2016) publikáltak hibatáblázatokat, melyek megadják, hogy a spektrumok feldolgozásánál használt modell-légkörök paramétereinek (pl. fémesség, hőmérséklet) változtatása során mennyit változnak a számolt elemgyakoriságok.

Ezen hibákra normáeloszlást feltételezve egy 10^5 lépésből álló Monte Carlo szimulációból mintavételezzük az elemgyakoriságok hibáit. A hibák összeadását az egymástól függetlennek tekintett fizikai paraméterek hibaterjedésével végeztük, ami így mindenképpen egy felső, de reális becslést szolgáltat.

Ezzel kapunk 10^5 különböző értéket az észleléseken alapuló elemgyakoriságokra (továbbiakban: random észlelések), melyben az elemgyakoriságok egymástól függetlenül kicsit megváltoztak a csillag fizikai paramétereinek mintavételezésével végzett hibaszámítás során. Így összességében egy olyan észlelési mintát nyertünk, mely feltehetőleg már tényleg megfelelően reprezentálja a valóságot hibahatárainkon belül.

2. A módosított χ^2 kiszámítása minden egyes random észlelésre:

$$\chi_m^2 = \sum_i \frac{(\text{Random-észlelt}_i - \text{Észlelt}_i)^2}{\text{Hiba}_i} \quad (5)$$

Itt Random-észlelt_i az i . elem hibával terjesztett mért elemgyakorisága, Észlelt_i az i . elem (hibával terjesztett) észlelések alapján számolt értéke, míg Hiba_i az i . elemgyakoriság hibája. A szokványos χ^2 próbában a nevezőben a mért értéket találnánk, azonban ezen módosított χ^2 segítségével a bizonytalanabb elemek kisebb súllyal számítanak bele az eredménybe. Emellett fontos szempont volt a módosítás végrehajtásánál, hogy elemgyakoriságok esetén a 0 érték nem azt jelenti, hogy a fizikai érték eltűnik, hanem azt, hogy annak mennyisége megegyezik a Napban találhatóval.

3. Valószínűségi eloszlás számítása a random észlelések alapján:

- A random észlelésekre kiszámolt χ_m^2 értékeket mint valószínűségi sűrűségfüggvényt kezeljük. Ez az eloszlás megadja, hogy a χ_m^2 mekkora valószínűséggel esik egy a és b pont közé – ezt az a és b pont közti integrálként számíthatjuk ki.
 - A sűrűségfüggvényből származtatható a χ_m^2 -re a $P(x)$ eloszlásfüggvénye mint a sűrűségfüggvény $-\infty$ és x közötti integrálja. Ez az eloszlásfüggvény azt adja meg, hogy mekkora valószínűséggel vesz fel a χ_m^2 az x -nél kisebb értéket.
 - Az eloszlásfüggvény komplementere ($\bar{F}(x)$) minden pontban 1 és az eloszlásfüggvény adott pontban vett értékének különbsége. Ez azt adja meg, hogy mekkora valószínűségnél nagyobb χ_m^2 az adott x értéknél.
4. Kiszámítjuk χ_m^2 -et a vizsgált AGB modellre is, ez $\chi_{m,model}^2$. Itt a random észlelések helyett a modellek elemgyakoriságaival számolunk az 5. képletben.
5. Az $\bar{F}(x)$ függvény értéke a $\chi_{m,model}^2$ pontban megadja azt, hogy a modell a random észlelések hány százalékánál rendelkezik jobb illeszkedéssel az észlelésekre. Tehát kaptunk egy mérőszámot arra, hogy az észlelések hibáin belül mennyire valószínű, hogy a mért észleléseket takarhatja a modellek elemgyakorisága. Ezt a százalékos arányt nevezzük a továbbiakban *GoF*-nek.

4.5. Legközelebbi módszer (closest method, *CM*)

A legközelebbi módszer a dolgozatom egyetlen, nem gépi tanuláson alapuló klasszifikátora. Ez az eljárás a 4.4. alfejezetben tárgyalt GoF értékeken alapul. Az eljárás lépesei:

- Minden egyes AGB modellt $\delta = [0, 0,9]$ tartományon elkeverünk, a 4.3. fejezetben tárgyaltak szerint.
- Az elkevert AGB modellekre kiszámítjuk a GoF-et. Az adott AGB modellhez azt a δ faktort rendeljük, amihez a legjobb GoF tartozik.
- A megfelelően kiválasztott δ -val rendelkező AGB modellek GoF-jét összevetjük, és kiválasztjuk azokat, amelyek ezek közül is a legmagasabb GoF-el rendelkeznek.
- Azon modelleket ítéltem megfelelőnek csillagonként, melyek GoF-e a legjobb modeltől legfeljebb 5%-ban térnek el.

Ez a módszer olyan modelleket választ ki, melyeket mi is „szemre jónak” látnánk, hiszen lényegében legkisebb távolságot keresi az észlelési pontoktól, így ez a klasszifikátor szolgált a többi referenciájaként. Sokkal érdekesebb lehet azonban, ha gépi tanulással próbálunk betanítani egy osztályozási algoritmust, valamint alá tudjuk támasztani a szemmel jónak érzékelt eredményeket is.

4.6. Random forest (*RF*)

A random forest eljárás napjaink egyik legnépszerűbb gépi tanulási módszere, ami jelen munka során is rendkívül jól működőnek bizonyult. Ez a módszer egyszerű elven működik, így egy kevésbé bonyolult modellt épít fel a tanítóhalmazra, aminek fizikai háttere értelmezhető – mégis egészen bonyolult feladatok megoldására képes.

4.6.1. A random forest mint gépi tanulási eljárás

A random forest módszer az egyik legegyszerűbb logikai struktúrát, a döntési fát használja fel. Egy döntési fa minden egyes lépésben bizonyos feltétel teljesülését vizsgálja meg. Ha a feltevés igaz, egy következő feltételt vizsgál meg, ha hamis, egy másik ágon halad tovább. Így egy közös feltételből „gyökerező”, ténylegesen faszerűen elágazó szerkezetet kapunk, melyek („levelekben”), diszkrét osztályokban végződnek (regressziós esetben, amikor nem diszkrét osztályokat, hanem folytonos változókat keresünk kimenet gyanánt, természetesen ez egy folytonos érték).

Miután ez a fa kiépült, minden egyes megvizsgálandó objektumot (pl. a csillagokat észlelt elemgyakoriságaik alapján) végig lehet követni, a csomópontokban a megfelelő irány felé fordulva, így egyértelműen hozzárendelhetünk egy osztályt (jelen esetben egy AGB modellt). Egy egyedülálló döntési fa ábrázolását és részleteit láthatjuk a 4., 5 és 6. ábrákon.

Azonban egyetlen ilyen döntési fa kiépítésekor még nem látunk bele a problémánk fizikai háttérbe, jóformán vakon tesszük fel a kritériumokat. Így egyetlen döntési fa szinte biztosan félrevezető eredményt adna.

Ennek kiküszöbölésére szolgál az, ha nagyon sok (több száz, akár ezer, munkámban 800) döntési fa eredményének összességét tekintjük (ezért hívják a módszert *random forest*-nek, ténylegesen döntési fák erdejeként gondolhatunk rá). Az eljárás azt az osztályt tekinti legvalószínűbbnek, amit a legtöbb döntési fa választ az adott egyedre.

A gépi tanulási eljárások esetén nem létezik a valószínűségnek abszolút és egyetemes mértéke, az mindig az adott modell felépítéséből származik.

Random forest modellek esetén az egyedek egyes osztályokhoz tartozó valószínűsége azzal egyezik meg, hogy az egyes döntési fák mekkora hányada vezetett erre az eredményre. A valószínűségek így 1-re összegződnek fel.



4. ábra. A RF klasszifikátorban található döntési fák egyikének ábrázolása (ezekből a modellem 800-at használ fel). Látszik, hogy rengeteg elágazást és csomópontot tartalmaz a rendszer, mélysége 15 szint. Az ábra két részletét mutatja be az 5. és 6. ábra, annak magyarázatát is ezeknél olvashatjuk.

4.6.2. A klasszifikátor lépései

A klasszifikátorhoz vezető lépések hasonlóak mindkét gépi tanulási módszer esetén, azok a betanuló algoritmus merőben más jellegét leszámítva csupán pár pontban térnek el. Ezek a lépések a RF esetén az alábbiak:

1. **Beolvasás:** A modellek és észlelések beolvasása.
2. **Hiányzó értékek:** Észlelések esetén az ismeretlen értékeket az átlaggal tölti fel az algoritmus. Hiányzó hibák esetén ± 1 -et tesz fel, ami a többi hibához képest mindenképpen felső becslés.
3. **Új tulajdonságok felvétele:** mivel a modellek által jósolt elemgyakoriság keveredik a Ba csillag anyagával, mindenképp kisebb lesz az észlelésből származtatott értéke a számoltnál. Így az abszolút elemgyakoriságok helyett sokkal beszédesebb a mintázatok alakjának felismerésében az elemgyakoriságok egymással képzett különbsége (továbbiakban: *elemarányok*), mely valójában a spektroszkópiai hányadosukat adja, például egy A-val és B-vel jelölt elemre:

$$\left[\frac{A}{Fe} \right] - \left[\frac{B}{Fe} \right] = \left[\frac{A}{B} \right] \quad (6)$$

4. **Normálás:** Az észlelések és modellek adattábláját a program elemtulajdonságonként (elemgyakoriságonként és elemarányonként, azaz oszloponként) normálja a modellek oszlopainak átlaga és szórása alapján – elemenként kivonja az oszlop átlagát, majd ezt a különbséget leosztja a szórással.
Fontos, hogy az észleléseket is ugyanazokkal a számokkal normáljuk, mint a modelleket, nem a saját oszlopaiból számolt statisztikai mutatókkal, különben eltérő eredményt kapunk az észlelésekre és a modellekre.
Ezeket a tulajdonságokat az eredeti elemgyakoriságok mellé helyezve új tulajdonságokat kapunk, melyeken a tanítás elvégezhető.
5. **Tanító – teszt halmaz:** A modelleket 80-20% arányban, véletlenszerűen felosztja a kód a tanítás és a modell jóságának jellemzésére használt teszt halmazra.
6. **A modell betanítása:** A *Python3 scikit-learn* csomagja által szolgáltatott RF modellek betanítása a modellek tanító halmazán.
7. **Finomhangolás:** A klasszifikációs problémák számos paraméterrel rendelkeznek. Ezek optimális értéke minden feladatra más, ezért az adott adathalmazon kell őket finomhangolni.
Ezt a *GridSearchCV* paranccsal végeztem, mely során a kód az egész modellhalmazt n db részre osztja, $n - 1$ egységen elvégzi a tanítást, majd az n . halmaz eredményei alapján értékeli a modell jóslatainak eredményességét. Ezt n -szer elvégezve kaphatunk egy átlagos képet arról, hogy a beállított paraméterekkel hogy teljesít a klasszifikátorunk az adathalmazon. Ezt a folyamatot a paraméterek széles hálóján elvégezve megtalálhatjuk a legjobban teljesítő paramétereket.
8. **Végső klasszifikáció:** A finomhangolt paraméterekkel rendelkező modell segítségével minden egyes csillag esetén hozzárendelhetünk minden AGB modellhez egy valószínűséget. Ez megadja azt, hogy az eljárás szerint milyen valószínű, hogy az adott AGB modell jellemzőivel bíró csillag szennyezte be a Ba csillagot.

9. **Modellek összesítése:** A végső klasszifikációt 5 különböző, véletlenszerű tanítóhalmazon betanított, így kissé eltérő modellel végeztem el. A végső halmazban azokat a AGB modelleket tartottam meg minden egyes csillagra, melyek az 5-ből legalább 3 modell esetén legalább 0,1 valószínűséggel rendelkeztek. A 0,1-es érték egy tetszőleges szám, ám ezzel az értékkel jellemzően 3–5 modellt talál az eljárás megfelelőnek, ami a többi klasszifikátorral konzisztens – ennél kevesebb túl kevés információt szolgáltat, több azonban már túlságosan széles eredményt adna, ami összemosná a csillagok vizsgálandó tulajdonságainak különbségeit, túl széles tartományt találnánk megfelelőnek.

4.6.3. A RF klasszifikátor paraméterei

A random forest modell számos hiperparaméterrel rendelkezik, melyeket az eljárás során finomhangoltam. A két model család nem tért el nagyban, és a random forest modell nem is túlzottan érzékeny ezen paraméterek pontos beállítására, így ugyanazon értékeket használtam mind a FRUITY, mind a Monash modellek esetén. Ezek az alábbiak:

- **n_estimators = 800:** A felhasznált döntési fák száma. Minél nagyobb ez az érték, annál pontosabb eredményt kapunk, azonban hajlamosabb is a modell a túlillesztésre, azaz a tanítóhalmaz specifikus tulajdonságainak betanulására.
- **max_depth = 15:** Az egyes döntési fák maximális mélysége. Az *n_estimators* paraméterhez hasonlóan növelésével nő a modell komplexitása, ami egy pontig növeli a pontosságot, ám azon túl túlillesztéshez vezet.
- **min_samples_split = 2:** A minták minimális száma, amely esetén még létrehozhat egy elágazást a fa. Ennek növelése esetén kevesebb elágazás lesz a fában, ami segítheti a túlillesztés elkerülését, azonban túl magas érték esetén alulilleszti a rendszert.
- **min_samples_leaf = 2:** A minták minimális száma, amely szükséges ahhoz, hogy létrehozhasson a fa egy levelet (végpontot). Értéke hasonlóan befolyásolja a rendszert, mint a *min_samples_split* paraméter.
- **max_features = 'auto':** A csomópontban az elágazáshoz felhasznált tulajdonságok maximális számát adja meg. Ha értéke nagy, a csomópontok kevésbé lesznek változatosak, ami okozhat túlillesztést. Azonban az 'auto' eset, ami nem szab meg felső korlátot, jól működött a klasszifikátoromban.
- **bootstrap = True:** Ha értéke True, fák építésekor a mintából *visszahelyezéssel* véletlen mintát vesz.
- **max_samples = None:** Ha ez a paraméter None, akkor a tanítóhalmaz méretével megegyező számú mintát választ minden egyes fa a betanuláshoz. Mivel *bootstrap* = True, ebben a halmazban azonban vannak ismétlődések és kihagyott elemek is.
- A többi paraméter az alapértelmezett állapotban maradt (a fent felsoroltak között is van, amihez az alapértelmezett értéket választottam végül, ám ezekre mind finomhangolás során jutottam). A többi paramétert csak ritkán szokás állítani a random forest modellek tanítása során.

A RF eljárásom mind a FRUITY és Monash modellek esetére 99,9%-nál magasabb pontosságot nyújtott a teszt halmazon. Érdekes azonban megjegyezni, hogy a modell mesterséges AGB modellek eredményein tanult, és a pontosságot további mesterséges AGB modelleken tudtam tesztelni, így ez nem pontos mérőszám arra, hogy később az észlelések beazonosításakor milyen jól fog teljesíteni a modell. Mégis minél pontosabb az AGB modelleken, annál jobb eredményt várhatunk az észlelések felismerésekor is. A tanítási idő jellemzően 1-2 perc, a 169 csillag klasszifikálása szintén ennyi, tehát egyáltalán nem költséges időben az eljárás.

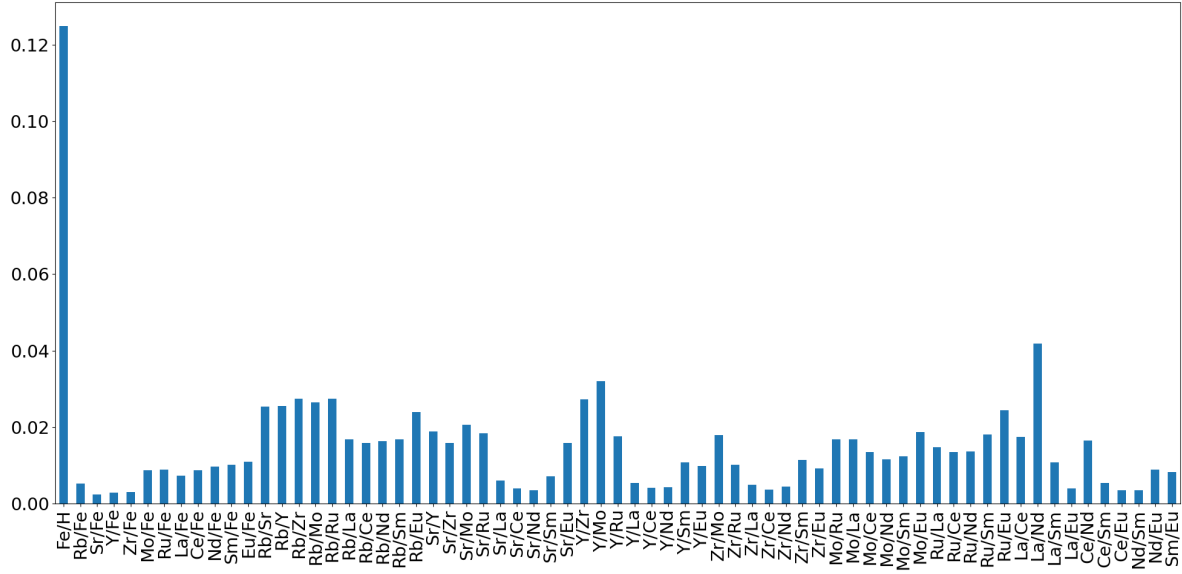
(Megj.: Munkám során a három klasszifikátor közül ezt az egyet fejlesztettem én, a CM és NN modelleket kollégáimnak köszönhetem. Ezen felül az eljárások összehasonlítását és az eredmények elemzését is én végeztem.)

4.6.4. Az elemtulajdonságok fontossága

A RF módszerrel könnyedén betekintést nyerhetünk abba, hogy a különböző tulajdonságokat milyen súllyal vette figyelembe a modell. Minden egyes, a tanítás során felhasznált tulajdonsághoz azt a számot rendeli súlyként, ami megadja, hogy a döntési fák elágazásainak hányadrészában használt fel az adott tulajdonságra kirótt kritériumot a döntés során. Ez azért szemléletes, mert a klasszifikátor betanítása során a tulajdonságok fizikai jelentéséről semmilyen információt nem adunk a modellnek. Mégis azt találtam, hogy a klasszifikátor automatikusan különböző súllyal vesz figyelembe más fizikai háttérű paramétereket. Ez megerősíthet minket abban, hogy a modell valós fizikai összefüggések alapján tanul be, még ha ezek túl bonyolultak is, és nem látunk bele a pontos mechanizmusukba.

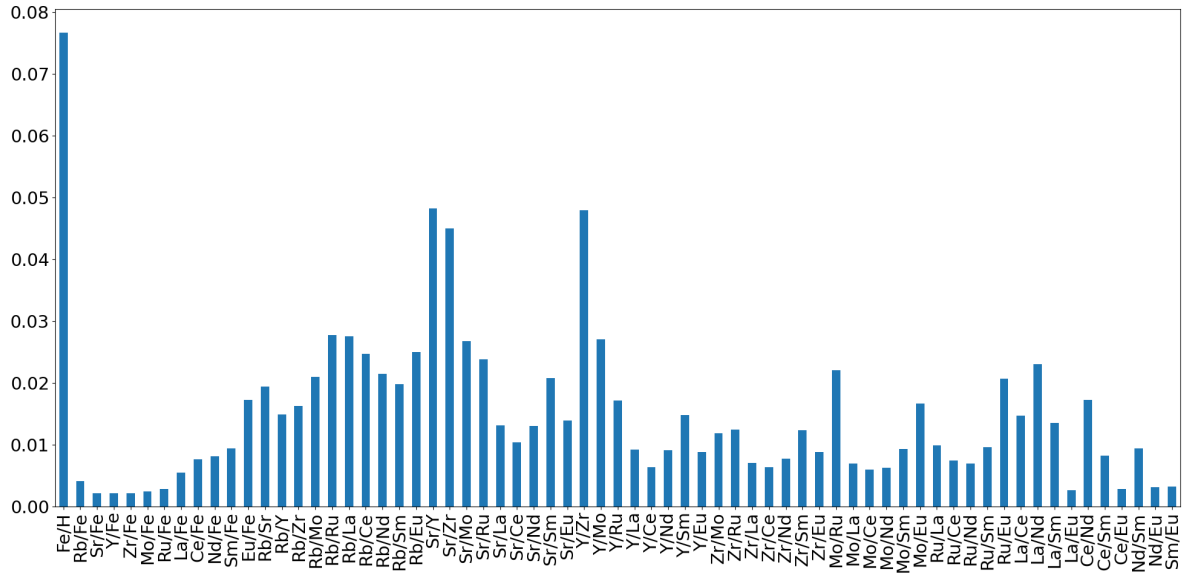
A Monash modellek súlyait a 7. ábrán láthatjuk, ebben szembevető a különböző csoportok eltérő súlya.

- A fémesség messze a legfontosabb tulajdonság. Ez a modell egyik fő paramétere (a másikat, a tömeget nem ismerjük a Ba csillagokra, így nem is használjuk fel a betanításhoz), és nagyban befolyásolja a csúcsok mintázatát. Már az eddigi munkámban is tapasztaltam, hogy ez messze a legfontosabb tulajdonság, a klasszifikátor ezt magától is felfedezte.
- Ezt követik az egyes elemgyakoriságok, melyek viszonylag kis súllyal jelennek meg. Ez nem meglepő, hiszen az AGB-anyag keveredése után már más mennyiségben fog megjelenni a Ba csillagon az anyag, mint azt a modellek jósolják. A nehezebb 1. csúcs környéki (Mo, Ru), valamint a 2. csúcsbeli elemek több mint kétszer akkora súllyal szerepelnek, mint a könnyű 1. csúcsbeli elemek.
- Ezután szembeötlő, hogy a legkönnyebb s-elem, a Rb az első csúcs elemeivel hasonlóan magas, majd a második csúcs elemeivel kissé alacsonyabb fontosságot képvisel.
- A következő elem, a Sr esetén ugyanezt figyelhetjük meg, észrevehetően lecsökken a fontosság, ha a második csúcs elemeivel képezzük az arányát.
- A nehezebb elemek estén nem mindig vehető ki ez a trend, de a továbbiakban is számos alkalommal látszódik ugrás, amikor új elem, vagy új csúcs következik az elemarányokban.
- A [La/Nd] arány kiugró értékének kiemelt fizikai háttéréről nem tudunk, bár érdemes megjegyezni, hogy ezen két elemre érte el később az egyik legjobb pontosságot a klasszifikátor.



7. ábra. A Monash modelleken tanított RF klasszifikátor súlyai minden egyes felhasznált tulajdonságra.

A FRUITY esetén betanult súlyokat a 8. ábrán láthatjuk. Itt nem figyelhetünk meg olyan éles határvonalakat, mint a Monash esetén. Azonban szintén messze kiugrik a fémesség, valamint az egyedi elemgyakoriságok képviselik a legkisebb súlyt. Ezen túl általános mintázatot nem tudtam beazonosítani az ábrán.



8. ábra. A FRUITY modelleken tanított RF klasszifikátor súlyai minden egyes felhasznált tulajdonságra.

4.7. Neurális háló (NN)

4.7.1. A neurális háló, mint gépi tanulási eljárás

A neurális hálók rendkívüli népszerűsége a mesterséges intelligencia terjedésével manapság nem meglepő – azonban ezek nem csupán képek felismerésére, hanem akár fizikai összefüggések betanítására is alkalmasak. Felépítésük réteges, egy bemeneti (*input*), egy kimeneti (*output*), és ezek között a modelltől függő mennyiségű rejtett (*hidden*) réteg alkotja. Az ezekben található csomópontok idegsejtekhez hasonlóan aktiválódnak (ezért a biológiával analóg módon *neuronoknak* hívjuk azokat).

A Ba csillagokra alkalmazott klasszifikációs eljárásunk két (Monash és FRUITY modellekre eltérő), kissé különböző felépítésű, szekvenciális neurális hálót használ. A két háló részletes felépítésének leírását a 4.7.3. alfejezet tartalmazza.

A neurális háló (NN) klasszifikálás lépései nagyrészt megegyeznek a random forestével, mint azt a 4.6.2. alfejezetben tárgyaltam. Azonban a 9. pontban más a kiválasztási kritérium. Szintén 5 különböző, véletlenszerű halmazon végeztem el a klasszifikációt, azonban a RF-el szemben azon modelleket tartottam megfelelőnek, amik legalább 3 modellben 0,001 valószínűséget érnek el. Ez azért különbözik két nagyságrenddel a RF-ben használt 0,1-es értéktől, mert a NN más elven számolja a valószínűséget, ami sokkal szigorúbb, mint a RF-é, mint azt a következő fejezetben külön tárgyalom.

4.7.2. A használt neurális hálók általános felépítése

A szekvenciális hálóban a neuronok egymással teljes összeköttetésben állnak (*deep connection*), így a következő réteg neuronjainak bemeneteként az összes előző rétegbeli neuron kimenete szolgál.

A modell több ciklus (*epoch*) során tanul be, melyek között a gradiens ereszkedés módszerével próbálja finomhangolni az egyes neuronok súlyait.

A két neurális háló *sűrű (dense) rétegekből* épül fel. Minden egyes rétegben találhatóak neuronok, ezek egymásra vonatkoztatott súlya a tanítás során egy súlymátrixot hoz létre, amelyet a bemeneti értékeket tartalmazó vektor szoroz. A sűrű rétegek kimenetét az alábbi függvény adja meg:

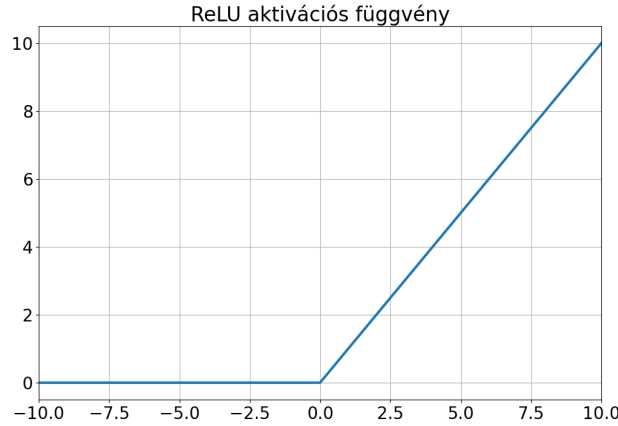
$$output = f_{activation}[\text{dot}(input, kernel) + bias] \quad (7)$$

Itt az *output* a réteg kimeneti vektora, *input* a bemenetként kapott értékek vektora, a *kernel* a neuronok súlymátrixa, a *bias* pedig egy tanulható eltolásvektor. A réteg egy nagyon fontos paramétere az *f_{activation}* függvény, ami az *aktivációs függvényt* takarja. Ha nem használnánk ezt a függvényt, lineáris összefüggést írna le a réteg, ami limitálná annak használhatóságát, hiszen ez a legegyszerűbb összefüggés, és a legtöbb vizsgált rendszer ennél bonyolultabb. Az aktivációs függvényeknek számos típusa ismert, jelen neurális háló a *ReLU* és a *Softmax* függvényeket használja fel.

A felhasznált rétegek aktivációs függvénye a *ReLU (Rectified Linear Unit) függvény* (a kimeneti réteget leszámítva). Ez a függvény a negatív *x* értékekhez 0-t, a nemnegatívakhoz önmagát rendeli, tehát alakja:

$$ReLU(z_i) = \max(0, z_i), \quad (8)$$

ahol *z_i* az előző rétegből kapott bemeneti érték az *i.* neuronon. A függvény ábrázolását mutatja be a 9. ábra.

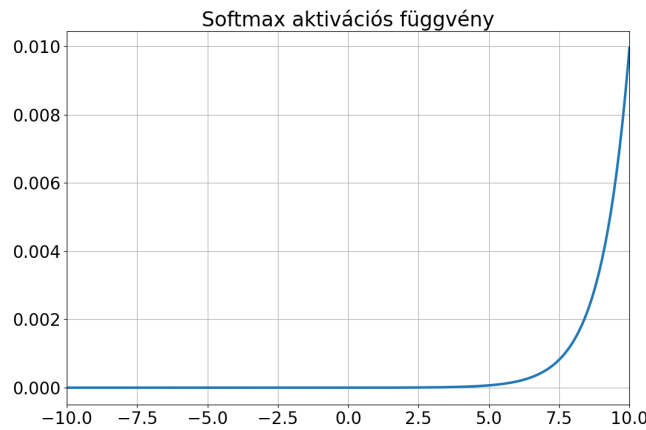


9. ábra. A ReLU aktivációs függvény értéke a $(-10,10)$ tartományon.

A kimeneti réteg a *Softmax aktivációs függvényt* használja, ami a legnépszerűbb választás a többféle osztályba sorolást célzó klasszifikációs problémáknál (multi-label classification). Ezen függvény alakja exponenciális, és az összes többi értékre normalizált, így az N darab bemeneti értékre alkalmazva a függvényt, azok értékének (a valószínűségek) összege 1-et ad. A függvény alakja:

$$\text{Softmax}(z_i) = \frac{\exp z_i}{\sum_j^N \exp z_j} \quad (9)$$

A függvény ábrázolását mutatja be a 10. ábra.



10. ábra. A softmax aktivációs függvény értéke a $(-10,10)$ tartományon.

Mivel a kimeneti réteg *Softmax* aktivációs függvénnyel rendelkezik, ez adja meg minden egyes osztályhoz annak a valószínűségét. Mint láthatjuk a 10. ábrán is, ez a függvény kevés osztályt illet nagy valószínűségértékkel – éppen ezért a RF-hez képest akár nagyságrendekkel kisebb valószínűség esetén is már megfelelőnek számít a modell. Sajnos a kétféle módszer valószínűségei között nincs abszolút megfeleltetés, így a RF és NN által megfelelőnek ítélt osztályok valószínűségének alsó határa egy egymástól független, tetszőleges paraméter, amit jelen munkában a RF esetén 0,1,-nek míg a NN esetén 0,001-nek határoztam meg.

Találhatunk még a rejtett rétegek között *kidobási (dropout) rétegeket* is, amelyek a túlillesztést (overfitting) hivatottak megelőzni. Ezen rétegekben véletlenszerűen a bemenet p hányadát (p : *dropout rate*, jelen munkában $p = 0,3$) 0-ra állítja az algoritmus a betanítás során, ezzel az azokhoz tartozó neuronokat kiiktatja a modellből. Ezeket a kiválasztott neuronokat minden egyes tanítási ciklusban újra véletlenszerűen mintavételezi az eljárás. Ennek segítségével kevésbé tanul rá a modell a tanítóhalmaz specifikus tulajdonságaira, amik biztosan nem fedik le az egész halmaz jellegét, így általánosabb modellt kapunk.

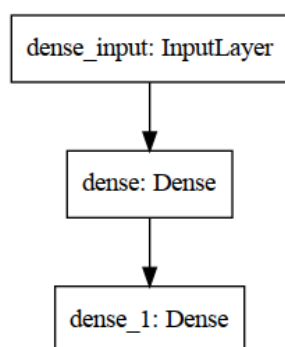
A neurális hálók pontos felépítésére nem létezik jól bevált szabály, azokat kísérletezve lehet a számunkra legmegfelelőbbre alakítani.

A hiperparamétereket tudjuk azonban finomhangolni, mint pl. az epochák számát, a tanulási rátát vagy a kidobási rátát. Több epochán keresztül futtatva a kódot és a pontosságot az epochák függvényében ábrázolva egy olyan függvényt fogunk találni, amelynek van egy minimuma. Ugyanis a kezdetben véletlenszerűen kiosztott neuron-súlyok nyilván nem vezetnek a legjobb eredményre, de pár epochán belül az iteráció segít bekonvergálni az optimális értékekre. Azonban ha túl sokszor próbálunk iterálni, a háló túlzottan rátanul a tanító halmaz specifikus tulajdonságaira, és ezzel elveszítjük az általánosságot, a teszt halmazon ismét rosszabbul fog teljesíteni a háló.

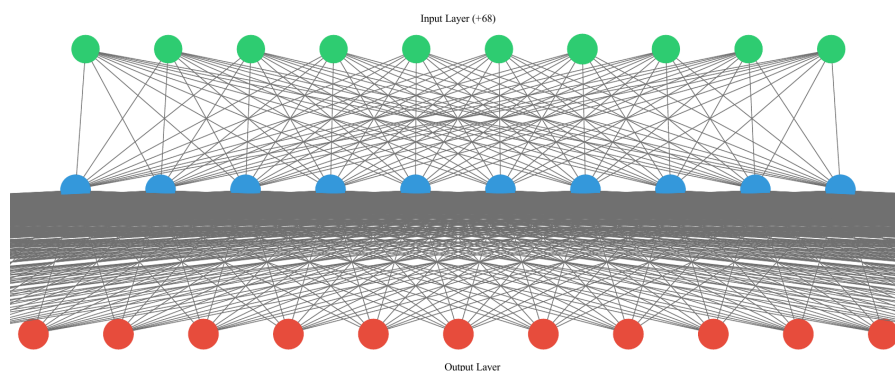
A két modellcsaládra felépített neurális hálók pontos szerkezetét és paramétereit ismertetem a következő fejezetben.

4.7.3. A használt neurális hálók részletes szerkezete

A FRUITY és Monash modellekre felépített neurális hálók részletes szerkezetét láthatjuk az alábbiakban. A két ábrapárosból a bal oldali ábra mutatja a rétegek sematikus szerkezetét. A jobb oldali ábrán az ennek megfelelő, a neuronokat és összeköttetéseiket bemutató ábrát látunk, melynek rétegei a sematikus ábrával egy magasságban találhatók. Az összeköttetéseket mutató ábrákon nem láthatunk minden egyes neuront, hiszen azok túlságosan átláthatatlan szerkezetet generálnának, azonban a leírásban részletezem azok méreteit.



11. ábra. A neurális háló felépítése FRUITY modellekre.

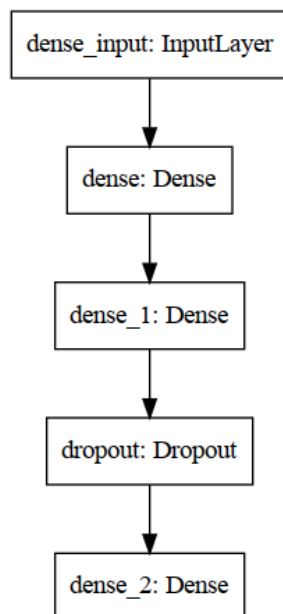


12. ábra. A neurális háló neuronjai közötti kapcsolat FRUITY modellekre.

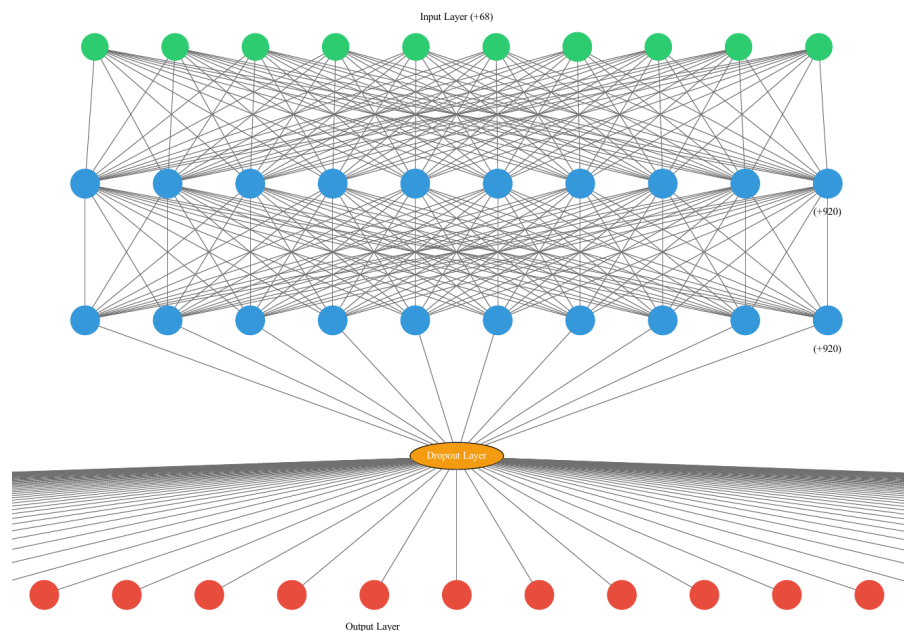
A FRUITY modellcsaládra épített neurális háló 3 rétegből áll, melyben egy bemeneti, egy rejtett és egy kimeneti réteg található.

1. Bemeneti réteg (aktiváció: ReLU; kimeneti méret: 78) – a neuronok száma a vizsgált elemgyakoriságok- és elemarányok (elemtulajdonságok) számának felel meg.
2. Rejtett réteg: (aktiváció: ReLU; méret: 78 $\rightarrow$ 8300) – kezdő nagysága a vizsgált elemtulajdonságok mennyiségének felel meg, kimenete a FRUITY modellek (83 db) számának százszorosa.
3. Kimeneti réteg: (aktiváció: Softmax; méret: 8300 $\rightarrow$ 83) a FRUITY modellek százszorosából generál 83 kimenetet, ami a különböző AGB modellek valószínűségének felel meg minden adott csillagra.

A FRUITY-ra kifejlesztett háló 4 epochán (iteráción) keresztül tanul és állítja be neuronjainak súlyait, tanulási rátája (learning rate) 0,001. A háló 1.344.683 paraméterrel rendelkezik, melyek mindegyike tanítható. Ilyen sok paraméter együttes fizikai értelmét lehetetlen megérteni, ez a neurális hálók egyik hátránya – jól működik a program, de általában pontosan nem tudjuk megmagyarázni, hogy milyen összefüggést követ.



13. ábra. A neurális háló sematikus felépítése Monash modellekre.



14. ábra. A neurális háló neuronjai közötti kapcsolat Monash modellekre.

A Monash model családra épített neurális háló 5 rétegből áll, melyben egy bemeneti, két rejtett, egy kidobási és egy kimeneti réteg található.

1. Bemeneti réteg: (aktiváció: ReLU; kimeneti méret: 78) – a neuronok száma a vizsgált elemtulajdonságok számának felel meg.
2. Rejtett réteg: (aktiváció: ReLU; méret: 78 $\rightarrow$ 930): köztes rejtett réteg, kezdő nagysága a vizsgált elemtulajdonságok mennyiségének felel meg, kimenete a Monash modellek (93 db) számának tízszerese.

3. Rejtett réteg: (aktiváció: ReLU; méret: $930 \rightarrow 930$) – az előzőhöz hasonló szerkezetű réteg, ám bemenete 930 nagyságú, és más súlyokkal rendelkezik.
4. Kidobási réteg: (méret: $930 \rightarrow 930$) – a bemeneti adatok (ezáltal a neuronok) 30%-át kiiktató (nullává tevő) réteg, ami minden epochában véletlenszerűen dobja ki ezeket a neuronokat. Célja a túlillesztés elkerülése.
5. Kimeneti réteg: (aktiváció: Softmax; méret: $930 \rightarrow 93$) a Monash modellek valószínűségét tartalmazza az adott csillagra.

A Monashra kifejlesztett háló 3 epochán (iteráción) keresztül tanul és állítja be neuronjainak súlyait, tanulási rátája (learning rate) 0,0015. A háló a FRUITY-nál kissé kevesebb, 1.025.883 paraméterrel rendelkezik, melyek mindegyike tanítható. A tanítás ideje nagyjából 5 perc, ezután a klasszifikáció a csillagokra 1-2 perc alatt lefut.

Mint látható, a FRUITY és Monash modellekre nem csupán a háló felépítése, de ezen hiperparaméterei is kissé eltérnek. A két modelles család a háló számára nagymértékben érzékenyen más jelleggel bír, így külön kellett őket betanítani és finomhangolni. Az látható, hogy mivel a Monashra kifejlesztett háló bonyolultabb, kevesebb epocha is szükséges a betanítására, különben túlillesztés történne.

A Monash modellek esetén 96%, a FRUITY modellek esetén 98% felettinek bizonyult az előrejelzés pontossága. Ez azonban nem feltétlenül megfelelő mérőszám az észlelések előrejelzésének pontosságára, mint azt a RF modell esetén is tárgyaltam.

4.8. További klasszifikátorok

A munkám során több, más elven működő klasszifikátor használata is felmerült, azonban ezek nem bizonyultak hatékonyak. Az általam fejlesztett RF klasszifikátor mellé könnyen beilleszthető lett volna a *gradient boosting* (GB) módszere is. Azonban a klasszikus GB nem képes párhuzamosan futni a számítógép CPU-jának magjain, jellemzően legalább fél órán keresztül tanult az AGB modelleken. Eredményei hasonlítottak a RF módszerrel kapottakhoz, azonban a finomhangolást ez a hosszú futási idő ellehetetlenítette.

Próbálkoztam a gradient boosting továbbfejlesztett változatával, az extreme gradient boosting (XGB) módszerrel is. Ez jóval gyorsabb futású, hiszen képes párhuzamosításra. Viszont fizikailag teljesen értelmetlen, önmagukkal sem konzisztens eredményekre vezetett. Sajnos sok munka árán sem találtam meg, hogy mi lehet ezen eltérés oka.

4.9. Bizonytalanságok

Az eljárás összességében megfelelően működőnek bizonyul, azonban mindenképp fenn tartásokkal kell kezelni a számos, különböző forrásból eredő bizonytalansága miatt. Az alábbi felsorolással próbálom felkarolni a legjelentősebb hibaforrásokat, azonban a lista valószínűleg nem teljes.

Az észlelések alapján számolt elemgyakoriságokat terhelő hibák:

- A legtöbb esetben csupán egydimenziós modell-léggöröket használnak a spektrumok elemzésekor, ami sokkal kevésbé számításigényes a háromdimenziósnál, ám a valóságtól távolabb is áll.

- A modell-légkörök esetén a lokális termodinamikai egyensúly (Local Thermodynamic Equilibrium, LTE) feltételezése egyszerűsítés, ugyanis néhány elem abszorpciós vonalainak kialakulásáért nem csupán a vonal keletkezésének közvetlen környezetében uralkodó viszonyok felelősek, hanem a távolabbiak is kihatnak rá. Az ezt javítandó NLTE (non-LTE) korrekció növelheti és csökkentheti is a mért elemgyakoriságot. A korrekció mértéke elemenként, valamint a fémesség függvényében is változik.
- Néhány elem esetén a spektrum alapján annak túlbecslése történhet. Ezt okozhatja a hiperfinom struktúra figyelmen kívül hagyása, vagy alacsonyabb felbontású spektrumok esetén több különböző elem vonalának egymásba csúszása. Ez történt a La esetében is, amire Roriz et al. (2021b) pontosította az értékeket, újabb atomfizikai paramétereket felhasználva az elemgyakoriság meghatározásához és figyelembe véve a hiperfinom felhasadást is.

Az AGB modelleket terhelő bizonytalanságok:

- A nukleáris folyamatokban résztvevő elemek neutronbefogásra mutatott hatáskezesztmetszete nagy bizonytalanságokkal terhelt. Ugyanis a csillagok belsejében uralkodó hőmérsékletekhez tartozó energiákat a földi laboratóriumokban nem tudjuk elérni, az csak extrapolációval közelíthető. Ezeket a hatáskezesztmetszeteket többek között a LUNA (Laboratory for Underground Nuclear Astrophysics) laboratórium-ban mérik, pl. a Ce és a ^{13}C (α, n) ^{16}O reakció esetében is egyre pontosabban, de még mindig nagy a bizonytalanság a legtöbb elem esetén.
- A ^{13}C pocketet a mai napig nem tudják a modellek természetesen kialakítani, ennek kialakítási mechanizmusa eltér, mérete egy szabad paraméter.
- Egyes fizikai (főképp nukleáris) folyamatok hiányozhatnak a modellekből, vagy azok fizikai leírása (pl. a konvekció feltételére) pontatlan lehet.

A tömegátadás pontos folyamata is ismeretlen. Az ebből eredő bizonytalanságok:

- A tömegátadás kezdetének időpontja és időtartama ismeretlen. Mivel a csillagszél erőssége és a sugár is egyre inkább nő az AGB csillag fejlődése során, a végső fázisokban a legvalószínűbb az akkréció létrejötte. A számolásokban végig feltettem, hogy a Ba csillag csak az AGB csillag az utolsó TDU utáni anyagát örökölte. Azonban ha az akkréció már az utolsó TDU előtt elkezdődött, ez egyértelműen hibát hoz a modellezésbe. Az utolsó néhány TDU-ra számolt elemgyakoriságok azonban már nem változnak jelentősen.
- A számolások során végig homogén keveredést tettünk fel, amitől a valóságban lehetnek eltérések.

A klasszifikátorra jellemző bizonytalanságok:

- A GoF használatával próbáltam kiküszöbölni a rosszul illeszkedő modellek figyelembevételét, de a módszer néhány nagyon hasonló modellt egyformán illeszkedőnek tekinthet, így bizonyos esetekben ez okozhatja a meghatározott paraméterek bizonytalanságát.
- Ellenben a módszer előnye, hogy három, független klasszifikátort alkalmaz, melyek egybecsengő eredményei megnyugtatóak az adatok helyes értelmezését illetően.

5. Eredmények

Eljárásom automatizáltan használja fel a háromféle klasszifikátort az AGB modellek beazonosítására a Ba csillagok észleléseiben. Ennek segítségével egyszerre nyerhetünk betekintést az egyedi csillagok és a teljes, 169 egyedet számláló csillagpopuláció jellemzőibe.

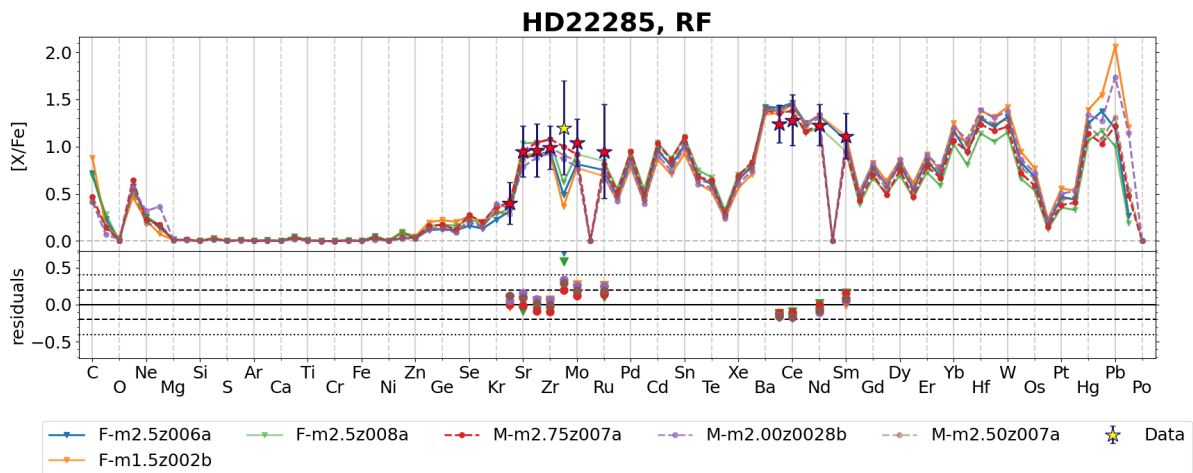
Az összes csillag mint statisztikai populáció jellemzőit azért fontos vizsgálnunk, mert ezzel a vizsgált asztrofizikai folyamatok általános működését, eddigi modelleink hiányait tárhatjuk fel. Ugyanakkor elengedhetetlen az egyedi csillagok elemenkénti vizsgálata is, hiszen a statisztikai nézőpont gyakran kisimítja a különleges, ám mégis sokatmondó eseteket is.

Az alábbiakban bemutatom az automatizáltan létrehozott ábratípusaimat, valamint azok értelmezését is.

5.1. Elemgyakoriság ábrák

A klasszifikáció után minden egyes csillagra, akár minden egyes klasszifikátor (CM, RF vagy NN) esetén külön elvégezhető a mért elemgyakoriságok és a klasszifikátorok által legvalószínűbbnek talált modellek közös ábrán való feltüntetése.

Az AGB modellek elemgyakoriságait természetesen akkor van értelme egy ábrán feltüntetni az észlelésekkel, ha azokat már a megfelelő δ faktorról elkevertük a Ba csillag kezdeti anyagával. Ennek egy példája a 15. ábrán látható.



15. ábra. A HD22285 csillag mért és a RF klasszifikátor által megfelelőnek ítélt modellek elemgyakoriságai.

Az ábra felépítése az alábbi:

- A vízszintes tengely mindkét táblára azonos, azon az egyes elemeket láthatjuk, növekvő rendszám szerint rendezve.
- **A felső tábla:** Az egyedi, hibával együtt feltüntetett, csillag alakú pontok a spektroszkópiai úton meghatározott Ba csillag-elemgyakoriságokat ábrázolják. Piros színnel jelöltem azon elemeket, melyeket felhasználtam a klasszifikáció során.

A folytonos, különböző színű vonalak az AGB modellek által jósolt elemgyakoriságokat ábrázolják. Ezeket a pontokat a 4.2. fejezetben taglaltak szerint kevertem a Ba csillag anyagával. A δ keveredési faktor az adott modell legnagyobb GoF értéket mutató, tehát a legjobb illeszkedést elérő állapotához szükséges keveredés mértéke.

- **Az alsó tábla (residual plot):** Itt az adott elemre láthatjuk a mért és a modellek alapján számított elemgyakoriságok különbségét. A jelölők megegyeznek az adott modell jelölőjével. Így közvetlenül összehasonlíthatjuk a modellek eltérését az észlelési pontoktól.

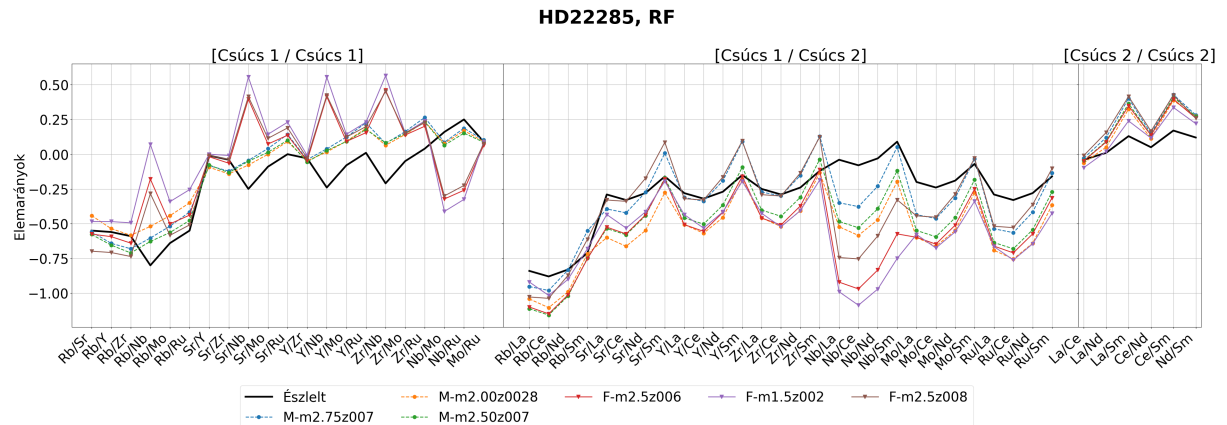
Szaggatott vonal jelöli a $\pm 0,2$ dex és $\pm 0,4$ dex értékeket, így egyértelműen látszódik, hogy mely pontok esnek ezen (tájékoztató jellegű) határokon kívül.

- **Címkék:** F vagy M: FRUITY vagy Monash modellek;
m...: az m-et követő szám a modell tömege;
z...: a z-t követő szám a modell fémessége;
a/b/c: a ^{13}C pocket méretét jellemző tulajdonság.

5.2. Elemarányok ábrája

Mint azt a RF és a NN klasszifikátorok felépítésénél (ld. 4.6.2. alfejezet) láttuk, azok nem csupán az $[X/\text{Fe}]$ típusú egyedi elemgyakoriságokat használják fel a betanulás során, hanem a modell alakját jobban jellemző $[A/B]$ típusú, (6) egyenlet alapján számolható *elemarányokat* is. Ezt is ábrázolhatóvá tettem minden egyes csillagra, tetszőleges klasszifikátorok esetén (ám az átláthatóság kedvéért egyszerre csak egyféle klasszifikátor jóslatait ábrázoltam).

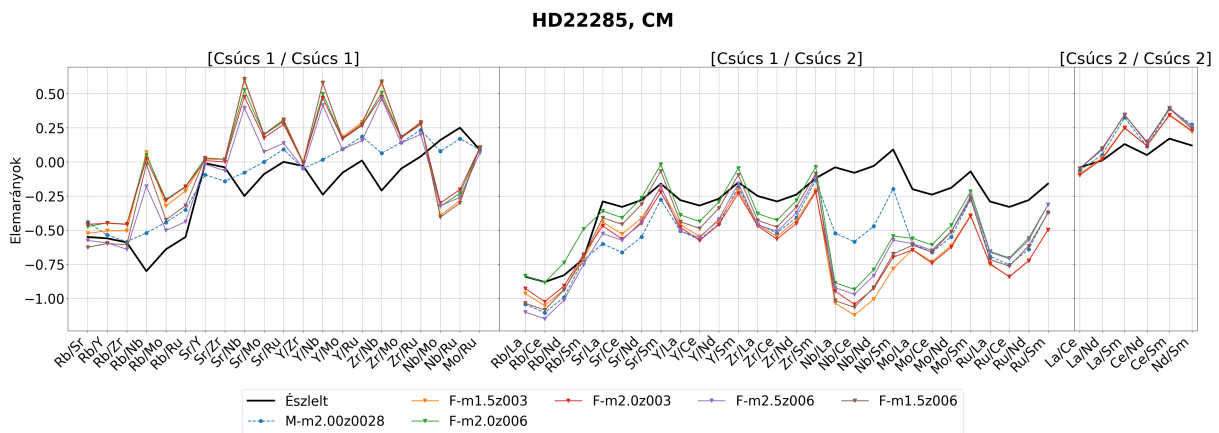
Hibákat nem tudtam elhelyezni az ábrákon, még a mért értékek esetén sem. Ugyanis az elemarány képzéséhez használt két különböző elemgyakoriság hibájának összege egy erős túlbecslést szolgáltatna, mivel a különböző elemgyakoriságértékek egymástól nem független változók. A hibaszámítás pontos folyamatát Cseh et al. (2018) írják le, azonban az ehhez szükséges adatokkal az újonnan publikált elemgyakoriságokra nem rendelkezünk.



16. ábra. Az elemarányok ábrázolása a HD22285 csillagra (ugyanaz a csillag, mint a 15. ábrán), RF klasszifikátorral. Látszódik, hogy FRUITY modellek esetén a Nb-ot használó elemarányok nagyban kiugranak, ennek okát később, az 5.3.1. alfejezetben bemutatom.

A 16. ábrán láthatjuk egy csillag elemarány-ábráját, a RF klasszifikátorral beazonosított AGB modellekre. Az illeszkedés, mint látható, pár tized dexen belül megegyezik. Ami még fontosabb azonban, hogy az elemarányok egymáshoz képesti trendje ugyanolyan az észlelésekre és a modellekre. Fontos azonban megjegyezni, hogy ez a kiemelt példa a legtöbb csillagnál pontosabb illeszkedést mutatott.

Külön érdemes lehet azt is megvizsgálni, hogy a CM klasszifikátor által megfelelőnek ítélt elemek illeszkedése mennyire pontos az elemarányokra, hiszen ez az eljárás csupán az egyedi elemgyakoróságokat használta fel a betanulás során, az elemarányokat nem. A 16. ábrán, az RF esetén bemutatott csillag, CM által beazonosított elemarányait láthatjuk a 17. ábrán. A vonalak trendje nagyon hasonlít az RF modelljeire, tehát a CM az elemarányok betanítása nélkül hasonló tulajdonságú modelleket talált, mint a RF. Természetesen ezt egy csillagot vizsgálva nem állapíthatnánk meg, de az elemarányok eltéréseinek statisztikáját vizsgálva is erre a következtetésre juthatunk.



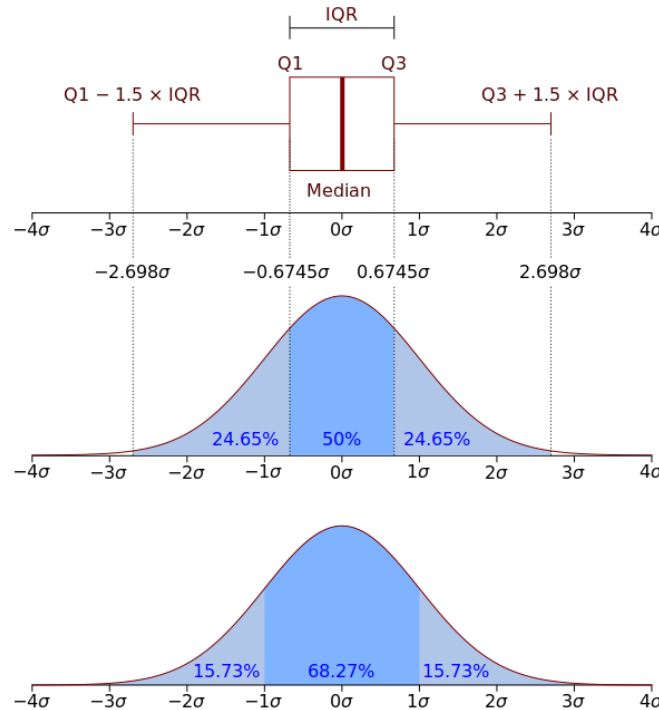
17. ábra. Az elemarányok ábrázolása a HD 22285 csillagra, CM klasszifikátorral

5.3. Az elemarányok maradékának statisztikai ábrája

Összességében, az elemarányok ábráit vizsgálva azt láthatjuk, hogy azok nem mutatnak olyan pontos illeszkedést, mint maguk az egyedi elemgyakoróságok, az eltérés szemmel vizsgálva is látványos. Általánosságában nem sokkal (legfeljebb pár tizeddel, jellemzően 0,2 dex-el), de a legtöbb csillag esetén eltér a modell által jósolt arány az észlelttől. Felmerül így az igény, hogy ezen eltéréseket vizsgáljuk meg az egész populációra – erre a feladatra készítettem minden egyes klasszifikátorra (Monash és FRUITY esetén külön) egy-egy boxplotot, azaz dobozábrát.

A *boxplot* egy olyan ábrázolási mód, amelynek segítségével különböző tulajdonságok egyedi statisztikai eloszlását vizsgálhatjuk egyszerre. A minden egyes tulajdonságra felvett doboz közepe az adatok mediánjánál található, a doboz szélei az elsőől a harmadik kvartilisig tartanak, ezt hívjuk interkvartilis régióknak. Az interkvartilis régió így az adatpontok felét öleli fel, hiszen az első kvartilis alsó határa a minimum és a medián közötti adatpontok számának felénél kezdődik, míg a harmadik kvartilis felső határa a medián és a maximum közti adatpontok felénél található. A dobozból kiinduló jelölők hossza a dobozon túl az interkvartilis régió nagyságának másfélszerese. Azon pontok helyzetét, amik

ezen is kívül esnek, kis körvonallal jelölhetjük, ezeket hívjuk kívülállóknak (outliers). (Néhány tulajdonság esetén ezek a kívülállók nagyon szorosan helyezkednek el, átfednek, ezért teli körnek tűnhetnek az ábráimon.) A boxplot egy dobozát és annak a valószínűségi eloszlással való kapcsolatát mutatja be a 19. ábra.

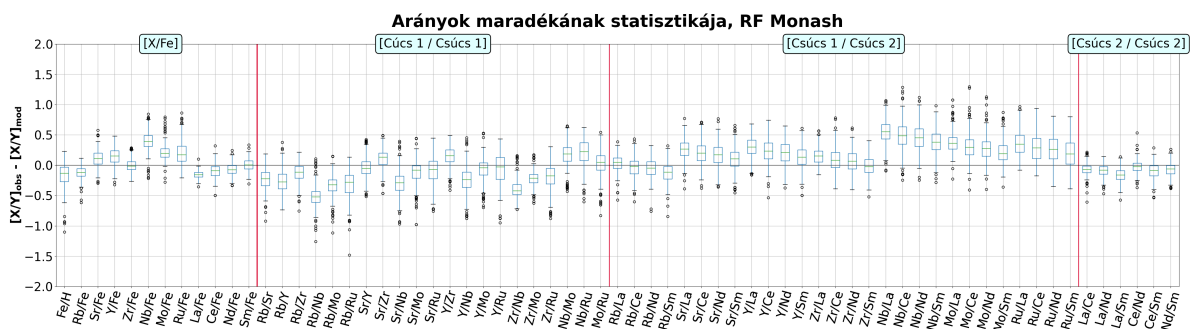


18. ábra. A boxplot egy dobozának magyarázatát láthatjuk felül. Itt egy adott tulajdonság értékének statisztikai eloszlását figyelhetjük meg. A Q1 és Q3 az első és harmadik kvartilis széleit jelölik, az IQR az interkvartilis régiót takarja. A doboznak megfeleltethető egy (feltehetőleg) normáeloszlást mutató valószínűségi sűrűségfüggvény (középső sor), melynek középső 50%-át takarja a doboz. Ez a doboz nem a σ szórásokkal áll kapcsolatban, a valószínűségi sűrűségfüggvény szórásokkal való felosztása az alsó sorban látható.

Forrás: Jhguch at en.wikipedia, CC BY-SA 2.5

Ilyen boxplotokat generáltam mindhárom klasszifikátor (CM, RF, NN) mindkét modellcsaládjára (Monash, FRUITY). Ezen ábrákon mind a 169 csillagra az összes megfelelőnek ítélt modelljétől (jellemzően 3-5 darab) való eltérését megvizsgáltam minden felhasznált elemtulajdonságra, így legalább 500 pont alapján állította fel az ábrázolt statisztikát a program minden elemtulajdonságra.

Ezen ábrákon az elemgyakoriságok statisztikája után az elemarányok statisztikáját is megvizsgálhatjuk. Ezen tulajdonságokat a fizikai szerepükhöz legjobban illeszkedő sorrendben rendeztem, az elemgyakoriságokat (a $[Fe/H]$ fémesség után) növekvő rendszám szerint. Az elemarányok az s -csúcsok szerint vannak rendezve: elsőként az 1. csúcs környéki s -elemek egymással képzett arányait láthatjuk, ezután az 1. és 2., majd a 2. és a 2. csúcs környéki elemek arányát figyelhetjük meg. Az egyes táblákon belül (melyeket vörös vonal választ el), az elemgyakoriságok számlálójában található legkönnyebb elem arányát vesszük a nevező egyre nehezebb elemeivel. Ezek után a második legkönnyebb elem arányát vizsgáljuk meg ismét (az ábrán jobb irányban növelve) növekvő rendszámú elemekkel, stb.



19. ábra. A RF klasszifikátor Monash modellekre alkalmazott eredményeinek boxplotja, mely az egyes tulajdonságoktól való eltérés statisztikáját ábrázolja. Az ábra nagyméretű változatát a függelékben, a 32. ábrán láthatjuk, a különböző csúcsokra vonatkozó tábláinak részleteit azonban ezen fejezetben bemutatom.

Összességében az ábrán látható, hogy az egyes csillagokra a vizsgált eltérések nagyban szórnak – mégis, mint statisztikai minta, figyelhetünk meg trendeket a különböző elem-tulajdonságok szisztematikus alul- vagy túlbecslésében. Ezeket a jellemzőket az alábbi alpontokban, az altáblánként tárgyalom.

5.3.1. Összehasonlítás a különböző klasszifikátorokra

A 3 klasszifikátor generált boxplotját a 33. ábra hasonlítja össze, külön a Monash és FRUITY modellekre. Azt figyelhetjük meg, hogy mind a három klasszifikátor mind a két modellcsaládra alig tér el, mediánjuk különbsége ritkán éri el a 0,2 dexet. Azonban a különböző klasszifikátorok elemarányainak trendje minden esetben megegyezik. Tehát a 3 klasszifikátor egymástól függetlenül hasonló jellegű AGB modelleket talált megfelelőnek, melyek eltérése az észlelésektől statisztikailag ugyanabba az irányba tolódik el.

Ha a Monash és FRUITY modellek klasszifikátorait, tehát mind a 6 eshetőséget egy ábrára helyezzük (ld. 34. ábra), akkor – bár a zsúfoltság miatt már nehézkes kivenni a részleteket – azt láthatjuk, hogy a két modellcsaládra hasonló mértékűek az eltérések értékei. Kiugró (akár több mint 0,5 dex) eltérést csupán azon elemtulajdonságoknál láthatunk, amelyekben a Nb is szerepel. Ez egy ismert jelenség – a FRUITY modellekben a ^{93}Nb nagy mennyiségben hiányzik, amely egy radioaktív izotóp, a ^{93}Zr leányeleme. Ennek oka, hogy a FRUITY modellek (a Monash-sal szemben) nem tartalmazzák a nukleáris reakciókban keletkezett magok radioaktív bomlását, így a Nb értékét fenntartásokkal kell kezelni.

Mivel hasonló az ábrázolt eltérések értéke mind a három klasszifikátor esetén, a továbbiakban az átláthatóság kedvéért csak a RF-el generált ábrákon mutatom be az egyes altáblák tulajdonságait.

Háromféle viselkedést különíthetünk majd el az ábrákon az elemarányokra vonatkozóan:

- Az elemarány ábrázolt eltérése a negatív irányba tolódik el –
 $[A/B]_{obs} < [A/B]_{mod} \rightarrow [A/Fe]_{obs} - [A/Fe]_{mod} < [B/Fe]_{obs} - [B/Fe]_{mod}$,
Ekkor a modellek az *A* elemet a *B*-hez képest felülbecslik. Tehát a B-ből kellene még termelnie a modellnek ahhoz, hogy az A elem esetéhez hasonló értéket mutasson az észlelt és a modellek által jósolt elemgyakoriság különbsége.

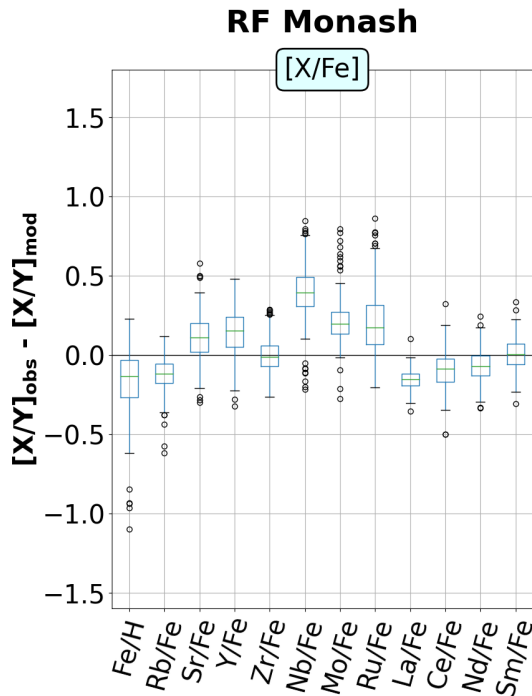
- Pontos illesztés – az elemarány ábrázolt eltérésének interkvartilis régiója áthalad a 0-n ($[A/B]_{obs} \approx [A/B]_{mod}$),
Ekkor a modellek az A elemet a B -hez képest megfelelően találják.
- Az elemarány ábrázolt eltérése a pozitív irányba tolódik el –
 $[A/B]_{obs} > [A/B]_{mod} \rightarrow [A/Fe]_{obs} - [A/Fe]_{mod} > [B/Fe]_{obs} - [B/Fe]_{mod}$,
Ekkor a modellek a B elemet a A -hoz képest felülbecslik.

5.3.2. Elemgyakoriságok ($[X/Fe]$)

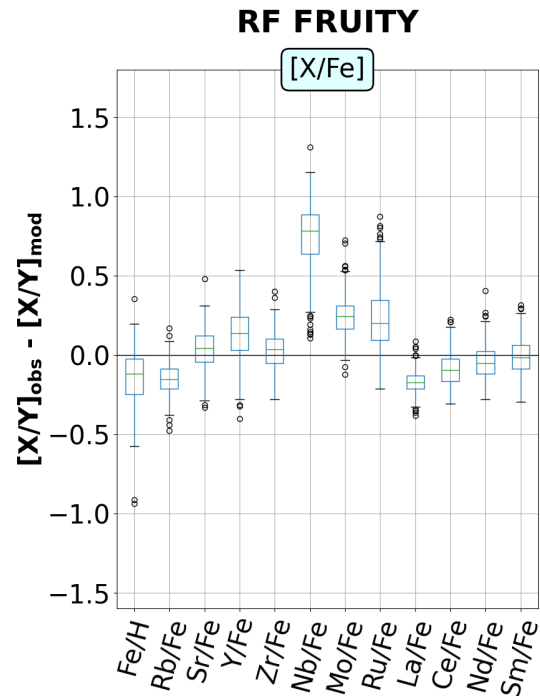
Az elemgyakoriságok eltérésének statisztikáját mutatja be a 20. és a 21. ábra. Az észlelések a modellekhez képest az alábbi eltéréseket mutatják:

- Enyhe ($\approx 0,1$ dex) felülbecslés a modellekben ($[X/Fe]_{obs} < [X/Fe]_{mod}$): $[Fe/H]$ (fémesség); Rb; La, Ce, Nd.
- Pontos illeszkedés ($[X/Fe]_{obs} \approx [X/Fe]_{mod}$): Zr, Sm.
- Enyhe ($\approx 0,1$ dex) alulbecslés a modellekben ($[X/Fe]_{obs} > [X/Fe]_{mod}$): Sr, Y.
- Erős ($> 0,2$ dex) alulbecslés a modellekben ($[X/Fe]_{obs} \gg [X/Fe]_{mod}$): Nb, Mo, Ru.
A Nb a Monash modellekből is kiugróan nagy mennyiségben hiányzik.

Összességében a 2. s-csúcs elemeit pontosabban sikerült illeszteni, mint az 1. csúcs körülieket. Főképp a nagyobb rendszámú, 1. csúcs környéki elemek túlbecslése volt jellemző eltérés.



20. ábra. Az egyes elemgyakoriságok eltérésének statisztikája a Monash modellek esetén.



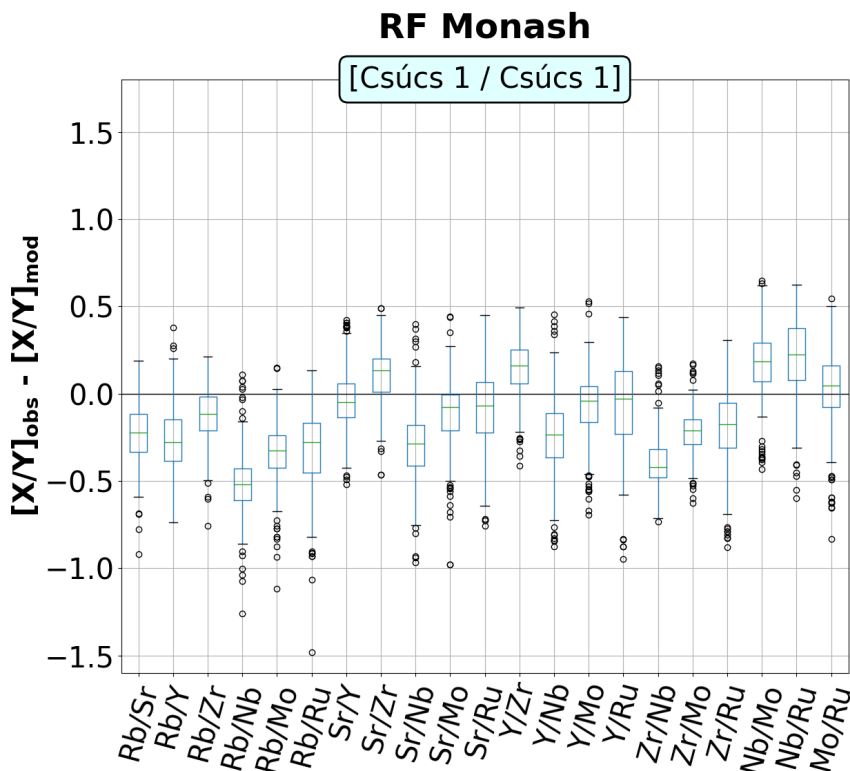
21. ábra. Ld. 20. ábra, FRUITY modellekre.

A fémesség nagyobb mértékű eltérését az is okozhatja, hogy a modelljeink fémességhá-
lózata kevés pontot fed le. Tehát a fémességben elég nagy hibákat véthetünk, mivel a
modelljeink nem fedik le ezen paraméterben folytonosan a valóságot. Azonban a legtöbb
esetben a legjobban illeszkedő modellek a Ba csillagok fémességének hibáján belül vannak.

Mint láthattuk, az elemgyakoriságokra egyik elem (a Nb-ot kivéve) se rendelkezett kiug-
róan magas eltéréssel. Mégis, a következőkben bemutatásra kerül, hogy két elem aránya
már izgalmas összefüggéseket tárhat fel. Mivel, mint azt a 34. ábrán is láthattuk, hogy a
Monash és FRUITY modellek esetén csupán a Nb tér el nagymértékben, a továbbiakban
a jellemzőket csak a Monash modellek statisztikáján keresztül mutatom be.

5.3.3. Az 1. csúcs elemeinek aránya

A következő tábla azon elemarányokat mutatja be, melyekben az 1. csúcs környéki elemek
egymáshoz való viszonya jelenik meg. Ezt a RF, Monash esetben a 22. ábrán láthatjuk.
Ezek az arányok az 1. csúcsbeli elemek egymáshoz viszonyított mennyiségében tapasztalt
pontatlanságokat mutatják be.



22. ábra. Az 1. csúcs környéki elemek arányainak eltérési statisztikája a Monash modellek esetén, az RF klasszifikátorral.

Az elemarányok egymás után egy fűrészfogszerű trendet mutatnak, mely mindig akkor
esik le, amikor a Nb áll a nevezőben. Ezután a Zr-ig fokozatosan, lineárisan csökken a
modell felülbecslése (tehát a modellek szintjére nő az észlelt csillagokban az elemarány),
a Zr környékén akár enyhe felülbecslésbe is átcsaphat, de többnyire közel marad a pon-
tos illesztéshez. Ez azt jelenti, hogy a Nb-nál nehezebb elemek a könnyebbekhez képest

a modellekben alultermelődnek – vagy a könnyű elemek termelődnek felül az észleltekhöz képest. Azt is érdemes megfigyelni, hogy amikor egy újabb, nehezebb elem kerül a számlálóba, ez a fűrészfog trend nem törik meg.

A trend általánosnak tűnik az 1. csúcsbeli elemekre. Az ezért felelős folyamat lehet akár az *i*-folyamat (közepes neutronbefogásos folyamat), akár az AGB csillagban egy kései termális pulzus nyoma. Az 1. csúcsbeli elemek arányának ábrája alapján kétféle forgatókönyvet képzelhetünk el. Azt, hogy ezek közül melyik teljesül, a két *s*-csúcs egymáshoz viszonyított eltéréseivel igazolhatjuk. A két lehetőség az alábbi, vagy ezek kombinációja:

- A nehezebb elemek mennyisége helyes, azonban a könnyű elemekből a nehezebbekhez képest több termelődik a modellekben, mint az észlelések alapján valószínűsíthető. Ez esetben egy alacsony hőmérsékleten feleslegesen aktivált folyamatot vettünk figyelembe, vagy egy eddig figyelmen kívül hagyott folyamat lerombolja a felépített könnyű elemeket.
- Ha a könnyebb elemek értéke pontos, a nehéz elemekből termelődik kevés a könnyebbekhez képest. Ez egy olyan, eddig figyelembe nem vett folyamatot igényelne a modellekben, ami csak nagyobb hőmérsékleten aktiválódik. Azonban mivel a Nb után az eltérés értéke csökken, a Nb környékén lehet a leghatékonyabb ez a folyamat, és ez egyre jobban lecseng a nagyobb rendszámú elemekre.

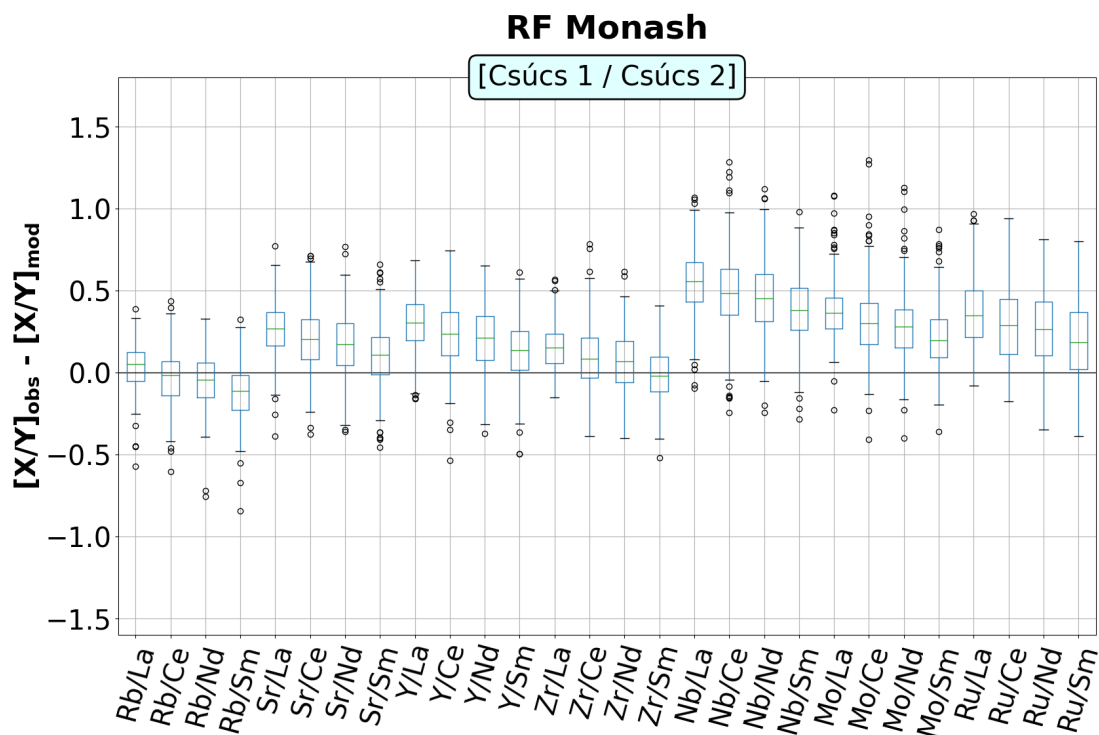
Természetesen előfordulhat az is, hogy ez a trend az észlelések szisztematikus hibájának köszönhető. Mivel egy homogén spektroszkópiai minta adatait dolgoztam fel, az önkonzisztens eltérések nem tűnnek ki. Éppen ezért lenne fontos egy másik, hasonlóan megbízható és nagy észlelési minta a Ba csillagok spektrumára, akár ugyanazon csillagokról.

5.3.4. Az 1. és 2. csúcsok elemarányai

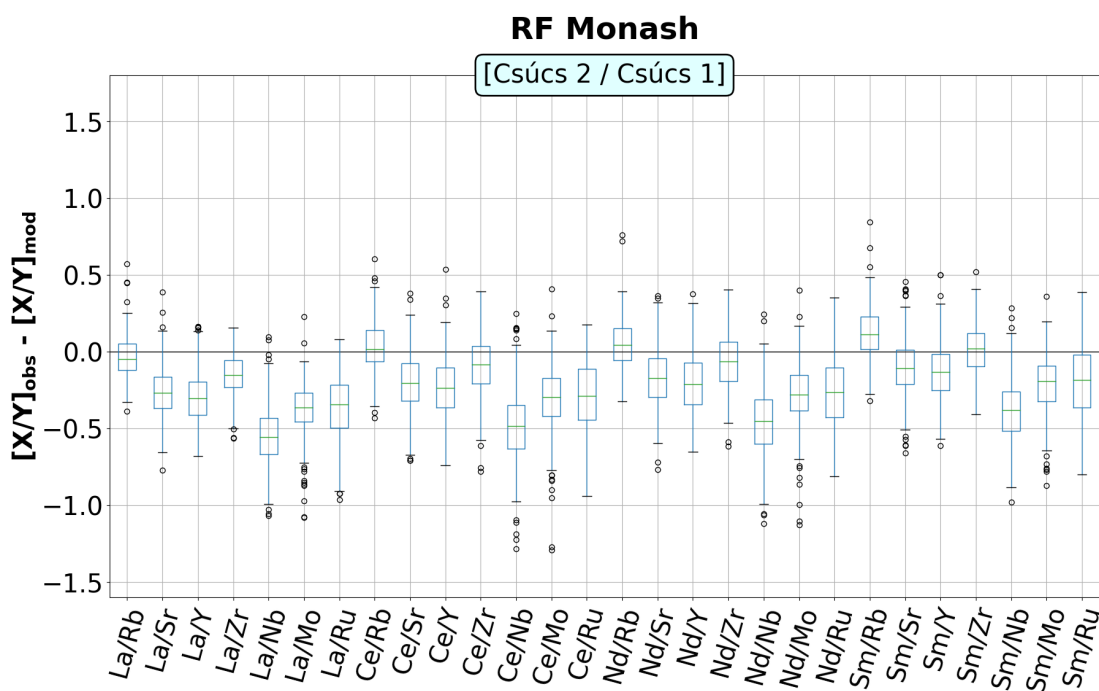
A két *s*-csúcs elemeinek aránya a 23. ábrán látható. Ezen arányok a két csúcs egymáshoz viszonyított magasságában, tehát a két csúcs termelésének hatékonyságában okozott hibát írják le.

Az 1. és 2. csúcs elemeinek aránya az 1. csúcs arányaihoz hasonlóan fűrészfogszerű mintázatot mutat, ami azonban ezen esetben nem a modellek felül-, hanem alulbecsléséből ered. Az észlelésekben termelt többlet a La esetén ugrik fel, ezek után lineárisan csökken a Sm-ig, tehát a 2. csúcs mentén halad végig ez a trend, az egyre nehezebb *s*-elemek esetén egyre kisebb a modellek eltérése az észlelésektől. Ez azt jelenti, hogy adott 1. csúcsbeli elem esetén a 2. csúcsban a nehezebb elemek felé haladva egyre kevésbé mutatnak hiányt a 2. csúcs elemeiben modelljeink – vagy egyre kevésbé mutatnak többletet a számlálóban szereplő 1. csúcsbeli elemekben.

Vizsgáljuk meg a fordított ábrázolást is, amikor a 2. csúcs elemeit rögzítve növeljük az 1. csúcs elemeinek rendszámát! Ezt láthatjuk a 24. ábrán. Ez az előbbi fejezet fényében szemléletesebb rendezés, és ez a perdöntő abban, hogy a könnyű vagy nehéz 1. csúcsbeli elemekkel lehet a gond az AGB modellekben.



23. ábra. Az 1. csúcs környéki, és a 2. csúcsbeli elemek arányainak eltérési statisztikája a Monash modellek esetén.



24. ábra. A 23. ábra, fordítva – a 2. csúcsbeli elemek aránya az 1. csúcs környékiekkel. Tehát most rögzített 2. csúcsbeli elem esetén vizsgáljuk az 1. csúcsbeli elemek rendszámának növelését.

Láthatjuk, hogy adott 2. csúcsbeli elem esetén a modellek ismét a Nb-tól kezdődően a nehezebb elemek felé csökkenő mértékben becslik felül az arányokat. Mivel a 2. csúcsbeli elemek illeszkedése a legpontosabb, arra következtethetünk, hogy a nehéz 1.-csúcsbeli elemekben a modellek valóban alultermelést mutatnak a valósághoz képest. Ennek mértéke a Nb-tól nagyobb rendszámok felé haladva csökken. Tehát modelljeinkből valószínűleg hiányzik egy olyan folyamat, ami ezeket az elemeket hozza létre.

Pusztán az 1. csúcsbeli elemek arányait vizsgálva még nem tudtuk eldönteni, hogy a könnyű 1. csúcsbeli elemekből van felül-, vagy a nehéz elemekből van alulbecslés a modellekben. A két különböző csúcs arányai azonban azt támasztják alá, hogy a nehéz 1. csúcsbeli elemeket becslik alul a modellek az észlelésekhez képest. Ez a megállapítás talán munkám eddigi legnagyobb eredménye.

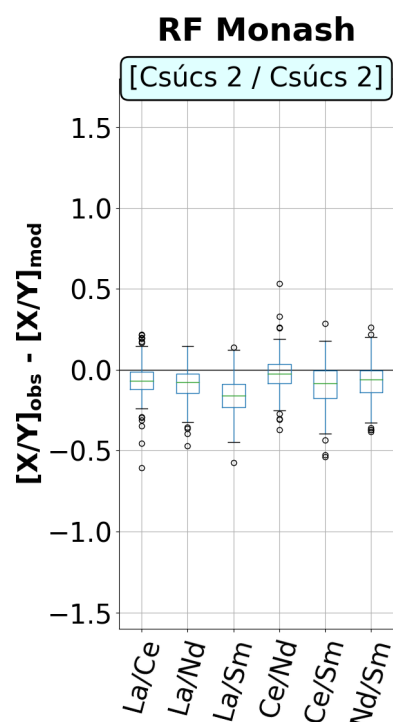
A könnyű 1. csúcsbeli *s*-elemek (Sr, Y, Zr) eltérésének mintázata is egy enyhe eltérést mutat a 2. csúcstól: a Sr és Y a modellek által enyhén ($\approx 0,2$ dex) felülbecsültnek tűnik a 2. csúcshoz képest.

5.3.5. A 2. csúcs elemeinek aránya

A 2. csúcsbeli elemek arányát a 25. ábra mutatja. Látható, hogy ezen elemarányok esetén nem figyelhető meg jelentős eltérés a 0 értéktől, tehát a modellek elemarányai egybeesnek az észlelésekből nyertekkel. Ráadásul az interkvartilis régió mérete is sokkal kisebb (jellemzően fele- vagy harmadakkora), mint az 1.-1., vagy 1.-2. csúcspárok esetén, tehát sokkal élesebben koncentrálnak az adatpontok, azok szórása kisebb.

Az egyetlen olyan elemarány, melynek interkvartilis régiója teljes mértékben a 0 határ alatt található, a [La/Sm]. Ha visszagondolunk a 20. ábrán az elemgyakoriságok mintázatára, ez nem meglepő – a Sm elemgyakorisága pontos, azonban a La csekély túlbecslésben részesült a modellek által.

Ez tehát azt jelenti, hogy a 2. csúcs elemei a legmegbízhatóbbak, feltehetőleg a modellek helyesen kezelik az ide tartozó elemek keletkezését.



25. ábra. A 2. csúcsbeli elemek arányainak eltérési statisztikája a Monash modellek esetén.

5.4. A csillagok tömegeloszlása

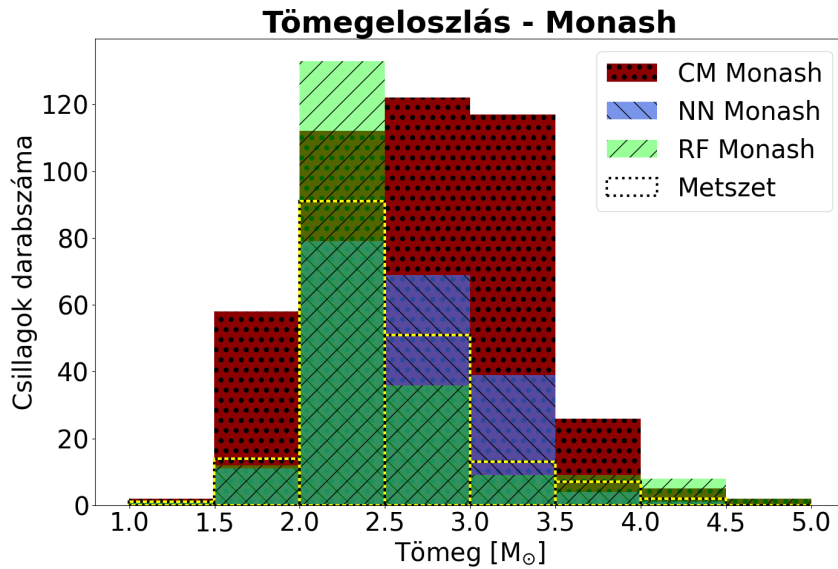
A megfelelőnek ítélt AGB modellek azt is elárulják, hogy milyen tömegű AGB csillagok szennyezhettek be a minta Ba csillagait. Ezen tömegek eloszlását vizsgálva arra kaphatunk választ, hogy általában milyen tömegű AGB csillagok vesznek részt a tömegátadásban ilyen rendszerekben.

Az alábbi ábrákon (Monashra 26., FRUITY-ra 27. ábra) azt láthatjuk, hogy az egyes tömegintervallumokba hány csillag esik a vizsgáltakból. Egy csillag azon intervallumban járul hozzá a hisztogramhoz, mely a rá megfelelőnek ítélt modellek közül a minimális és maximális tömegek közé esik.

Mindkét ábrán feltüntettem egy „metszet” hisztogramot is. Ebben a csillagok azon intervallumokba számítanak bele, amelyben a 3 klasszifikátor közül legalább 2 megegyezett a tömegükön.

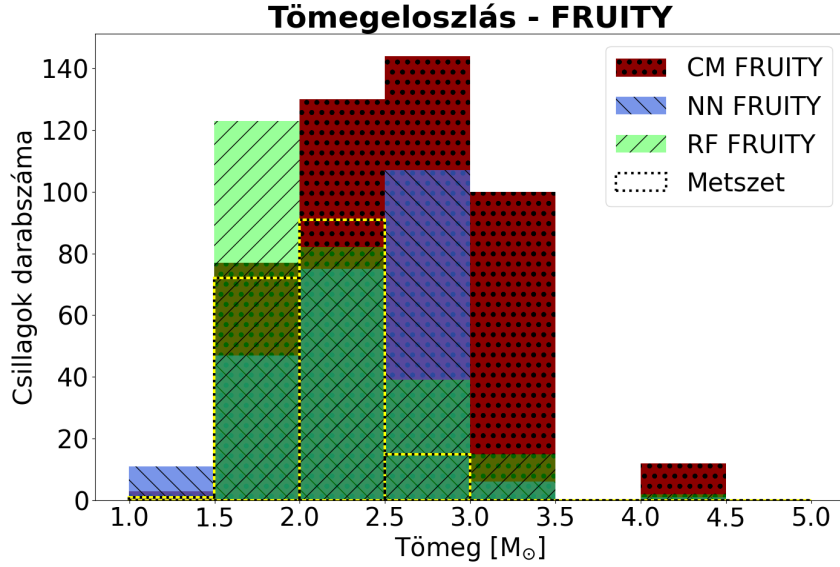
Látható, hogy mindkét modellcsaládra mutatott eloszlás mindhárom klasszifikátor esetén 2-2,5 $M_{\odot}$ -nél csúcsosodik, és a 4 $M_{\odot}$ -et ritkán lépi át. Tehát a vizsgált Ba csillagok beszenyezését valóban kistömegű AGB csillagok végezheték.

A klasszifikátorok kissé eltérő trendet mutatnak egymáshoz képest. A CM mindkét modellcsalád esetén általánosságában jóval ($\approx 1 M_{\odot}$) nagyobb tömegeket ad meg, mint a másik két klasszifikátor. A RF a NN jóslatainál kevéssel kisebb tömegeket hajlamos megadni, bár a Monash modellek esetén a két gépi tanulási klasszifikátor eloszlásának alakja szinte megegyezik, mindkettő esetében 2 és 2,5 $M_{\odot}$ között csúcsosodik az eloszlás.



26. ábra. A Monash modellekre megtalált AGB modellek tömegének eloszlása, különböző színnel jelölve a különböző klasszifikátorok által jóslott eloszlást, valamint ezek metszetét, melybe azok a csillagok számítanak bele, amelyeket legalább két klasszifikátor ezen intervallumba helyezett.

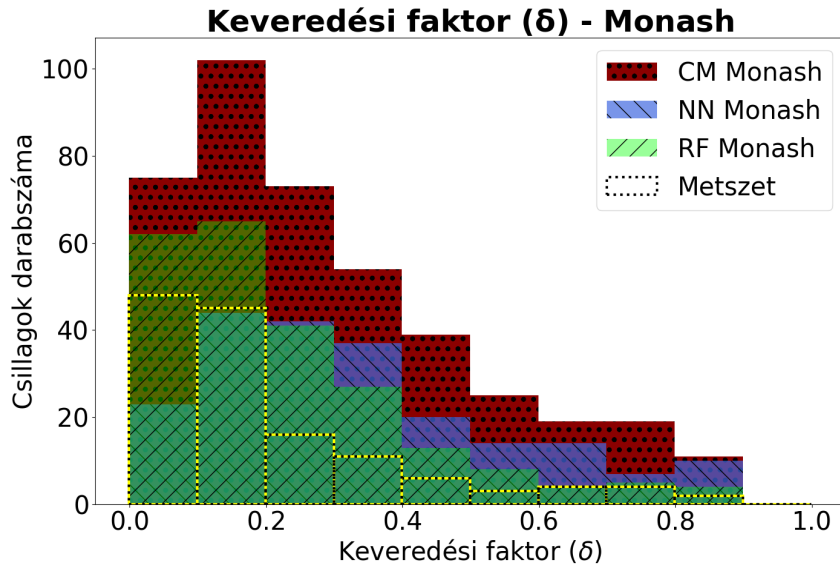
(Megj.: Az eloszlás csúcsánál azért láthatunk csupán ≈ 130 csillagot, mert a maradék csillagra a klasszifikátor egyáltalán nem talált megfelelő modellt.)



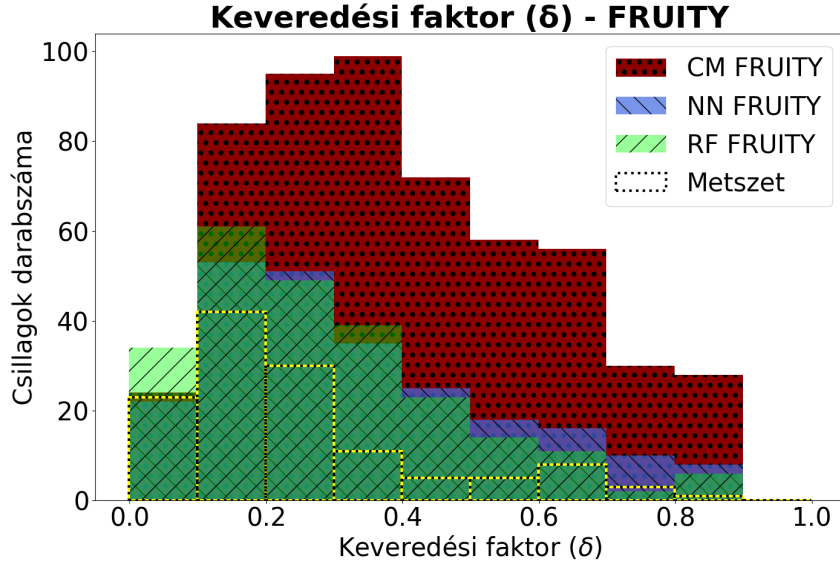
27. ábra. Ld. 26. ábra, de FRUITY modellekre.

5.5. A keveredési faktor eloszlása

Az előző, 5.4. alfejezetben látottal analóg eloszlást állítottam fel a keveredési faktorokra is. A 28. és a 29. ábrákon az egyes intervallumokba azon csillagok esnek, melynek minimális és maximális keveredési faktora eközött található. A metszet ismét azon csillagokat takarja, melyre legalább két klasszifikátor megegyezett.



28. ábra. A Monash modellekre megtalált AGB modellek keveredési faktorának eloszlása, különböző színnel jelölve a különböző klasszifikátorok által jósolt eloszlást, valamint ezek metszetét, melybe azok a csillagok számítanak bele, amelyeket legalább két klasszifikátor ezen intervallumba helyezett.



29. ábra. Ld. 28. ábra, de FRUITY modellekre.

Láthatjuk, hogy a keveredési faktor mindkét esetben 0,2 körül csúcsosodik, és a nagy értékek felé lecseng. A 0,9 értéknél mesterséges vágást végeztem a modellek válogatásánál. A 0,5 feletti keveredési faktor már azt jelenti, hogy a Ba csillag a köpenyének több mint felét a társ csillagról nyerte – ez már egy nagyon intenzív fizikai folyamatot takar. Így nem meglepő, hogy a kisebb keveredési faktor a jellemzőbb, a Monash esetén $\delta = 0,5$ felett már kevesebb, mint 10 csillag található a klasszifikátorok metszetében. A nagyobb értékek feltehetőleg az illesztés hibájából adódnak, azonban nem zárható ki az sem, hogy szoros kettősökben valóban létrejöhet ilyen nagymértékű tömegátadás. A FRUITY esetén láthatunk egy enyhe csúcsot $\delta = 0,6-0,7$ között.

A háromféle klasszifikátor itt is, mint a tömegeloszlás esetén, jó egyezést mutat, azonban itt is a CM jóval nagyobb értékeket. A RF csúcsa a Monash esetén kevéssel kisebb értéknél található, mint az NN-é, FRUITY esetén szinte teljesen egybeesnek.

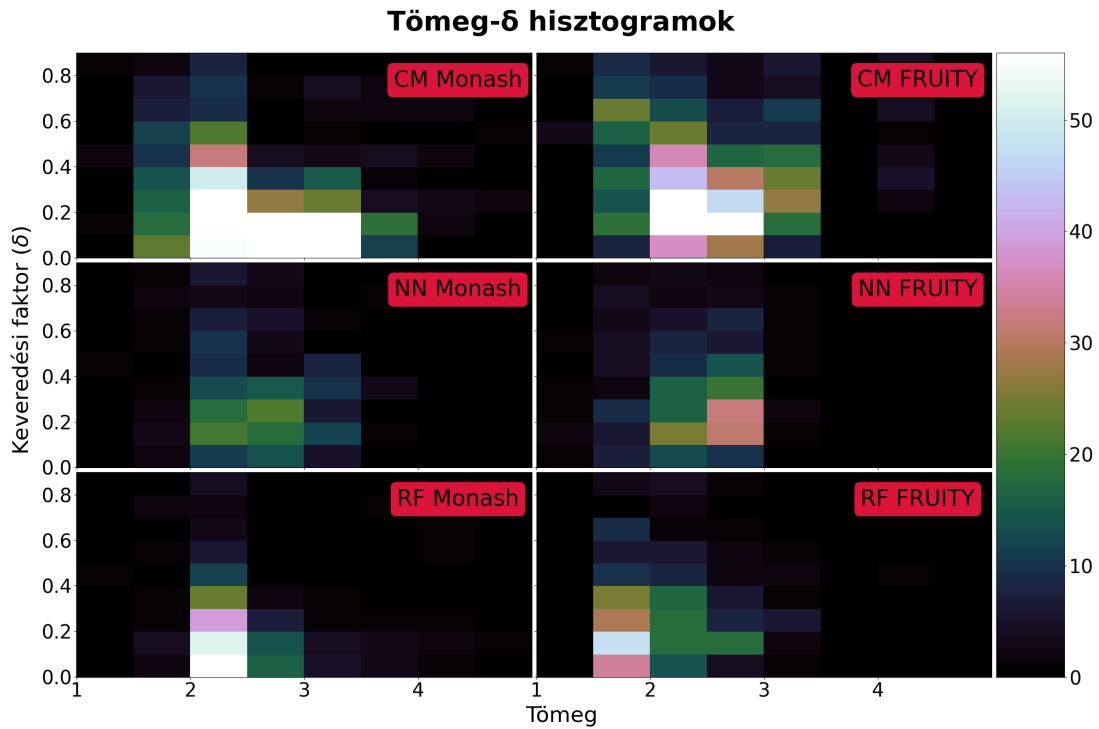
Stancliffe (2021) szintén megvizsgálta a keveredési faktor változását különböző kezdeti tömegű Ba és AGB csillagok esetére. A modelljeit felhasználva az általam talált eloszlásokba illő értékeket kapott mind a szennyező AGB tömegekre, mind a keveredési faktorra: a legtöbb esetben 2,5-3 $M_{\odot}$ közötti AGB csillagot talált megfelelőnek, és a keveredési faktor értéke is 0,3 alatti, ami szintén alátámasztja az ennél nagyobb keveredési faktorú találatok fizikai valótlanságát.

Hidrodinamikai vizsgálatok alapján is 30%-os maximum érték körül lehet a csillagszél által kitöltött Roche térfogat általi tömegátadás hatásfoka (Chen et al., 2020).

5.6. A tömeg és a keveredési faktor kapcsolata

Annak érdekében, hogy a kettős rendszerben történő tömegátadás természetét vizsgálhasuk, érdemes lehet megvizsgálni az átadott tömeg mennyiségét. A Ba csillag köpenyének tömege és a keveredési faktor szorzata (lásd (1) egyenlet) közvetlenül megadja az átadott tömeg mennyiségét – azonban a Ba csillag tömegét nem ismerjük. Nem helyes feltevés úgy tekinteni, hogy a nagyobb tömegű Ba csillagokhoz nagyobb tömegű AGB csillag tartozik, de első kísérletként érdekes lehet mégis megvizsgálni az AGB csillag tömegének és a keveredési faktornak a kapcsolatát. Ennek érdekében egy 2 dimenziós hisztogrammot készítettem mindhárom klasszifikátor mindkét modellcsaládra való használata esetén, amit a 30. ábrán láthatunk.

Látható, hogy összességében a kistömegű AGB csillagok és kicsi keveredési faktorok voltak jellemzőek. Azonban általános trendet nem tudtam megfigyelni a mintázatokban. Tehát további vizsgálatokat igényel ez a kapcsolat, melyhez valószínűleg szükség lenne a kettősök pályaparamétereire is.



30. ábra. Az AGB tömegek és a keveredési faktorok kétdimenziós hisztogrammja a hatféle klasszifikátor-modellcsalád kombináció esetén. Az egyes cellák színe az odaeső csillagok számával arányos, melynek közelítő értékét a jobb oldali színskáláról olvashatjuk le.

6. Összefoglalás és kitekintés

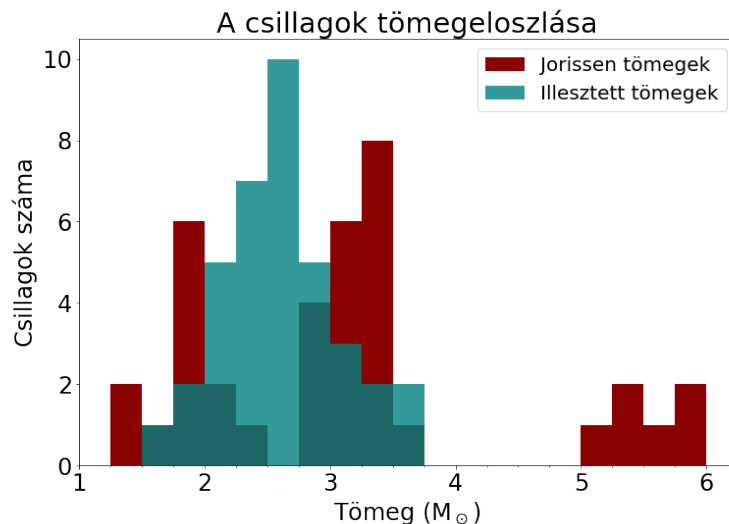
Munkámban eredményesen vettem össze Ba csillagok észleléseit AGB nukleoszintézis modellekkel. Ennek segítségével becslést adtam arra, hogy milyen tulajdonságú AGB csillagok szennyezhették be a Ba csillagokat. Kifejlesztettem egy klasszifikációs eljárást, ami a random forest nevű gépi tanulási technikán alapul, valamint felhasználtam kollégáim két, azonos célra használt eljárását, melyek a legjobb illeszkedés, valamint neurális háló alapján működtek. A három klasszifikátor által megfelelőnek ítélt AGB modelleket összehasonlítottam, és többnyire nagy átfedést találtam azok paramétereiben.

A 169 csillagból álló minta a tavalyi munkámhoz képest háromszor nagyobb volt, ami homogén spektroszkópiai elemgyakoriságokat szolgáltatott, ráadásul több elemre, mint eddig. Ez elegendő darabszám volt ahhoz, hogy a csillagok egyedi vizsgálata mellett a minta statisztikai viselkedését is feltérképezsem.

A csillagokra megfelelőnek ítélt modellek illeszkedését egyedi elemgyakoriság- és elemarány ábrákkal tehetjük meg, melyeket automatikusan generál a programom.

A statisztikai betekintést az elemtulajdonságok illeszkedésére dobozábrákkal szemléltettem. Lehetővé tettem a megtalált AGB tömegek és a modellek keveredési faktorának eloszlásának, valamint a tömeg és a keveredési faktor kapcsolatának ábrázolását is.

Tavalyi munkámban az akkor 37 megfelelő illeszkedésű csillagra bizonyos esetekben kisebb tömeget találtam megfelelőnek, mint azt az irodalomban becsülték a kettős pályaparaméterek alapján. Ezt az eloszlást láthatjuk a 31. ábrán. Az akkor felállított tömegeloszlás is azt ígérte, hogy egy $2,5 M_{\odot}$ -nél csúcsosodó eloszlást várunk, az irodalomban becsült, $4 M_{\odot}$ feletti csúcs pedig nem létezik. Ezt idei munkám is megerősítette, nagyobb mintán és pontosabb eljárással is azt találtam, hogy a Ba csillagokat kistömegű, $4 M_{\odot}$ -t legfeljebb nagyon ritkán túllépő AGB csillagok szennyezhették be.



31. ábra. A tavalyi munkámban felállított tömegeloszlás a 37 megfelelő illeszkedésű csillagra. „Jorissen tömegek” címkével az irodalmi, kettős paraméterek alapján, „illesztett tömegek” címkével az eljárásom alapján talált tömeg látható.

Az elemarányok eltéréseinek statisztikai vizsgálata egy nagyon érdekes mintázatot tárt fel: valószínűsíthető, hogy az AGB modellekből hiányzik egy folyamat, ami a nehezebb 1. *s*-csúcs környéki elemeket (Nb, Mo, Ru) termeli, és hatékonysága a Nb termeléséhez szükséges energia körül a legnagyobb. A továbbiakban mindenképpen szeretném megvizsgálni, hogy ennek mi lehet a fizikai háttere. Ez igazolhatja egy eddig nem alátámasztott fizikai folyamat jelenlétét az AGB csillagokban, mint például a közepes neutronbefogásos folyamatét (*i*-folyamat), egy kései termális pulzusét, vagy egy más, eddig ismeretlen folyamatét. Más jelek is utalnak arra, hogy nem teljes a nukleáris asztrofizikai folyamatokról alkotott képünk, mivel például a Naprendszer nehéz elemekből álló összetételét sem tudjuk teljes egészében pusztán az *s*- és *r*-folyamattal megmagyarázni. A Ba csillagok vizsgálatával ezen folyamat beazonosításához is hozzájárulhatok.

A behatóbb elemzéshez több mérési adatra lenne szükségünk minél több Ba csillagra. A kettősök paramétereinek ismeretében az átadott tömeg mennyisége pontosabban vizsgálható lenne. A Pb elemgyakorisága nagyban pontosíthatná a modellek illesztését, mivel ez az elem a 3. *s*-csúcsot képviseli, ahol nagyobb energiájú nukleáris folyamatok is fellépnek. Sokat segítené egy másik független, homogén észlelési minta is, hogy ki tudjuk zárni a jelenlegi minta esetleges szisztematikus hibáit.

További terveim között szerepel az előbb tárgyalt, sejthető fizikai folyamat behatóbb vizsgálata. Ha rendelkezünk kettős pályaparaméterekkel, szeretném megvizsgálni az átadott tömeg és a pályaparaméterek kapcsolatát, ami a tömegátadás jobb megértését segítheti ilyen kettős rendszerekben. Ezenfelül ki szeretném terjeszteni az eljárásom CEMP csillagokra is, melyek a Ba csillagok fémszegény megfelelői.

A klasszifikálásra használt kód elérhető a GitHub platformon, Andrés Yagüe oldalán *Ba_star_classification* néven, ezen a linken.

A tavalyi munkámból készült publikáció, melyen Cseh Borbála után második szerző vagyok, referálás alatt áll. A CM és NN eljárásokat bemutató cikk, melyen társszerző vagyok, nemsokára beküldésre kerül. Terveim szerint jelen munka eredményét is publikálni fogom.

Köszönetnyilvánítás

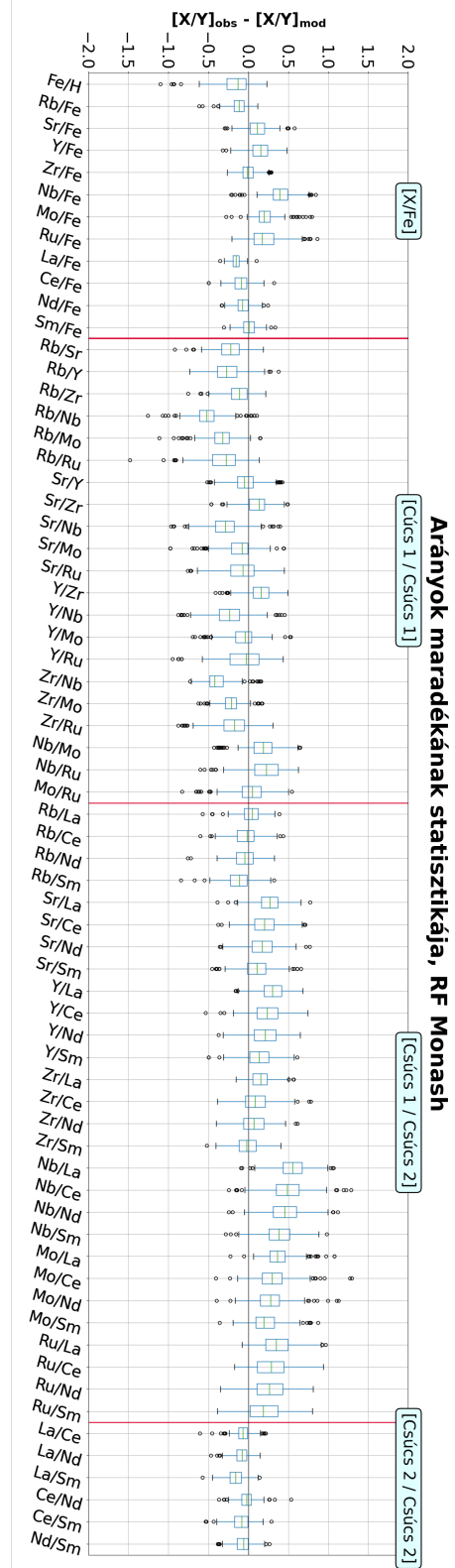
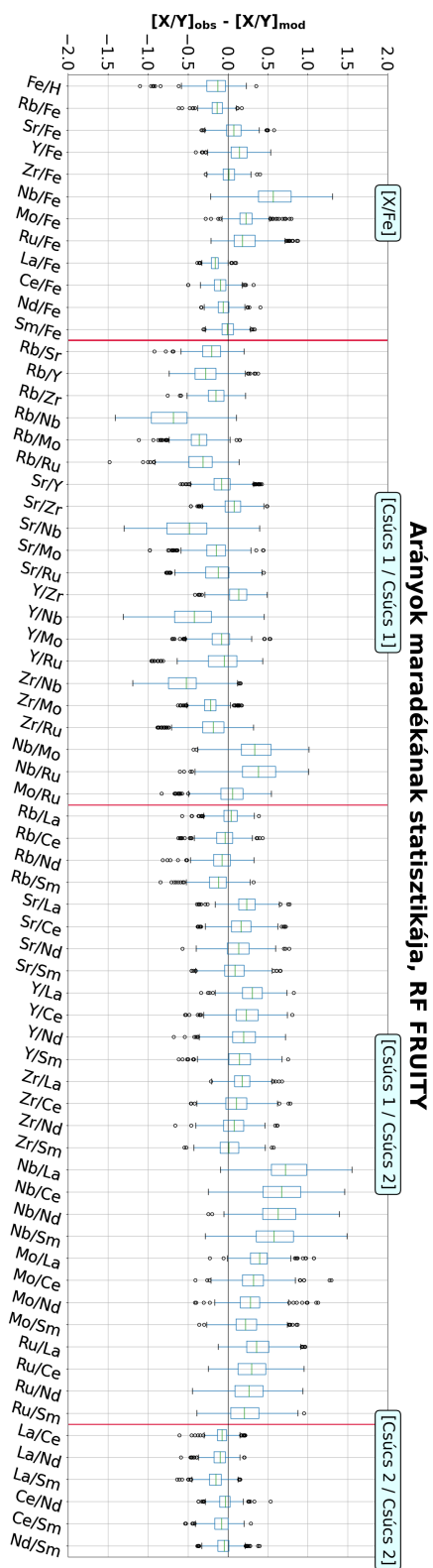
A kutatás az Innovációs és Technológiai Minisztérium ÚNKP-21-1 kódszámú Új Nemzeti Kiválóság Programjának a Nemzeti Kutatási, Fejlesztési és Innovációs Alapból finanszírozott szakmai támogatásával készült.

Cseh Borbála témavezetőm nélkül ez a munka nem jöhetett volna létre, akinek szakmai tudása és erőfeletti segítsége megalapozta eredményeimet. A CM és NN klasszifikátort Dr. Andrés Yagüe-nek és Dr. Jacqueline den Hartogh-nak köszönhetem, akik megalapozták az eljárást, és annak statisztikai hátterét. A kutatócsoport vezetője és mozgatórugója pedig Dr. Maria Lugaro, akinek a vezetése alatt ez a pezsgő csoport kialakulhatott. Köszönettel tartozom Dr. Kovács Józsefnek is a témavezetésért, támogatásért és a lektorálásért. Nagyon köszönöm az összes barátomnak és családomnak, akik segítettek a dolgozat kiteljesítésében, mind szakmai meglátásaikkal, dolgozatom átolvasásában, mind a személyes támogatásukkal.

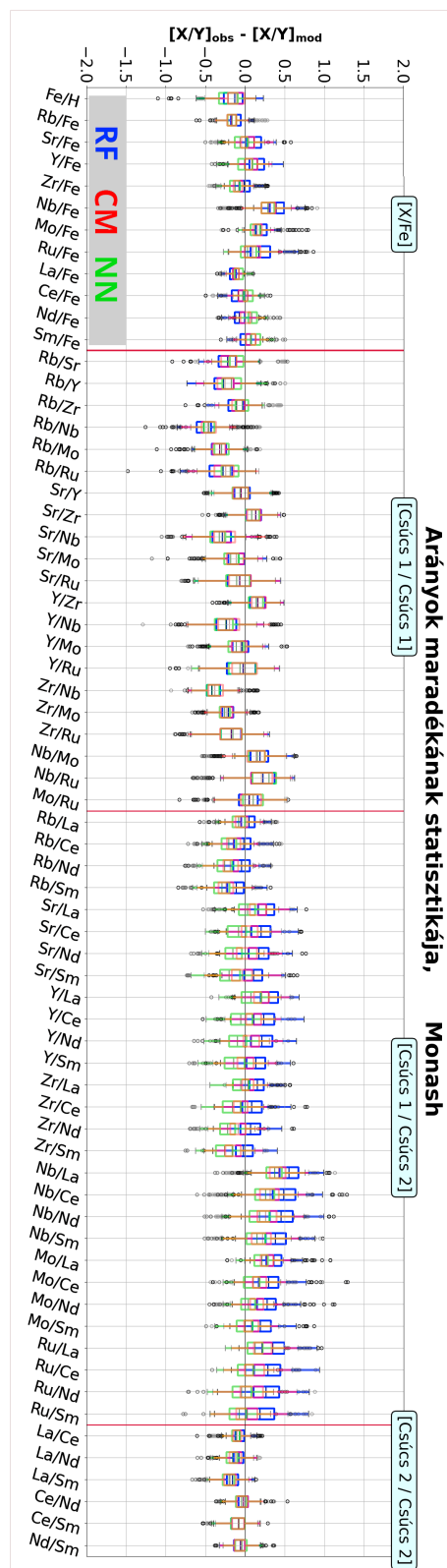
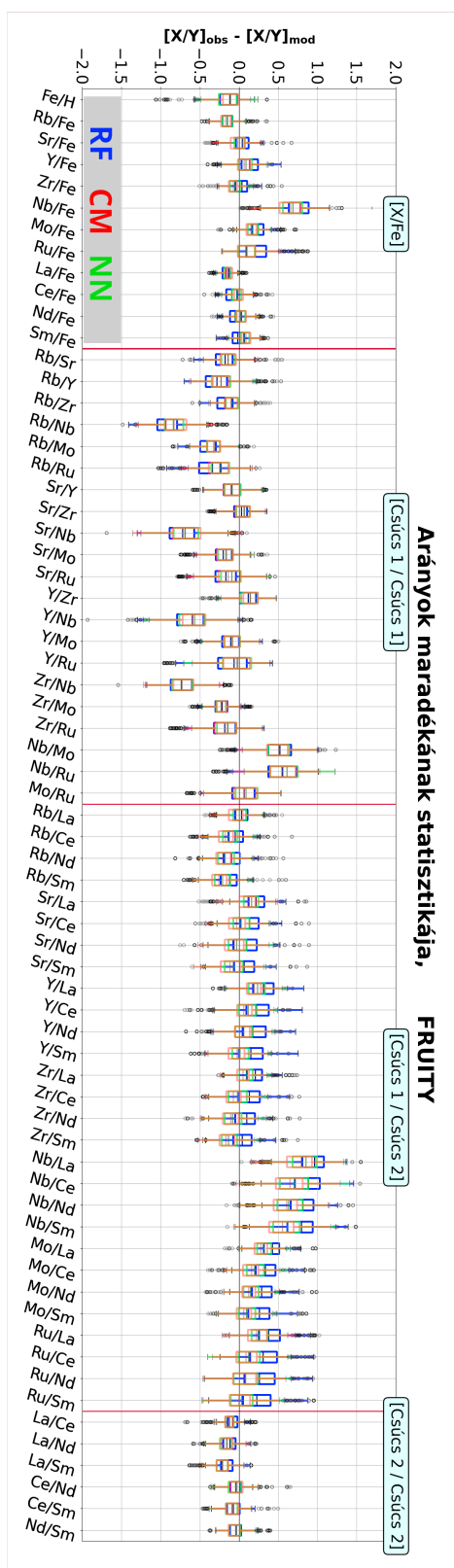
Hivatkozások

- Bidelman, W. P. and Keenan, P. C.: 1951, *Astrophys. J.* **114**, 473
- Boehm-Vitense, E.: 1980, *Astrophys. J., Lett.* **239**, L79
- Chen, Z., Ivanova, N., and Carroll-Nellenback, J.: 2020, **892(2)**, 110
- Cristallo, S., Abia, C., Straniero, O., and Piersanti, L.: 2015, *Astrophys. J.* **801**, 53
- Cristallo, S., Karinkuzhi, D., Goswami, A., Piersanti, L., and Gobrecht, D.: 2016, *Astrophys. J.* **833**, 181
- Cristallo, S., Piersanti, L., Straniero, O., Gallino, R., Domínguez, I., Abia, C., Di Rico, G., Quintini, M., and Bisterzo, S.: 2011, *Astrophys. J., Suppl. Ser.* **197**, 17
- Cristallo, S., Straniero, O., Gallino, R., Piersanti, L., Domínguez, I., and Lederer, M. T.: 2009, *Astrophys. J.* **696**, 797
- Cseh, B., Lugaro, M., D’Orazi, V., de Castro, D. B., Pereira, C. B., Karakas, A. I., Molnár, L., Plachy, E., Szabó, R., Pignatari, M., and Cristallo, S.: 2018, *A&A* **620**, A146
- de Castro, D. B., Pereira, C. B., Roig, F., Jilinski, E., Drake, N. A., Chavero, C., and Sales Silva, J. V.: 2016, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **459**, 4299
- den Hartogh, J. W., Hirschi, R., Lugaro, M., Doherty, C. L., Battino, U., Herwig, F., Pignatari, M., and Eggenberger, P.: 2019, **629**, A123
- Fishlock, C. K., Karakas, A. I., Lugaro, M., and Yong, D.: 2014, *Astrophys. J.* **797**, 44
- Griffin, R. and Griffin, R.: 1980, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **193**, 957
- Jorissen, A., Boffin, H. M. J., Karinkuzhi, D., Van Eck, S., Escorza, A., Shetye, S., and Van Winckel, H.: 2019, *A&A* **626**, A127
- Karakas, A. I. and Lugaro, M.: 2016, *Astrophys. J.* **825**, 26
- Karakas, A. I., Lugaro, M., Carlos, M., Cseh, B., Kamath, D., and García-Hernández, D. A.: 2018, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **477(1)**, 421
- Lugaro, M., Karakas, A. I., Stancliffe, R. J., and Rijs, C.: 2012, *Astrophys. J.* **747**, 2
- McClure, R. D.: 1983, *Astrophys. J.* **268**, 264
- Piersanti, L., Cristallo, S., and Straniero, O.: 2013, *Astrophys. J.* **774**, 98
- Pols, O., *Stellar Structure and Evolution* egyetemi jegyzet
- Roriz, M. P., Lugaro, M., Pereira, C. B., Drake, N. A., Junqueira, S., and Sneden, C.: 2021a, **501(4)**, 5834
- Roriz, M. P., Lugaro, M., Pereira, C. B., Sneden, C., Junqueira, S., Karakas, A. I., and Drake, N. A.: 2021b, **507(2)**, 1956
- Schindler, M., Stencel, R. E., Linsky, J. L., Basri, G. S., and Helfand, D. J.: 1982, *Astrophys. J.* **263**, 269
- Stancliffe, R. J.: 2021, **505(4)**, 5554

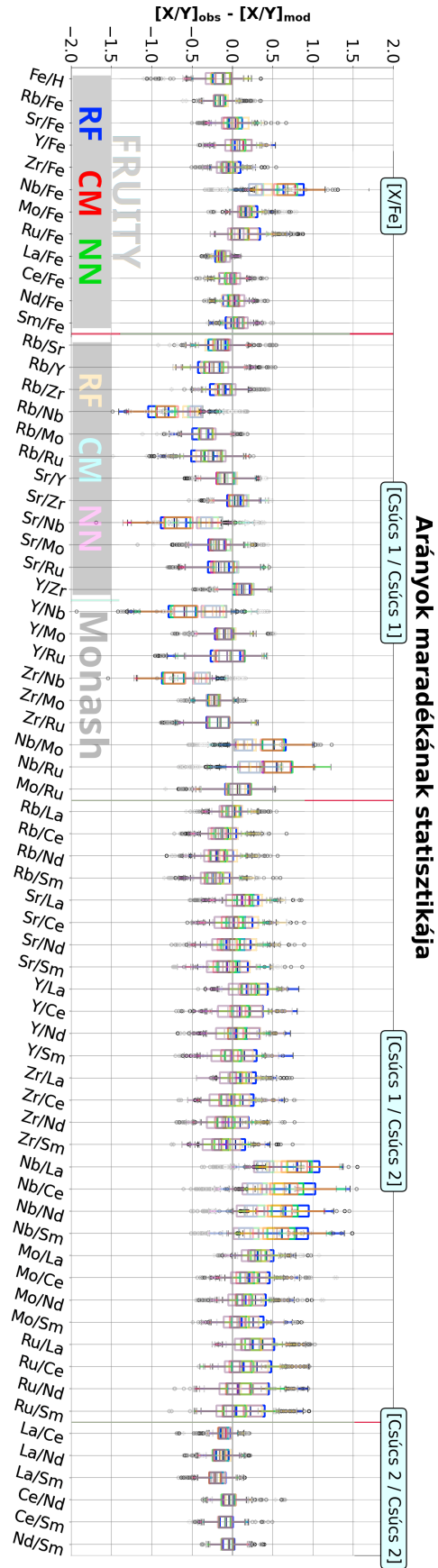
7. Függelék – ábrák



32. ábra. Az 5.3. alfejezetben tárgyalt, az elemtulajdonságok eltérését ábrázoló boxplotok a RF klasszifikátor eredményeivel. Balra a FRUITY, jobbra a Monash modellekre.



33. ábra. Ld. 32. ábra, de mindhárom klasszifikátor eredménye megjelenik a FRUTY és Monash ábráján is, különböző színnel.



34. ábra. Ld. 33. ábra, most mind a 3 klasszifikátor mindkét modelleszaládra adott eredménye egy ábrán látható.