

Universidade de São Paulo
Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas
Departamento de Astronomia

Taísa Oliveira de Jesus

**Espectros Estelares Sintéticos na
Reprodução da Biblioteca Empírica
X-shooter**

São Paulo

2024

Taísa Oliveira de Jesus

**Espectros Estelares Sintéticos na
Reprodução da Biblioteca Empírica
X-shooter**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
ao Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências
Atmosféricas da Universidade de São Paulo
como requisito parcial para a obtenção do título
de Bacharel em Astronomia.

Vertente: Pesquisa Básica

Orientadora: Profa. Dra. Paula R. T. Coelho

São Paulo

2024

Dedico este trabalho a Ademir Carlos de Oliveira, Laysa Stivanelli e Giovana Santos.

Agradecimentos

À minha família, por tudo. Em especial para meus pais, Andréia e Eduardo e à minha irmã Letícia, as pessoas que eu mais amo e também as que mais me entendem no mundo.

Às amigadas que sobreviveram ao ensino médio: Laís, Julia, Lílian, Miguel, Pedro, Ira e Carol. É bom demais crescer junto a vocês. Aos amigos da graduação, que me carregaram em momentos difíceis e construíram um ambiente seguro. Em especial agradeço à Lais e à Yasmmin por sempre me receberem em sua casa e insistirem em me ter por perto, à Maria Fernanda (MaFê) pela facilidade que é ser entendida por você e à Laura e Cibele pelo momento delicado que passamos. Também à Raquel, Júlia, Liana, May, Amanda, Zaca, Mari, Aline, Gabi (Delay), Giovana (Cad), Giovanna (Seis), Isa, Belle e ao pessoal da “Astromesa” (os membros originais: Matheus, Guilherme, Dora, Jaque, Gustavo, Pedro e os agregados) pelas horas de estudo junto às pausas para um café a cada 20 minutos.

Às minhas colegas do vôlei, do handebol, do atletismo e de qualquer esporte que eu já tenha passado! O esporte salvou minha graduação mais vezes do que sou capaz de me lembrar e sou grata a todos que cruzei nesse caminho. Um abraço especial para Juliana Hirata, Giulia Fioresi, Paula Zilveti, Fernanda Basualdo, Louise Oliveira, Nathalia Fukase e Luísa Bacci, que o vôlei trouxe para a minha vida e também à galera do Handböhhr, a melhor escola de hand que eu poderia ter tido. Hyana, Ruth, Gi, Flor, Mona, Jayne, Milena, Thais, Janine, Ju, Angelina e Vitão. Eu aprendi muito com vocês!

À Profa. Dra. Paula Coelho, por aceitar me orientar de última hora e por toda a compreensão durante as aulas e no desenvolvimento deste trabalho. Obrigada Paula, talvez você não imagine a importância que teve no meu processo de descoberta da pesquisa e da vida acadêmica e como eu posso me encaixar nelas. Estendo os agradecimentos ao grupo de pesquisa: Vini, Ge, André, Danilo, Letícia e Vitória, obrigada pelas ótimas conversas.

Um cumprimento especial ao Prof. Dr. Reinaldo Santos de Lima, pela confiança que depositou em mim para as atividades de divulgação científica, desde o início da minha graduação. Ao pessoal do CASP (Clube de Astronomia de São Paulo), Astrominas, Atendimento Astronômico, Mania de Ensinar (atual TUnE), Observatório Abrahão de Moraes e Planetário do Carmo: vocês são absolutamente gigantes e eu não me vejo fazendo ciência sem a parte da divulgação por culpa de toda experiência que tive com vocês.

E por fim agradeço a todos que contribuíram de alguma forma para eu ter chegado até aqui. Eu me lembro de cada um de vocês e sou imensamente sortuda por conhecer e ter conhecido tantas pessoas generosas ao longo da vida.

“Vita brevis, ars longa, occasio praeceps, experimentum periculosum, iudicium difficile.”

“A vida é breve, a arte é longa, a oportunidade é fugaz, a experiência é traiçoeira e o julgamento é difícil.”

— Hipócrates/Sêneca

“We must build dikes of courage to hold back the flood of fear.”

— Martin Luther King, Jr.

Resumo

Para simular um sistema como uma galáxia ou um aglomerado estelar, é necessário dispor de uma biblioteca estelar que cubra o diagrama HR de maneira abrangente, incluindo diferentes variações químicas. Existem bibliotecas estelares empíricas e teóricas, que atendem a diferentes aplicações e estão em constante atualização. Neste trabalho, avaliamos a qualidade dos modelos teóricos atuais de Branco (comunicação privada) usando os dados da biblioteca empírica *X-shooter Spectral Library (XSL)*. A avaliação foi feita através dos indicadores estatísticos χ^2 e sua forma reduzida (χ_{red}^2) e com a medição dos índices espectrais de Lick. A reavaliação dos cálculos de χ^2 e a inclusão dos erros observacionais melhoraram os resultados, reduzindo *outliers* especialmente no infravermelho. Nossa comparação não evidenciou uma dependência dos modelos com a temperatura, *a priori* em discordância com um dos artigos-base, que a observa para estrelas frias. A principal hipótese para esta dependência não aparecer é o intervalo de temperatura das estrelas ($3800K \leq T_{\text{eff}} \leq 9000K$), que é menor do que o intervalo do artigo ($3000K \leq T_{\text{eff}} \leq 30000K$), cuja dependência aparece principalmente quando avaliamos a cauda fria entre $3000K$ e $4000K$. Observando no artigo o intervalo de T_{eff} aqui utilizado, similarmente não encontramos dependência com a temperatura. Por fim, obtivemos bons resultados para os índices espectrais. O índice *NaD* é desconsiderado dos resultados por estar em uma região dicróica e com exceção do índice *TiO₂*, todos os índices são bem reproduzidos.

Abstract

A stellar library must comprehensively cover the HR diagram, including different chemical variations, to simulate a system such as a galaxy or a stellar cluster. There are empirical and theoretical stellar libraries, each serving different applications and constantly being updated. In this work, we evaluate the quality of current theoretical models of Branco (private communication) using data from the empirical *X-shooter Spectral Library (XSL)*. The evaluation was performed using the statistical indicators χ^2 and its reduced form (χ_{red}^2), along with the measurement of Lick spectral indices. The reassessment of χ^2 calculations and including observational errors improved the results, reducing *outliers*, particularly in the infrared. Our comparison did not reveal a dependence of the models on temperature, *a priori* in disagreement with one of the base articles, which observed such dependence for cool stars. The main hypothesis for this dependence not appearing is the temperature range of the stars ($3800K \leq T_{\text{eff}} \leq 9000K$), which is narrower than the range in the article ($3000K \leq T_{\text{eff}} \leq 30000k$), where the dependence primarily emerges when evaluating the cool tail between $3000K$ and $4000K$. Observing, in the article, the T_{eff} range used here, we similarly did not find a dependence on temperature. Finally, we obtained good results for the spectral indices. The *NaD* index is excluded from the results as it falls in a dichroic region, and except for the *TiO₂* index, all indices are well reproduced.

Lista de Figuras

| | | |
|-----|---|----|
| 1.1 | Comparações do espectro de uma mesma estrela, originalmente e depois com a aplicação da máscara para filtrar as regiões indesejadas, de ruídos telúricos e dicroicos. | 21 |
| 1.2 | Comparações entre modelos inicialmente considerados bom (esquerda) e ruim (direita). | 22 |
| 1.3 | Painel com os histogramas da distribuição de χ^2 (à esquerda) e dos valores para o desvio médio (à direita). | 22 |
| 1.4 | Painel com os gráficos de dispersão da temperatura efetiva com (à esquerda) a distribuição de χ^2 e (à direita) os valores para o desvio médio. Cada ponto associa o valor absoluto do χ^2 de cada espectro com a sua respectiva temperatura. | 23 |
| 2.1 | Diagrama de Kiel com os objetos observados pela XSL (cinza) sobrepostos com a amostra de baixa metalicidade (codificado por cor). | 25 |
| 2.2 | Representação da medida dos índices Fe5270 e M_{g_2} para a estrela NGC 6528 I 27, onde os círculos brancos indicam os limites dos contínuos, os círculos pretos o ponto médio de cada contínuo e a reta pontilhada o contínuo local. Os diamantes indicam os limites da banda passante. No painel superior, a linha mais grossa sobre o espectro indica a região para a qual é calculada a largura equivalente. No painel inferior, as linhas tracejadas e pontilhadas definem a região para o cálculo em magnitudes da banda. | 28 |

| | | |
|------|--|----|
| 3.1 | Comparações entre espectros que tiveram pouca diferença pelos diferentes métodos: trapézio (esquerda) e simpson (direita). Os espectros sintéticos aparecem em azul ou verde. | 31 |
| 3.2 | Comparações entre espectros que tiveram diferença visual significativa pelos diferentes métodos: trapézio (esquerda) e simpson (direita). | 31 |
| 3.3 | Comparação entre os espectros das 3 estrelas teste, considerados bons. . . . | 33 |
| 3.4 | Valores de χ^2 das estrelas testadas para a identificação dos problemas. . . . | 33 |
| 3.5 | Histogramas com os parâmetros fluxo, erro, sinal-ruído e chi-quadrado das estrelas teste dos dados não filtrados. | 34 |
| 3.6 | Histogramas com os parâmetros fluxo, erro, sinal-ruído e χ^2 das estrelas teste filtrados. | 34 |
| 3.7 | Gráficos de distribuição dos parâmetros fluxo, erro, sinal-ruído e chi-quadrado em função do comprimento de onda das estrelas teste dos dados não filtrados, mostrando os pixels problemáticos nas regiões telúricas do infravermelho | 35 |
| 3.8 | Gráficos de distribuição dos parâmetros fluxo, erro, sinal-ruído e chi-quadrado em função do comprimento de onda das estrelas teste dos dados filtrados. . | 35 |
| 3.9 | Histograma obtido da distribuição de χ^2 dos espectros disponíveis. | 36 |
| 3.10 | Histograma da distribuição de χ^2 , filtrando os valores de χ^2 maiores do que E+20. | 37 |
| 3.11 | Histograma da distribuição de χ^2 , com os valores limitados a 1000 nm, para evitar valores discrepantes do infravermelho. | 37 |
| 3.12 | Gráfico de dispersão entre os valores de χ^2 e o parâmetro atmosférico da temperatura efetiva (T_{eff}). | 38 |
| 3.13 | Gráfico de dispersão entre os valores de χ^2 e o parâmetro atmosférico da temperatura efetiva (T_{eff}), limitados à 1000 nm. | 38 |
| 3.14 | Nos painéis superiores, temos as comparações estatísticas de χ^2 e desvio médio com a temperatura efetiva T_{eff} para as estrelas da biblioteca sintética SYNCOMIL. As cruzes vermelhas indicam estrelas que não foram utilizadas nos modelos de SPS. Nos painéis inferiores vemos a distribuição dos valores das mesmas métricas, para a mesma biblioteca. | 39 |

| | | |
|------|--|----|
| 3.15 | Comparação entre modelos e observações para o perfil da linha de sódio nos gráficos obtidos pelo método de Simpson. Nas linhas de absorção, nota-se que o espectro sintético, em azul, cruza o espectro observado, em marrom. O espectro em verde é o espectro sintético de alta resolução, antes do processo de convolução, apenas para a visualização. As linhas tracejadas marcam os limites da banda passante, que define a região de medição do perfil. | 41 |
| 3.16 | Comparação entre modelos e observações para o perfil da linha de sódio nos gráficos obtidos pelo método dos Trapézios, sendo o espectro sintético em azul e o observado em laranja e as linhas tracejadas marcam os limites da banda passante, que define a região de medição do perfil. | 42 |
| 3.17 | Comparação entre modelos e observações para o perfil da linha de CN_1 nos gráficos obtidos pelo método de Simpson, sendo o espectro sintético em azul, o observado em marrom e as linhas tracejadas marcam os limites da banda passante, que define a região de medição do perfil. | 42 |
| 3.18 | Comparação entre modelos e observações para o perfil da linha de CN_1 nos gráficos obtidos pelo método dos Trapézios, sendo o espectro sintético em azul e o observado em laranja e as linhas tracejadas marcam os limites da banda passante, que define a região de medição do perfil. | 43 |
| 3.19 | Exemplo de índice espectral (Na_D) cujo intervalo da banda passante está contida em um dos intervalos de emissões dicróicas, que são filtrados nas análises, mas que foi medido sem a máscara nas regiões. | 43 |
| 3.20 | Comparação de 12 índices espectrais de Lick entre o modelo sintético e o espectro observado, com o desvio padrão da diferença entre os índices sintéticos e observados (σ). | 45 |
| 3.21 | Espectros das estrelas que se repetem como valores discrepantes em mais de um índice espectral, sendo a estrela X0519 se repetindo 10 vezes e X0610 se repetindo 4 vezes. | 46 |
| 3.22 | Espectros das estrelas que se repetem como valores discrepantes em mais de um índice espectral, sendo a estrela X0378 se repetindo 2 vezes e X0756 se repetindo 4 vezes. | 47 |
| A.1 | Perfis de linhas dos índices $Ca4227$, CN_1 , CN_2 nos dois ajustes. | 55 |

| | | |
|-----|--|----|
| A.2 | Perfis de linhas dos índices Fe5270, Fe5335 e G4300 nos dois ajustes. | 56 |
| A.3 | Perfis de linhas dos índices H_β , H_{δ_F} e H_{γ_F} nos dois ajustes. | 57 |
| A.4 | Perfis de linhas dos índices Mg_b , Na_D e TiO_2 nos dois ajustes. | 58 |

Lista de Tabelas

| | | |
|-----|---|----|
| 2.1 | Amostra de parâmetros atmosféricos para diferentes estrelas. | 25 |
| 2.2 | Intervalos de medição dos índices espectrais | 29 |
| 3.1 | ID dos espectros e o número de repetições como <i>outlier</i> para os índices espectrais | 46 |
| 3.2 | Principais outliers por índice espectral | 47 |
| 3.3 | ID's dos espectros que aparecem como <i>outliers</i> de χ^2 vs T_{eff} | 48 |
| B.1 | Intervalos completos da medição dos 12 índices espectrais | 59 |

Sumário

| | |
|---|----|
| 1. <i>Introdução</i> | 19 |
| 1.1 <i>Objetivos</i> | 20 |
| 1.2 <i>Resumo Trabalho de Graduação I</i> | 21 |
| 2. <i>Dados & Metodologia</i> | 24 |
| 2.1 <i>Biblioteca Empírica</i> | 24 |
| 2.2 <i>Biblioteca Teórica</i> | 25 |
| 2.3 <i>Métricas Estatísticas</i> | 26 |
| 2.4 <i>Índices Espectrais</i> | 27 |
| 3. <i>Desenvolvimento & Resultados</i> | 30 |
| 3.1 <i>Comparações Visuais Entre Espectros</i> | 30 |
| 3.2 <i>Métricas Quantitativas de Comparação</i> | 32 |
| 3.3 <i>Comparação Entre Índices Espectrais</i> | 40 |
| 3.3.1 <i>Outliers</i> | 45 |
| 4. <i>Conclusões</i> | 49 |
| <i>Referências</i> | 51 |
| <i>Apêndice</i> | 53 |
| A. <i>Perfis de linhas de todos os índices espectrais</i> | 55 |
| B. <i>Anexos</i> | 59 |

Introdução

As bibliotecas espectrais estelares são um conjunto de espectros de diferentes estrelas, utilizadas como ferramenta para a pesquisa em diversas áreas da astronomia. Uma das aplicações está no desenvolvimento de modelos de síntese de populações estelares (SPS), a partir da determinação de diferentes parâmetros como: história de formação estelar, metalicidades, abundâncias químicas e funções de massa iniciais (Verro, K. et al., 022a). Os modelos de síntese de populações estelares são fundamentais para o estudo de galáxias e aglomerados de estrelas, o que evidencia a necessidade de se obter a maior quantidade de informações possíveis para compor as bibliotecas estelares, possibilitando a modelagem destes objetos de estudo com precisão.

Uma biblioteca empírica ideal deveria possuir um conjunto completo dos espectros de todas as variações possíveis de estrelas. Além de uma cobertura abrangente de comprimentos de onda, é necessário que se inclua estrelas representantes de todas as fases evolutivas, em todas as massas, com todas as metalicidades e também com abundâncias químicas distintas. As bibliotecas empíricas reais possuem limitações, como a cobertura incompleta do diagrama HR. Ignorando este limite de estrelas que causam a lacuna nos dados, podemos utilizar estas bibliotecas com uma larga margem de confiança, justamente por ser bem estabelecida a precisão instrumental, que é capaz de retornar dados com alta qualidade e boa resolução.

Por estes motivos, uma alternativa desenvolvida é a de se usar as bibliotecas teóricas ou sintéticas, cuja construção se baseia em previsões teóricas das atmosferas estelares e fluxos emergentes e que por isso têm a capacidade de cobrir mais extensivamente o diagrama

HR. As bibliotecas empíricas sofrem com limitações em questões observacionais como a resolução instrumental, a cobertura de comprimento de onda e a calibração do fluxo, assim como a impossibilidade de se estudar a cobertura completa dos tipos de estrelas. Entretanto, não é simples apenas fazer a substituição das empíricas pelas teóricas, pois apesar de superar diversas limitações, as bibliotecas teóricas atuais não conseguem reproduzir em plenitude os detalhes dos espectros de estrelas por limitações dos modelos (Martins, L. P. e Coelho, P., 2007), causadas tanto pelas listas de opacidades (átomos e moléculas) na atmosfera estelar quanto pela física simplificada adotada na modelagem das atmosferas. Esses são fatores que se somam à dificuldade da reprodução de um determinado sistema, que exige uma mistura personalizada.

No trabalho realizado em Coelho, P. R. T. et al. (2020), foram comparados os espectros da biblioteca empírica MILES com os espectros sintéticos de Coelho, P. R. T. (2014), visando estudar a melhor opção de escolha entre a MILES, que possui uma qualidade melhor nos espectros individuais ou a biblioteca teórica, que possui uma cobertura melhor no espaço de parâmetros. Para realizar esta comparação, a biblioteca sintética foi construída imitando a cobertura de parâmetros atmosféricos da biblioteca empírica, adotando diferentes modelos de SPS. Desde esse período foram desenvolvidas bibliotecas melhores, tanto empíricas quanto teóricas, restando avaliar se as comparações entre os dois tipos melhoraram ou não.

1.1 *Objetivos*

O objetivo deste trabalho é quantificar a comparação entre os espectros sintéticos e espectros empíricos de novas bibliotecas: a biblioteca empírica X-shooter (XSL) Vernet et al. (2011) e os novos modelos de Branco (2024), baseados em Branco, V. et al. (2024) que se limitam às estrelas de baixa metalicidade. Com estes dados, busca-se verificar a reprodutibilidade do método, comparando com os resultados apresentados anteriormente na literatura.

A utilização de dados e modelos melhores foi feita com a finalidade de observar possíveis mudanças com os resultados da literatura, obtendo indicadores estatísticos como χ^2 e

também a correlação dessas métricas com parâmetros atmosféricos, aqui focamos na temperatura efetiva T_{eff} . Também serão medidos doze índices espectrais (ver Seção 3.3), conhecidos como índices padrão de Lick (Faber, S. M. et al., 1985), que são as características espectrais constituídas de linhas atômicas de absorção e as bandas moleculares, na região entre 400 e 640 nm.

1.2 Resumo Trabalho de Graduação I

O tratamento dos dados exigiu escolha entre os métodos de integração para a normalização dos fluxos, que permitiu a comparação visual nas etapas iniciais. A função calculada na rotina utilizou o método de Simpson, através das integrais $\int_{3500}^{25000} F_{\lambda} = 1$, para cada tipo de fluxo. Os arquivos tinham origens diferentes, sendo os dados observados obtidos diretamente do domínio da *X-shooter Spectral Library*, em formato FITS e os dados sintéticos em formato ASC. Essa discussão será retomada na Seção 3.1.

Os efeitos de contaminação das regiões dicroicas e telúricas, que são respectivamente causadas por questões instrumentais e por efeitos atmosféricos, afetam diretamente a qualidade dos dados, tornando necessária a filtragem dessas regiões ruidosas nos espectros, delimitadas pelos intervalos de comprimento de onda: *Dicroico*₁ entre 545–590 nm, *Dicroico*₂ entre 994 – 1150 nm, *Telurico*₁ entre 1350 – 1420 nm e *Telurico*₂ entre 1770 – 2100 nm *Telurico*₃ 2270 – 2275 nm. A Figura 1.1 mostra um exemplo de espectros antes e depois da aplicação do filtro.

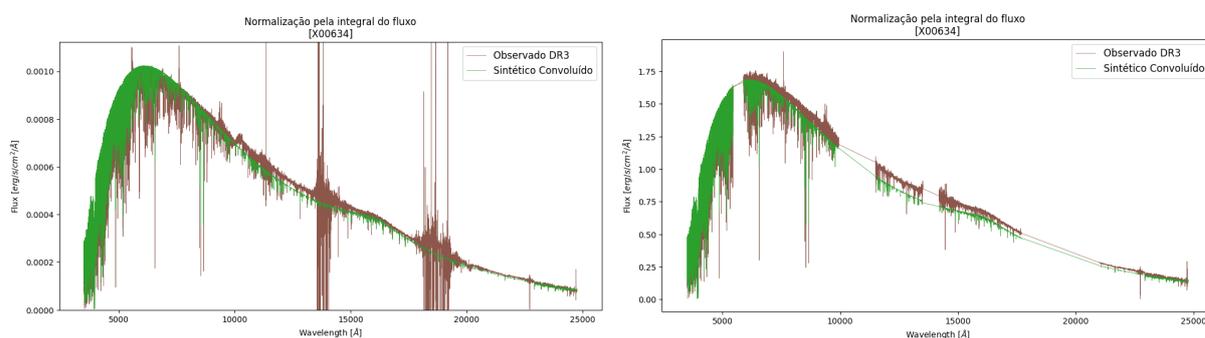


Figura 1.1: Comparações do espectro de uma mesma estrela, originalmente e depois com a aplicação da máscara para filtrar as regiões indesejadas, de ruídos telúricos e dicroicos.

Após a aplicação da máscara em todas as estrelas de interesse, foi possível reparar em uma variedade de modelos ajustados, distribuídos entre o que denominamos de bons e ruins (Figura 1.2).

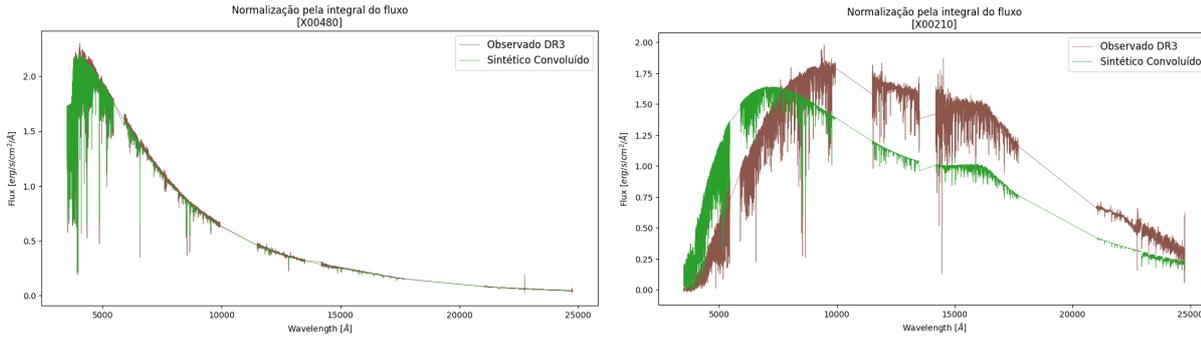


Figura 1.2: Comparações entre modelos inicialmente considerados bom (esquerda) e ruim (direita).

Para criar o histograma com as métricas estatísticas, pegou-se os novos valores dos fluxos, tanto dos espectros sintéticos quanto dos observados após a máscara, eliminando as regiões problemáticas e garantindo a menor interferência dos ruídos das contaminações na visualização. As métricas estatísticas foram calculadas e os histogramas resultantes estão na Figura 1.3, que mostra que a maioria das estrelas está sendo relativamente bem reproduzida, com valores baixos de χ^2 , mas que existe uma cauda de estrelas que são piores, o que até então, corroborou visualmente a diferença encontrada entre modelos e espectros observados.

Outra forma de interpretar essas métricas, é através da comparação dos indicadores com os parâmetros atmosféricos, podendo comparar com propriedades físicas conhecidas.

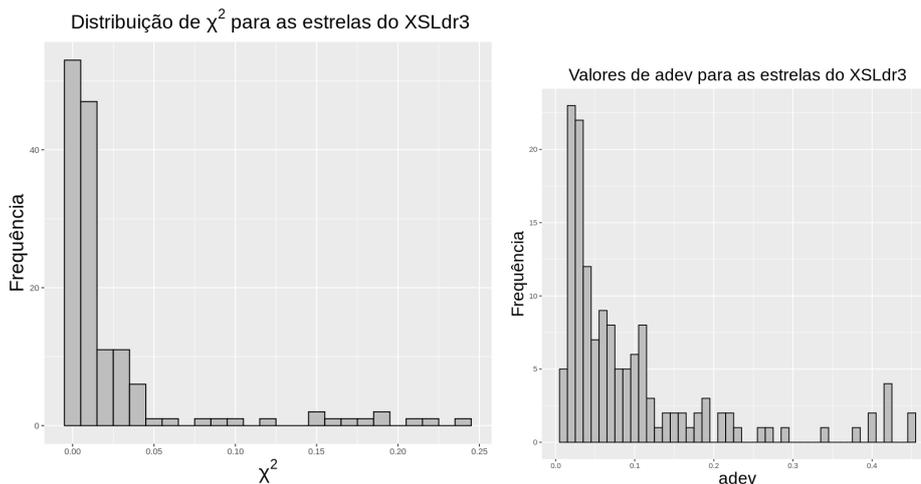


Figura 1.3: Painel com os histogramas da distribuição de χ^2 (à esquerda) e dos valores para o desvio médio (à direita).

A Figura 1.4 mostra que, em todas as comparações existem *outliers* óbvios e um dos objetivos era isolar tais estrelas e entender seus perfis. Não ficou claro o motivo de os

modelos possuírem valores discrepantes para as mesmas temperaturas, uma vez que são conhecidos os intervalos para quais os modelos teóricos não são bons. Percebe-se também uma correlação com a temperatura, que pode ser observada a partir de $6000K$, onde há um acúmulo de pontos e depois observamos a dispersão destes pontos conforme a temperatura diminui. Há, em Coelho, P. R. T. et al. (2020) a conclusão de que existe uma correlação com a temperatura, porém o intervalo onde é possível observar tal dependência está fora da amostra aqui utilizada. Veremos isso à frente, na Seção 3.2.

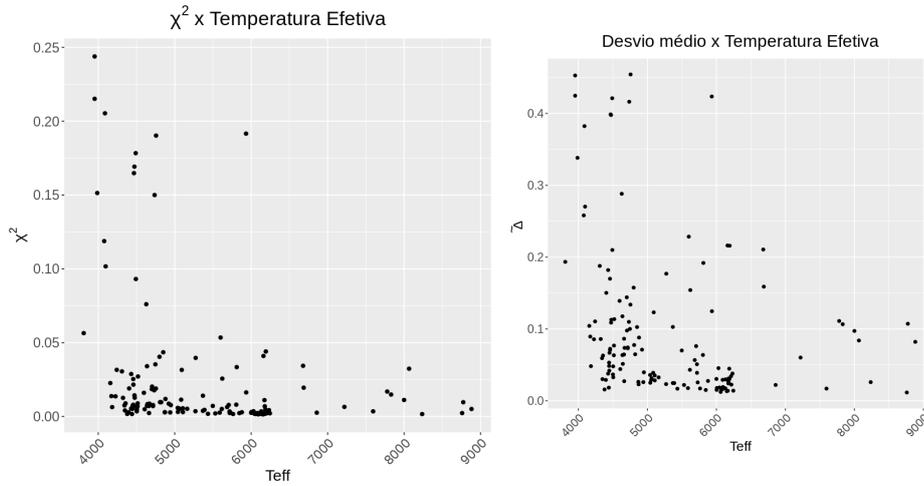


Figura 1.4: Painel com os gráficos de dispersão da temperatura efetiva com (à esquerda) a distribuição de χ^2 e (à direita) os valores para o desvio médio. Cada ponto associa o valor absoluto do χ^2 de cada espectro com a sua respectiva temperatura.

As comparações com os outros parâmetros atmosféricos; gravidade superficial $\log g$ e metalicidade $[Fe/H]$ não apresentam correlação direta. Por fim, deu-se início às medições de índices espectrais, também visando entender aspectos astrofísicos dos modelos teóricos. Embora não tenha sido concluído no TGI, a continuidade do estudo dos índices será apresentada em seções futuras deste trabalho.

Dados & Metodologia

2.1 Biblioteca Empírica

A *X-shooter Spectral Library* (XSL) é uma biblioteca espectral estelar construída utilizando o espectrógrafo de resolução média X-shooter, instrumento que faz parte do conjunto de telescópios VLT (*Very Large Telescope*), da ESO. A XSL possui uma cobertura de comprimentos de onda de $3000 - 25000 \text{ \AA}$, com uma resolução $R \sim 10000$. O terceiro conjunto de dados (DR3) foi liberado em Março de 2022, e possui 830 espectros estelares de 683 estrelas diferentes, cobrindo a maior parte do diagrama HR entre estrelas do tipo O a M, e também estrelas do Ramo Assintótico das Gigantes (AGB). Além dos espectros originais, também estão disponíveis as versões corrigidas pelas extinções causadas pelo meio interestelar (Verro, K. et al., 022a), identificadas por 5 possíveis nomenclaturas de arquivos: *merged_scl.fits*, *merged.fits*, *merged_ncl.fits*, *merged_ncge.fits* ou *merged_ncl_ncge.fits*, que se referem aos arquivos que foram ou não corrigidos.

A Tabela 2.1 apresenta os valores dos parâmetros atmosféricos¹ de algumas das estrelas utilizadas. A primeira coluna é o índice que identifica a estrela na biblioteca X-shooter, a segunda coluna mostra os valores para a temperatura efetiva em Kelvin, a terceira coluna mostra os valores para a gravidade superficial $\log g$ e a última as metalicidades.

Como as observações do VLT são feitas a partir do solo, a interação da radiação com as moléculas da atmosfera produz outras linhas de absorção e de emissão que contaminam o espectro, principalmente nas faixas do visível e em algumas partes do infravermelho próximo. Essas interferências são as contaminações telúricas (Seção 1.2).

¹ <http://kurucz.harvard.edu/linelists/linesmol/>

Tabela 2.1 - Amostra de parâmetros atmosféricos para diferentes estrelas.

| XSL ID | T_{eff} | $\log g$ | [Fe/H] |
|--------|------------------|----------|--------|
| 122 | 4922 | 2.25 | -1.63 |
| 123 | 5271 | 3.12 | -1.51 |
| 143 | 5811 | 3.84 | -1.53 |
| 151 | 4808 | 1.47 | -1.64 |
| 157 | 6161 | 4.25 | -1.46 |
| 171 | 4879 | 1.54 | -1.55 |
| 176 | 6074 | 4.14 | -1.34 |
| 198 | 5846 | 4.27 | -1.51 |
| 200 | 6004 | 04.04 | -1.04 |
| 210 | 3987 | 0.64 | -1.56 |

2.2 Biblioteca Teórica

Os modelos utilizados foram fornecidos por Branco (2024), que como citado anteriormente estuda aglomerados globulares antigos e que, por esta razão, focou seus modelos nas estrelas de baixa metalicidade da XSL. Com os parâmetros atmosféricos derivados para os objetos da XSL-DR3, obtidos da literatura (Arentsen, A. et al., 2019) a amostra onde $[\text{Fe}/\text{H}] \leq -1.0$ foi filtrada, restando 177 dos 830 espectros estelares disponíveis.

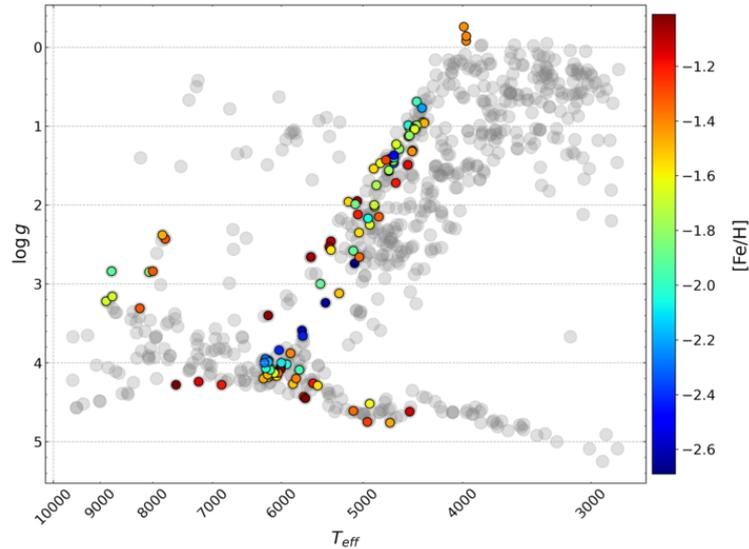


Figura 2.1: Diagrama de Kiel com os objetos observados pela XSL (cinza) sobrepostos com a amostra de baixa metalicidade (codificado por cor).

Na Figura 2.1 estão os 177 objetos, porém nem todos os modelos convergiram, o que resultou em uma redução na quantidade de espectros que aqui foram trabalhados. Dos

168 espectros que convergiram, 19 estrelas não eram compatíveis para serem plotadas, pois eram arquivos do tipo *merged_ncl.fits*, *merged_ncge.fits* ou *merged_ncl_ncge.fits*, descritos na Seção 2.1, que não havia as correções nos espectros. Outras 5 estrelas foram descartadas, pois por motivos que não puderam ser investigados devido ao tempo, o cálculo das integrais dos fluxos dessas estrelas não convergiu, impossibilitando a normalização dos espectros. Esses fatores resultaram em 144 espectros utilizados no trabalho.

Objetivamente, foram adotados os seguintes parâmetros: A razão $[\alpha/Fe] = 0.4$, o intervalo de comprimento de onda $250 \text{ nm} \leq \lambda \leq 2550 \text{ nm}$, a resolução espectral $R = 11573$ (sendo que todos os espectros foram convoluídos adequadamente para a resolução espectral de cada braço da XSL: $UVB = 9793$ e $NIR = 7956$, vide intervalos da XSL), a velocidade de microturbulência $v_{turb} = 1.0 \text{ km/s}$, que é a mesma para todos os modelos. Além disso, as opacidades moleculares adotadas foram as de Kurucz² e as opacidades atômicas são de Branco, V. e Coelho, P. R. T. (2020) e Branco, V. et al. (2024).

2.3 Métricas Estatísticas

Para conseguir qualificar os resultados das comparações, foram utilizadas duas formas da mesma métrica estatística: o chi-quadrado (χ^2). Com ele é possível quantificar a diferença entre valores de um conjunto de dados que são obtidos e observados com os valores de um conjunto de dados de um modelo teórico. A expressão mais genérica para o χ^2 é

$$\chi_{\text{genérico}}^2 = \sum \frac{(f_{\lambda}^{\text{syn}} - f_{\lambda}^{\text{obs}})^2}{\sigma^2} \quad (2.1)$$

mas aqui será calculado como

$$\chi^2 = \sum_i \frac{\left(\frac{f_{\lambda}^{\text{syn}} * auc_{\text{obs}}}{auc_{\text{syn}}} - f_{\lambda}^{\text{obs}}\right)^2}{\sigma^2} \quad (2.2)$$

onde f_{λ}^{syn} e f_{λ}^{obs} são os fluxos sintéticos e observados para um comprimento de onda λ , auc_{syn} e auc_{obs} são as integrais de cada fluxo e σ é o erro associado ao observado. Esta equação já está normalizando o fluxo sintético em relação ao fluxo observado, em um

² <http://kurucz.harvard.edu/molecules.html>

processo chamado escalonamento, para assim preservar os fluxos originais. Isso garante que a escala do erro e do fluxo observado permaneça a mesma. O outro é o chi-quadrado reduzido (χ_{red}^2), sendo simplesmente

$$\chi_{red}^2 = \frac{\sum_i \chi^2}{n} \quad (2.3)$$

onde n é o número de pixels válidos.

2.4 Índices Espectrais

Os índices espectrais são medidas no espectro de absorção de estrelas ou galáxias que vêm das propriedades espectrais de um elemento químico, em diferentes comprimentos de onda. Eles são definidos em um espectro contínuo normalizado, em 3 intervalos: o da banda passante, o contínuo normalizado no azul e o contínuo normalizado no vermelho. O ponto médio entre cada contínuo define uma reta, chamada de contínuo local, onde uma função polinomial é ajustada. O valor final dos índices é a integral dessa área, em unidades de largura equivalente ou magnitude. A Figura 2.2 apresenta uma visualização sobre a medição dos índices espectrais de Fe5270 e Mg_2 para a estrela NGC 6528 I 27 realizada em Coelho, P. R. T. (2000).

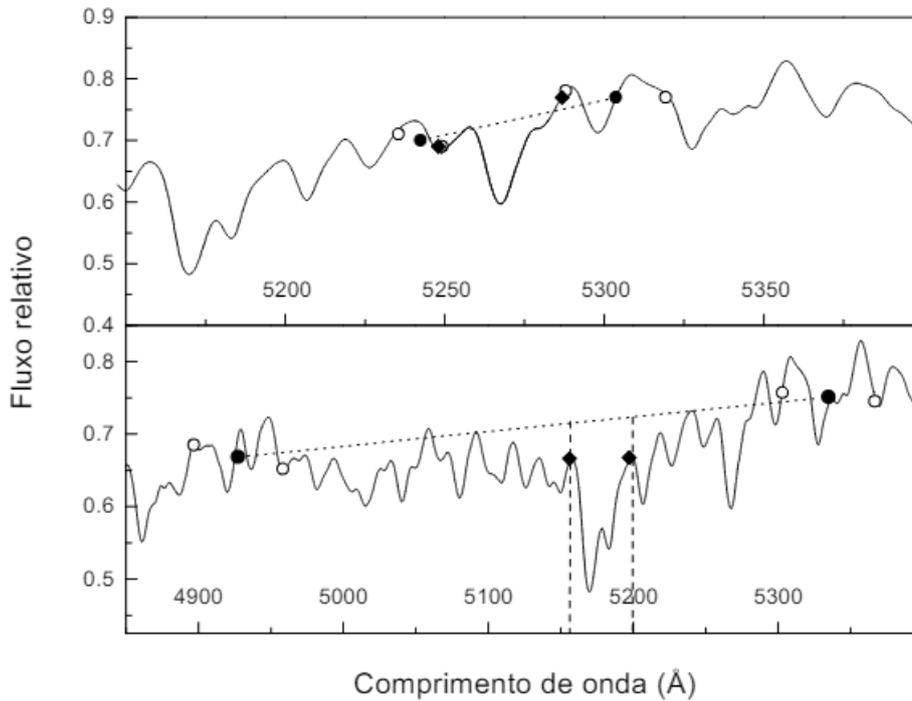


Figura 2.2: Representação da medida dos índices $Fe5270$ e Mg_2 para a estrela NGC 6528 I 27, onde os círculos brancos indicam os limites dos contínuos, os círculos pretos o ponto médio de cada contínuo e a reta pontilhada o contínuo local. Os diamantes indicam os limites da banda passante. No painel superior, a linha mais grossa sobre o espectro indica a região para a qual é calculada a largura equivalente. No painel inferior, as linhas tracejadas e pontilhadas definem a região para o cálculo em magnitudes da banda.

Existem diversos índices conhecidos, calculados em regiões específicas de forma a evidenciar características próprias, que possibilitam inferir conclusões em um determinado ambiente ou para um determinado objeto observado. Aqui serão usados como referência os índices padrão de Lick, que foram definidos por Faber, S. M. et al. (1985) com o principal objetivo de estudar estrelas, a partir das medidas das linhas de absorção dos espectros estelares.

Com estes índices é possível inferir propriedades sobre temperatura, gravidade superficial e metalicidade. Serão medidos doze índices espectrais (CN_1 , CN_2 , NaD , $G4300$, $Ca4227$, $Fe5270$, $Fe5335$, H_β , H_{δ_F} , H_{γ_F} , Mg_b , TiO_2) definidos pela biblioteca padrão de índices de Lick do PyPhot³, que é uma ferramenta utilizada para calcular a fotometria de espectros. O cálculo dos índices também foi feito a partir da função *LickLibrary()* dentro da biblioteca do Pyphot, em uma rotina de *Python*.

³ <https://mfouesneau.github.io/pyphot/licks.html>

A Tabela 2.2 mostra os intervalos de comprimento de onda das bandas em que os índices foram medidos em Angstroms (\AA). A versão completa desta tabela para os índices aqui utilizados, contendo os intervalos dos contínuos azul e vermelho além dos intervalos de banda se encontra no Apêndice B e os dados para todos os índices da biblioteca interna do Pyphot podem ser encontrados em sua documentação⁴. Os resultados das medições serão mostrados mais à frente, na Seção 3.3.

Tabela 2.2 - Intervalos de medição dos índices espectrais

| Nome | Mínimo [\AA] | Máximo [\AA] |
|----------|-------------------------|-------------------------|
| CN_1 | 4142.125 | 4177.125 |
| CN_2 | 4142.125 | 4177.125 |
| Ca4227 | 4222.250 | 4234.750 |
| Fe5270 | 5245.650 | 5285.650 |
| Fe5335 | 5312.125 | 5352.125 |
| G4300 | 4281.375 | 4316.375 |
| H_beta | 4847.875 | 4876.625 |
| Hdelta_F | 4091.000 | 4112.250 |
| Hgamma_F | 4331.250 | 4352.250 |
| Mg_b | 5160.125 | 5192.625 |
| Na_D | 5876.875 | 5909.375 |
| TiO_2 | 6189.625 | 6272.125 |

⁴ <https://mfouesneau.github.io/pyphot/licks.html/library-content>

Desenvolvimento & Resultados

3.1 Comparações Visuais Entre Espectros

Foi citado na Seção 1.2 que a comparação visual entre os espectros é a primeira avaliação que podemos fazer dos modelos. Identificamos, porém, que grande parte dos problemas anteriores (modelos visualmente considerados ruins) estava na manipulação dos arquivos FITS, que de início apenas havia deixado os valores dos fluxos observados organizados em um formato estranho, que dificultou os plots iniciais das métricas estatísticas, pois os histogramas em si foram obtidos por meio de códigos na linguagem de programação *R*, enquanto os espectros eram manipulados em *Python*. Por isso resolvemos refazer todo o processo de plot dos espectros em *R*, utilizando o RStudio.

Após reuniões com a orientadora, descobrimos que não havia a necessidade de manipular os arquivos puros FITS, pois os mesmos arquivos fornecidos com os espectros sintéticos já possuíam coluna com os fluxos do DR3, no formato ASC, que antes imaginamos ser pertencentes ao DR2 e que por esta razão tinham sido ignorados. Desta forma, as questões problemáticas em lidar com diferentes formatos de arquivos puderam ser solucionadas. A introdução do RStudio exigiu um período de familiarização com o *software* e reconhecimento de ferramentas para conseguir trabalhar com os dados. Por esses motivos, foi necessário readaptar a forma de normalização entre os fluxos sintéticos e observados, utilizando desta vez, o método de integração dos Trapézios, ao invés da integração por Simpson anterior.

Surpreendentemente, alguns espectros estavam diferentes. Os plots que anteriormente

eram considerados bons permaneceram iguais ou levemente melhores, como na Figura 3.1, mas os modelos considerados ruins mudaram completamente seu corpo negro, inclusive o pico de emissão de radiação, como a Figura 3.2 mostra.

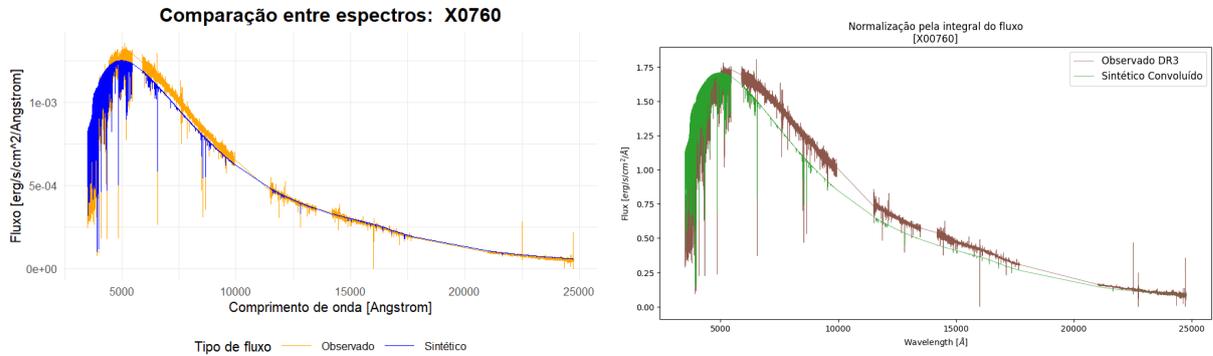


Figura 3.1: Comparações entre espectros que tiveram pouca diferença pelos diferentes métodos: trapézio (esquerda) e simpson (direita). Os espectros sintéticos aparecem em azul ou verde.

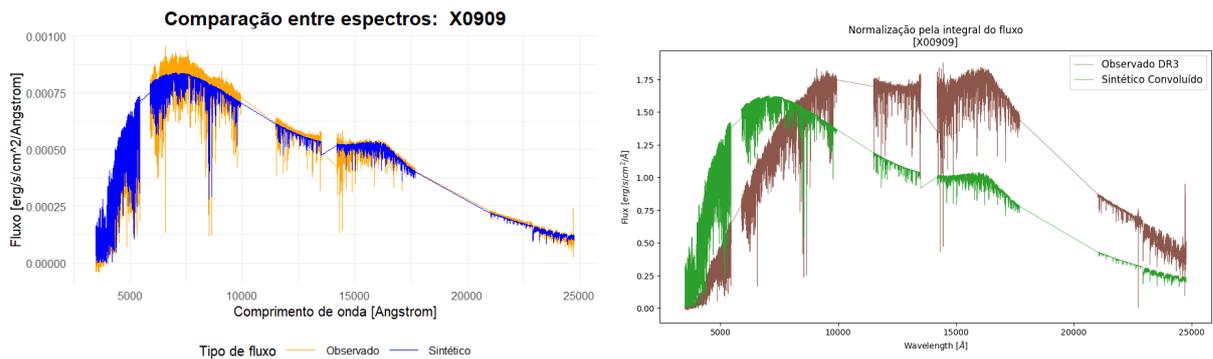


Figura 3.2: Comparações entre espectros que tiveram diferença visual significativa pelos diferentes métodos: trapézio (esquerda) e simpson (direita).

A parte curiosa está no fato de que o espectro sintético não está sendo alterado, apenas o observado. O contrário não causaria estranheza, pois é esperado que os dados reais permaneçam intactos conforme os ajustes ou normalizações. Somado a isso, o método de Simpson é significativamente superior, em termos de precisão. O método dos Trapézios aproxima a área sob a curva dividindo-a em pequenos segmentos trapezoidais e somando-os para obter a integral total com uma precisão de segunda ordem (o erro decresce com o quadrado da diminuição no tamanho dos intervalos $O(h^2)$) e uma velocidade de convergência baixa. Por outro lado, o método de Simpson utiliza parábolas para aproximar a área sob a curva, calculando a integral aproximada com uma precisão de quarta ordem e erro $O(h^4)$, o que torna a aproximação significativamente melhor ao reduzir o tamanho dos intervalos

e com uma velocidade de convergência maior.

Por ser mais preciso, foi inusitado nos depararmos com espectros observados que ajustassem melhor desta maneira. Desta forma, podemos reforçar que houve de fato um erro na manipulação dos arquivos FITS em algumas das rotinas *Python*, que alteraram a estrutura dos *dataframes* dos espectros. Consequentemente, além do novo cálculo do χ^2 considerando os erros do observado, que já seriam feitos, surgiu a necessidade de analisar os modelos ruins, pois com ajustes melhores a expectativa seria a diminuição na quantidade de *outliers*.

3.2 Métricas Quantitativas de Comparação

Através das equações descritas na Seção 2.3, enfim foram calculados os novos valores de χ^2 , trazendo novas problemáticas ao estudo por utilizarmos os erros dos espectros, ao contrário do TG1, onde não incluímos os erros. Para diversas estrelas, os cálculos retornaram não apenas valores extrapolados (com ordens maiores que E+20) como também infinitos. Apesar das dificuldades anteriores com a manipulação dos arquivos (TGI), os valores calculados de χ^2 não apresentaram problemas (como valores infinitos). Por esta razão, houve a necessidade de se revisar o processo do cálculo dos novos χ^2 , para entender a origem dos valores extrapolados.

O procedimento de revisão começou com a escolha de 3 estrelas com plots considerados bons (Figura 3.3), mas com valores diferentes de χ^2 , sendo dois deles inadequados e um apropriado (Figura 3.4), reforçando a propagação de algum erro, pois gráficos e valores não correspondiam. Foram feitos dois testes para cada uma das 3 estrelas: o 1º teste utilizando os espectros completos e o 2º teste utilizando os espectros filtrados.

Para cada estrela filtramos os pixels válidos para obter o χ_{red}^2 da Equação 2.3, e depois isolamos os pixels para os quais o χ^2 estivesse acima de E+20. Plotamos por fim os histogramas individuais em escala logarítmica da distribuição dos fluxos (FLUX_DR), do erro (ERR), do Sinal-Ruído (SNR) e do χ^2 (chi2), para tentar identificar a existência de pontos problemáticos. As Figuras 3.5 (1º teste) e 3.6 (2º teste) ilustram o exemplo, para a estrela

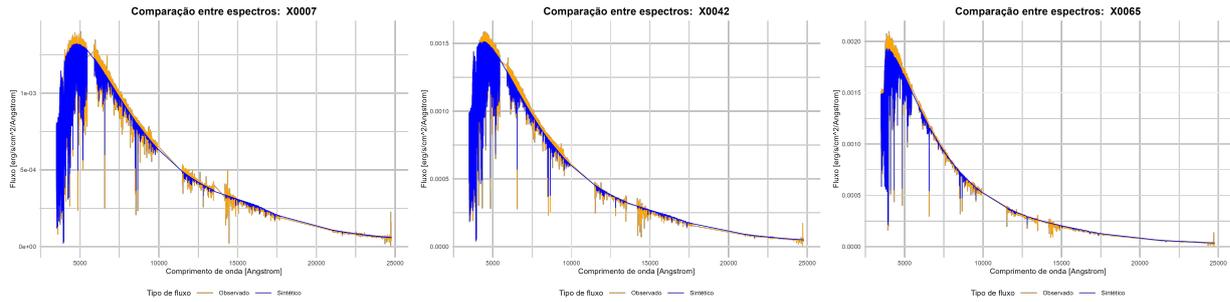


Figura 3.3: Comparação entre os espectros das 3 estrelas teste, considerados bons.

| id <chr> | chi2 <dbl> |
|--------------------|----------------------|
| X0007 | 1.610529e+26 |
| X0042 | 3.420480e-01 |
| X0065 | Inf |

Figura 3.4: Valores de χ^2 das estrelas testadas para a identificação dos problemas.

X0007. Também plotamos os mesmos 4 parâmetros em função do comprimento de onda, exemplificados nas Figuras 3.7 (1^o teste) e 3.8 (2^o teste). A razão Sinal-Ruído quantifica a relação entre a intensidade de um sinal desejado e a intensidade do ruído na observação. Um SNR mais alto indica uma captura de sinal mais limpa, enquanto um SNR mais baixo significa que o ruído interfere mais na medição. O cálculo simples consistiu na divisão do fluxo observado (aparecendo nas imagens em termos de FLUX_DR ou FLUX_SC, que são as colunas de fluxo observado) pelo erro associado.

Todos os gráficos feitos a partir dos dados não filtrados de fato revelaram a existência de pontos isolados, com valores extremamente altos de χ^2 . Algumas hipóteses para esses valores eram atribuídas a valores muito baixos de fluxo ou do erro, o que também diminuiria os valores de SNR. Por isso, foi necessário mascarar esses pontos extremos onde o SNR estava abaixo de 1 e, em alguns casos abaixo de 0. Posteriormente, encontramos pixels onde com erro $ERR = 0$, responsáveis pelos valores de infinitos, que também foram excluídos. As Figuras 3.5 e 3.7 evidenciam com clareza a necessidade de mascarar as regiões com as emissões telúricas principalmente.

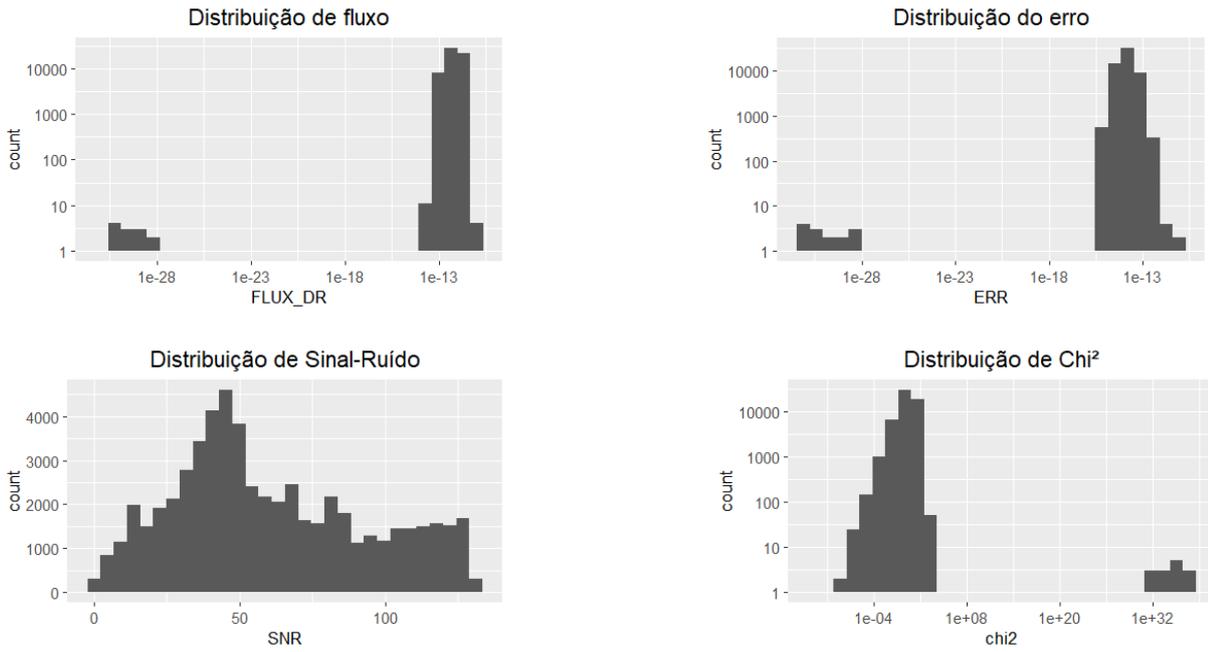


Figura 3.5: Histogramas com os parâmetros fluxo, erro, sinal-ruído e chi-quadrado das estrelas teste dos dados não filtrados.

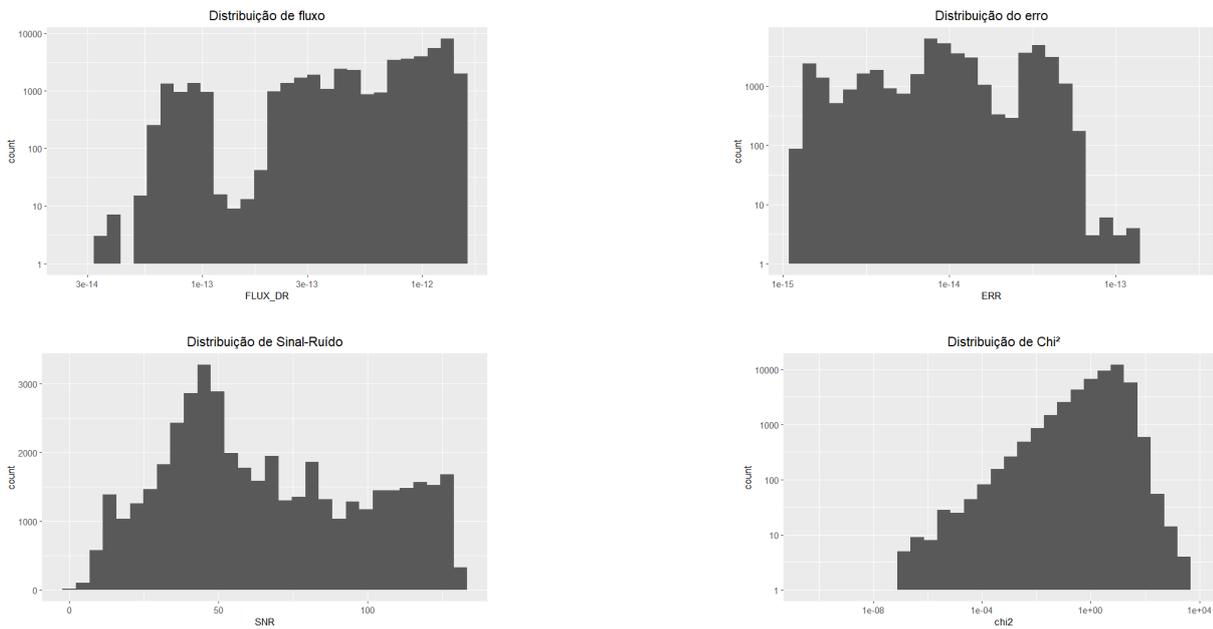


Figura 3.6: Histogramas com os parâmetros fluxo, erro, sinal-ruído e χ^2 das estrelas teste filtrados.

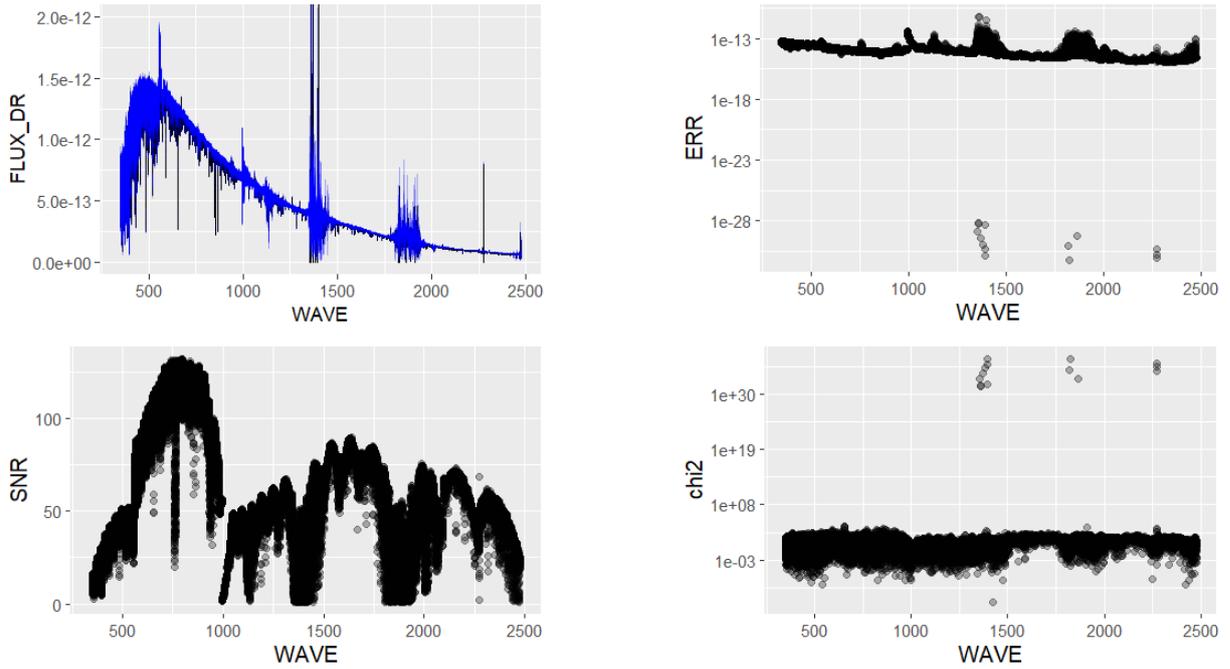


Figura 3.7: Gráficos de distribuição dos parâmetros fluxo, erro, sinal-ruído e chi-quadrado em função do comprimento de onda das estrelas teste dos dados não filtrados, mostrando os pixels problemáticos nas regiões telúricas do infravermelho

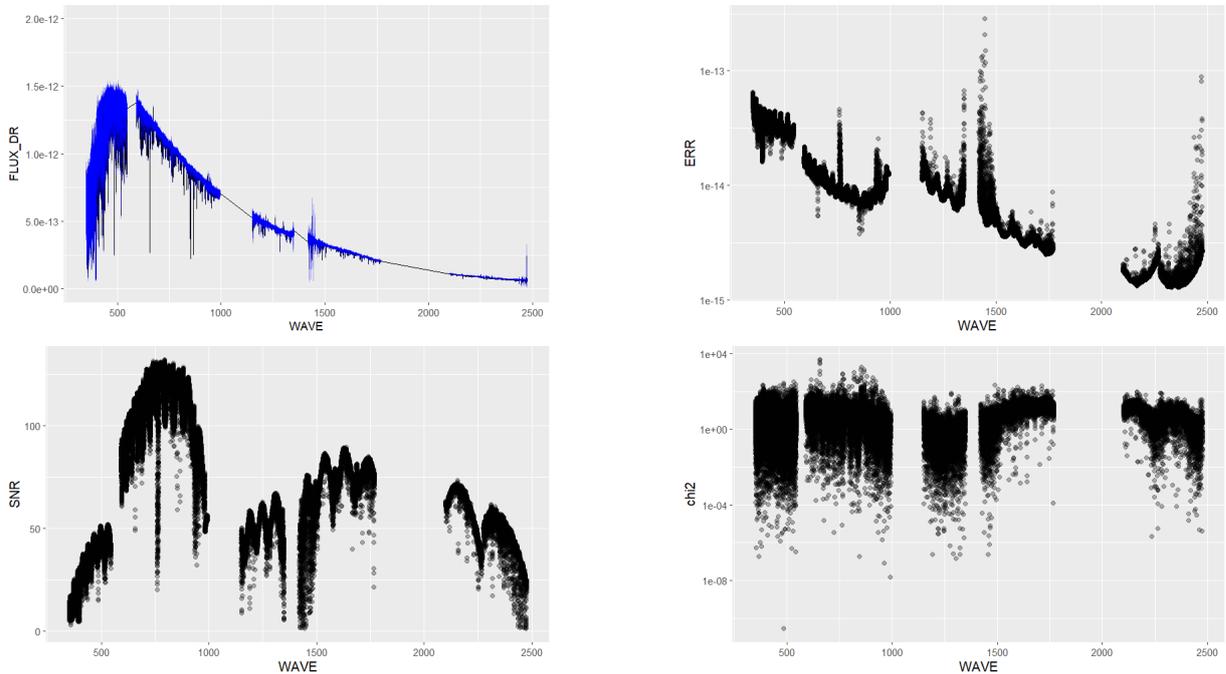


Figura 3.8: Gráficos de distribuição dos parâmetros fluxo, erro, sinal-ruído e chi-quadrado em função do comprimento de onda das estrelas teste dos dados filtrados.

Eliminados os problemas, finalmente foi possível plotar o histograma comparando todos os valores de χ^2 , que pode ser visto na Figura 3.9. Se fizermos uma comparação direta

entre esse histograma e o antigo, na Figura 1.3, podemos observar que de fato a cauda residual diminuiu, o que corrobora a premissa de que os dados FITS iniciais propagaram algum erro na interpretação da qualidade dos modelos teóricos. Em compensação, os valores absolutos de χ^2 estão um pouco maiores, mas é um resultado que conversa com o a presença do erro, porque a Equação 2.2 divide a diferença dos fluxos ao quadrado (fluxo sintético escalonado) pelo erro ao quadrado.

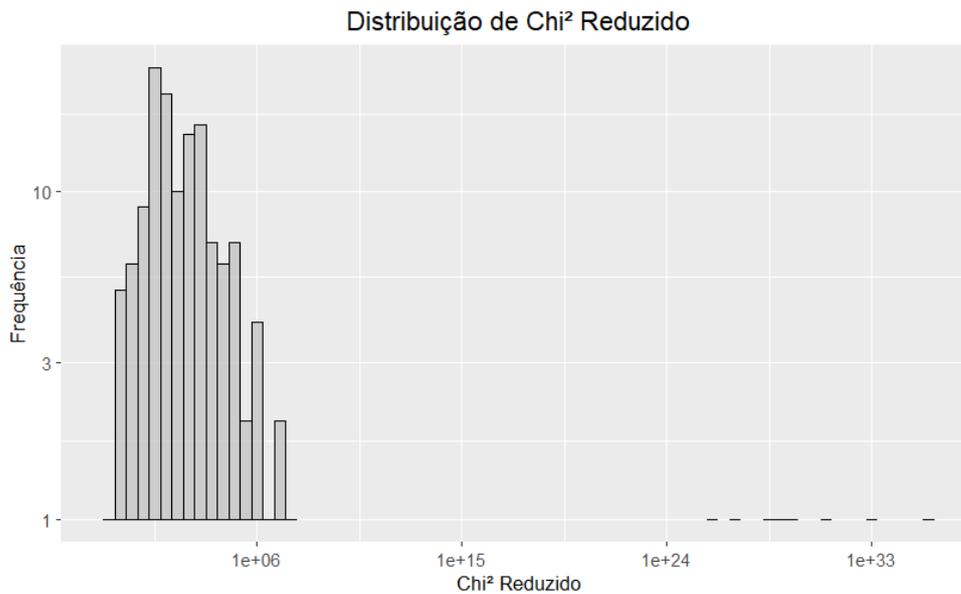


Figura 3.9: Histograma obtido da distribuição de χ^2 dos espectros disponíveis.

A Figura 3.10 retira do histograma as estrelas de valores extrapolados de χ^2 , que provavelmente são estrelas com algum problema em questão de modelagem, e que podem ser desconsideradas da análise dos resultados.

Mesmo com a exclusão dos altos valores, ainda vemos na Figura 3.8 -em 1500 nm e 2500 nm de todos os gráficos- que existem regiões às margens das filtradas (regiões de borda) que ainda possuem baixo sinal-ruído e erros maiores, na faixa do infravermelho (IR). Por este motivo, limitamos o cálculo do χ_{red}^2 para até $\lambda = 1000 \text{ nm}$, o que continuou permitindo a reprodução da figura de referência no trabalho de Coelho, P. R. T. et al. (2020), mas apenas até o infravermelho próximo (NIR), garantindo a qualidade dos dados até esse comprimento de onda. O resultado está na Figura 3.11.

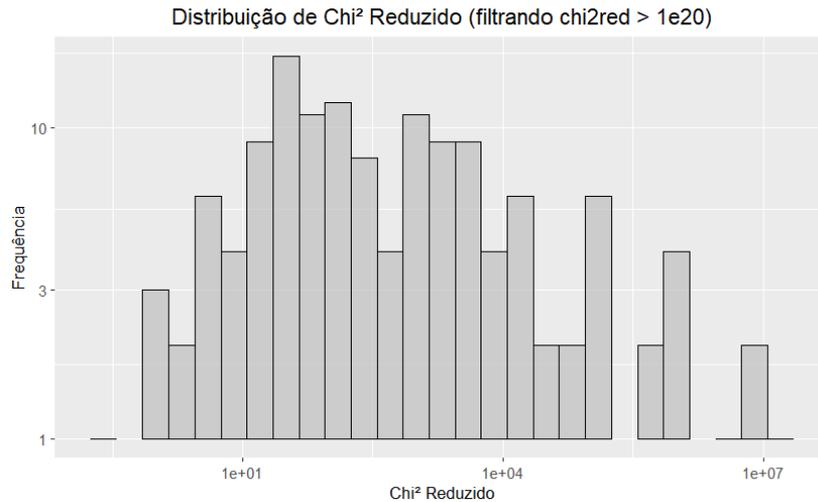


Figura 3.10: Histograma da distribuição de χ^2 , filtrando os valores de χ^2 maiores do que $E+20$.

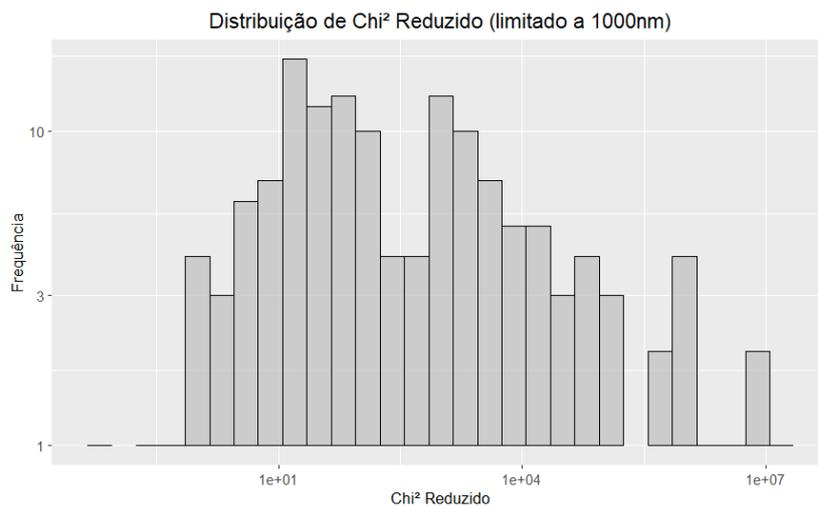


Figura 3.11: Histograma da distribuição de χ^2 , com os valores limitados a 1000 nm, para evitar valores discrepantes do infravermelho.

A análise do χ^2 , do ponto de vista interpretativo se revelou melhor do que os resultados do trabalho anterior e ainda coerentes com a conclusão do artigo de referência. Existem três aspectos importantes na interpretação dos novos resultados: os dados utilizados possuem valores mais confiáveis devido à manipulação correta dos arquivos; o cálculo adotado considera os erros observacionais; em espectros onde, em certas regiões o sinal-ruído seja alto por píxel, devido aos erros muito pequenos aumentam o valor absoluto do χ^2 , por uma questão matemática, o que poderia indicar uma melhora nos modelos.

Obtidos os valores, é possível fazer a comparação com parâmetros atmosféricos. Para

esta análise, é interessante adquirir o gráfico de dispersão apenas contra a temperatura efetiva (T_{eff}). Há uma diferença interessante entre esses resultados das Figuras 3.12 e 3.13 em comparação aos obtidos na Seção 1.2: ao eliminarmos os *outliers* óbvios, que devem ser descartados por possivelmente serem modelos problemáticos, nós verificamos a perda da correlação com a temperatura, melhor perceptível na Figura 3.13 e que em primeira análise diverge negativamente ao que foi concluído anteriormente no TGI.

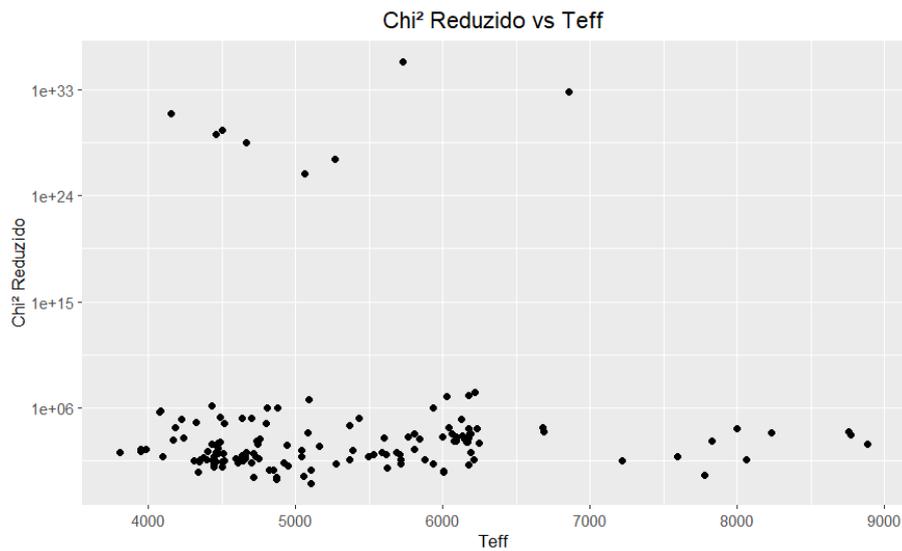


Figura 3.12: Gráfico de dispersão entre os valores de χ^2 e o parâmetro atmosférico da temperatura efetiva (T_{eff}).

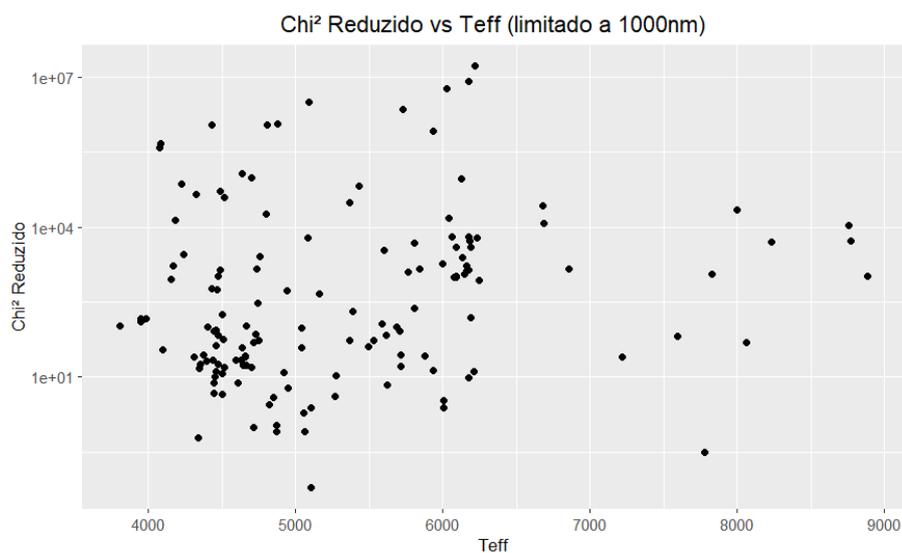


Figura 3.13: Gráfico de dispersão entre os valores de χ^2 e o parâmetro atmosférico da temperatura efetiva (T_{eff}), limitados à 1000 nm.

Na Seção 3.3.1 trataremos de maneira breve, mas com algum detalhamento os *outliers* e listaremos as estrelas problemáticas. É interessante perceber que, mesmo sem o corte em 1000 nm , poderíamos fazer o gráfico de χ_{red}^2 vs. T_{eff} se desconsiderarmos essas estrelas, pois os resultados pouco diferem. Desta maneira continuamos sem a dependência com a temperatura.

Observando os resultados de Coelho, P. R. T. et al. (2020), na Figura 3.14, podemos definir uma hipótese para o sumiço dessa dependência, que é uma das conclusões do artigo para estrelas frias.

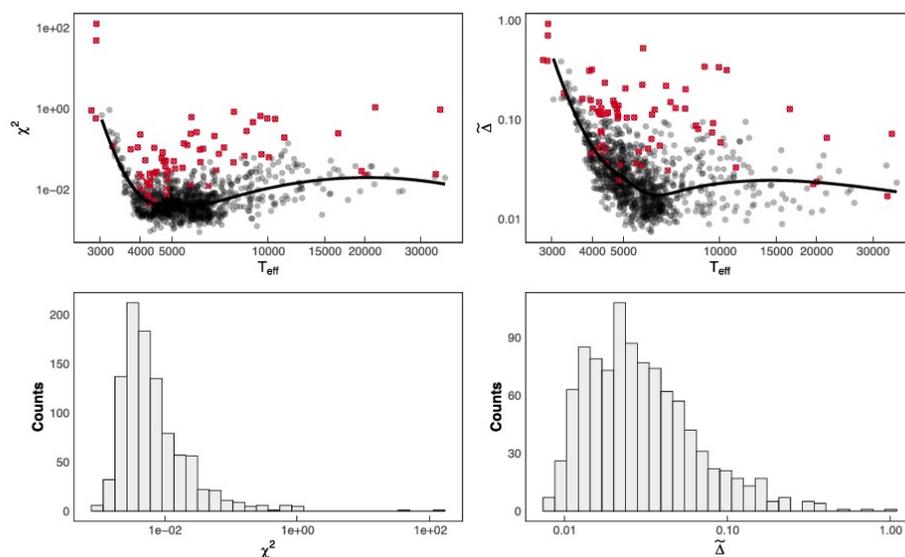


Figura 3.14: Nos painéis superiores, temos as comparações estatísticas de χ^2 e desvio médio com a temperatura efetiva T_{eff} para as estrelas da biblioteca sintética SYNCOMIL. As cruzes vermelhas indicam estrelas que não foram utilizadas nos modelos de SPS. Nos painéis inferiores vemos a distribuição dos valores das mesmas métricas, para a mesma biblioteca.

É possível que esta falta esteja relacionada com a escolha para os intervalos de temperatura. No artigo, a metalicidade típica das estrelas é a solar e, como discutido em seções anteriores, a comparação deste trabalho utiliza apenas amostras de estrelas pobres em metais, com metalicidades abaixo de $[Fe/H] \leq -1.0$. Porém, o intervalo de temperatura das estrelas vai de $3000K \leq T_{\text{eff}} \leq 30000K$, com a maioria da amostra indo até $15000K$, enquanto aqui, o intervalo varia entre $3800K \leq T_{\text{eff}} \leq 9000K$. Disso, podemos observar duas situações: (1) existe, na figura do artigo, uma cauda fria entre $3000K$ e $4000K$, que é o intervalo de maior piora nos modelos e o que permite a inferência da correlação; (2)

podemos acompanhar, pela linha suave no gráfico, que entre $4000K$ e $9000K$ há uma região relativamente plana, onde não se observa dependência com a temperatura, o que é similar ao que encontramos, para o mesmo intervalo.

Portanto, seria necessário um estudo mais detalhado do artigo, para este intervalo de temperaturas para concluir se há de fato discrepância entre os resultados.

3.3 Comparação Entre Índices Espectrais

A presença dos erros observacionais nos índices existe de maneira implícita. Embora esses erros (valores da coluna *ERR*) entrem no cálculo do χ^2 , eles não são necessários no cálculo dos índices. No caso do χ^2 , as regiões dicróicas e telúricas são desconsideradas (mascaradas) para não afetar a qualidade das métricas. Da mesma forma, se algum índice possuir qualquer parte em um dos intervalos mascarados, ele deve ser completamente descartado. Para considerar explicitamente os erros observacionais dos índices seria necessário propagar esse erro em diversas versões de cada espectro e calcular o índice em cada um deles. Entretanto, é preciso separar com cautela as circunstâncias onde a influência do erro observacional nas medições é ignorável e quando elas passam a importar na interpretação dos resultados. Descartamos o índice inteiro se ele estiver em uma região "proibida" pois, se realizássemos as medições em um espectro que já estivesse mascarado, a própria medição para este índice não seria possível, como percebemos ser o caso para o índice do sódio durante o processo de comparação.

Para garantir que o problema não fosse os modelos sintéticos, foram plotados gráficos das regiões específicas da banda onde cada índice é medido. Como discutido nas Seções 3.1 e 3.2, há uma diferença visual e estatística explícita entre a normalização dos fluxos sintéticos e observados utilizando os métodos de integração de simpson e dos trapézios. Por isso, escolhemos o espectro de uma estrela que tivesse ajuste visualmente bom, além de valores baixos de χ^2 nos dois tipos de modelo, para analisar.

A medição inicial dos índices havia sido feita apenas em *Python* e todas as figuras foram plotadas nessa mesma rotina, o que em tese não deveria ser um problema, mas após a constatação do erro na manipulação dos arquivos FITS do DR3 foi necessário reavaliá-las.

Observando primeiramente as linhas do sódio (Na_D), surgiu certa inquietação ao percebermos que a largura das linhas de absorção referentes ao elemento não estavam paralelas (Figura 3.15). Por isso, todas as figuras foram refeitas, utilizando os plots normalizados pelo método dos trapézios, na linguagem *R*. Como pode ser visto na Figura 3.16, as linhas ainda não estavam paralelas, sem grandes diferenças entre as figuras.

Isso poderia ser um indicativo de que o espectro sintético estivesse fora da resolução necessária, pois as asas das linhas de absorção deveriam estar paralelas às do observado, no caso em que as resoluções espectrais são as mesmas, mas as vemos atravessando umas às outras além da profundidade das linhas de absorção também não estarem condizentes. Essa é uma avaliação intuitiva, que nos impele a verificar posteriormente com nova atenção a medição dos índices problemáticos. Por essa razão, comparamos todos os índices, nos dois métodos para ver se o erro se repetia. As Figuras 3.17 e 3.18 ilustram o exemplo, e as outras imagens estão no Apêndice A. Vimos que, em realidade, as linhas de fato estavam paralelas nas regiões correspondentes aos elementos, com a exceção sendo o sódio. Isso mostrou que para os índices, os diferentes métodos de integração não influenciaram nesses resultados.

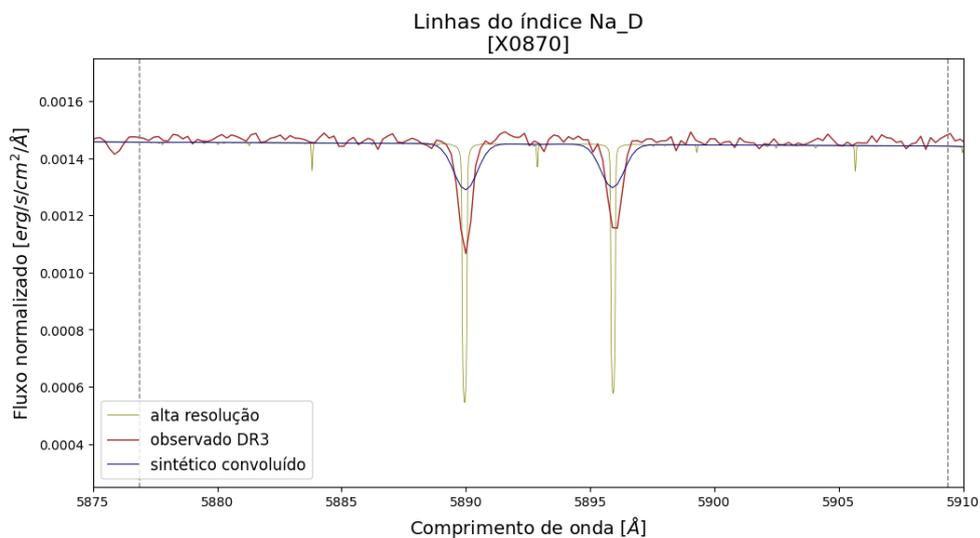


Figura 3.15: Comparação entre modelos e observações para o perfil da linha de sódio nos gráficos obtidos pelo método de Simpson. Nas linhas de absorção, nota-se que o espectro sintético, em azul, cruza o espectro observado, em marrom. O espectro em verde é o espectro sintético de alta resolução, antes do processo de convolução, apenas para a visualização. As linhas tracejadas marcam os limites da banda passante, que define a região de medição do perfil.

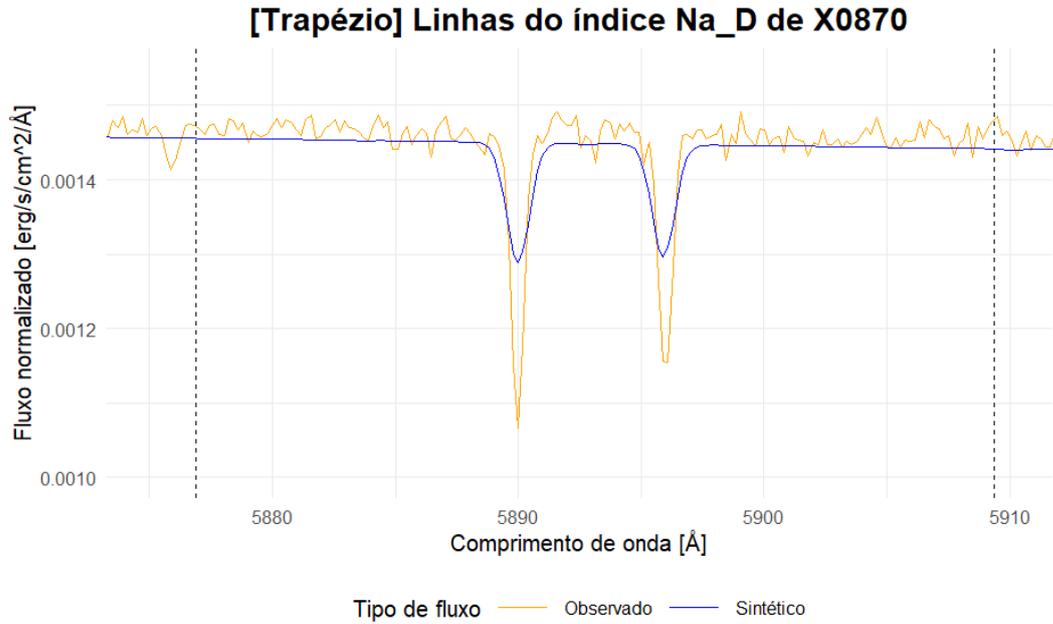


Figura 3.16: Comparação entre modelos e observações para o perfil da linha de sódio nos gráficos obtidos pelo método dos Trapézios, sendo o espectro sintético em azul e o observado em laranja e as linhas tracejadas marcam os limites da banda passante, que define a região de medição do perfil.

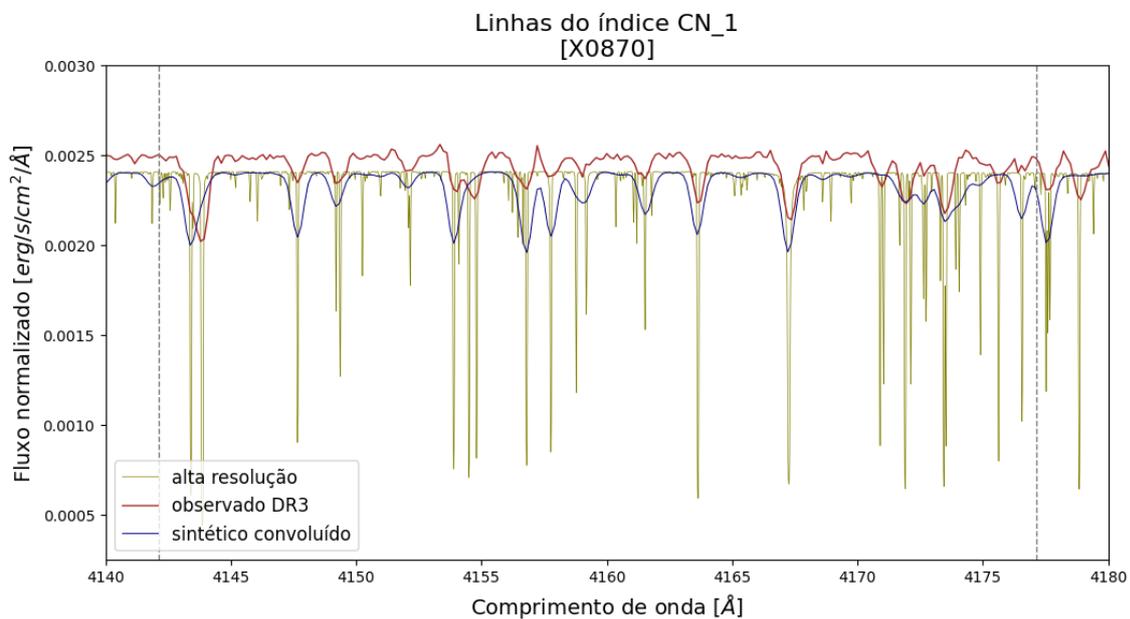


Figura 3.17: Comparação entre modelos e observações para o perfil da linha de CN_1 nos gráficos obtidos pelo método de Simpson, sendo o espectro sintético em azul, o observado em marrom e as linhas tracejadas marcam os limites da banda passante, que define a região de medição do perfil.

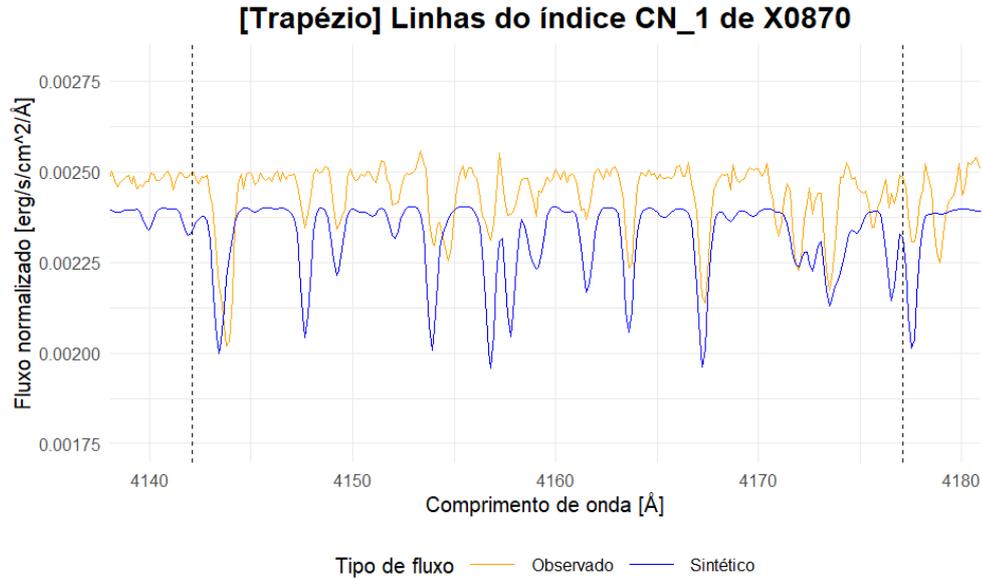


Figura 3.18: Comparação entre modelos e observações para o perfil da linha de CN_1 nos gráficos obtidos pelo método dos Trapézios, sendo o espectro sintético em azul e o observado em laranja e as linhas tracejadas marcam os limites da banda passante, que define a região de medição do perfil.

Como o problema não estava nos arquivos, voltamos a atenção para as regiões espectrais e realmente, parte do intervalo do Na_D (5876.875 Å- 5909.375 Å) se encontra em uma das regiões de emissões dicróicas, a $Dicroica_1$: 5450 – 5900 Å, que foram filtradas (Figura 3.19).

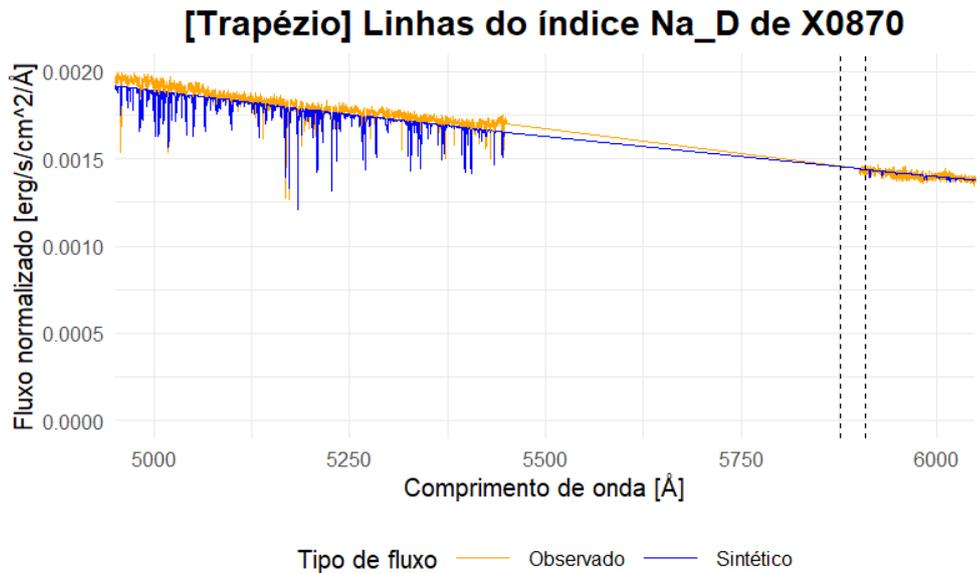


Figura 3.19: Exemplo de índice espectral (Na_D) cujo intervalo da banda passante está contida em um dos intervalos de emissões dicróicas, que são filtrados nas análises, mas que foi medido sem a máscara nas regiões.

Embora as medições não precisem ser feitas nos fluxos filtrados, a análise dos resultados, principalmente os comparativos é influenciada nessas regiões. Assim, esse índice do sódio pode ser desconsiderado na nossa análise final entre a concordância dos modelos teóricos.

Após a medição dos índices espectrais, seguindo os procedimentos detalhados na Seção 2.4, a Figura 3.20 reúne as comparações entre os índices teóricos e observados. Foi calculado o desvio padrão para as diferenças entre os índices observados e sintéticos, para cada um deles. Aqui, quanto mais próximo o valor for de zero, melhor é a concordância entre modelos e observações. Temos resultados diversos, com valores bons para Fe5270, Fe5335, CN_1 , CN_2 , Ca4227, valores razoáveis para G4300, H_β , H_{γ_F} , H_{δ_F} e Mgb . Embora o valor dos desvios de Na_D , TiO_2 estejam relativamente baixos, há uma certa estranheza na forma como esses índices se distribuem no gráfico.

Esses resultados são um indicativo de propriedades particulares de cada índice, que podem ter problemas de algumas possíveis origens, como erro nas medições; erro nos modelos teóricos ou erro no tratamento de dados, por exemplo. Mas fora isso, podemos concluir que para uma grande variedade dos índices os modelos concordam com as observações. Com exceção do sódio, que podemos deixar de fora das análises, o único índice menos satisfatório é o TiO_2 , de resto, todos estão bons. Existe dispersão em alguns, que ainda podem ser melhor investigados, mas o aspecto geral é de concordância e, portanto, os resultados são satisfatórios.

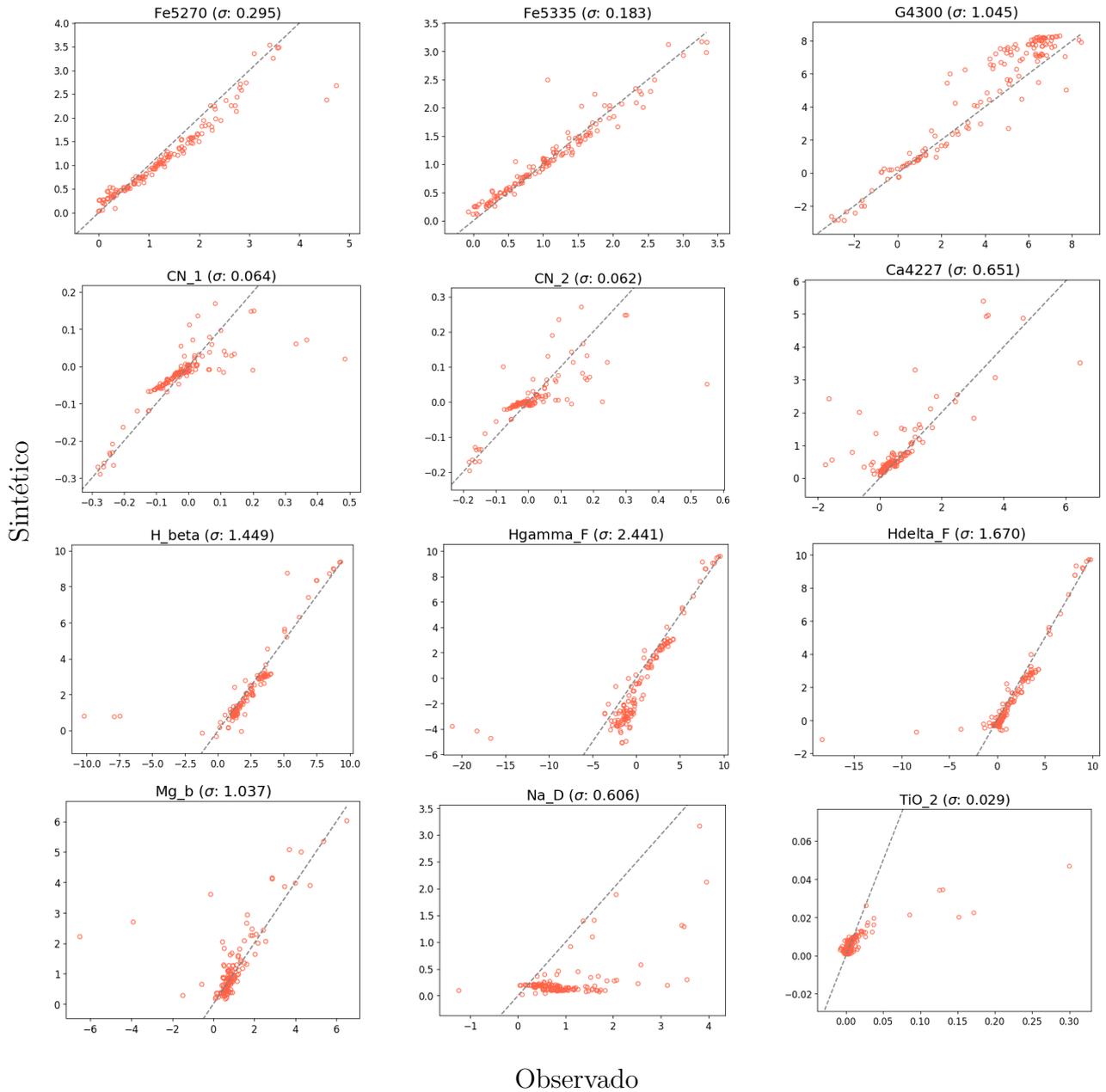


Figura 3.20: Comparação de 12 índices espectrais de Lick entre o modelo sintético e o espectro observado, com o desvio padrão da diferença entre os índices sintéticos e observados (σ).

3.3.1 Outliers

Foi ponderada desde os primeiros cálculos de χ^2 e reforçada após a medição dos índices a ideia de observar com mais detalhes os *outliers*, os valores discrepantes. Para os índices, foi possível isolar os valores fora do esperado mais evidentes, e compará-los a seus espectros. As estrelas "problemáticas" variam as suas aparições a depender dos índices aos quais se olha, podendo ter aparição única ou se repetir como valor discrepante em diferentes índices. A seguir, na Tabela 3.1 estão nomeados os ID's desses espectros e as colunas das repetições

indicam a quantidade de vezes que o espectro apareceu com *outlier*.

Tabela 3.1 - ID dos espectros e o número de repetições como *outlier* para os índices espectrais

| ID do Espectro | Repetições | ID do Espectro | Repetições |
|----------------|------------|----------------|------------|
| 210 | 1 | 661 | 1 |
| 248 | 1 | 733 | 1 |
| 274 | 1 | 756 | 4 |
| 378 | 2 | 760 | 1 |
| 418 | 1 | 883 | 1 |
| 519 | 10 | 884 | 1 |
| 530 | 10 | 902 | 1 |
| 589 | 7 | 906 | 4 |
| 602 | 1 | 908 | 3 |
| 610 | 4 | 909 | 3 |

As Figuras 3.21 e 3.22 mostram os gráficos de alguns dos espectros que aparecem mais vezes como *outliers*, para índices diferentes, onde vemos em comum que os picos de emissão dos espectros não coincidem e, conseqüentemente, as temperaturas efetivas.

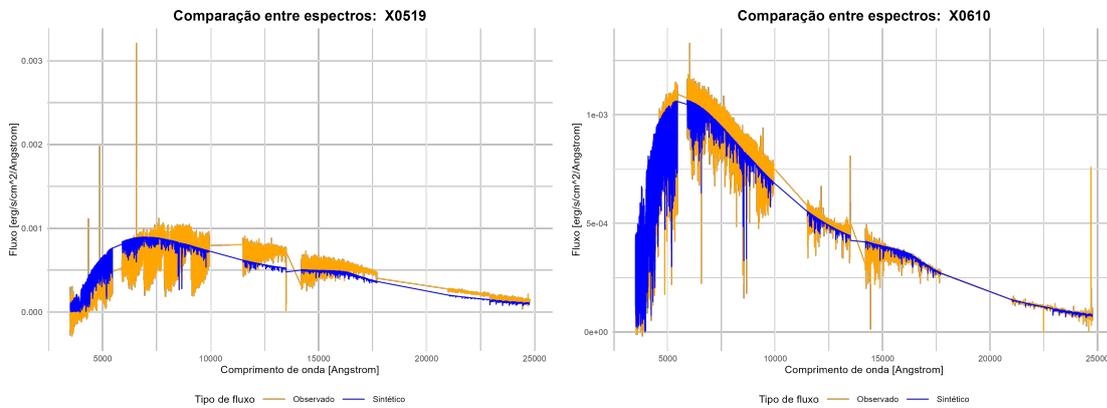


Figura 3.21: Espectros das estrelas que se repetem como valores discrepantes em mais de um índice espectral, sendo a estrela X0519 se repetindo 10 vezes e X0610 se repetindo 4 vezes.

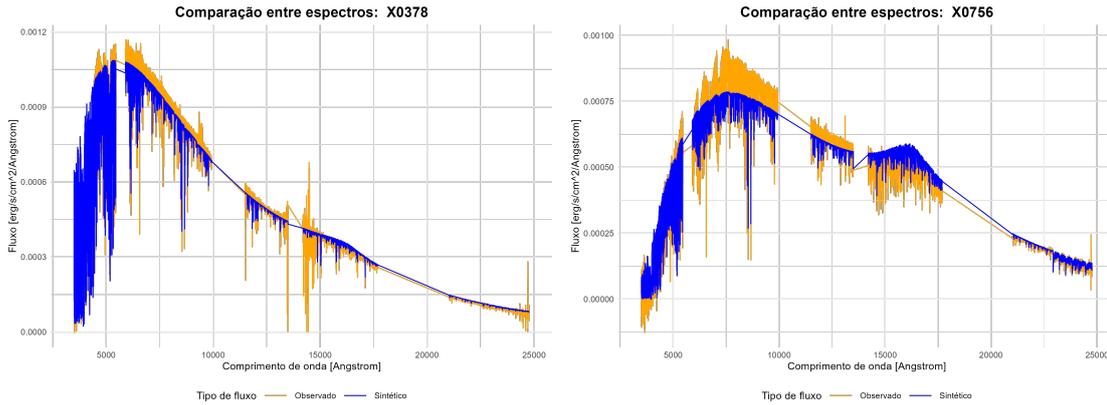


Figura 3.22: Espectros das estrelas que se repetem como valores discrepantes em mais de um índice espectral, sendo a estrela X0378 se repetindo 2 vezes e X0756 se repetindo 4 vezes.

Tabela 3.2 - Principais outliers por índice espectral

| Índice | Outliers (ID dos Espectros) |
|----------|-----------------------------|
| CN_1 | 519, 610, 756, 883 |
| CN_2 | 610, 378, 906, 883 |
| Ca4227 | 756, 909, 530, 906 |
| Fe5270 | 530, 519, 661, 756 |
| Fe5335 | 519, 530, 733, 418 |
| G4300 | 760, 602 |
| H_beta | 530, 589 |
| Hdelta_F | 589, 519 |
| Hgamma_F | 530, 519 |
| Mg_b | 530, 906, 908 |
| Na_D | 248, 378, 909 |
| TiO_2 | 210, 908, 519 |

As temperaturas variam em $3800K \leq T_{\text{eff}} \leq 5100K$, com uma única estrela com temperatura distinta, a X0248 com $T_{\text{eff}} = 8065K$. Comparando com a Figura 1.4, há compatibilidade entre os outliers, a menos desta estrela de temperatura maior. Os outros parâmetros atmosféricos estelares, metalicidade $[\text{Fe}/\text{H}]$ e $\log g$ seguem variando sem tendência aparente. No gráfico de T_{eff} com os novos valores de χ^2 , os *outliers* obtidos correspondem a espectros diferentes. Apenas uma das estrelas aparece como discrepante tanto pelo χ^2 quanto pelos índices espectrais, que está destacada na Tabela 3.3.

Tabela 3.3 - ID's dos espectros que aparecem como *outliers* de χ^2 vs T_{eff} .

| ID do Espectro | |
|----------------|-----|
| 123 | 380 |
| 372 | 622 |
| 375 | 870 |
| 378 | 897 |

Por fim, é válido citar que em Martins, L. P. e Coelho, P. (2007), nas Figuras 4 a 10, há no geral resultados melhores na comparação índice a índice em estrelas com temperaturas entre $4500K \leq T_{\text{eff}} \leq 7000K$, que é um resultado similar, pois a amostra deste trabalho tem estrelas entre $3800K \leq T_{\text{eff}} \leq 9000K$.

Conclusões

O trabalho avaliou a qualidade de novos modelos teóricos em comparação com os dados observacionais da biblioteca X-shooter, através da análise de indicadores estatísticos, sua correlação com parâmetros atmosféricos e também com medições de índices espectrais. A partir da reavaliação dos cálculos de χ^2 e do impacto ao adotar os erros observacionais, melhoramos a qualidade dos resultados, reduzindo a quantidade de *outliers*. A exclusão de estrelas nitidamente destoantes, que puderam ser desconsideradas da análise junto à limitação de comprimentos de onda para 1000 nm no cálculo do χ^2_{red} que eliminou pontos indesejados na região do infravermelho nos mostrou a falta de dependência dos modelos com a temperatura, como obtido anteriormente, trazendo atenção ao fato de que a correlação com a temperatura existia, para as amostras deste trabalho, quando o erro não tinha sido considerado nos cálculos. A ausência dessa dependência entre χ^2 e T_{eff} pode ser atribuída à hipótese de que, como a seleção das amostras dos dois trabalhos possuem um intervalo de temperatura bem distinto (no artigo: $3000K \leq T_{eff} \leq 30000K$ e trabalho atual: $3800K \leq T_{eff} \leq 9000K$) a dependência não aparece aqui. Corroborar-se a isso o fato de que, o intervalo da amostra deste trabalho não apresenta dependência, mas se isolarmos o mesmo intervalo, no artigo, também não é observada dependência óbvia, o que reforça a necessidade de uma amostra mais variada para confirmar discrepância entre os trabalhos. Há ainda a diferença entre as metalicidades das amostras: enquanto aqui trabalhamos com estrelas pobres em metais, com $[Fe/H] \leq -1.0$, no artigo as estrelas possuem metalicidade solar, o que é um outro tópico que ainda pode ser explorado. Os resultados atuais e os resultados do TGI divergem, onde a diferença nos métodos de comparação está na consideração dos erros associados aos espectros no cálculo de χ^2 e também a melhor manipulação dos arquivos. Por essas razões, tomamos como válidos os resultados do primeiro,

devido a maior confiabilidade dos resultados.

Os índices espectrais foram avaliados visualmente através da comparação direta entre os valores calculados para os sintéticos e para os observados e também foi calculado o desvio padrão da diferença entre eles. Eles foram majoritariamente bem reproduzidos, sendo o pior deles o índice de TiO_2 . Alguns índices ainda podem ser verificados em detalhe nos modelos para entender o porquê de uma dispersão maior, além de ser interessante desconsiderar os *outliers* listados para os valores do desvio padrão diminuírem, em geral, a medição sustenta a qualidade dos modelos. A partir da inspeção visual das linhas espectrais, foi possível identificar que o problema poderia estar relacionado às faixas de absorção específicas, como no Na_D , onde o duplete de linhas de absorção característicos sobrepõe-se a região $Dicroica_1$, o que nos permite não o incluir na avaliação dos resultados.

Em conclusão, o estudo evidenciou a importância de uma análise cuidadosa dos dados espectrais e dos modelos teóricos utilizados para comparações, pois dessa forma foi possível perceber o erro na manipulação inicial dos arquivos, que influenciou diretamente os resultados e sua interpretação. Com a melhora dos dados, pudemos não apenas aumentar a confiabilidade nos resultados como também descobrir que eles são mais positivos do que os encontrados na primeira parte deste trabalho. Mesmo com conclusões satisfatórias, existem ainda perguntas em aberto, como os motivos da dependência de temperatura não aparecer em comparação com a literatura, ou quanto os erros observacionais são relevantes nas comparações entre os índices espectrais. Essas questões complementam o trabalho aqui realizado e possuem caráter sequencial em trabalhos futuros. Por fim, fica explícita a necessidade de um trabalho contínuo que acompanhe as atualizações de dados observacionais e a criação de outros modelos teóricos, pois cada resultado direciona o desenvolvimento de teorias que nos ajudam a compreender a evolução de diversas estruturas, em competências interdisciplinares que demandam um entendimento unificado para avanços significativos.

Referências Bibliográficas

- Arentsen, A. Prugniel, P. Gonneau, A. Lançon, A. Trager, S. Peletier, R. Lyubenova, M. Chen, Y. Barroso, J. F. Blázquez, P. S. Vazdekis, A. Stellar atmospheric parameters for 754 spectra from the X-shooter Spectral Library, *Astronomy & Astrophysics*, 2019, vol. 627, p. A138
- Branco V., , 2024 Modelos Teóricos de Baixa Metalicidade
- Branco, V. Coelho, P. R. T. Atomic/molecular opacities and globular cluster spectra, *Boletín de la Asociación Argentina de Astronomía*, 2020, vol. 61C, p. 85
- Branco, V. Coelho, P. R. T. Lançon, A. Martins, L. P. Prugniel, P. Synthetic stellar spectra to study multiple populations in globular clusters: an extended grid and the effects on the integrated light, 2024, *Astronomy & Astrophysics manuscript no. aa* ©ESO 2024, April 25, 2024. Received Dec. 18, 2023; accepted Apr. 16, 2024.
- Coelho, P. R. T. Determinação de parâmetros atmosféricos de estrelas em NGC 6528 e NGC 6553 - aglomerados globulares de referência para o estudo de populações ricas em metais, Instituto de Astronomia, Geofísica e Ciências Atmosféricas, University of São Paulo, 2000, Master's dissertation
- Coelho, P. R. T. A new library of theoretical stellar spectra with scaled-solar and α -enhanced mixtures, *MNRAS*, 2014, vol. 440
- Coelho, P. R. T. Bruzual, G. Charlot, S. Título do Artigo, *MNRAS*, 2020, vol. 491, p. 2025
- Faber, S. M. Friel, E. D. Burstein, D. Gaskell, C. M. *ApJS* 57, 711, *Astrophysical Journal Supplement Series*, 1985, vol. 57, p. 711

Martins, L. P. Coelho, P. Testing the accuracy of synthetic stellar libraries, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 2007, vol. 381, p. 1329

Vernet J., Dekker H., D’Odorico S., Kaper L., et al. X-shooter: O novo espectrógrafo de resolução intermediária de banda larga no Very Large Telescope do ESO, 2011

Verro, K. Trager, S. C. Peletier, R. F. Lançon, A. Gonneau, A. Vazdekis, A. Prugniel, P. et al. The X-shooter Spectral Library (XSL): Data Release 3, *A&A*, 2022a, vol. 660, p. A34

Apêndice

Apêndice A

Perfis de linhas de todos os índices espectrais

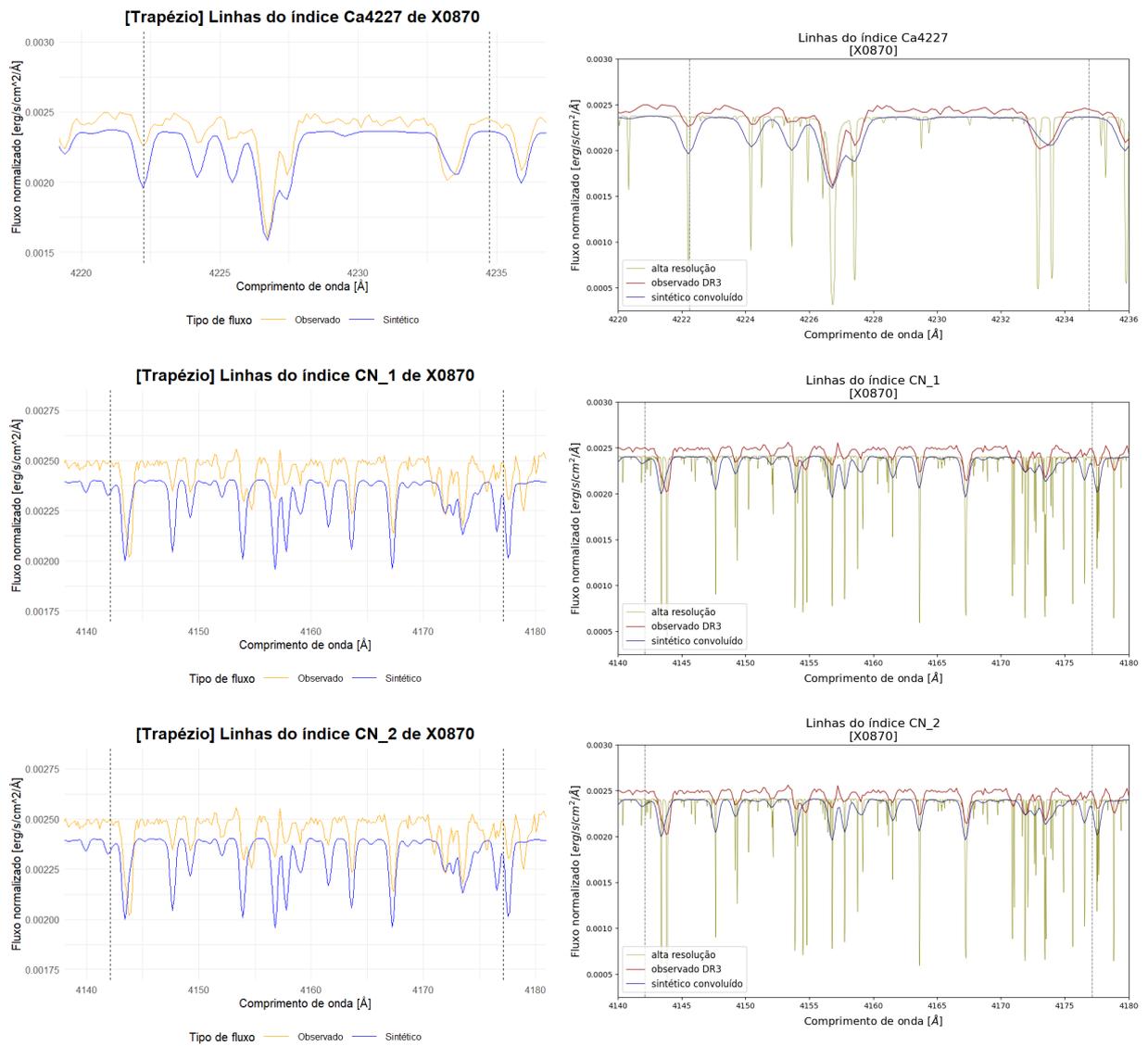


Figura A.1: Perfis de linhas dos índices Ca4227, CN₁, CN₂ nos dois ajustes.

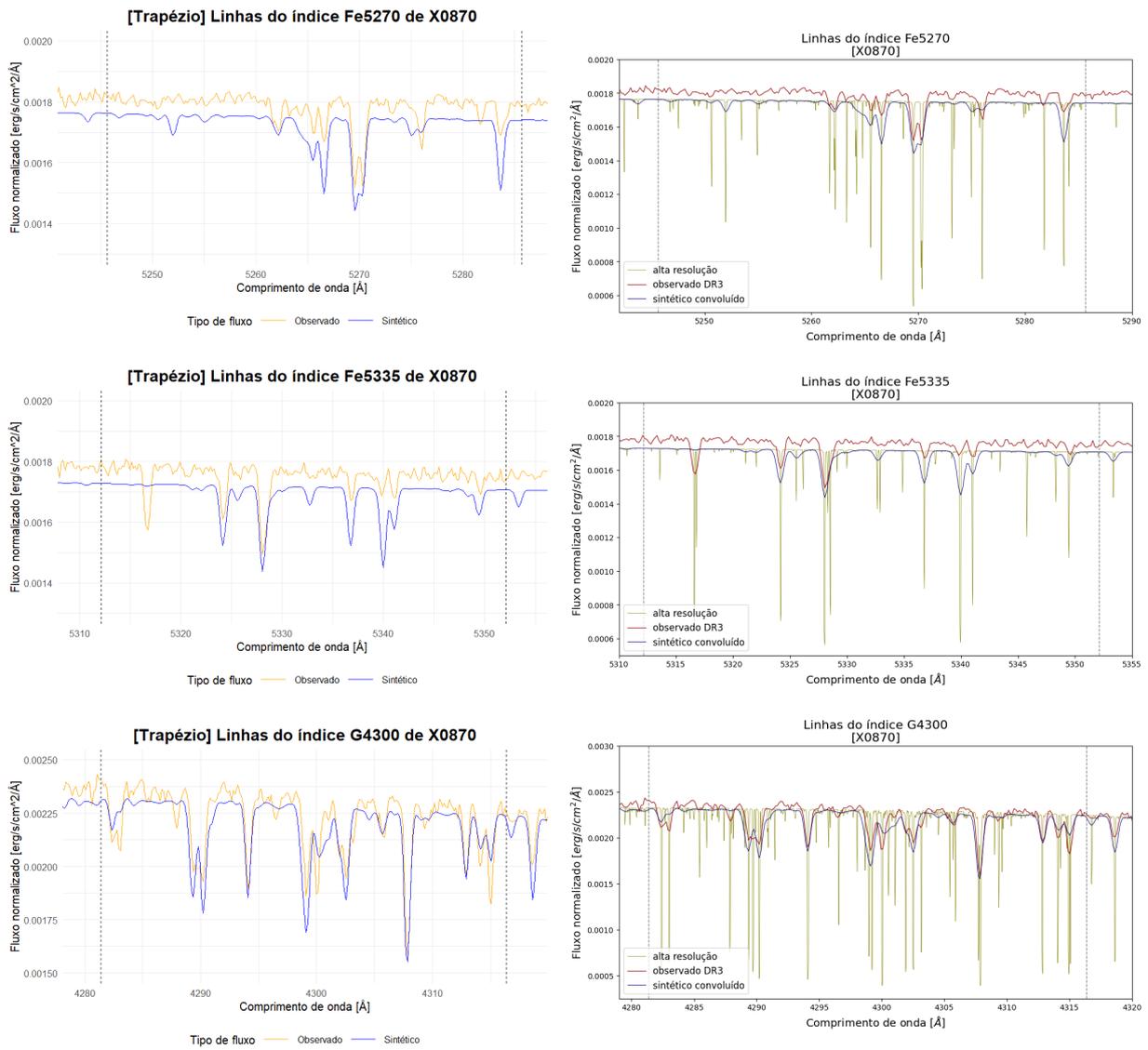


Figura A.2: Perfis de linhas dos índices Fe5270, Fe5335 e G4300 nos dois ajustes.

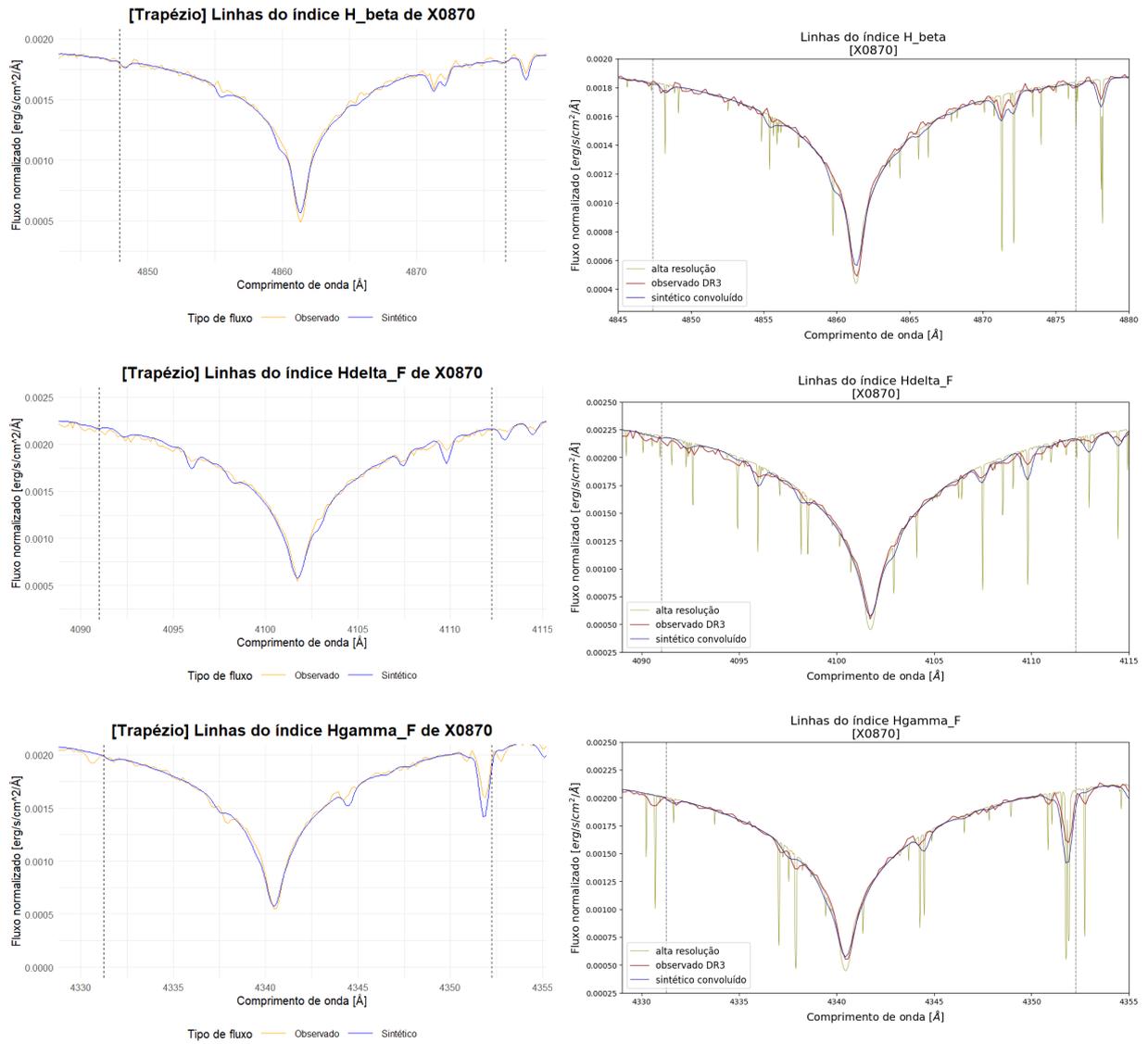


Figura A.3: Perfis de linhas dos índices H_{β} , H_{δ_F} e H_{γ_F} nos dois ajustes.

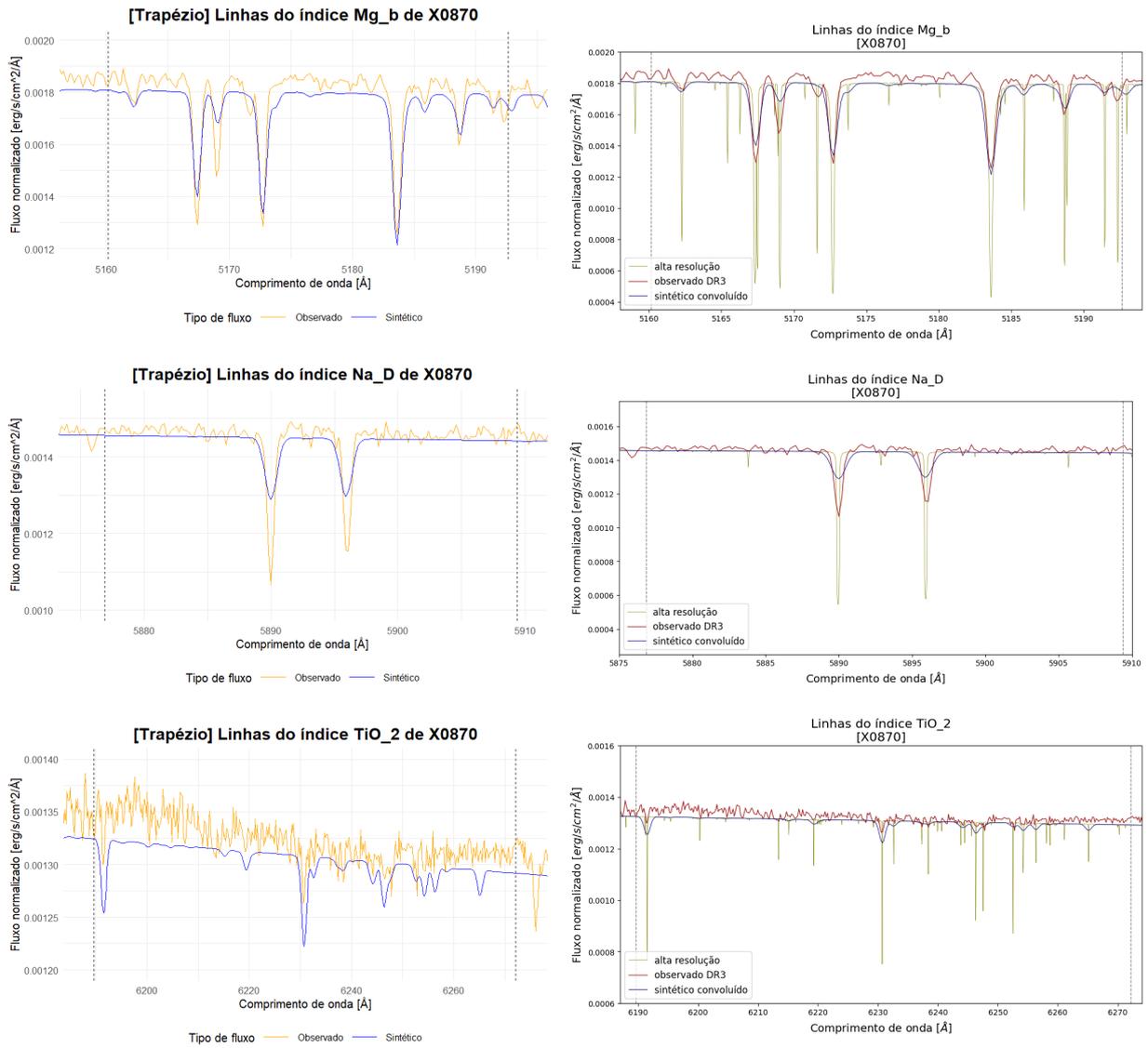


Figura A.4: Perfis de linhas dos índices Mg_b , Na_D e TiO_2 nos dois ajustes.

Anexos

Tabela B.1 - Intervalos completos da medição dos 12 índices espectrais

| Nome | Unidades | Índice | Min [Å] | Max [Å] | Min Azul [Å] | Max Azul [Å] | Min Vermelho [Å] | Max Vermelho [Å] |
|----------|----------|--------|----------|----------|--------------|--------------|------------------|------------------|
| CN_1 | AA | mag | 4142.125 | 4177.125 | 4080.125 | 4117.625 | 4244.125 | 4284.125 |
| CN_2 | AA | mag | 4142.125 | 4177.125 | 4083.875 | 4096.375 | 4244.125 | 4284.125 |
| Ca4227 | AA | ew | 4222.250 | 4234.750 | 4211.000 | 4219.750 | 4241.000 | 4251.000 |
| Fe5270 | AA | ew | 5245.650 | 5285.650 | 5233.150 | 5248.150 | 5285.650 | 5318.150 |
| Fe5335 | AA | ew | 5312.125 | 5352.125 | 5304.625 | 5315.875 | 5353.375 | 5363.375 |
| G4300 | AA | ew | 4281.375 | 4316.375 | 4266.375 | 4282.625 | 4318.875 | 4335.125 |
| H_beta | AA | ew | 4847.875 | 4876.625 | 4827.875 | 4847.875 | 4876.625 | 4891.625 |
| Hdelta_F | AA | ew | 4091.000 | 4112.250 | 4057.250 | 4088.500 | 4114.750 | 4137.250 |
| Hgamma_F | AA | ew | 4331.250 | 4352.250 | 4283.500 | 4319.750 | 4354.750 | 4384.750 |
| Mg_b | AA | ew | 5160.125 | 5192.625 | 5142.625 | 5161.375 | 5191.375 | 5206.375 |
| Na_D | AA | ew | 5876.875 | 5909.375 | 5860.625 | 5875.625 | 5922.125 | 5948.125 |
| TiO_2 | AA | mag | 6189.625 | 6272.125 | 6066.625 | 6141.625 | 6372.625 | 6415.125 |