


Uma metodologia para a detecção de parâmetros de linhas espectrais



Através de Machine Learning



Objetivo

- Estimar parâmetros de linhas espectrais através de aprendizado de máquina
- Quais parâmetros?
 - Perfil da linha espectral:
 - Gauss
 - Lorentz
 - Voigt
 - Largura das linhas espectrais

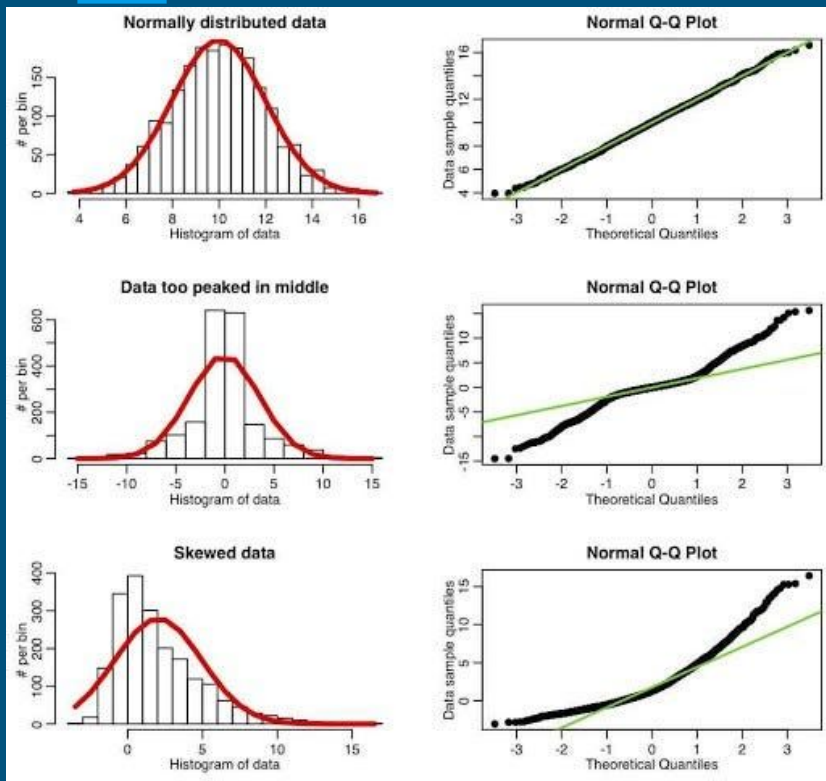
Motivação: Adversidades enfrentadas no TCC

- Dificuldade em selecionar o perfil de linha correto.
 - Força bruta: Ajustar todos os perfis e analisar qual se ajusta melhor às linhas através do erro. Consome muito tempo!
- Ajuste em massa pode apresentar problemas.
 - Algumas linhas podem apresentar problemas durante o ajuste. Necessidade de intervenção manual. Também demanda tempo!

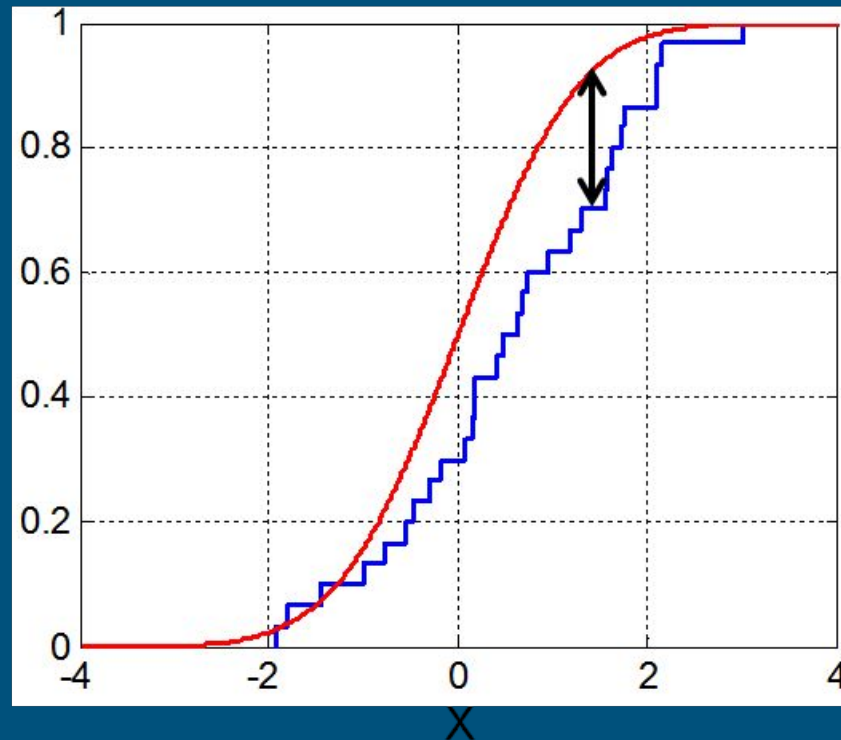
Possíveis soluções:

- Metodologias estatísticas (apenas para seleção do perfil de linha)
 - Q-Q plot
 - Teste de hipótese (Kolmogorov-Smirnov)
- Aprendizado de máquina (perfil e largura)
 - Algoritmos de classificação e regressão
 - Regressão logística e linear
 - K- vizinhos mais próximos
 - Árvore de decisão
 - Floresta aleatória
 - Modelos ensemble
- Aprendizado profundo (perfil e largura)
 - Redes Neurais

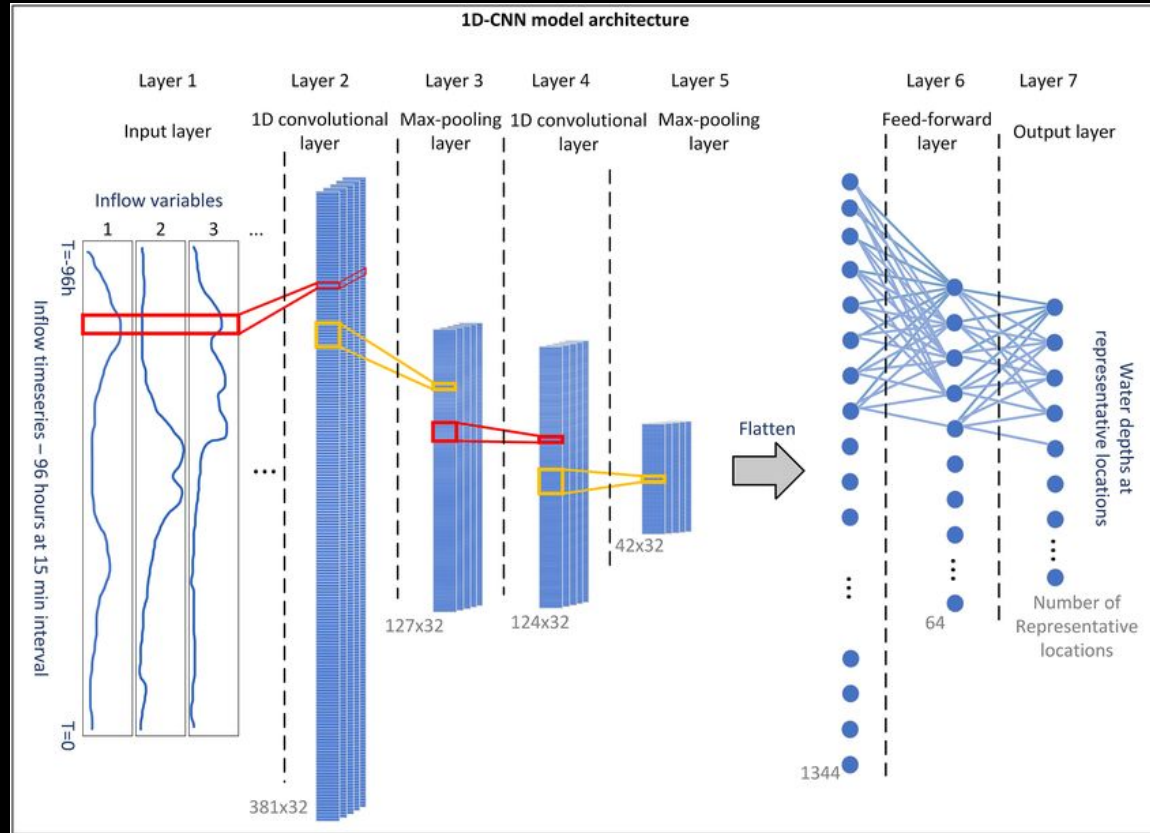
Q-Q plot



KS



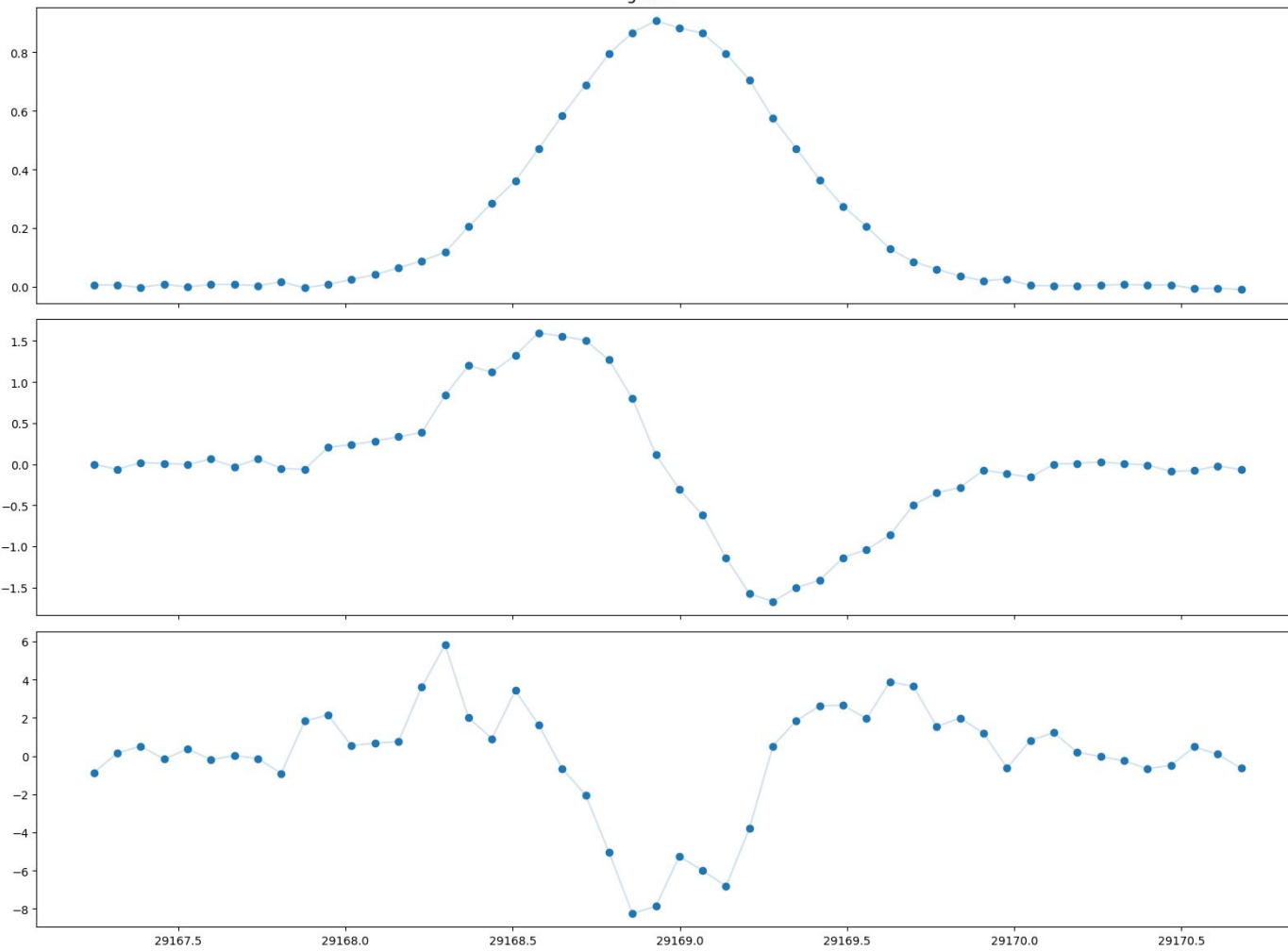
Solução proposta: Rede neural



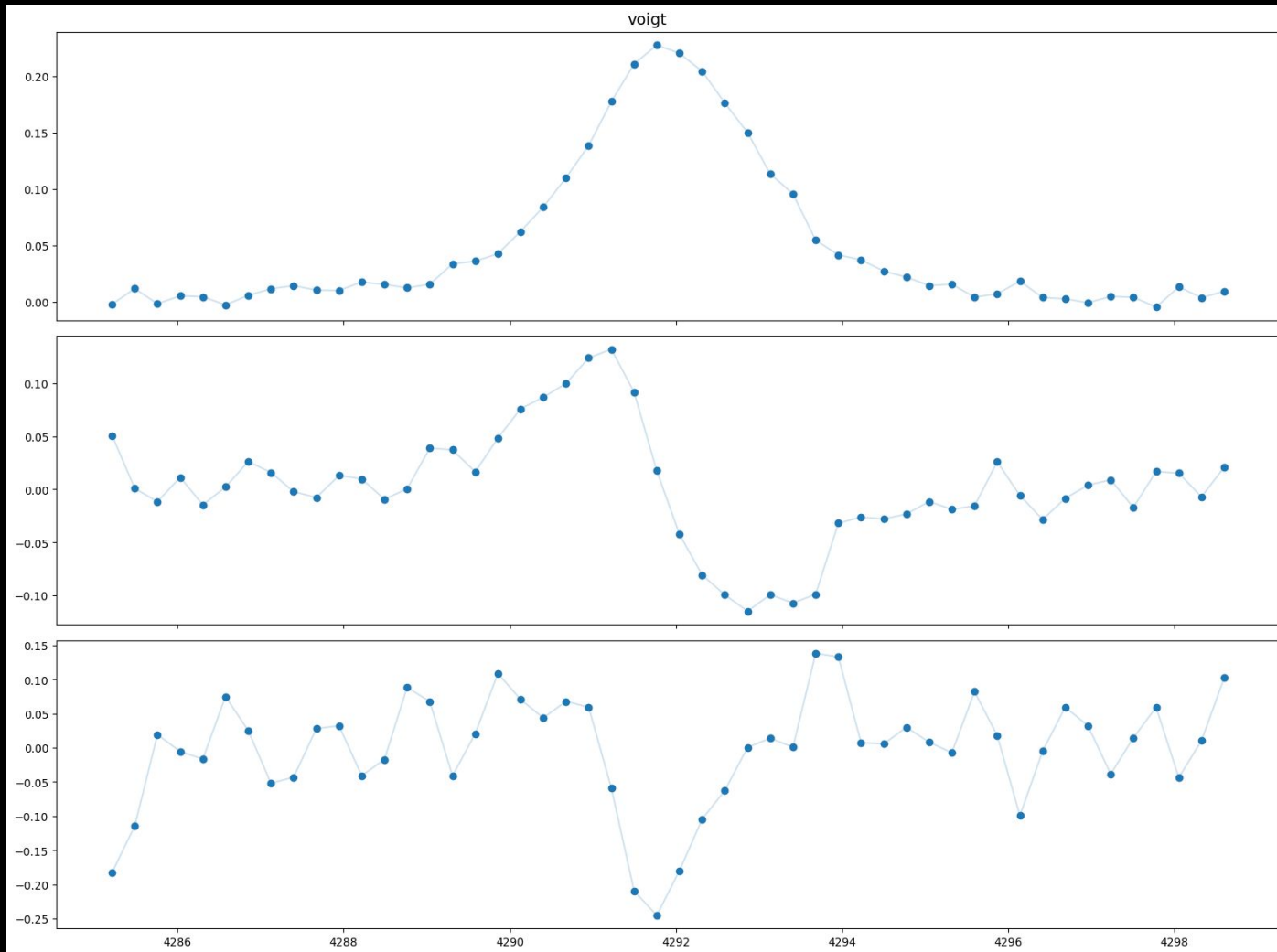
Treinamento e validação

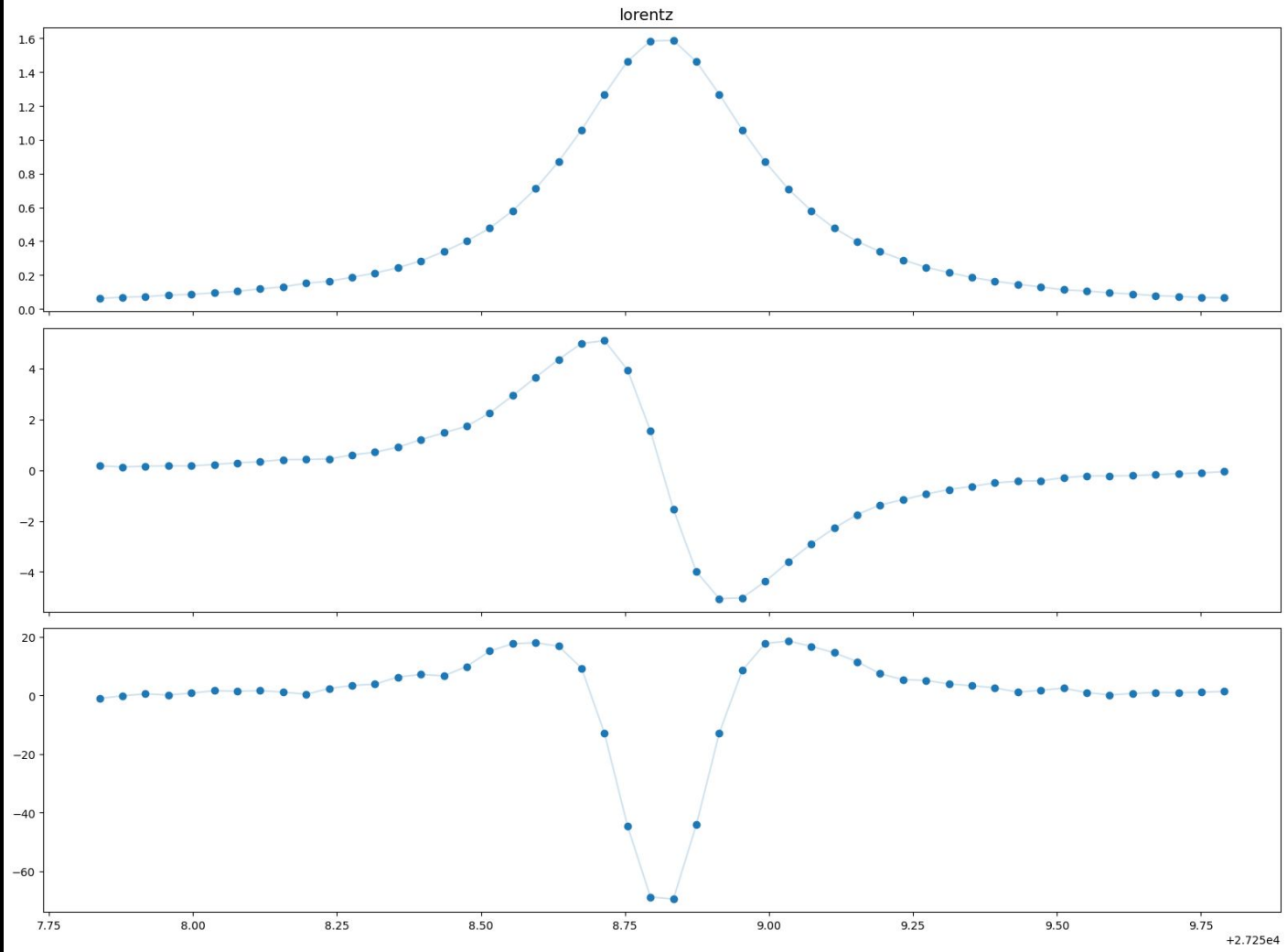
- Linhas espectrais geradas artificialmente com parâmetros e ruídos aleatórios
 - 120 mil linhas para treino (40 mil para cada perfil)
 - 1500 linhas para validação (500 para cada perfil)
- Input da Rede
 - Linha espectral
 - Primeira derivada
 - Segunda derivada
- Output da Rede
 - Probabilidade de ser Gauss
 - Probabilidade de ser Lorentz
 - Probabilidade de ser Voigt
 - Largura da linha (full width at half maximum)

gauss

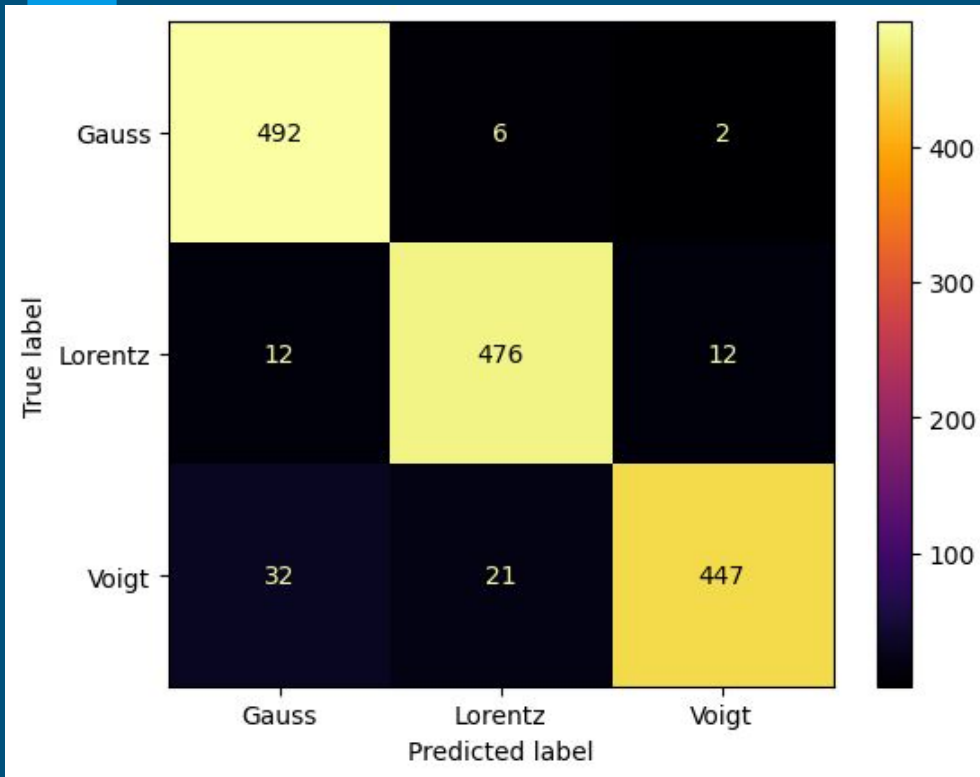


—





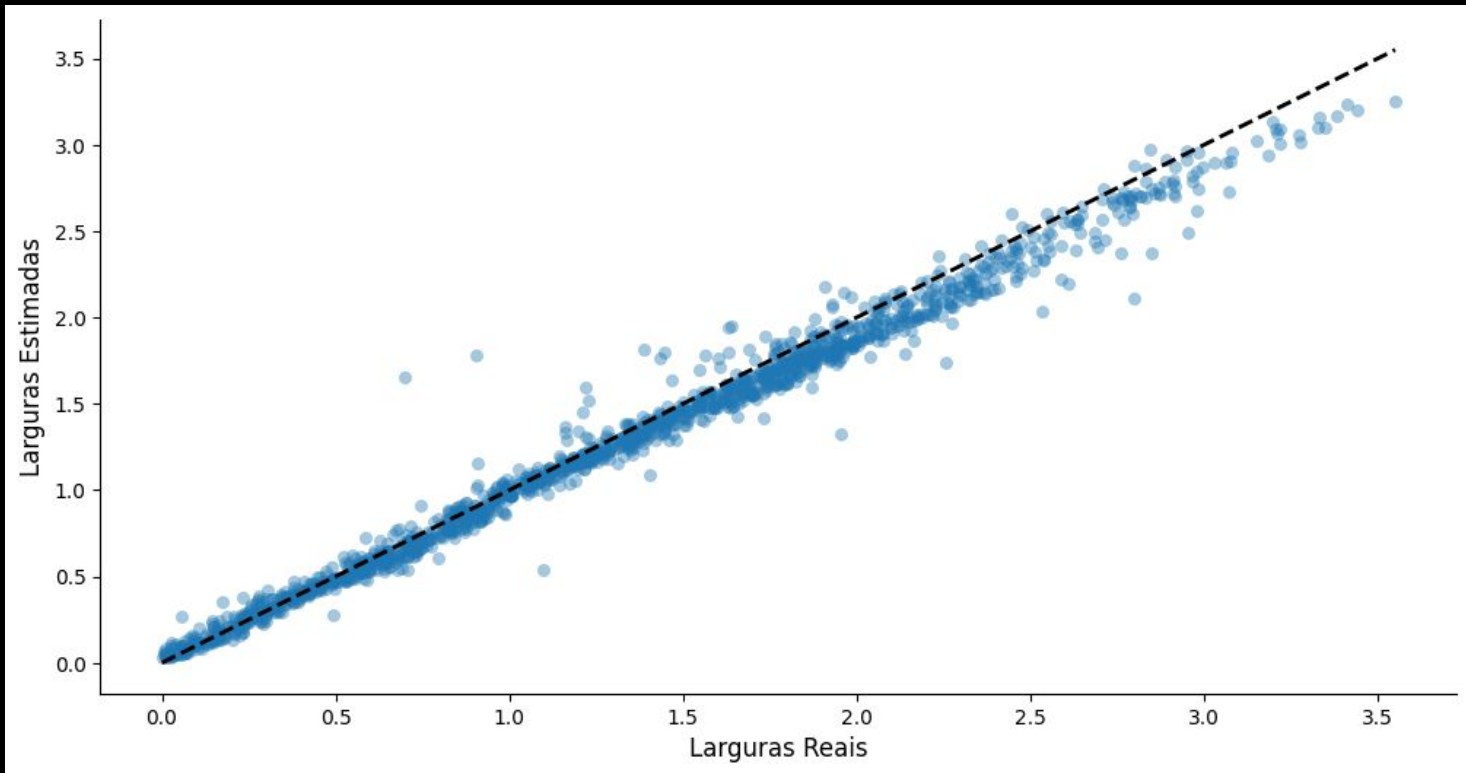
Resultados para a classificação do perfil



Taxa de acerto:

94%

Resultados para a estimativa de largura



Resultados para a estimativa de largura

Erro médio absoluto $\rightarrow 0.075$

Raiz do erro médio quadrático $\rightarrow 0.109$

Erro Percentual $\rightarrow 11.84\%$

Próximos passos

- Validar o modelo em espectros simulados pelo Hitran
- Validar o modelo em espectros reais: HCl
- Testar novas metodologias
- Aprimorar o modelo

A close-up photograph of a laboratory apparatus. A vertical glass tube is illuminated from within, creating a series of bright, glowing pinkish-orange rings. To the left, a black cooling fan is visible. The background is dark, and the overall lighting is dim, with the primary light source being the glowing tube. The text 'Obrigado pela atenção' is overlaid in the top right corner.

Obrigado pela atenção

May 11, 2023 11:26