



中国科学院大学

University of Chinese Academy of Sciences

硕士学位论文

基于机器学习的星系光谱自动分类研究

作者姓名: 吴莹

指导教师: 樊东卫 副研究员

中国科学院国家天文台

学位类别: 理学硕士

学科专业: 天文技术与方法

培养单位: 中国科学院国家天文台

2024年6月

Research on Automated Galaxy Spectral Classification based on
Machine Learning

A thesis submitted to
University of Chinese Academy of Sciences
in partial fulfillment of the requirement
for the degree of
Master of Natural Science
in Astronomical Technology and Method

By

Wu Ying

Supervisor: Associate Professor Fan Dongwei

National Astronomical Observatories, Chinese Academy of Sciences

June, 2024

中国科学院大学 学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的学位论文是本人在导师的指导下独立进行研究工作所取得的成果。承诺除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体享有著作权的研究成果，未在以往任何学位申请中全部或部分提交。对本论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人或集体，均已在文中以明确方式标明或致谢。本人完全意识到本声明的法律结果由本人承担。

作者签名：吴莹

日期：2024.5.31

中国科学院大学 学位论文授权使用声明

本人完全了解并同意遵守中国科学院大学有关收集、保存和使用学位论文的规定，即中国科学院大学有权按照学术研究公开原则和保护知识产权的原则，保留并向国家指定或中国科学院指定机构送交学位论文的电子版和印刷版文件，且电子版与印刷版内容应完全相同，允许该论文被检索、查阅和借阅，公布本学位论文的全部或部分内 容，可以采用扫描、影印、缩印等复制手段以及其他法律许可的方式保存、汇编本学位论文。

涉密及延迟公开的学位论文在解密或延迟期后适用本声明。

作者签名：吴莹

日期：2024.5.31

导师签名：樊东卫

日期：2024.5.31

摘要

天体光谱的观测和分析是天文学研究的重要手段之一。天体光谱中蕴含着丰富的信息，能够揭示天体的物理性质、化学成分和运行状态，为深入研究天体的演化规律提供了丰富的数据。随着观测设备与技术的发展，大型光谱巡天项目获取的光谱数据已呈千万量级规模。然而，传统的光谱分析方法依赖于人工处理和模板匹配，不仅易受主观因素影响，并且受限于人力与时间等因素，面对大规模光谱数据处理的需求显得力不从心。因此，如何有效处理与分析这些海量的光谱数据是一个亟待解决的关键问题。机器学习等数据驱动技术可以自动挖掘光谱中的关键特征，实现自动化的光谱分析，从而大幅提升光谱数据处理的效率，因此已成为天体光谱学研究的一个热点方向。

本文主要研究基于机器学习的星系光谱自动分类方法，旨在构建模型实现自动化的星系光谱分类，将星系光谱划分为恒星形成星系 (Star-forming Galaxy)、复合星系 (Composite Galaxy)、活动星系核 (Active Galactic Neuclei) 和正常星系 (Normal Galaxy)。各类星系光谱反映出不同的物理过程和性质，可以揭示星系内部的物理结构、化学成分和演化历史等重要信息。例如，活动星系核的光谱通常含有明显的发射线，这些谱线来源于中心黑洞附近高温致密的气体，因此有助于探究活动星系核的物理过程和黑洞质量等参数；而恒星形成星系的光谱则含有较强的氢发射线，反映其内部活跃的恒星和星际物质形成过程，对于理解星系内部的物理和化学环境至关重要。因此，星系光谱的分类是深入研究星系性质及其形成演化过程的重要基础。

传统的 BPT (Baldwin-Phillips-Terlevich) 诊断图是星系光谱分类最常用的方法之一，具有明确的物理意义，但该方法操作复杂，在处理大规模光谱数据时存在一定的局限性。目前已经提出的星系光谱自动分类算法需要提高分类准确性和效率。因此，本论文应用深度学习算法自动处理星系光谱数据，该算法直接从原始光谱数据中提取重要特征，避免对光谱数据手动处理的复杂过程，分类准确性和效率得到提高，适用于大规模星系光谱的自动分类。本文的主要研究工作包括如下三个方面：

1. 基于卷积神经网络的星系光谱自动分类方法

本文设计了一种基于光谱数据的一维卷积神经网络模型——GalSpecNet。该模型对 SDSS 的星系光谱样本进行监督训练。实验证明，该模型的分类准确率达到 94% 以上，分类表现出色。相比于传统的诊断图方法，该模型无需对谱线进行测量，实施简单，且处理效率显著提升，尤其适用于大规模光谱数据分类；且该模型不受明确的红移和信噪比限制，适用范围更广。

在仅使用光谱数据、未引入额外信息和人工特征筛选条件下，本文将 GalSpecNet 模型与基于随机森林、Fisher 线性判别分析和支持向量机的经典机器学习分类器进行对比。结果显示，这些分类器虽在区分发射线星系与正常星系方面

表现良好,但在细分发射线星系,尤其是识别复合星系时能力有限,而 GalSpecNet 模型对各类星系的分类性能都最好。

基于 GalSpecNet 模型的有效性,本文公开发布了该模型对 SDSS DR16 和 LAMOST DR8 交叉星系的分类星表。该星表中给出了 41,250 个恒星形成星系和 55,103 个活动星系核候选体,其中包含 BPT 诊断图没有给出分类或由于谱线缺失等无法给出分类的样本。星表中给出了每个样本的分类概率,可以通过概率值筛选活动星系核或恒星形成星系候选体。

2. 星系光谱特征的自动提取方法及有效性分析

本文构建的 GalSpecNet 模型基于网络中的卷积和池化等操作对输入光谱进行特征提取,通过与原始光谱特征和基于主成分分析的光谱特征提取方法进行比较,证明了这种特征提取方法在处理星系光谱时的有效性。

3. 模型可解释性研究

本文创新地提出使用基于梯度的类激活图方法对模型分类时的依据进行解释,量化分析了模型在预测光谱样本时的全局注意力分布,给出了模型在分类时重点关注的谱线特征。结果表明, GalSpecNet 模型在分类发射线星系时,最关注 $[\text{N II}]\lambda\lambda 6548\ 6584$ 、 $\text{H}\alpha$ 和 $[\text{S II}]\lambda\lambda 6716\ 6731$ 发射线所在的区域,而在分类正常星系时, Mg 吸收线最受重视。这些结果与传统的星系光谱分类理论展现出一致性,提高了模型的可信度。该解释方法也适用于其他类似的光谱模型的特征分析。

关键词: 光谱分类, 发射线星系, 机器学习, 卷积神经网络

Abstract

The observation and analysis of the celestial spectra is one of the most important means of astronomical research. The spectra of celestial bodies contain a wealth of information that can reveal the physical properties, chemical composition and operational status of celestial bodies, providing a wealth of data for the in-depth study of celestial bodies' evolutionary patterns. With the development of observation equipment and technology, the spectra acquired by large-scale spectral surveys have reached a scale of tens of millions. However, traditional spectral analysis methods rely on manual processing and template matching, which are not only susceptible to subjective factors, but also limited by factors such as manpower and time, making them inadequate to face the demands of large-scale spectra processing. Therefore, how to effectively process and analyse these massive spectra is a key issue that needs to be solved. Data-driven techniques such as machine learning can automatically extract key features in spectra and achieve automated spectral analysis, thus significantly improving the efficiency of spectra processing, and has become a hot direction in the research of astronomical spectroscopy.

This thesis focuses on the automatic classification of galaxy spectra based on machine learning, aiming to construct models to achieve automated classification of galaxy spectra into star-forming galaxies, composite galaxies, active galactic nuclei and normal galaxies. The spectra of various types of galaxies reflect different physical processes and properties, which can reveal important information such as the physical structure, chemical composition, and evolutionary history within the galaxies. For example, the spectra of active galactic nuclei usually contain distinct emission lines that originate from the high-temperature, dense gas near the central black hole, and are therefore useful for probing the physical processes of active galactic nuclei and parameters such as the mass of the black hole; whereas the spectra of star-forming galaxies contain strong hydrogen emission lines, reflecting the active star and interstellar matter formation processes in the inner parts of the galaxies, which is crucial to the understanding of the inner physical and chemical environments of the galaxies. Therefore, the classification of galaxy spectra is an important basis for the in-depth study of the properties of galaxies and their formation and evolution processes.

The traditional BPT (Baldwin-Phillips-Terlevich) diagnostics is one of the most commonly used methods to classify galaxy spectra with clear physical meanings, but the method is complicated to operate and has some limitations when dealing with large-scale spectra. The automatic galaxy spectral classification algorithms that have been proposed need to improve the classification accuracy and efficiency. Therefore, this

this thesis applies a deep learning algorithm to automatically process galaxy spectra, which extracts important features directly from the raw spectra, avoids the complex process of manually processing the spectra, and improves the classification accuracy and efficiency, which is suitable for the automatic classification of large-scale galaxy spectra. The main research work of this thesis includes the following three aspects:

1. Automatic classification method of galaxy spectra based on convolutional neural network

In this thesis, a one-dimensional convolutional neural network model based on spectra, GalSpecNet, is designed. The model profits from supervised training of galaxy spectral samples from SDSS. Experiments have proved that the classification accuracy of the model reaches more than 94%, which is a great classification performance. Compared with the traditional diagnostics, the model does not need to measure the spectral lines, which is simple to implement, and the processing efficiency is significantly improved, which is especially suitable for large-scale spectra processing; and the model is not subject to explicit redshift and signal-to-noise ratio limitations, which makes it applicable to a wider range of applications.

Using only spectra, without introducing additional information and manual feature screening, this thesis compares the GalSpecNet model with classical machine learning classifiers based on random forests, Fisher's linear discriminant analysis and support vector machines. The results show that although these classifiers perform well in distinguishing emission-line galaxies from normal galaxies, they have limited ability in subdividing emission-line galaxies, especially in identifying composite galaxies, while the GalSpecNet model has the best classification performance for all types of galaxies.

Based on the effectiveness of the GalSpecNet model, this thesis publicly releases a catalogue of galaxies classified by the model for cross-matched galaxies of SDSS DR16 and LAMOST DR8. The catalogues give 41,250 star-forming galaxies and 55,103 active galactic nuclei candidates, which contain samples for which the BPT diagnostics does not give a classification or cannot give a classification due to missing spectral lines, etc. The classification probabilities for each sample are given in the catalogues, and the probability values can be used to filter the active galactic nuclei or star-forming galaxy candidates.

2. Automatic extraction method and effectiveness analysis of galaxy spectral features

The GalSpecNet model constructed in this thesis is based on the feature extraction of input spectra by operations such as convolution and pooling in the network, and the effectiveness of this feature extraction method in processing galaxy spectra is demonstrated by comparing it with the original spectral features and spectral feature extraction methods based on principal component analysis.

3. Model interpretability study

This thesis innovatively propose the use of a gradient-based class activation mapping approach to explain the basis of the model when classifying, quantitatively analyze the global distribution of the model's attention when predicting spectral samples, and give the spectral line features that the model focuses on when classifying. The results show that the GalSpecNet model pays the most attention to the regions where the [N II] $\lambda\lambda$ 6548 6584, H α , and [S II] $\lambda\lambda$ 6716 6731 emission lines are located when classifying emission-line galaxies, while the Mg absorption lines are most highly valued when classifying normal galaxies. These results show consistency with traditional theories of galaxy spectral classification, improving the credibility of the model. The interpretation method is also applicable to the analysis of other similar spectral models.

Key Words: Spectral Classification, Emission-line Galaxies, Machine Learning, Convolutional Neural Network

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 研究背景	1
1.2 国内外研究现状	2
1.2.1 传统星系光谱分类方法	2
1.2.2 机器学习在天体光谱研究中的应用	3
1.2.3 基于机器学习算法的星系光谱分类研究	5
1.3 论文研究内容	6
1.4 论文组织结构	7
第 2 章 星系光谱自动分类的机器学习算法	9
2.1 经典机器学习算法	9
2.1.1 Fisher 线性判别分析	9
2.1.2 支持向量机	10
2.1.3 随机森林	11
2.2 卷积神经网络 (CNN) 算法	12
2.2.1 网络的基本结构	13
2.2.2 网络的训练与优化	18
2.3 算法评价指标	22
第 3 章 星系光谱自动分类模型 GalSpecNet 及实验结果分析	25
3.1 光谱数据准备	25
3.2 基于 CNN 的自动分类模型: GalSpecNet	31
3.2.1 模型的网络设计	31
3.2.2 模型训练	32
3.3 基于经典机器学习算法的对比实验	34
3.3.1 Fisher 线性判别分析实验设计	34
3.3.2 支持向量机实验设计	34
3.3.3 随机森林实验设计	35
3.4 自动分类实验结果对比	36
3.4.1 整体分类表现	36
3.4.2 各类别分类表现	38
3.4.3 红移和信噪比的影响	41
3.4.4 模型泛化性评估	42

3.5 分类星表	44
3.5.1 星表内容描述	44
3.5.2 模型不确定性评估	46
3.5.3 与其他星表的交叉验证	47
3.6 本章小结	49
第 4 章 星系光谱特征的自动提取方法及有效性分析	51
4.1 特征提取方法概述	51
4.2 基于 UMAP 的特征可视化	52
4.3 基于不同特征的分类结果	53
4.4 本章小结	55
第 5 章 模型可解释性研究	57
5.1 可解释性分析技术基础	57
5.2 GalSpecNet 模型的可解释研究	57
5.2.1 目视检查	57
5.2.2 客观分析	59
5.3 本章小结	60
第 6 章 总结与展望	61
6.1 总结	61
6.2 展望	62
参考文献	63
致谢	69
作者简历及攻读学位期间发表的学术论文与其他相关学术成果 ..	71

图目录

图 1-1	BPT 诊断图 (图片引用自 Kewley et al. 2006)	3
图 2-1	Fisher 线性判别分析算法示意图	9
图 2-2	支持向量机算法示意图	11
图 2-3	随机森林算法示意图	12
图 2-4	一次卷积运算过程示意图	14
图 2-5	常用的激活函数	15
图 2-6	最大池化和平均池化示意图	17
图 2-7	卷积神经网络结构图	17
图 2-8	卷积神经网络训练流程图	19
图 3-1	构建数据集的整体流程	26
图 3-2	数据标签、红移和信噪比的核密度估计	31
图 3-3	GalSpecNet 模型的网络结构图	32
图 3-4	GalSpecNet 模型训练时的准确率和损失值曲线	33
图 3-5	GalSpecNet 模型测试的混淆矩阵	40
图 3-6	GalSpecNet 和 rest-frame GalSpecNet 模型对不同红移和信噪比的样本预测的准确率曲线	41
图 3-7	GalSpecNet 模型对 LAMOST 光谱样本预测的混淆矩阵	42
图 3-8	LAMOST 数据样本中的异常光谱	44
图 3-9	模型对 AGN 的预测概率取不同阈值时预测结果的 Acc、P、R 和 F1 曲线	46
图 3-10	GalSpecNet 模型的预测概率与其在 MC dropout 方法下的预测概率	47
图 3-11	MC Dropout 方法下模型的预测概率与不确定性	48
图 4-1	PCA 提取不同数量主成分时被保留的数据信息百分比	52
图 4-2	原始光谱特征、PCA 提取的光谱特征和卷积和池化等操作提取的光谱特征的降维可视化	53
图 4-3	基于原始光谱特征、基于 PCA 提取的光谱特征和基于卷积和池化等操作提取的光谱特征的分类结果	54
图 5-1	GalSpecNet 模型可解释性分析的热图样本	59

表目录

表 2-1	混淆矩阵	23
表 3-1	各类别星系的筛选标准	27

表 3-2	数据集中各类别星系的数据量	28
表 3-3	GalSpecNet、rest-frame GalSpecNet、LDA、SVM、RF、Chen21's 和 Sharma20's 模型的 5 折交叉验证结果	37
表 3-4	GalSpecNet、rest-frame GalSpecNet、LDA、SVM、RF、Chen21's 和 Sharma20's 模型对各类别星系的分类结果评估	39
表 3-5	分类星表的内容描述	45
表 5-1	模型预测各类别星系时关注的谱线及相应的权值	60

符号列表

缩写

AdaGrad	Adaptive Gradient
Adam	Adaptive Moment Estimation
AGN	Active Galactic Neuclei
ANN	Annual Neural Network
AUC	Area Under Curve
BGD	Batch Gradient Descent
BPT	Baldwin-Phillips-Terlevich
DESE	Dark Energy Spectroscopic Instrument
DL	Deep Learning
DT	Decision Tree
DR	Data Release
FDA	Fisher Discriminant Analysis
GPU	Graphics Processing Unit
KNN	K-Nearest Neighbors
LAMOST	Large Sky Area Multi-Object Fiber Spectroscopic Telescope
LINER	Low-Ionization Nuclear Emission-Line Region
LLE	Locally Linear Embedding
MBSGD	Mini-Batch Stochastic Gradient Descent
MC	Monte Carlo
ML	Machine Learning
MLP	Multi-Layer Perceptron
PCA	Principal Component Analysis
RBF	Radial Basis Function
ResNet	Residual Neural Network
RMSprop	Root Mean Square Propagation
ROC	Receiver Operating Characteristic
SDSS	Sloan Digital Sky Survey
SF	Star-Forming
SGD	Stochastic Gradient Descent
SGDM	Stochastic Gradient Descent with Momentum

SVC	Support Vector Classifier
SVM	Support Vector Machine
UMAP	Uniform Manifold Approximation and Projection
VAC	Value Added Catalog

第1章 绪论

1.1 研究背景

天文学是一门以观测为基础的学科，天体光谱观测和分析是天文学研究最重要的手段之一。天体光谱是指天体辐射的电磁波在不同波长范围内的能量分布情况的记录，反映了天体在不同波长范围内的辐射特征。其中蕴含着的信息，能够揭示天体的物理性质、化学成分、运动状态等信息，为深入研究天体的演化历史与演化规律提供了宝贵的数据支持。

星系光谱是星系研究的重要工具之一。其中的发射线、吸收线等谱线特征有助于了解星系的结构、组成成分以及内部物质的情况，如恒星类型、星际介质、气体云和尘埃 (Bernardi et al., 2003; Brinchmann et al., 2004) 等。观测到的多普勒效应和线宽等参数也有助于研究星系内部物质的运动状态和动力学特性 (Alonso et al., 2007)。不同时期的星系光谱中还可以观察到星系中恒星形成、星系合并和星系活动等过程的迹象，从而推断星系的演化历史和演化轨迹 (Coldwell et al., 2017)。此外，星系光谱还可用于探测宇宙中的暗物质等重要物理现象。因此，星系光谱研究对于揭示星系的形成与演化历史、探索宇宙的大尺度结构和演化等重要问题具有至关重要的意义。

星系的光学光谱分类是指利用可见光波段的光谱数据对星系进行分类。根据星系光谱中是否表现出发射线特征，星系可分为发射线星系和正常 (Normal) 星系。发射线星系的光谱通常呈现出强烈的 [N II]、 $H\alpha$ 等发射线特征 (Kennicutt Jr, 1992a)。这些星系的中央区域富含气体和尘埃，并伴随高度活跃的星际物理过程，如恒星形成和超新星爆发，星系内气体的加热和能量释放导致了发射线的产生 (Heckman, 1980)。相比之下，正常星系的光谱通常不显示发射线，这些星系中的气体和尘埃含量较少，星际物理活动相对较缓慢 (Kennicutt Jr, 1992b)。

各类星系因其独特的物理条件、化学组成及演化历史等，呈现出不同的光谱特征 (Draine, 2010)。星系光谱分类旨在根据光谱特征将星系划分为不同的类别。恒星形成星系是一类重要的发射线星系，其光谱中强烈的氢发射线揭示了星系内部正在进行的星际物质形成和恒星形成过程，为研究星系内部的化学和物理环境提供了线索。活动星系核是宇宙中最强大的能量来源之一，其光谱通常含有非常明亮的发射谱线，这些谱线来源于星系中心超大质量黑洞周围的高温、高密度气体，分析这些谱线可以推断活动星系核 (Active Galactic Nuclei, AGN) 的物理过程和黑洞质量等关键参数，甚至利用高红移天体研究早期宇宙的演化状态。星系光谱分类不仅为开展后续研究奠定了基础，也在天文和天体物理学的众多领域发挥着关键作用。

近年来，斯隆数字化巡天 (Sloan Digital Sky Survey, SDSS)、大天区面积多目标光纤光谱天文望远镜 (Large Sky Area Multi-Object Fiber Spectroscopic Telescope, LAMOST) 和暗能量光谱仪 (Dark Energy Spectroscopic Instrument, DESI) 等大

型光谱巡天项目取得了巨大的成功，收集了大规模的星系光谱数据，研究者们基于这些光谱数据开展了多项重要研究。例如，通过分析星系光谱的特征研究星族合成模型与星系的形成与演化历史等 (汪梦欣, 罗阿理, 2020; Wang et al., 2021); 通过监测星系等天体的红移变化研究宇宙加速膨胀的机制，限制宇宙的基本参数，从而研究宇宙的大尺度结构等 (ur Rahman, Iqbal, 2019)。然而，面对大规模星系光谱数据的处理需求，如何从中提取有用信息和实现快速准确的分类是一个亟待解决的关键问题。

1.2 国内外研究现状

1.2.1 传统星系光谱分类方法

星系光谱分类中重要的一环是活动星系核的识别，其识别方法多样，例如观测光谱中的强发射线或宽发射线特征，或分析光谱是否呈现不寻常的蓝色连续谱等 (Ho, 2008)。在光学波段，由 Baldwin、Phillips 和 Terlevich 共同提出的诊断图方法因其直观性和有效性而被广泛应用于发射线星系光谱分类，这一诊断图被称为 BPT 诊断图，后经 Veilleux, Osterbrock (1987) 等进行了理论发展。该方法基于气体激发机制对发射线星系进行分类，基本思想是利用某些突出发射线的相对强度探测激发源的星云状态。BPT 诊断图方法将星系划分为两个区域：一是主要电离机制来自于恒星高速形成的区域；二是气体电离主要源自于活动星系核存在的区域，包括赛弗特 (Seyfert) 星系和低电离星系核 (low ionization nuclear emission-line region, LINER) 星系。

BPT 诊断图方法利用 $[O III]/H\beta$ 、 $[N II]/H\alpha$ 、 $[S II]/H\alpha$ 和 $[O I]/H\alpha$ 四种发射线与巴尔默线的线强比，将发射线星系分类为恒星形成 (Star-Forming, SF) 星系、复合 (Composite) 星系和 AGN。AGN 又被分类为 Seyfert 星系和 LINER 星系。图1-1是 Kewley et al. (2006) 用于 SDSS 星系分类的 BPT 诊断图，其中包含了目前最常用的分类线：Kewley et al. (2001) 理论分析获得的 AGN 分类线 (简称 K01) 和 Kauffmann et al. (2003b) 通过实验得到的 SF 星系分类线 (简称 K03)。位于 K01 和 K03 两条分类线之间的星系被分类为复合星系，这种星系同时表现出 SF 星系和 AGN 的特征。Kewley et al. (2006) 提出 Seyfert-LINER 星系的分类线，将 AGN 进一步分类为 Seyfert 星系和 LINER 星系，Seyfert 星系的光谱中含有包括允许线和禁线在内的大量高电离发射线，而 LINER 星系的光谱中高电离线非常少，但具有很强的低电离线。

除了 BPT 诊断图外，Fernandes et al. (2010) 提出了以 $H\alpha$ 或 $[O II]$ 代替 $H\beta$ 或以 $H\alpha$ 的等值宽度 (Equivalent Width, EW) 代替 $[O III]/H\beta$ ，以实现弱线星系的分类。此外，Fernandes et al. (2005) 提出了使用 D_n4000 指数和 $\max(EW[OII], EW(NeIII))$ 区分 SF 和 AGN。这些诊断图方法都是基于谱线特征的分类方法。

传统的诊断图方法的物理意义较强，分类也比较明确。然而，这种方法在实施时也存在一些缺点。例如，(1) 对数据质量和噪声敏感。为了识别特定谱线的位置和测量谱线流量，该方法需要高精度度的光谱红移和谱线测量，在分类时对

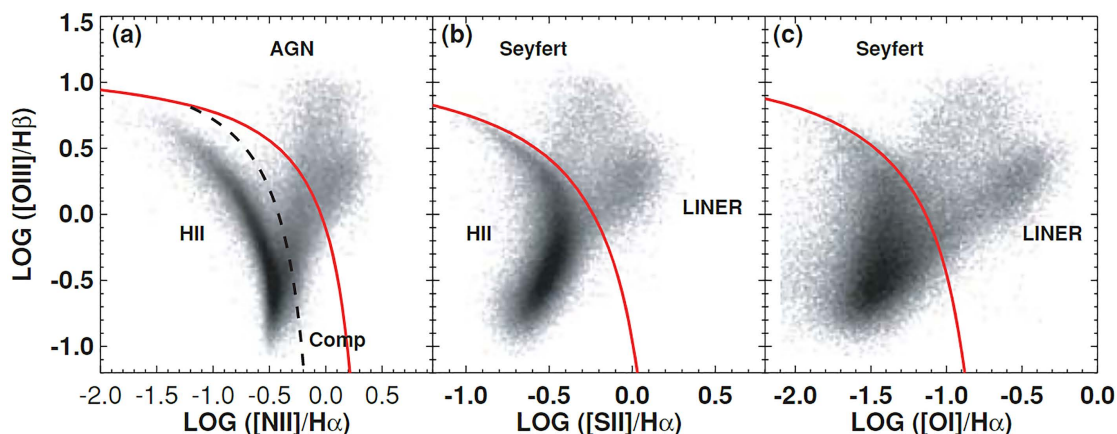


图 1-1 BPT 诊断图 (图片引用自 Kewley et al. 2006)

Figure 1-1 The BPT Diagram Cited from Kewley et al. (2006)

光谱信噪比 (Signal/Noise ratio, S/N) 有较高要求, 在光谱数据质量较差或存在较多噪声的情况下, BPT 诊断图的分类结果可能会受到较大影响, 导致分类不准确 (Brinchmann et al., 2004; Thomas et al., 2013)。(2) 不适用于特定谱线缺失的光谱。例如, 不能用于由于遮挡或红移效应导致所需发射线缺失的光谱 (Zhang et al., 2019; Kyritsis et al., 2022)。(3) 分类结果主观性较强。在测量谱线流量时, 不同的研究者往往根据自己的经验和偏好对星系光谱进行处理, 例如将恒星吸收成分从发射线光谱中去除的过程就会产生不确定性 (Ho, 2008)。(4) 不适用于大规模数据。该方法通常是手动进行的, 复杂度较高, 耗时较长, 因此对于大规模光谱数据的处理效率较低 (Veilleux, Osterbrock, 1987; 赵梅芳等, 2008)。天文学已经进入大数据时代, 面对海量星系光谱数据, 这些限制影响了 BPT 诊断图方法在当前天文学研究中的实用性和有效性。

1.2.2 机器学习在天体光谱研究中的应用

1.2.2.1 经典机器学习算法

随着望远镜数量的增加、观测范围的扩大和天体信息获取能力的增强, 天文学已经进入大数据时代。传统光谱研究主要依赖于人工分析和处理, 随着各类大型光谱巡天项目积累并将持续产生大规模的光谱数据, 这些数据的高维性和海量性特点对传统天文研究方法提出了挑战。为了充分利用这些大规模的光谱数据, 研究人员开始转向采用基于机器学习等人工智能的数据驱动方法。机器学习 (Machine Learning, ML) 是一种对数据进行自动化分析和处理的技术, 能够高效地分析和处理光谱数据, 节省时间和人力成本, 并提高观测数据的有效利用率。机器学习算法已经被广泛应用于各种天体光谱数据的分析和处理问题。

天体光谱分类是天体光谱研究中一类重要的问题。例如, 机器学习算法为解决恒星-星系-类星体分类问题提供了高效的手段 (Solarz et al., 2012)。Wen, Yang (2021) 利用 K 近邻 (K-Nearest Neighbors, KNN)、决策树 (Decision Tree, DT)、随机森林 (Random Forest, RF) 和支持向量机 (Support Vector Machine, SVM)

实现了LAMOST光谱的分类问题,结果表明SVM和RF分类器表现更好。Peng et al. (2013)将KNN与SVM方法相结合,在恒星-类星体的分类实验中得到了比单独使用SVM方法更好的效果。美国天文学家威廉·威廉姆·摩根(William Wilson Morgan)和菲利普·凯斯勒(Philip C. Keenan)于1943年提出一种恒星光谱分类系统——MK分类。这是一种基于恒星的表面温度和亮度的恒星光谱分类系统,被广泛应用于恒星光谱研究和分类中。研究者们也使用了各种机器学习算法,例如局部线性嵌入(Locally Linear Embedding, LLE; Daniel et al. 2011)、KNN(Brice, Andonie, 2019)和SVM(Liu et al., 2015)等来解决这一问题。

恒星大气参数预测是机器学习典型的回归问题,相关研究工作使用了包括主成分分析(Principal Component Analysis, PCA; Fiorentin et al. 2007)和RF(Chandra et al., 2020)在内的多种机器学习算法。

特异天体是指在天文学中具有特殊性质或表现形式的天体,其性质和现象与普通天体有所不同。机器学习算法被广泛应用于特异天体的搜寻,例如超新星(Muthukrishna et al., 2019; Kou et al., 2020)、耀变体(Arsioli, Dedin, 2020)、激变变星(Fuqiang et al., 2014; Hou et al., 2023)等。此外,还有研究利用无监督机器学习算法实现检测异常天体(Reis et al., 2018)、提取光谱特征(Yude et al., 2013; Kong et al., 2018)和光谱插值(Sharma et al., 2020b)等工作。

1.2.2.2 深度学习算法

随着计算机硬件的不断更新和大规模硬件加速设备的出现,尤其是图形处理器(Graphics Processing Unit, GPU)性能的不不断提升,深度学习(Deep Learning, DL)取得了惊人的进展。作为一种基于深度神经网络的算法,DL是机器学习的分支学科,旨在建立可以模拟人脑进行分析学习的模型,实现计算机模拟人类的认知并通过经验学习的过程。该算法采用多个隐藏层对底层特征进行组合,进而形成更加抽象的高层特征,实现高层次的特征提取和表示学习,从而得到输入数据的复杂特征表示。

深度学习包括多种模型结构,主流的网络模型包括卷积神经网络(Convolutional Neural Network, CNN),其使用卷积替代一般矩阵乘法运算;循环神经网络(Recurrent Neural Network, RNN),可用于处理序列数据,自编码器(Autoencoder),由一个编码器和一个解码器组成;以及用于从训练样本中学习出新样本的生成式对抗网络(Generative Adversarial Network, GAN)等。通过不断探索各种网络模型的结构和特征,深度学习算法已经成为当前最为流行和应用广泛的人工智能算法之一。

对于天体光谱的分析,深度学习算法可以自动学习原始光谱特征,挖掘多维参数空间中隐含的规律,从而生成特征表达。因此,在天文学光谱的相关研究中,各种深度学习的网络模型被广泛应用。特别地,CNN在光谱处理和分析中表现优异。许多研究利用CNN模型进行恒星光谱分类(Sharma et al., 2020a; Zhao et al., 2022; Wang et al., 2019)和大气参数估计(Gilda et al., 2018; Guiglion et al.,

2020; Li et al., 2022; Wu et al., 2023)。Sharma et al. (2020a) 比较了 ANN、RF 和 CNN 对于恒星光谱分类任务的表现, 结果表明 CNN 能够将分类误差降低到 1.23 个光谱子类。Busca, Balland (2018) 设计了一个名为 QuasarNET 的深度 CNN 模型, 能够以与人类专家相当的准确性进行天体物理光谱的分类和红移估计。在此基础上, FNet (Rastegarnia et al., 2022) 将残差神经网络 (Residual Neural Network, ResNet) 结构与一维 CNN 相结合以估计类星体的红移, 能够提供与 QuasarNET 类似的准确性, 同时适用于更广泛的 SDSS 光谱。Wang et al. (2020) 构建了基于 CNN 的 SPCANet 模型以估计 LAMOST 中分辨光谱的恒星参数 (有效温度和表面重力) 和 13 种化学元素的丰度, 实现了高精度和高效率的光谱分析。CNN 模型在其他领域, 如搜寻阻尼莱曼 α 系统 (Parks et al., 2018)、识别低 HI 柱密度的莱曼 α 吸收系统 (Cheng et al., 2022) 方面也展现了出色的性能。Liu et al. (2019) 构建了 CNN 模型对 F、G、K 型恒星及十个子类进行分类, 结果显示该模型的分 类准确率高于 SVM、RF 和 ANN。

这些研究证明了机器学习和深度学习算法对于光谱分析处理的有效性和高效性。在星系光谱分类问题中, 有效的星系光谱自动分类方法是研究星系形成与演化的基础。斯隆数字巡天是活动星系核证认的重要来源之一, 但自第十三次数据发布起, 该项目不再提供官方的 BPT 分类结果。随着项目产生的星系光谱数据的规模不断增加, 基于传统的 BPT 诊断图进行星系光谱分类需要耗费大量时间和人力, 因此, 基于机器学习的星系光谱自动分类方法具有非常重要的研究意义, 有助于提高分类精度和数据处理效率, 是星系光谱自动分类的重要工具。

1.2.3 基于机器学习算法的星系光谱分类研究

目前已经有很多研究使用机器学习算法实现自动分类星系光谱或自动识别活动星系核 (Tao et al., 2020; Peruzzi et al., 2021)。例如, 主成分分析 (Principle Component Analysis, PCA) 可以提取星系光谱中的主成分, 进而使用主成分信息识别星系光谱 (Ortiz, Galaz, 2009; Bolton et al., 2012)。覃冬梅等 (2004) 将利用 PCA 提取的主成分信息输入 SVM 分类器, 实现了活动天体与非活动天体的自动区分。李乡儒等 (2007b) 基于 Fisher 判别分析方法进行有监督的特征提取方法, 分别实现了 Normal 星系和类星体、类星体和 Seyfert 星系的自动分类, 实验结果表明该方法能够有效约减光谱的维数并融合光谱数据的类别信息。赵梅芳等 (2008) 采用自适应增强 (Adaboost) 方法实现 AGN 的自动识别, 仅采用 $H\alpha$ 和 [N II] 发射线为主的波段就能达到较好的分类效果。Sánchez Almeida et al. (2010) 应用 K 均值方法实现星系光谱的无监督分类, 分类结果体现了星系光谱类型与哈勃类型间的潜在联系。Shi et al. (2015) 利用支持向量机将活动星系分类为恒星形成星系、活动星系核和复合星系, 分类准确率达到 90% 以上。

越来越多的研究者也已经探索使用聚类 (De Souza et al., 2017; Stampoulis et al., 2019; Fraix-Burnet et al., 2021) 和降维 (Yip et al., 2004; Marchetti et al., 2013) 等无监督机器学习算法在星系光谱分析问题上的有效性。Chattopadhyay et al. (2019) 使用独立成分分析方法降低光谱维度, 并将提取的特征以 K 均值方法进行聚类。

张茜等 (2020) 证明了 K 均值无监督聚类方法可以快速高效地将星系光谱聚类为吸收线星系和发射线星系, 该研究还利用 CLARA 聚类算法实现发射线星系的细分类, 结果与 BPT 诊断图等传统方法的分类结果存在预期的相关性, 能够反映星系的演化过程。Portillo et al. (2020) 使用变分自编码器将 SDSS 的星系光谱降低至 10 个维度, 在降维后的特征空间能够更好地区分宽线 AGN、窄线 AGN、发射线星系和 Normal 星系。Pat et al. (2022) 将均匀流形近似和投影 (Uniform Manifold Approximation and Projection, UMAP) 方法同时应用于原始观测的光谱和以自编码器降维的光谱。他们发现 UMAP 映射能够显著区分 SF 星系和 Normal 星系。用无监督方法区分发射线星系, 尤其是区分 SF、Composite 和 AGN 星系的有效性仍需进一步评估。

一些研究在利用机器学习算法分类发射线星系时, 也实现了 Seyfert 和 LINER 星系的子分类。Zhang et al. (2019) 比较了在 [N II]、 $H\alpha$ 、[S II] 缺失的情况下, RF、KNN、SVM 和多层感知机 (Multi-Layer Perceptron, MLP) 模型对发射线星系的分类效果, 星系被分类为 SF、composite、AGN 和 LINER 星系, 结果表明 RF 分类器的分类表现最好。Wang et al. (2023) 利用 RF、KNN、SVM 和 MLP 方法将 LAMOST 的发射线星系光谱分类为 SF、Composite、Seyfert 和 LINER 星系, 结果表明 MLP 算法准确率达到 92.31%, 并证明了该算法的鲁棒性。

Shi et al. (2015) 使用人工神经网络 (Artificial Neural Network, ANN) 实现了活动星系的光谱分类, 但这种传统的 ANN 通常为单层或浅层结构, 只有一到二层隐藏层, 难以学习非线性的复杂函数和捕捉复杂输入数据中的关键特征。

目前星系光谱自动分类的研究主要基于经典的机器学习算法实现, 其中, 关键光谱特征的筛选依赖于专家先验知识。此外, 已有的分类方法的准确率和适用范围仍需进一步提升。深度学习算法能够利用深层的网络结构来学习复杂的模式和特征表示, 并且对大型数据集的处理更具优势, 非常适用于大规模、高维度的巡天光谱数据。因此, 在包括天文学在内的众多领域, 深度学习算法表现出了良好的性能。利用机器学习和深度学习算法, 继续发展并研究适用于大规模星系光谱数据的自动分析处理算法是该领域发展的必然趋势。

1.3 论文研究内容

基于目前星系光谱分类问题的研究现状及深度学习算法在光谱处理和分析中展现的有效性, 本文的首要研究内容是利用深度学习算法实现对星系光谱的自动分类。这一研究旨在弥补传统分类方法难以快速处理大规模星系光谱、不适用于特定谱线缺失的光谱等局限性, 并进一步提高现有自动分类算法的分类精度。在以往基于经典的机器学习算法的星系光谱自动分类研究中, 通常仅使用了 [N II] 和 $H\alpha$ 等关键谱线附近的波段作为输入特征, 对于这些谱线缺失的光谱无法给出分类。为了更充分地利用光谱信息, 揭示其中可能隐藏的物理规律, 并扩大算法的适用范围, 本文对原始观测的、不进行人工特征筛选的光谱进行分类。

第二个主要内容是探讨星系光谱特征的自动提取方法, 并分析其有效性。在

星系光谱自动分类问题中，光谱的特征提取是决定分类效果的关键环节。在传统的诊断图方法和经典的机器学习算法中，对光谱特征的选取往往基于天文学家的理论知识与先验经验。本文主要探索数据驱动的自动特征提取的可能性，分析利用机器学习和深度学习算法提取出的星系光谱特征的有效性。

第三个主要内容是对深度学习的自动分类模型进行可解释性分析，并将其与传统的星系光谱分类理论进行比较。尽管机器学习与深度学习算法在分类任务上展现出强大的性能，但其决策过程往往缺乏直观、明确的理论依据。然而，理解模型如何依据光谱信息作出分类决策对于科学研究的严谨性与后续应用至关重要。本研究将对深度学习模型进行可解释性分析，尝试解析模型输出结果背后的关键特征贡献，揭示其分类依据。并与星系光谱分类理论对比，评估模型分类依据的一致性，提高模型的可信度和应用性。

1.4 论文组织结构

本文结构安排如下：

第一章，绪论。主要介绍星系光谱分类这一课题的研究背景和国内外研究现状。基于当前研究面临的挑战，结合光谱分析处理的研究趋势，引出本文的主要研究内容。

第二章，星系光谱自动分类的机器学习算法。主要对星系光谱自动分类算法进行理论介绍，一部分是以往研究中具有代表性的几种经典机器学习算法，另一部分是本文设计实现的卷积神经网络算法。

第三章，星系光谱自动分类模型 GalSpecNet 及实验结果分析。首先，详细描述基于卷积神经网络的星系光谱自动分类模型——GalSpecNet 的构建过程。其次，进行经典机器学习算法的对比实验。定量评估各类自动分类算法的关键指标，进行性能对比，分析实验结果。最后，基于 GalSpecNet 模型给出星系光谱的分类星表，展示模型的实际应用价值。

第四章，星系光谱特征的自动提取方法及有效性分析。介绍光谱特征的自动提取方法，通过特征可视化和基于不同特征实现的光谱分类两个角度，对比分析和评价不同光谱特征的有效性。

第五章，模型可解释性分析。针对深度学习模型的黑箱特性，对 GalSpecNet 模型进行可解释性分析。采用基于梯度的类激活图技术和热图方法，可视化展现模型在分类时重点关注的光谱区域和谱线特征。通过与传统分类理论比较，探讨模型识别星系类别的内在逻辑。

第六章，总结与展望。对本文的主要工作和贡献进行总结，并对未来的研究方向进行展望。

第 2 章 星系光谱自动分类的机器学习算法

本章深入探讨实现星系光谱自动分类的算法理论。一部分是介绍其已有研究使用的经典机器学习算法的分类理论，选取其中具有代表性的 Fisher 线性判别分析、支持向量机和随机森林算法进行介绍。另一部分是本文主要实现的卷积神经网络算法，详细介绍了该网络的基本结构、训练流程与优化流程。

2.1 经典机器学习算法

2.1.1 Fisher 线性判别分析

Fisher 线性判别分析 (Fisher's Linear Discriminant Analysis, LDA; Fisher 1936) 由英国统计学家罗纳德·费舍尔 (R. A. Fisher) 于 1936 年率先提出。该方法本质上是一种线性判别方法。它在给定类别和样本数据的条件下，通过构造线性判别函数找到各类别样本间最佳的判别边界。该算法的核心思想是寻找一个 (或一组) 最佳投影方向。在投影方向上，将原始高维数据投影到较低维度的空间中，使得不同类别之间尽可能分离，同时，使得同一类别内的数据点尽可能紧凑。即最大化类间散度与类内散度的比值，使得数据在投影的新空间中具有最佳的分类性能。

如图 2-1 所示，LDA 算法在分类时将考虑所有可能的映射，LD1 和 LD2 是 LDA 其中两个映射，LD1 可以很好地区分两个类别的样本，而 LD2 的映射则导致了两个类别的样本具有大量重叠，因此 LD1 的分类效果更好。

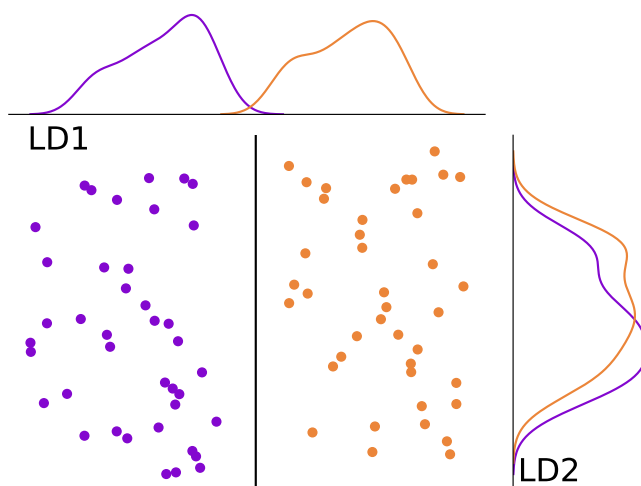


图 2-1 Fisher 线性判别分析算法示意图

Figure 2-1 Schematic Diagram of Fisher's Linear Discriminant Analysis Algorithm

设有两类星系光谱数据 X_1 和 X_2 ，每类包含多个光谱样本，每个样本是一个 n 维向量 x ，表示光谱的强度随 n 个波长的变化情况。使用 LDA 实现特征提

取的目标是找到一个向量 w ，使得将 x 投影到 w 上后，两类数据在一维空间上区分得最好，使用类内散度矩阵 S_w 和类间散度矩阵 S_b 衡量区分程度，其计算公式分别是2-1和式2-2。

$$S_w = \sum_{i=1}^2 \frac{1}{|X_i|} \sum_{x \in X_i} (x - m_i)(x - m_i)^T \quad (2-1)$$

$$S_b = (m_1 - m_2)(m_1 - m_2)^T \quad (2-2)$$

其中， $m_i = \frac{1}{|X_i|} \sum_{x \in X_i} wx$ 是第 i 类在原始空间中的均值向量。类内散度矩阵 S_w 反映同类样本内部的变异性，类间散度矩阵 S_b 衡量两类样本均值之间的差异。LDA 的目标是找到一个最优的投影向量 w ，使得投影后两类数据的类间散度与类内散度之比最大，即最大化如下目标函数：

$$J(w) = \frac{S_b}{S_w} = \frac{(m_1 - m_2)(m_1 - m_2)^T}{\sum_{i=1}^2 \frac{1}{|X_i|} \sum_{x \in X_i} (x - m_i)(x - m_i)^T} \quad (2-3)$$

通过求解以下特征值问题找到最大的 Fisher 准则值及其对应的特征向量 w ：

$$S_b w = \lambda S_w w \quad (2-4)$$

其中， λ 为特征值， w 为对应的特征向量。选择特征值最大的特征方向作为最优投影向量。给定一个光谱样本 x ，将其投影到最优投影向量 w 上，得到一维特征值：

$$y = w^T x \quad (2-5)$$

在投影后的一维空间设定一个阈值，根据特征值 y 与阈值的关系对样本实现分类。例如， $y > 0$ 时将样本分为一类；否则分为另一类。这样就基于 LDA 算法实现了星系光谱的分类。李乡儒等 (2007b) 利用 LDA 对类星体与正常星系分类、类星体与 Seyfert 2 实现了较好的区分。

2.1.2 支持向量机

支持向量机 (Support Vector Machine, SVM; Hearst et al. 1998) 是一种有监督的机器学习分类算法。对于给定的数据集，它首先将数据映射到高维空间中，然后在所有可能的分类边界中寻找一个超平面，使得它能够将不同类别的数据样本分离开来，并且这个超平面距离不同类别的数据样本的最短距离最大化，即将不同类别的数据样本分离得最好。距离超平面最近的数据点被称为支持向量，因为它们对于 SVM 模型的构建起到至关重要的作用。

设有两类星系光谱数据 X_1 和 X_2 ，每个光谱样本是一个 n 维向量 x ，其中 n 代表光谱长度。图 2-2 展示了 SVM 算法的示意图，使用 SVM 实现星系光谱分类的目标是找到一个由向量 w 和偏置项 b 定义的最优超平面。该超平面 $w^T x + b = 0$

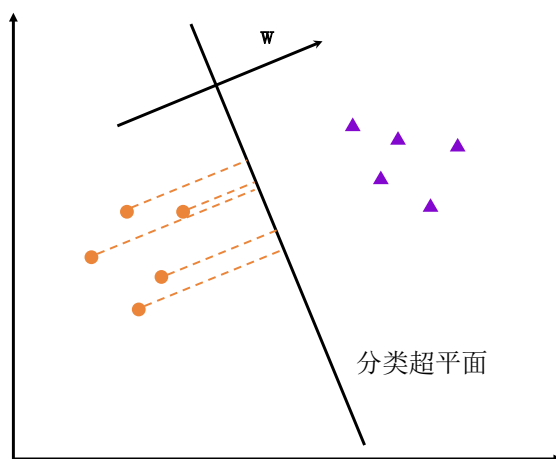


图 2-2 支持向量机算法示意图

Figure 2-2 Schematic Diagram of Support Vector Machine Algorithm

作为分类边界能够最大地将两类数据在原始特征空间中分离，同时满足约束条件：

$$y_i \times (w^T x_i + b) \leq 1 \quad (2-6)$$

其中 $y_i \in [-1, 1]$ 是类别标签。这是一个凸优化问题，可以通过拉格朗日乘子法和偶问题来求解。求解过程中，只有一部分数据点对于优化目标有贡献，这些数据点被称为支持向量，它们满足等式 $y_i \times (w^T x_i + b) = 1$ 。

SVM 算法的核心优势之一是可以核函数将线性问题转换为非线性问题。核函数将数据从原始空间映射到一个更高维的空间中，使得原始数据集在新的高维空间中变得线性可分，常用的核函数包括线性核、多项式核、高斯核函数等。当数据本身线性可分或希望通过线性超平面进行分类时，通常采用线性核；当数据存在一定的非线性关系，但可以用低阶多项式近似时，可以使用多项式核；高斯核是最常用的非线性核函数，能够处理复杂的非线性边界，对参数的敏感度相对较低。此外，SVM 算法的优点在于可以处理高维数据集，因为在高维空间中，数据点更容易被分离。并且，SVM 只依赖支持向量来确定分类边界，受噪声和非关键特征的影响较小。该算法通常应用于二分类问题，也可以由一对多和一对一等策略扩展到多分类问题。

SVM 是一种强大的有监督机器学习算法，在处理高维数据和非线性问题方面表现出色。目前已经有许多研究利用 SVM 算法实现了星系光谱自动分类，并取得了不错的效果 (覃冬梅 等, 2004; Zhang et al., 2019; Wang et al., 2023)。

2.1.3 随机森林

随机森林 (Random Forest, RF; Breiman 2001) 是一种有监督的深度学习算法，它是一种基于树模型的集成学习方法，利用多棵决策树分别对样本进行训练和预测，最终的预测结果由各棵树投票决定。

图 2-3 是 RF 算法的一个示意图， N 棵决策树分别对输入光谱进行预测，得

到 N 个预测结果，通过多数投票或对 N 个测试结果求均值的方式，得到输入光谱的最终预测结果。

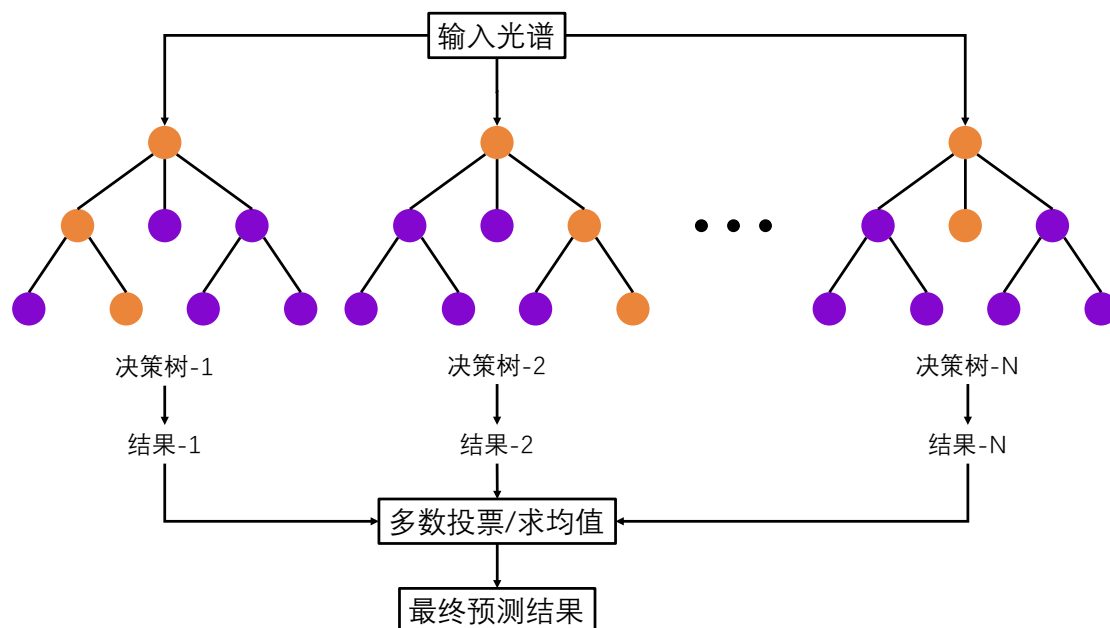


图 2-3 随机森林算法示意图

Figure 2-3 Schematic Diagram of Random Forest Algorithm

RF 分类方法能够处理和分析高维度、大规模的数据，并且无需进行特征选择或降维操作；它能够对输入的各个特征进行重要性评估，有助于数据和模型的理解，重要性越高的特征越有助于提高算法分类的准确率，也可以根据重要性对特征进行排序或筛选以提高模型的效率和可解释性；它能够有效地处理输入数据中的缺失值或噪声数据，具有很强的泛化和抗过拟合能力；并且它的训练过程也易于并行化，可以节省模型训练时间，计算效率较高。

但 RF 方法也存在一定的缺点，例如它的模型结构比较复杂，不易解释；对于某些噪声较大或类别不均衡的数据，RF 方法的分类结果可能会偏向某一类别；并且对于取值划分较多的特征，可能会有更大的影响，导致特征权重不准确。

RF 已经被广泛应用于恒星和星系光谱的分类实验 (Tao et al., 2020; Zhang et al., 2013; Li et al., 2019; Kyritsis et al., 2022)。Zhang et al. (2019) 使用四种深度学习算法 KNN、SVC、RF 和 MLP 分类中红移发射线星系，并发现 RF 分类器表现出最佳分类能力。这些研究证明了 RF 在天体光谱分析处理方面的能力，本文将进一步测试该方法在星系光谱分类方面的表现。

2.2 卷积神经网络 (CNN) 算法

卷积神经网络的研究起源于 20 世纪 80 年代，它是一种使用卷积核检测局部模式的深度学习模型，特别适用于具有网格结构的数据。经过数年的发展，Krizhevsky et al. (2017) 等人提出的深度卷积神经网络在 ImageNet 图像识别数据

库上取得了最佳的分类效果，使这一网络模型受到重视并引发了广泛的讨论和研究，由此产生了一系列出色的网络模型。现在，CNN 已经成为图像和序列数据等数据集特征提取的基准。

2.2.1 网络的基本结构

卷积神经网络的核心思想是通过层层堆叠的卷积层、池化层和全连接层来逐渐提取和组合输入数据的特征，从原始数据中抽取深层语义信息，最终实现对输入数据的高效表示和分类。

2.2.1.1 卷积操作与卷积层

卷积层是卷积神经网络的核心组成部分，也是从原始数据中提取特征的主要环节。它通过在输入数据上滑动一个特定大小的窗口（通常称为卷积核或滤波器）来提取局部特征。这种局部感知能力使 CNN 能够有效捕捉数据中的空间结构信息。

卷积操作将卷积核中的权重分别与输入光谱中对应位置的元素进行点积，并将结果相加得到一个标量值。在每个位置执行卷积操作直到遍历整个输入光谱，最后卷积结果组合起来，即为从输入光谱提取出的特征。在一次卷积过程中，输入光谱共享卷积核的权重参数，这是卷积神经网络的一个重要特点——权值共享，这种方式能够减少卷积层的计算量。卷积操作可以表示为：

$$y_i = \sum_{j=0}^{k-1} x_{i+s \times j} \cdot w_j + b \quad (2-7)$$

其中 y_i 是卷积输出的第 i 个元素， x_i 是输入的第 i 个元素， w_j 是卷积核的第 j 个权重参数， b 是偏置项， k 是卷积核的大小。卷积核 w 是一个权重向量，用于提取输入光谱的特征。实现卷积操作时，可以通过设置步幅 s 控制卷积核在输入光谱上的移动间隔。例如，步幅为 1 时，每次移动一个元素；步幅为 2 时，每次移动两个元素，以此类推。此外，卷积操作的输入与输出特征谱的尺寸满足式 2-8：

$$f_o = \left\lfloor \frac{f_i + 2 \times p - k}{s} \right\rfloor + 1 \quad (2-8)$$

其中， f_o 为卷积操作的输出特征尺寸， f_i 为输入光谱尺寸， k 为卷积核尺寸， p 为填充尺寸， s 为卷积操作的步幅。填充通过在输入光谱的两端添加零值或其他值，确保输出光谱的长度与输入光谱或指定的输出长度相同。

对于长度为 N 的输入光谱，当卷积向量 $w = (1, 0, -1)$ ，步长 $s = 1$ ，填充 $p = 0$ 时，一次卷积的运算过程如图 2-4 所示。卷积层的元素仅和前一层的部分元素连接，用来学习局部特征，这是卷积神经网络的另一个重要特点——局部连接。这一特点大幅减少了 CNN 的参数数量，加快了学习速率，也在一定程度上减少了过拟合。网络中不同层次的卷积核通常具有不同的提取性能，浅层的卷积可以提取出简单和直观的特征，深层的卷积则可以获取更为复杂和抽象的特征。

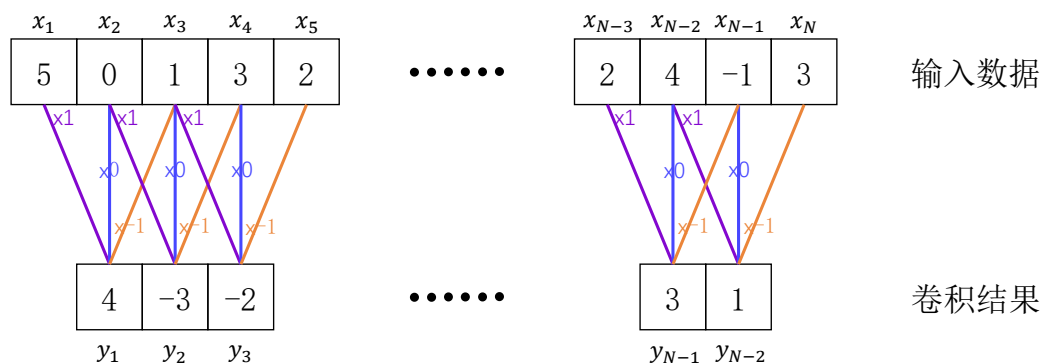


图 2-4 一次卷积运算过程示意图

Figure 2-4 Schematic Diagram of a Convolution Operation

卷积运算提供了输入光谱与卷积核之间的线性运算，随着网络层数的增加，输出值始终是输入值的线性函数。但对于复杂的光谱而言，线性运算难以拟合其分布情况。因此引入激活函数（Activation Function）为 CNN 提供非线性的激活能力，使其能够学习和表示更复杂的函数关系，提高了对复杂输入光谱复杂特征的提取能力。合适的激活函数还能过滤掉网络中的无效参数，降低网络的计算量。图 2-5展示了四种常见的激活函数。

1. Sigmoid 激活函数

Sigmoid 函数是一种常见的连续、单调递增的非线性激活函数，其公式和图像分别如式 2-9和图 2-5a所示。

$$\text{Sigmoid}(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (2-9)$$

它将输入值映射到 $(0, 1)$ 的区间内，几何形状为一条“S”型曲线。Sigmoid 函数常用于二分类任务中的输出层，将网络的输出映射到概率值，表示样本属于某个类别的概率。然而，该函数存在的问题是，在反向传播计算误差梯度时，由于 Sigmoid 函数的求导涉及除法和指数运算，因此计算成本相对较高。并且，当输入数据极大或极小时，其导数无限逼近于 0。在深度神经网络中，随着网络深度增加，连续多层 Sigmoid 函数的梯度乘积可能迅速趋近于零，导致梯度消失现象，影响网络的训练效率和模型收敛。

2. Tanh 激活函数

双曲正切（Tanh）函数是另一种常用的激活函数，其公式和图像分别如式 2-10和图 2-5b所示。

$$\text{Tanh}(x) = \frac{1 - e^{-2x}}{1 + e^{-2x}} \quad (2-10)$$

Tanh 函数与 Sigmoid 函数类似，都呈现出单调递增的“S”型曲线，但它将输入值映射到以 0 为中心、 $(-1, 1)$ 的区间内，具有中心对称性。与 Sigmoid 函数相比，Tanh 函数的导数在输入值接近 0 时达到最大值 1，导数变化更加陡峭，有利于梯度传播。因此，该函数在一定程度上缓解了梯度消失的问题。但当输入数据极大

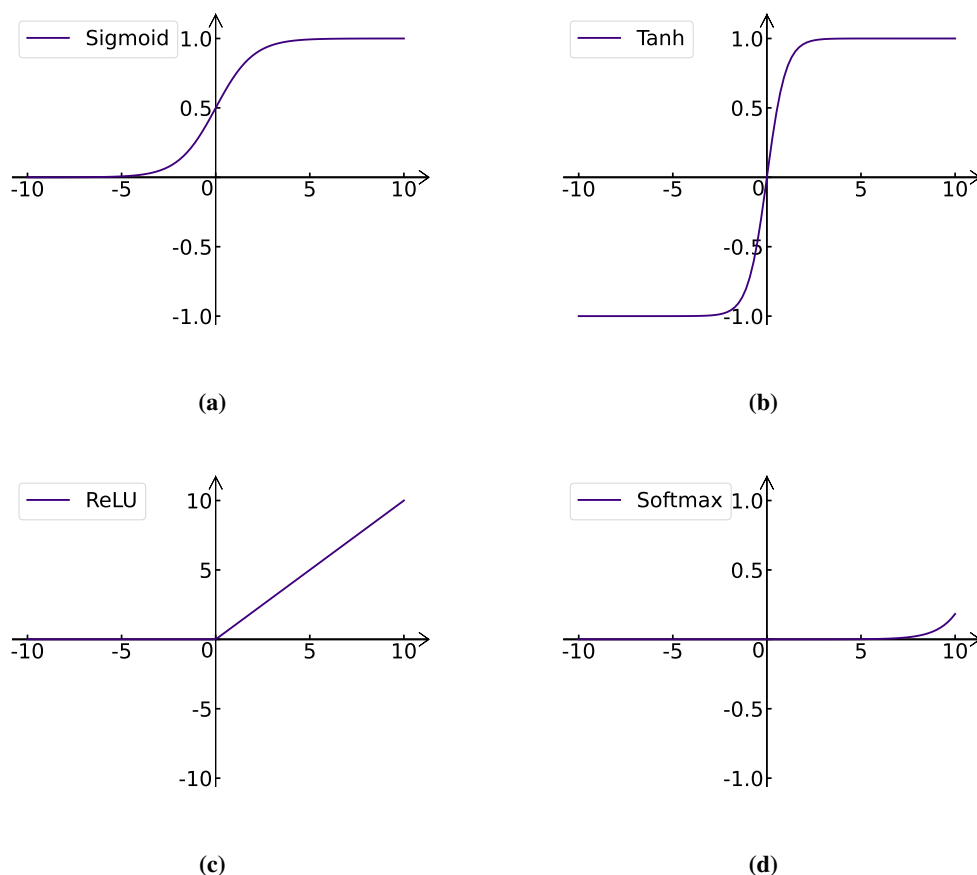


图 2-5 常用的激活函数

Figure 2-5 Common Activation Functions

或极小时，梯度消失问题仍然存在。并且，Tanh 函数的梯度计算涉及指数运算，因此计算开销也相对较大。

3. ReLU 激活函数

ReLU (Rectified Linear Unit) 函数是一种简单而有效的非线性激活函数，其公式和图像分别如式2-11和图 2-5c所示。

$$\text{ReLU}(x) = \max(0, x) \quad (2-11)$$

ReLU 函数可以视为两个线性函数的组合：当输入值大于 0 时，输出等于输入；当输入值小于 0 时，其输出为 0，此时神经元不会被激活，网络不进行反向传播，使得网络更加具有稀疏性，有助于防止过拟合。与 Sigmoid 和 Tanh 函数不同，ReLU 函数在正区间的梯度恒定为 1，避免了梯度消失问题，有助于提高网络的训练速度和模型收敛性能。并且，ReLU 函数在反向传播误差时仅包含简单的阈值操作，无需复杂的数学运算，大大降低了反向传播过程中的计算负担，网络的计算效率更高。由于 ReLU 函数的性质，当输入值持续为负时，相关神经元的梯度始终为 0，可能导致这些神经元无法更新，称为 ReLU 函数的“死区”问题。为缓解这一问题，衍生出了 Leaky ReLU、Parametric ReLU 等变体。

4. Softmax 激活函数

Softmax 函数常用于多分类问题的输出层，将神经网络的原始输出转换为类别概率分布，其公式和图像分别如式2-12和图 2-5d所示。

$$\text{Softmax}(x)_i = \frac{e^{x_i}}{\sum_j e^{x_j}} \quad (2-12)$$

Softmax 函数将多个神经元的输出映射到 (0, 1) 区间内，并对网络的输出进行归一化，确保所有类别的概率之和为 1。这使得网络的输出可以视为属于各个分类的概率，方便训练过程中的损失计算、模型评估以及实际应用中的决策制定。尽管 Softmax 函数的计算涉及指数运算和求和，但因其在多分类任务中的独特作用，其计算开销通常被认为是必要的。

2.2.1.2 池化操作与池化层

池化层 (Pooling Layer)，又称下采样层 (Down-Sample Layer)，是卷积神经网络的重要组成部分，其核心功能在于对前一层 (通常是卷积层) 输出的特征图进行有效筛选和压缩。池化层通过在局部区域实施特定的取值策略，降低特征图的尺寸，实现对输入特征的下采样。池化层有助于降低信息冗余，削减网络参数和计算量，加速模型的训练与推断过程，且有助于预防过拟合现象；通过忽略局部细节，池化层能够降低模型对训练数据中的噪声或微小变动的敏感性，增强了模型的鲁棒性；通过提取局部区域内的关键特征，池化层促使模型关注更加抽象和更具代表性的特征表示，进一步加强模型的特征表征能力。

图 2-6展示了目前最常用的两种池化方式，最大池化 (Max Pooling, MP) 和平均池化 (Average Pooling)。这两种池化分别在特定大小的窗口内选择最大值和平均值作为池化结果，实现对输入数据的压缩降维。最大池化和平均池化的输出分别可以表示为式 2-13和式 2-14。

$$\text{MaxPooling}(x)_i = \max(x_{si}, x_{si+1}, \dots, x_{si+p-1}) \quad (2-13)$$

$$\text{AveragePooling}(x)_i = \frac{1}{p} \sum_{j=0}^{p-1} x_{si+j} \quad (2-14)$$

其中， x 表示输入的一维数据， i 为输出特征谱的位置， p 为池化窗口的大小， s 为池化操作的步长。

对于长度为 N 的输入数据，当池化窗口的大小为 2，步长为 2 时，最大池化和平均池化的运算过程如图 2-6所示。

其他常见的池化操作还包括最小池化、全局池化等。在选择池化操作时，需要根据具体的任务需求和网络结构进行选择。池化的输入与输出的尺寸满足式 2-15：

$$f_o = \frac{f_i - f_w}{s} + 1 \quad (2-15)$$

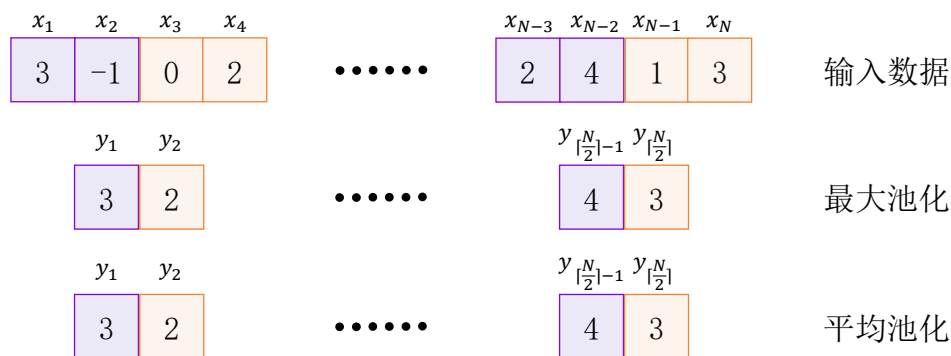


图 2-6 最大池化和平均池化示意图

Figure 2-6 Schematic Diagram of Maximum Pooling and Average Pooling

其中, f_o 表示池化操作的输出尺寸, f_i 为输入尺寸, f_w 为池化窗口的大小, s 为池化操作的步长。实践中, 池化窗口大小和步长可以根据不同的网络结构和任务需求进行调整。

2.2.1.3 全连接层

在卷积神经网络中, 输入光谱经过一系列的卷积和池化等特征提取过程后, 被转化为一组局部特征谱。这些特征谱共同构成了对输入光谱深层次、高维度的特征表达, 其中, 每个特征谱都是对输入光谱中某一特定局部区域的抽象压缩表达。

全连接层作为卷积神经网络的重要组成部分, 通常被放置在网络的最后。该网络层接收前面的网络层提取出的局部特征谱, 然后利用权重矩阵对这些特征进行线性变换和加权求和, 形成新的特征表示, 将多个局部特征谱融合为一维特征向量。并通过非线性激活函数引入非线性特性, 进一步提升特征表示的复杂性和多样性。最终, 将综合了输入光谱中关键特征信息的特征向量输入到分类器(如 Softmax 函数), 实现对输入光谱的类别预测。

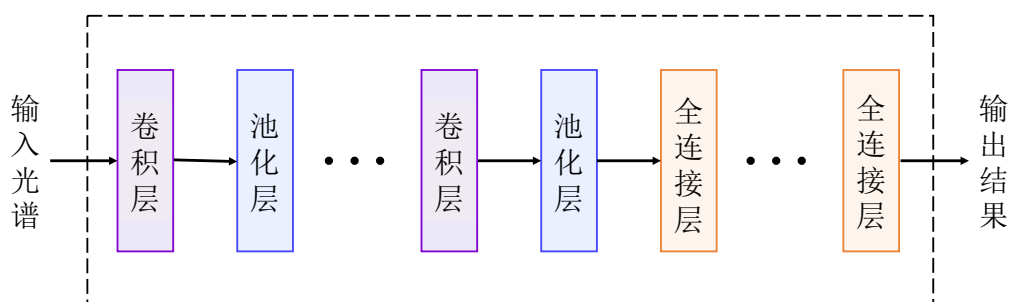


图 2-7 卷积神经网络结构图

Figure 2-7 Structure Diagram of Convolutional Neural Network

综上所述, 卷积神经网络的结构如图 2-7 所示。输入光谱进入 CNN 后, 由多级卷积和池化操作逐步实现输入光谱的多层次、多尺度特征提取, 随后, 这些多维度、局部化的特征被传递至全连接层实现全局特征融合, 生成可供分类器使

用的一维特征向量，最终输出预测结果。

2.2.2 网络的训练与优化

2.2.2.1 训练过程

卷积神经网络的训练过程如图 2-8所示，这一过程采用了迭代优化的方法，基本可以分为以下五个步骤：

(1) 前向传播 (Forward Propagation): 首先，将光谱数据输入网络的输入层，并通过网络的各个层一直传播到输出层。在网络的每一层，数据都经过一系列的卷积、池化和激活等操作，逐渐提取和加工特征。最终，在网络的输出层得到对输入光谱的预测结果。

(2) 损失计算 (Loss Computation): 通过损失函数计算预测值与真实值之间的差异，即损失值。常用的损失函数包括交叉熵损失函数 (Cross-Entropy Loss)、均方误差损失函数 (Mean Square Error Loss) 等，通常根据任务类型确定合适的损失函数。

(3) 反向传播 (Backward Propagation): 反向传播过程从输出层开始，将损失值反向传播回网络。根据损失值计算每一层参数对损失的梯度，并将梯度信息沿着网络反向传播，直至达到输入层。这样就可以得到每一层参数的梯度信息，以便后续的参数更新。

(4) 参数更新 (Parameter Update): 根据反向传播得到的梯度信息，使用优化算法 (如随机梯度下降、Adam 等) 更新网络中的参数，并在参数更新后再次进行前向传播。通过不断迭代反向传播和参数更新的过程，逐渐减小损失值，提高网络对输入数据的预测准确度。

(5) 收敛判断 (Convergence Check): 在训练过程中，对损失值的变化情况进行监控，并设定一个停止条件。当损失值足够小或经过一定的迭代次数后，可以认为网络模型已经收敛，模型训练结束。

通过对以上步骤的循环迭代，网络模型在每个训练周期 (epoch) 不断调整其内部参数，持续学习并适应训练数据的内在规律。随着训练的深入，模型对输入数据的表征能力不断提升，逐步逼近最优状态，对输入数据的预测精度逐渐提高，最终具备对输入数据的准确预测能力。

2.2.2.2 损失函数

损失函数用于衡量模型对样本的预测值与真实值之间的差异，即损失值。该函数用于评估模型的性能，并指导优化算法朝正确方向调整模型的参数。损失值的大小直接反映了模型对样本的拟合程度，越小的损失值代表模型对样本的拟合越好。

在神经网络的训练过程中，每次迭代都会计算模型对样本的损失值。然后，利用反向传播算法，根据损失值的梯度更新网络层的权重和偏置。这个过程被称为梯度下降，旨在不断减小模型的损失值，使模型逐渐趋近于最优解。因此，神

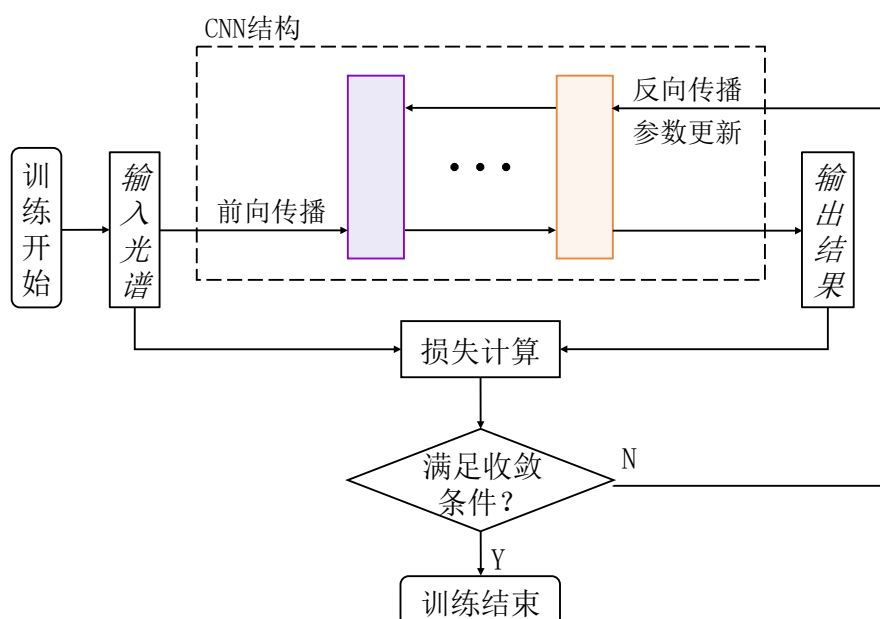


图 2-8 卷积神经网络训练流程图

Figure 2-8 Training Flowchart of Convolutional Neural Network

神经网络的学习过程就是不断优化模型的损失函数，使其达到或接近最小值的过程。

多分类交叉熵损失函数 (Categorical Cross-Entropy Loss Function, Goodfellow et al. 2016) 是分类问题中的一种常用且有效的损失函数。它用来衡量样本的真实类别分布与模型预测的类别概率分布之间的差异，其数学表达式为：

$$L_{CE} = - \sum_{i=1}^N y_i \log(\hat{y}_i) \quad (2-16)$$

其中， N 表示类别的总数， y 是样本真实标签的独热编码， \hat{y} 是模型预测的类别概率分布。网络模型训练的目标是最小化多分类交叉熵损失。随着模型的优化，损失值逐渐减小，使模型更好地逼近真实数据的分布，从而提高分类准确率。

2.2.2.3 优化器

优化器是用于更新模型参数的算法，它决定了模型参数的更新方式，直接影响模型的收敛速度和性能。以下介绍五种常用的优化器：

1. 随机梯度下降 (Stochastic Gradient Descent, SGD)

SGD 算法是最基本的优化算法之一。它是一种梯度下降的变体，被设计用于大规模数据集和高维参数空间的情况。

在标准的批量梯度下降 (Batch Gradient Descent, BGD) 算法中，每一次迭代都会使用所有训练样本来计算模型参数的梯度，然后更新参数。当数据集很大时，这种做法就变得非常耗时。SGD 算法每次迭代时仅随机选择一个样本来计算梯度，并沿着梯度的反方向更新参数，实现计算开销的降低。其参数更新规则

是：

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \eta \nabla L(\theta_t) \quad (2-17)$$

其中, θ_t 表示第 t 次迭代后的参数, θ_{t+1} 表示更新后的参数, η 表示学习率, $\nabla L(\theta_t)$ 表示损失函数 L 关于参数 θ 的梯度。

SGD 算法简单易实现, 但收敛速度慢, 容易陷入局部最优点。该算法每次更新参数时仅使用一个样本, 因此准确性较差。实际中通常选用 BGD 和 SGD 算法的折中, 即小批量随机梯度下降算法 (Mini-Batch SGD, MBSGD)。MBSGD 在每次迭代时, 随机选择一个小批量的样本来计算梯度, 并根据梯度的平均值来更新模型的参数。这样可以减少计算开销, 并且相对于 SGD 算法而言, 参数更新方向更加稳定。

2. 带动量的随机梯度下降 (SGD with Momentum, SGDM)

SGDM 算法在 SGD 的基础上引入了动量, 通过积累之前梯度的方向信息来加速参数更新的过程, 使得参数更新更加平稳。其参数更新规则是：

$$v_{t+1} = \beta v_t + (1 - \beta) \nabla L(\theta_t) \quad (2-18)$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \eta v_{t+1} \quad (2-19)$$

其中, β 表示动量系数, v_t 表示上一步的动量。

SGDM 算法可以加快模型训练时的收敛速度, 减少震荡, 适用于训练复杂的深层网络, 但需要对动量系数等超参数进行调节。

3. 自适应梯度 (Adaptive Gradient, AdaGrad; Duchi et al. 2011)

AdaGrad 算法根据参数的历史梯度信息来调整学习率。对于出现频率较低的参数, 采用较大的学习率进行更新; 而对于出现频率较高的参数, 采用较小的学习率进行更新。其参数更新规则是：

$$G_t = \sum_{i=1}^t (\nabla L(\theta_i))^2 \quad (2-20)$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\eta}{\sqrt{G_t + \epsilon}} \odot \nabla L(\theta_t) \quad (2-21)$$

其中, G_t 为历史梯度平方的累积和, ϵ 为平滑项, 防止除数为 0。

AdaGrad 算法可以自适应地条件学习率, 能够有效地处理不同参数的更新需求。但该算法没有考虑迭代衰减, 学习率可能会过于快速地衰减, 之后学习率基本就不再变化。该算法适用于稀疏数据或者具有稀疏梯度信息的情况。

4. 均方根传播 (Root Mean Square Propagation, RMSProp)

RMSProp 算法基于 AdaGrad 的思想, 但对历史梯度进行了指数加权平均, 从而减少了学习率的快速衰减, 更加平滑地更新参数。其参数更新规则如下：

$$G_t = \beta G_{t-1} + (1 - \beta) (\nabla L(\theta_t))^2 \quad (2-22)$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\eta}{\sqrt{G_t + \epsilon}} \odot \nabla L(\theta_t) \quad (2-23)$$

其中， β 表示衰减率， $(1 - \beta)(\nabla L(\theta_t))^2$ 表示当前梯度的平方项， βG_{t-1} 则表示对历史梯度平方项的指数加权平均。

RMSProp 相对于 Adagrad 而言，通过对梯度进行指数加权平均，减少了学习率的快速衰减问题，使得模型的训练更加稳定。但是，RMSProp 仍然存在学习率过快衰减的问题，可能导致训练提前停止的情况。该算法适用于非稀疏数据和非稀疏梯度信息的情况，特别是对于很深的神经网络模型。

5. 适应性矩估计 (Adaptive Moment Estimation, Adam; Kingma, Ba 2017)

Adam 算法结合了 Momentum 和 RMSProp 的思想，不仅考虑了梯度的一阶矩估计 (均值)，还考虑了梯度的二阶矩估计 (方差)，从而更加全面地调整学习率。其参数更新规则如下：

$$m_t = \beta_1 m_{t-1} + (1 - \beta_1) \nabla L(\theta_t) \quad (2-24)$$

$$v_t = \beta_2 v_{t-1} + (1 - \beta_2) (\nabla L(\theta_t))^2 \quad (2-25)$$

$$\hat{m}_t = \frac{m_t}{1 - \beta_1^t} \quad (2-26)$$

$$\hat{v}_t = \frac{v_t}{1 - \beta_2^t} \quad (2-27)$$

$$\theta_{t+1} = \theta_t - \frac{\eta}{\sqrt{\hat{v}_t + \epsilon}} \odot \hat{m}_t \quad (2-28)$$

其中， m_t 和 v_t 分别为梯度的一阶矩估计 (动量) 和二阶矩估计 (梯度的平方的指数加权移动平均)， β_1 和 β_2 为动量项和梯度项的衰减率； \hat{m}_t 和 \hat{v}_t 分别为偏差修正后的梯度一阶矩估计和二阶矩估计； β_1 和 β_2 为动量项和梯度项的衰减率。

Adam 算法结合了动量的思想和自适应学习率的优点，具有较快的收敛速度和较好的性能表现，在实践中表现出色，相对于其他优化算法具有较好的鲁棒性和适用性。但 Adam 也存在可能过早收敛的问题，并且可能需要进行调参以实现最佳性能。

2.2.2.4 正则化技术

在机器学习的过程中，由于模型过于复杂或者训练数据量太小导致的过拟合是一个常见的问题。过拟合是指机器学习模型在训练数据上表现良好，但在未见过的测试数据上表现不佳的现象。具体来说，过拟合是指模型过度学习了训练数据中的噪声或随机变动，导致模型在训练数据上表现很好，但在新数据上的泛化能力较差。

正则化技术是用于缓解过拟合问题的重要方法，在深度学习中起着至关重要的作用。常见的正则化技术包括 L1 正则化、L2 正则化和 Dropout 正则化。

1. L1 正则化

L1 正则化通过在损失函数中添加模型参数的绝对值之和来惩罚参数的大小，从而促使模型学习到稀疏的特征表示，减少不重要特征的影响。在损失函数中添

加 L1 正则化项的表达式为：

$$L_{L1} = L_{\text{data}} + \lambda \sum_{i=1}^n |\theta_i| \quad (2-29)$$

其中， L_{data} 为原始的数据损失函数， λ 为正则化参数， θ_i 为模型的参数。

L1 正则化能够促使模型学习到稀疏的特征表示，降低模型复杂度，提高模型的泛化能力。但也有可能导致模型参数稀疏性过强，影响模型的表达能力。

2. L2 正则化

L2 正则化通过在损失函数中添加模型参数的平方之和来惩罚参数的大小，使得模型参数的取值更加平滑，降低模型复杂度。在损失函数中添加 L2 正则化项的表达式为：

$$L_{L2} = L_{\text{data}} + \lambda \sum_{i=1}^n \theta_i^2 \quad (2-30)$$

L2 正则化能够降低模型的过拟合风险，提高模型的泛化能力，对于大多数情况下都具有较好的效果。但在数据特征稀疏性较强的情况下，L2 正则化可能效果不如 L1 正则化。

3. Dropout 正则化

Dropout 正则化在每次训练迭代时，以概率 p 随机丢弃神经网络中的部分神经元，即将其输出设置为 0，同时保持输入和输出的期望值不变 (Hinton et al., 2012)。该正则化方法能够有效缓解神经网络的过拟合问题，提高模型的泛化能力，减少模型训练时间。

除了以上介绍的正则化技术外，还有一些其他的正则化方法，如批标准化 (Batch Normalization)、数据增强 (Data Augmentation) 等，它们也都能够有效缓解深度学习模型的过拟合问题。在实际应用中，通常需要根据具体的问题和数据特点选择合适的正则化方法。

2.3 算法评价指标

为了客观、定量地度量和比较训练好的网络模型，本节介绍了几个常用的深度学习模型的评价指标。这些评价指标是衡量模型性能和指导模型改进的重要工具。

1. 多分类交叉熵损失 (Categorical Cross-Entropy Loss)

在 2.2.2.2 小节中介绍了多分类交叉熵损失函数，其损失值即多分类交叉熵损失。只不过损失函数在模型训练过程中使用，指导下一次迭代时网络的参数更新。此处的多分类交叉熵损失用于衡量模型对测试样本的预测概率分布与其真实标签之间的差异程度。

2. 混淆矩阵 (Confusion Matrix)

混淆矩阵用于展示模型在每个类别上的预测情况。表2-1展示了二分类问题的混淆矩阵。根据模型的预测类别和样本的真实标签，可以将预测结果分为真正例（True Positive, TP）、假正例（False Positive, FP）、假负例（False Negative, FN）和真负例（True Negative, TN）四种情况。

表 2-1 混淆矩阵

Table 2-1 Confusion Matrix

预测类别 \ 真实标签	正类	负类
	正类	TP
负类	FN	TN

在 N 个类别的多分类问题中，对于每一个类别都可以构建一个混淆矩阵。整个样本上所有的分类结果通常展示为一个 $N \times N$ 的矩阵 M 。其中每个元素 $M_{i,j}$ 表示模型将类别 i 预测为类别 j 的样本数量或比例。

3. 准确率 (Accuracy, Acc)

准确率是模型正确分类的样本数占样本总数的比例。它是最直观的评价指标之一，其数学公式为：

$$\text{Acc} = \frac{\text{TP} + \text{TN}}{\text{TP} + \text{TN} + \text{FP} + \text{FN}} \quad (2-31)$$

4. 精确率 (Precision, P)

精确率是模型预测为正例的样本中，标签也为正例的样本所占的比例，其数学公式为：

$$P = \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FP}} \quad (2-32)$$

5. 召回率 (Recall, R)

召回率是标签为正例的样本中，模型成功预测为正例的样本所占的比例，其数学公式为：

$$R = \frac{\text{TP}}{\text{TP} + \text{FN}} \quad (2-33)$$

6. F1 分数 (F1-score, F1)

F1 分数是精确率和召回率的调和平均值，用于综合评价模型的预测性能，其数学公式为：

$$F1 = \frac{2 \times P \times R}{P + R} \quad (2-34)$$

7. ROC 曲线 (Receiver Operating Characteristic Curve) 和 AUC 值 (Area Under the Curve)

ROC 曲线是以假正例率 (False Positive Rate, FPR) 为横轴，真正例率 (True Positive Rate, TPR, 也称为召回率) 为纵轴绘制的曲线，展示了在不同阈值下模

型的分类性能。ROC 曲线下的面积即 AUC，通常介于 0 和 1 之间。AUC 值越大，表示模型性能越好，因为它意味着在不同阈值下模型正确分类的概率更高。

在多分类问题中，Acc、P、R、F1 分数和 AUC 值等评估指标的计算方式有两种。一种是微平均 (Micro-average)，这种方式将所有类别的预测结果进行汇总，然后计算各指标。在该方式下，所有类别的预测结果被汇总到同一个混淆矩阵中，因此对样本量更大的类别的性能更加关注。另一种是宏平均 (Macro-average)，该方式分别计算每个类别的指标，然后对所有类别的指标进行平均。这种方式不考虑类别不平衡，将每个类别的性能视为同等重要的。在实际应用中，根据数据集的特点和任务需要选择合适的评估方法。

第3章 星系光谱自动分类模型 GalSpecNet 及实验结果分析

本章介绍了光谱数据的准备过程，对基于卷积神经网络的星系光谱自动分类模型——GalSpecNet 进行了设计与实现，详细介绍了模型的网络结构设计和训练过程。开展了基于 LDA、SVM 和 RF 算法的对比分类实验，并对所有自动分类实验的结果进行了对比和分析。基于对比实验和对模型自身的不确定性等分析，证明了 GalSpecNet 模型的可靠性。最后，基于该模型给出了一个对 SDSS DR16 和 LAMOST DR8 的交叉星系的分类星表。

3.1 光谱数据准备

天文学是以观测为基础的学科，天文学家利用天文观测设备获取的各种数据信息深入了解宇宙的起源、结构和演化规律。随着近年来各种地基和天基望远镜等观测设备的相继运行和数据发布，星系光谱数据的产生速度和数据量不断增长，这些数据的积累是研究星系光谱自动分类问题的重要基础。

SDSS¹是迄今为止最具影响力的大规模天文巡天项目之一，从 2000 年开始运行。该项目的主要任务是使用位于新墨西哥州阿帕奇天文台（Apache Point Observatory）的 2.5 米望远镜收集天空中数百万个天体的光谱。根据所获取的海量光谱数据得到星系在宇宙中的三维分布，揭示宇宙的结构和星系的演化等问题。SDSS 项目获取的光谱覆盖范围 $\sim(3800, 9200)\text{\AA}$ ，光谱分辨率 $R \sim 2000$ 。截止 SDSS 的第十六次数据发布（Data Release, DR）数据发布，已获得星系光谱的总量为 3,234,563，其中不包含重复观测的、对每个星系的最佳观测的光谱总量为 2,963,274。

LAMOST 又称郭守敬望远镜²，是我国自主研发的中星仪式反射施密特望远镜 (Cui et al., 2012; Zhao et al., 2012)。该望远镜被设计用于大规模光谱巡天，应用了薄镜面和拼接镜面主动光学技术，其独特之处在于采用了并行可控的光纤定位技术，在 5 度视场、1.75 米直径的焦面上放置 4000 根光纤，可以同时获得 4000 个天体的光谱，是当前世界上光谱获取率最高的望远镜。LAMOST 的有效通光口径为 4 米，是世界上最大的光纤光谱天文望远镜之一。在曝光 1.5 小时内，LAMOST 可以观测到暗达 20.5 星等的天体，使其成为大口径兼大视场光学望远镜的世界之最。LAMOST 已被用于绘制银河系中恒星的分布、寻找新的类星体和研究遥远宇宙中星系的性质等天文学和天体物理学的各项研究中。LAMOST 于 2011 年 10 月 23 日正式启动先导巡天，并于 2012 年 6 月 24 日结束。自 2012 年 9 月起，LAMOST 正式进入科学巡天阶段。该巡天项目 DR8 的 1.0 版本包含 2011 年 10 月至 2020 年 5 月的观测数据，其中包含 219,776 个星系，其光谱覆盖

¹<http://www.sdss.org/>

²<http://www.lamost.org/>

范围 $\sim(3700, 9000)\text{\AA}$ ，光谱分辨率 $R \sim 1800$ 。

SDSS 和 LAMOST 光谱巡天的光谱分辨率、波长覆盖范围等特征都十分相似。并且，SDSS 的增值星表 (Value Added Catalogs, VAC) 提供了对星系光谱的 BPT 分类结果。因此本文主要利用 SDSS 巡天项目的光谱数据训练星系光谱分类模型 GalSpecNet，并利用该模型对 LAMOST 光谱数据进行星系分类，以测试模型的泛化性和迁移性。

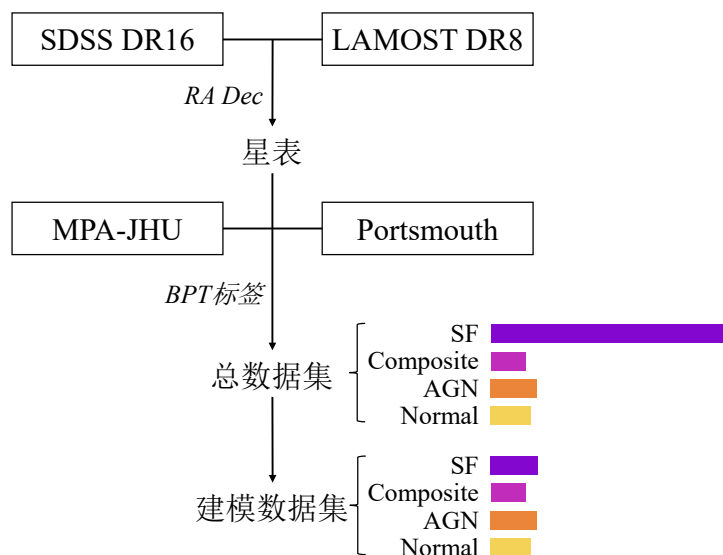


图 3-1 构建数据集的整体流程

Figure 3-1 The Overall Process of Constructing Datasets

构建数据集的整体流程如图 3-1 所示。本文研究的星系目标是 SDSS DR16 和 LAMOST DR8 的交叉天体，交叉半径是 1 角秒。交叉后得到了包含 119,436 个匹配星系的星表。该星表对应的 SDSS 光谱用于训练和测试 GalSpecNet 模型，对应的 LAMOST 光谱被用于测试模型的泛化性和迁移性。

SDSS 的两个增值星表 (Value Added Catalog, VAC) 中给出了星系的 BPT 分类标签, 即 “Galspec” 和 “emissionLinesPort”。这两个 VAC 分别来自马克斯普朗克天体物理研究所与约翰霍普金斯大学 (Max Planck Institute for Astrophysics and the Johns Hopkins University, MPA-JHU) 和朴茨茅斯团组 (Portsmouth Group, Maraston et al. 2013)。“Galspec” 星表对 SDSS DR8 (Aihara et al., 2011) 的光谱数据进行分析, 基于 Bruzual, Charlot (2003) 的星族合成模型和恒星连续谱的尘埃衰减进行最小二乘拟合 (Kewley, Ellison, 2008), 利用一种针对 SDSS 星系光谱优化的复杂代码计算得到星系光谱的发射线流量并给出星系的 BPT 分类结果。该星表使用的恒星连续谱和发射线的拟合程序可以在 Brinchmann et al. (2004)、Kauffmann et al. (2003a) 和 Tremonti et al. (2004) 中找到相应描述。“emissionLinesPort” 星表则对 SDSS DR12 (Alam et al., 2015) 的星系光谱进行处理, 提供了光谱的发射线流量和等效宽度的测量 (Thomas et al., 2013)。该星表利用 Maraston, Strömbäck (2011) 给出的基于 MILES 恒星库 (Sanchez-Blazquez et al., 2006) 的星族模型, 以及 Maraston et al. (2009) 给出的、基于 UVBLUE 理论库 (Rodriguez-Merino et al., 2005) 的波长

小于 3500 的理论光谱作为星系模板。星系的 BPT 分类使用 Kewley et al. (2001) 和 Kauffmann et al. (2003b) 的分类线作为标准。此外，SDSS 还提供了“SpecObj”星表，其中包含了光谱数据的红移、分类等必要信息。尽管该星表中提供了由光谱处理管道给出的星系的子分类，包括恒星形成星系、星暴星系和活动星系核等，但其分类标准与上述两个 VAC 不同，且给出的类别也与本文的任务目标不同。因此，本文依据“Galspec”和“emissionLinesPort”星表提供的 BPT 分类构成数据标签。

由于星系光谱处理的复杂性，不同星表在计算发射线流量时的技术细节，如连续谱的计算和星族模型的选择等均存在差异，这些差异直接影响到最终给出的 BPT 分类结果。例如，“Galspec”星表的分类要求 BPT 分类所需的发射线信噪比均符合 $S/N > 3$ ，若任一发射线未达到该标准，则该星系被视为不可分类；“emissionLinesPort”星表对于星系发射线的筛选标准则是发射线的振幅与噪声之比 Amplitude-over-Noise > 2 。统计结果显示，“Galspec”星表共计给出 48,669 个 SF 星系、7,652 个 composite 星系、14,559 个 AGN 星系和 38,285 个不可分类的星系；“emissionLinesPort”星表给出了 49,032 个 SF 星系、22,287 个 composite 星系、33,360 个 AGN 星系和 4,485 个不可分类的星系。有效的深度学习算法高度依赖于数据集的质量，因此，在构建数据标签时，从上述两个星表中筛选了相同 BPT 分类结果的星系。并且，为进一步提高数据标签的可靠性，只考虑“Galspec”星表中具有可靠光谱测量结果 ($reliable = 1$) 和“SpecObj”星表中具有准确测量的红移 ($zwarning = 0$) 的星系构建数据标签。此外，正常星系的筛选标准是 MPA-JHU、Portsmouth 和“SpecObj”都没有给出发射线星系分类结果。各类别星系的详细筛选标准在表 3-1 中详细列出。

表 3-1 各类别星系的筛选标准

Table 3-1 Specific Selection Criteria for Each Category of Data

	Galspec	emissionLinesPort	subclass	reliable	zwarning
SF	1, 2	‘Star Forming’	...	1	0
Composite	3	‘Composite’	...	1	0
AGN	4, 5	‘LINER’, ‘Seyfert’, ‘LINER/Seyfert’	...	1	0
Normal	NaN	NaN	NaN	...	0

对于输入的光谱数据，实验采取了两种预处理方式：一种是对原始观测光谱的预处理；另一种是对退红移的静止坐标光谱的预处理。原始观测光谱用于训练 GalSpecNet 模型，静止坐标光谱则用于训练 rest-frame GalSpecNet 模型，旨在探讨红移对模型分类结果的影响。为确保预处理操作的一致性，对 SDSS 和 LAMOST 的光谱波长进行统一的限制，原始光谱和静止坐标光谱的波长范围分别限制为 $(3850, 9000)\text{\AA}$ 和 $(3800, 7000)\text{\AA}$ 。这样的波长设置既可以保证大部分 SDSS 和 LAMOST 的光谱都被覆盖，又确保了数据集的统一。光谱波长不足以

覆盖这一范围的光谱被舍弃，经统计，被舍弃的 SDSS 光谱和 LAMOST 光谱分别仅占各自总数据集的 1% 和 5%。其余光谱满足要求的所有天体构成 SDSS 和 LAMOST 的交叉数据集进行实验。形成的两个总数据集中，原始光谱的总数据集包含 118,756 个光谱数据，退红移光谱的总数据集包含 118,954 个光谱。

由此构成的两个总数据集中，各类别星系的数据量并不均衡，这对模型训练和性能评估可能带来不利影响。为了解决类别不平衡的问题，对 SF 星系进行了下采样，从中随机选取了 9,000 个 SF 星系样本，与其他类别的所有样本共同构成了建模数据集。通过这种策略，成功平衡了建模数据集中各类别的样本数量，确保了模型在训练和验证过程中对各类星系的公平性。最终形成的数据集的总样本数和各类别的样本数汇总于表 3-2，这些数据集为后续深度学习模型的训练与评估提供了数据基础。

表 3-2 数据集中各类别星系的数据量

Table 3-2 The Number of Each Type of Spectra in the Datasets

		SF	Composite	AGN	Normal	Total
原始光谱	总数据集	41,557	6,196	8,882	7,701	118,756
	建模数据集	9,000	6,196	8,882	7,701	31,779
退红移光谱	总数据集	41,701	6,220	8,915	7,693	118,954
	建模数据集	9,000	6,220	8,915	7,693	31,828

SDSS 星系光谱包含位于对数波长空间的流量数据。为方便后续处理，从每个光谱文件中提取了星系的波长值及其对应的流量信息，并通过指数运算将波长数据从对数空间转换回常数空间。然后，每条光谱数据以 2\AA 为单位进行线性插值，实现光谱数据在指定间隔上的均匀分布。线性插值的公式为：

$$y'_i = \begin{cases} y_k, & \text{if } x'_i = x_k \\ y_j + \frac{x'_i - x_j}{x_l - x_j} \cdot (y_l - y_j), & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3-1)$$

其中， x 和 y 分别为原始观测的波长和流量， x' 和 y' 分别为插值得到的波长和流量。 k 和 l 标识了规整后的波长序列 x' 中与插值点 x'_i 最接近的两个相邻下标，满足 $x_k \leq x'_i < x_l$ 。经过插值操作，原始观测光谱被转换为 2575 个采样点的形式，而静止坐标光谱被转换为 1600 个采样点的形式。这种插值处理使光谱数据具备了统一的分辨率和采样点数，便于模型输入与比较。

每条光谱的流量信息可以表示为一个 m 维的向量，记作 $f = (f_1, f_2, \dots, f_m)^T$ ，其中 $f_i, i \leq m$ 标识在第 i 个波长位置的流量值。由于观测到的天体光谱辐射能量受到天体自身亮度、与地球的距离等多种因素的影响，不同光谱的流量可能存在显著的数量级差异，这种差异性可能会增加自动分类算法对光谱进行识别和区分的难度(李乡儒等, 2007a)。为了消除或减弱这种不利影响，有必要对光谱流量进行归一化处理，即通过一个与光谱流量相关的缩放因子 $\delta(f)$ ，将每条光谱

的流量统一同时进行缩放。归一化后的光谱流量可以表示为：

$$f' = \frac{f}{\delta(f)} \quad (3-2)$$

值得注意的是，由于 BPT 诊断图基于谱线强度的比值实现发射线星系光谱的分类，而对光谱流量的统一缩放不会改变光谱的线强比，因此，这种归一化操作不会影响最终的分类结果。常用的光谱流量归一化方法包括：

- (1) 最小值归一化，缩放因子为原始光谱流量的最小值。

$$\delta(f) = \min(f_1, f_2, \dots, f_m) \quad (3-3)$$

- (2) 最大值归一化，缩放因子为原始光谱流量的最大值。

$$\delta(f) = \max(f_1, f_2, \dots, f_m) \quad (3-4)$$

- (3) 均值归一化，缩放因子为原始光谱流量的最大值。

$$\delta(f) = \sum_{i=1}^m \frac{f_i}{m} \quad (3-5)$$

- (4) 中值归一化，缩放因子为原始光谱流量的中值。

$$\delta(f) = \text{median}(f_1, f_2, \dots, f_m) \quad (3-6)$$

$$= \begin{cases} f_{(m+1)/2} & \text{当 } m \text{ 为奇数} \\ \frac{f_{m/2} + f_{m/2+1}}{2} & \text{当 } m \text{ 为偶数} \end{cases} \quad (3-7)$$

- (5) 单位归一化，缩放因子为原始光谱的欧几里得范数。

$$\delta(f) = \sqrt{\sum_{i=1}^m f_i^2} \quad (3-8)$$

最小值和最大值归一化方法简单直观且易于理解，但它们对光谱中的异常值非常敏感，一旦存在极端的异常值，可能导致归一化后的光谱流量受到显著影响；均值归一化考虑了整个光谱流量的平均值，通过将每个流量值减去平均值，将数据集的均值调整为零，这种方法在一定程度上减小了异常值对归一化结果的影响，因此更加稳健；中值归一化也可以较好地应对光谱中存在的极端值，因为光谱流量的中值不会受到极端值的直接影响，但该方法需要对光谱流量进行排序，计算复杂度相对较高，可能会影响光谱处理的效率；单位归一化消除了光谱流量的绝对大小影响，能够更好地探索流量的模式和特征，但该方法可能会忽略流量的整体分布情况，不适用于需要考虑流量的绝对大小的情况。李乡儒等(2007a)对比了各种归一化方法在分类任务中的表现，实验结果指出最大值、均值、中值和单位归一化均可对分类任务提供帮助；最大值和均值归一化的效率远高于中值和单位归一化方法；单位归一化方法累加了各个波长处的噪声干扰，

受噪声干扰严重，而均值归一化方法中的噪声影响能够相互抵消，因此均值归一化在有效性和稳定性方面都明显好于均值归一化方法。基于以上讨论，本实验选用均值归一化方法对星系光谱进行预处理。这一选择既考虑了方法的有效性、稳定性，也兼顾了计算效率，适合于本研究的需求。通过均值归一化，可以有效地减小异常值对预处理结果的影响，同时保持较高的计算效率，为后续的星系光谱分类任务奠定良好的数据基础。LAMOST 的光谱数据进行了同样的线性插值和流量归一化预处理。

在训练星系光谱自动分类模型时，遵循了常见的数据集划分策略，即将建模数据集以 6 : 2 : 2 的比例随机划分为训练集、验证集和测试集。其中，训练集用于模型的学习和训练过程，模型通过迭代学习训练集中的样本，逐步调整内部参数以尽可能地拟合这些已知数据的特征和对应的类别标签。训练集规模较大，确保模型有足够多的样本来学习各类星系光谱的典型特征，提高模型的泛化能力。验证集用于监测模型在训练过程中是否出现过拟合，模型每在训练集上完成一轮学习后，就在验证集上进行性能评估，模型的训练目标是达到在训练效果和泛化能力之间的最佳平衡。测试集用于模型的整个训练过程结束后，对模型的最终性能进行独立、公正的评估，测试集数据在模型训练和验证阶段均未参与，因此它可以反映出模型在全新、未知数据上的真实表现，测试集上的预测结果作为衡量模型实际应用价值的重要指标。

图 3-2 绘制了各个子集数据的数据标签 (3-2a)、红移 (3-2b) 和信噪比 (3-2c) 的核密度估计图，以可视化建模数据集的划分。显然，在训练集、验证集和测试集中，这些数据特征的分布都是相似的。因此，用于训练的光谱和用于测试的光谱的数据整体分布没有显著差异。

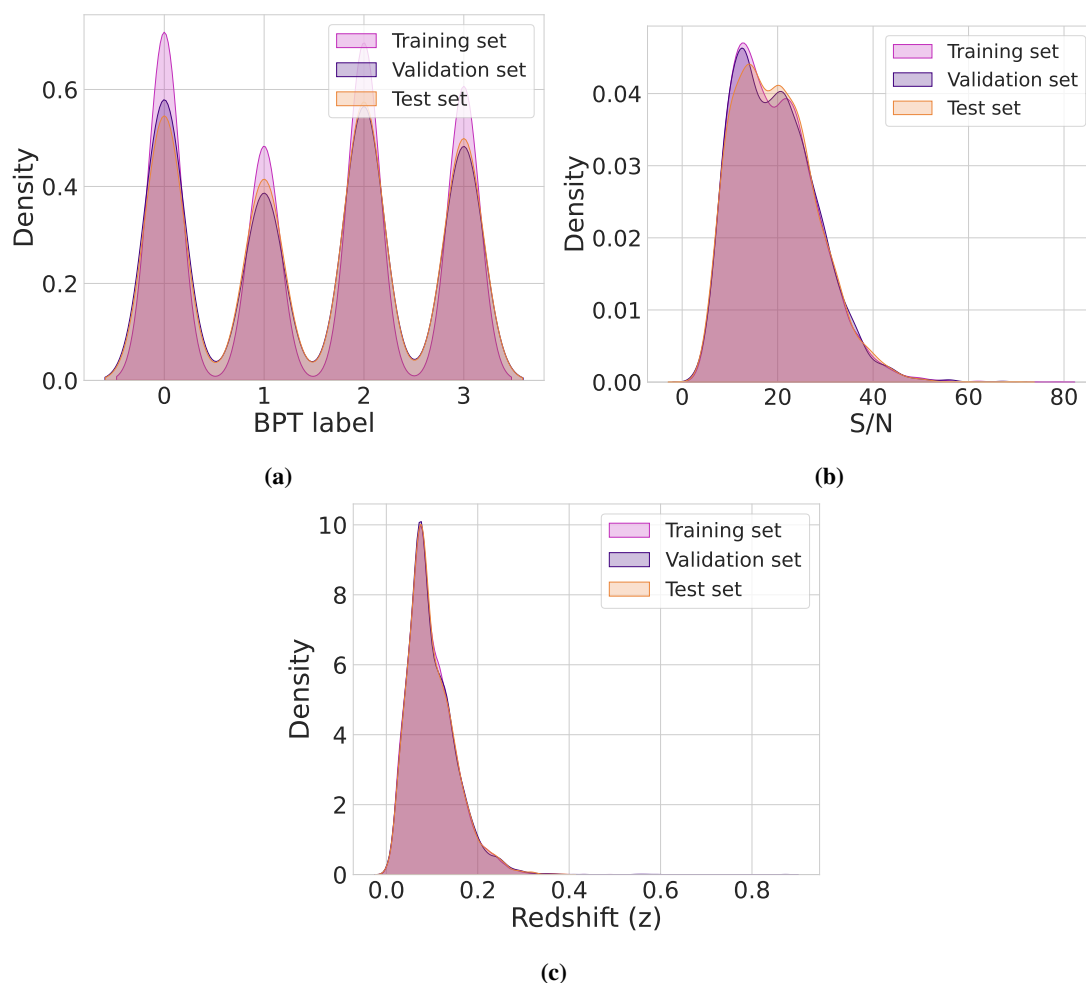


图 3-2 数据标签、红移和信噪比的核密度估计

Figure 3-2 Kernel Density Estimates of the Data Labels, Redshifts, and Signal-to-Noise ratios

3.2 基于 CNN 的自动分类模型：GalSpecNet

3.2.1 模型的网络设计

本文提出了一个基于卷积神经网络的 GalSpecNet 模型，旨在实现星系光谱自动分类。该模型接受经过预处理的星系光谱数据，这些数据以一维向量的形式表示，并经过一系列的处理层进行特征提取和分类。该模型的网络结构如图 3-3 所示，包含了 10 个关键的网络层，其中包括 4 个卷积层（Convolutional Layers，图中表示为 Conv）、3 个最大池化层（MaxPooling Layers，图中表示为 MP）和 3 个全连接层（Fully Connected Layers，图中表示为 FC）。

GalSpecNet 模型的网络结构中包含四个卷积层，前两个卷积层采用 64 个 1×3 大小的卷积核，后两个卷积层则采用 32 个 1×3 大小的卷积核。每个卷积层后紧跟着 ReLU 激活函数，用于引入非线性，使模型能够更好地拟合复杂的数据分布。在前三个卷积层之后，各接一个 1×4 大小的最大池化层，每个池化层过滤器的数量分别与相应的卷积核数量相等。最后三层是全连接层，分别包含 64、

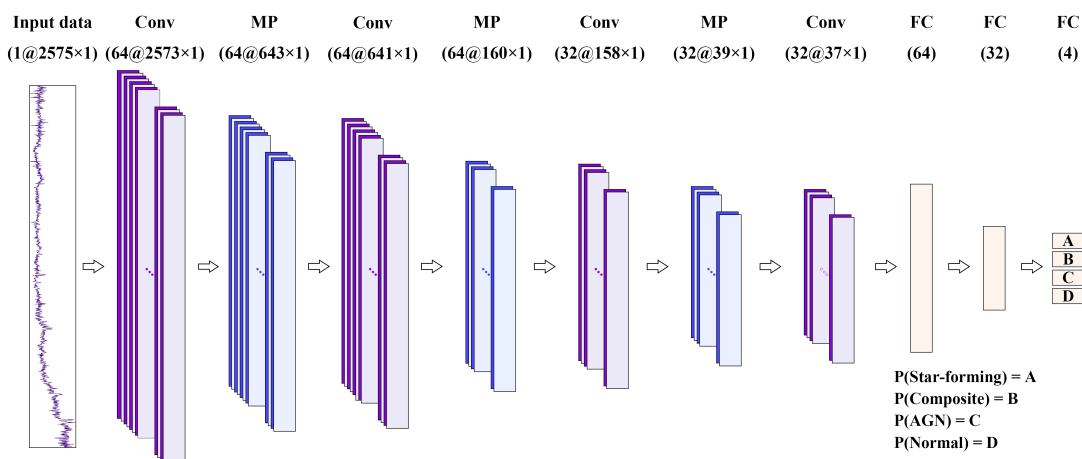


图 3-3 GalSpecNet 模型的网络结构图

Figure 3-3 Network structure of the GalSpecNet Model

32、4 个神经元，前两个全连接层同样采用了 ReLU 激活函数，最后一个全连接层则采用 Softmax 激活函数，用于输出模型将输入数据预测为各个类别的概率。

为了避免模型过度依赖某些局部特征，增强模型的泛化能力，在全连接层前引入了一个概率为 $p = 0.2$ 的 Dropout 层，用于实现正则化。在前向传播的过程中，每个神经元以 $p = 0.2$ 的概率被随机丢弃，这有助于防止过拟合现象的发生，能够提高模型的鲁棒性和泛化性能。

需要强调的是，普适的、用于确定最佳网络结构的标准配方并不存在。优化网络结构的本质是一个迭代探索的过程，设计对众多超参数的细致调整与反复实验。本文测试了多种不同的神经网络设计，并筛选出了在星系光谱分类任务上性能最好的网络结构。特别地，实验观察到当网络参数量大约在 10^5 量级时，所训练出的模型能够在保持较高分类准确度的同时，表现出理想的训练速度。

3.2.2 模型训练

要构建一个高性能的星系光谱分类模型，除了高质量数据集的准备和有效的网络设计外，训练模型时的其他设置，如损失函数、优化器、学习率等也很重要。

本文的星系光谱自动分类任务是一项典型的多分类任务，因此选取多分类交叉熵损失函数用于模型训练过程中的损失计算。该损失函数适用于多分类任务，通过比较模型预测的概率分布与真实标签的概率分布之间的差异，并力求最小化这种差异来训练模型，推动模型在反向传播过程中调整其参数，以逐渐逼近真实的类别概率分布。在反向传播过程中，选取 Adam 优化器作为更新模型参数的算法。在模型的训练过程中，学习率 (learning rate) 的初始值设置为 0.01，并采取一种学习率衰减策略：当验证集的损失值连续三个 epoch 未见明显降低，即表明模型在这段时间内的学习效果趋于停滞，此时将学习率减小 0.5 倍。这种策略有助于在模型接近最优解时降低更新步长，避免因学习率过高导致的振荡

或错过最优解。为了避免过拟合问题并加速训练过程，采用早停 (early stopping) 机制作为模型收敛的判断条件。具体实施为，当验证集的损失值连续 7 个 epoch 未见改善，则认为模型已经过拟合，模型就停止训练，并保留倒数第 7 个 epoch 的模型作为最优模型。此外，实验中设定批大小 (batch size) 为 64，表示每次有 64 个光谱数据同时输入到模型。

GalSpecNet 模型的训练过程遵循了“训练-验证-测试”的模式，模型的训练阶段充分利用了训练集和验证集，通过反复执行前向传播和误差反向传播，根据训练集样本的输入光谱和对应标签不断更新网络参数；验证集实时监控模型的泛化性能，在训练过程中防止过拟合，以免模型过度关注在训练集上的准确率而损失了泛化能力，并根据早停机制实现模型的收敛判断。GalSpecNet 模型在训练过程中的准确率和损失曲线如图 3-4 所示，紫色曲线和橙色曲线分别代表训练集和验证集，随着训练周期的推进，训练集的准确率持续增加，损失值持续减小，表明模型在不断学习训练集样本的过程中，分类能力逐渐增强，对训练数据的拟合程度不断提高；验证集的准确率先增加然后趋于平缓，损失值先减小然后趋于平缓，表明在训练的初期，验证集准确率和损失值与训练集同步改善，说明模型在学习训练集的同时，也对未见过的新样本保持了良好的泛化能力，然而，随着训练的深入，模型开始出现过拟合。模型共进行了 33 个 epoch 的训练，自第 26 个 epoch 起，模型开始过拟合于训练样本。因此，最终采用经过 26 次迭代的模型作为最终的 GalSpecNet 模型，并进行后续实验。模型的训练结果将会展示在 3.4 节。

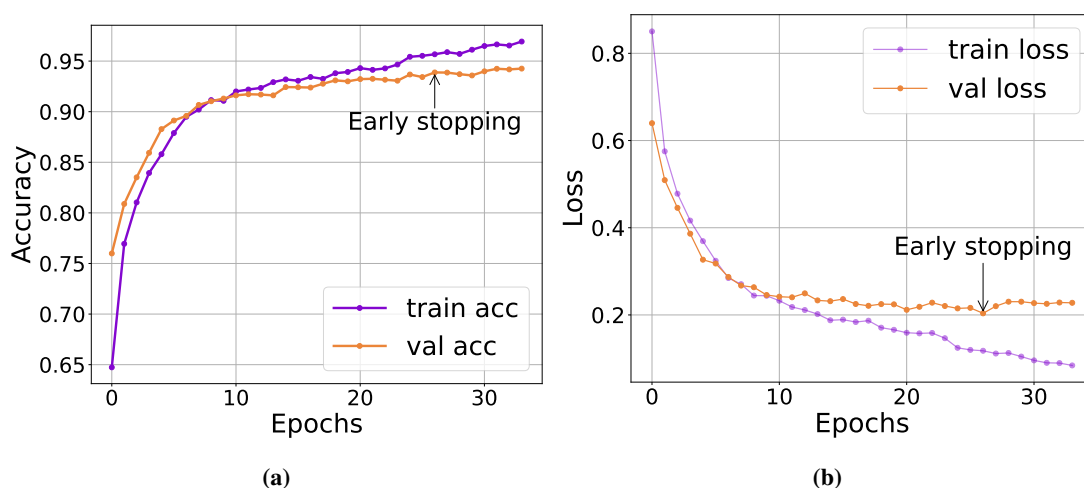


图 3-4 GalSpecNet 模型训练时的准确率和损失值曲线

Figure 3-4 Curves of Accuracy and Loss Values During the GalSpecNet Model's Training

本文所有工作都在相同的软硬件环境下开展，GalSpecNet 模型使用 Tensorflow 后端的 Keras 框架 (Abadi et al., 2015) 实现。硬件环境是阿里云弹性计算服务支持的 Cent OS 7、64 位操作系统、Intel(R) Xeon(R) 258 Platinum 8163 CPU、2.50GHz/4 核处理器、NVIDIA Tesla V100 SXM2、16.0GB 内存。关键的软件环境是 Python 3.9.7、Anaconda 4.12.0、cuda 10.1、cudnn 7.6.5 和 tensorflow-gpu 2.4.1。

3.3 基于经典机器学习算法的对比实验

3.3.1 Fisher 线性判别分析实验设计

在 Fisher 线性判别分析方法的实现中，最关键的两个参数是求解器和正则化参数。

求解器是 LDA 中的一个超参数，决定了计算判别超平面特征矩阵使用的方法，常用的求解器包括奇异值分解 (Singular Value Decomposition, SVD)、最小二乘法 (Least Squares, LS) 和特征分解 (Eigen Decomposition, ED)，其中 SVD 求解器更适用于输入数据特征较多的情况。

正则化参数决定了模型正则化的应用，通过正则化可以增强分类器的泛化能力，该参数只在求解器为 LS 和 ED 时有效。经多次交叉调参实验比较，在本文的分类实验中，由于星系光谱的输入特征较多，因此使用 SVD 分解器和不进行正则化时分类器的判别准确率最高，实验结果将展示在第3.4节。

3.3.2 支持向量机实验设计

在分类问题中，SVM 通过添加软边界和松弛变量来使问题变得更加灵活，从而允许在训练样本中允许一些误差，不仅要找到最优分类超平面，还需要最小化错误率或对错误样本进行惩罚。该分类实验中重点考虑的参数如下：

(1) 惩罚系数 (C): 惩罚系数值越大，SVM 将尝试最小化错误分类的程度越大，从而导致更复杂的决策边界。较小的 C 值可能会导致更简单的决策边界，但可能会存在欠拟合的问题。

(2) 核函数 (*kernel*): SVM 实验中有多种核函数可以选择，包括线性核、多项式核、高斯核等。核函数的选择需要基于数据集的特点进行。如果数据集具有线性可分性，则使用线性核函数较为合适。如果数据集具有比线性更复杂的关系，则可以考虑高斯核函数。

(3) 高斯核函数的系数 (γ): γ 值调整了 SVM 决策边界的复杂度，影响数据在高维空间的分布形态。 γ 值越小，高斯核函数的曲线就越宽，决策边界就越平滑；反之， γ 的值越大，高斯核函数的曲线就越窄，决策边界就越复杂。与惩罚系数一样， γ 也是一个正则化超参数，因此需要仔细选择以达到最佳的分类效果。过小的 γ 值可能会导致决策边界过于平滑，出现欠拟合的情况；而过大的 γ 值可能会导致决策边界过于复杂，出现过拟合的情况。

(4) 决策函数 (*decision_function_shape*): 决策函数用于指定处理多类别分类使用的策略。OVR 表示使用“一对多” (One-vs-Rest) 策略，该策略通过在每个类别中将其余类别的实例视为同一个类别来解决多类别分类问题；OVO 表示使用“一对一” (One-vs-One) 策略，该策略通过在每两个类别之间构建一个分类器来解决多类别问题。

(5) 每个类别的权重 (*class_weight*): 该参数是一个字典，其中每个键 (key) 都是一个类别的索引，对应的值 (value) 是该类别的权重。默认情况下，所有类别的权重都是 1。将某个类别的权重设置为较高的值将使该类别的误差更加严

格，从而增加这个类别的分类效果。通过赋予样本数较小的类别更高的权重，可以解决样本不平衡问题。

在机器学习中，这些参数的调整 and 选择往往会对模型的性能产生重要的影响。为了保证分类器实现最好的分类效果，实验在可能的参数空间内进行了网格搜索 (Grid Search)。网格搜索是一种常用的超参数调优方法，它的思想是遍历所有可能的参数组合，并通过交叉验证来评估每个参数组合的性能，最后在参数网格中找到能够产生最优性能的参数组合作为最终的超参数组合，保证充分实现模型性能。SVM 网格搜索的参数空间如下：

- C : 0.1、0.3、0.5、0.7、0.9、1；
- $kernel$: linear、poly、rbf、Sigmoid；
- γ : 0.001、0.01、0.1、1、scale、auto；
- $decision_function_shape$: OVR、OVO；
- $class_weight$: balanced、None。

其中， $kernel$ 的值分别表示使用的核函数为线性核、多项式核函数、高斯核函数、Sigmoid 函数。当 γ 值为 scale 时，其值为 $\frac{1}{(n_{features} * X.var())}$ ，其中 $n_{features}$ 为输入数据包含的特征数， $X.var()$ 为输入数据的方差，当 γ 值为 auto 时，其值为 $\frac{1}{n_{features}}$ 。当 $class_weight$ 的值为 balanced 时，根据输入数据中各类别的数目赋予相应的权重，即给数目较多的类别较小的权重，而数目较少的类别更大的权重，保证模型在分类时不会变向某类别的数据，这种平衡在数据量极度不平衡时更加有效，当 $class_weight$ 的值为 None 时则不进行这种平衡。

网格搜索的结果表明，能够产生最佳分类结果的参数设置组合为：惩罚系数 $C = 1$ 、使用高斯核函数、其系数 $\gamma = 0.01$ 、使用 OVR 决策函数和不进行类别均衡，实验结果将展示在第3.4节。

3.3.3 随机森林实验设计

RF 算法的性能受到样本数量和质量、特征数量和质量、决策树参数等多个因素的影响，在实验的准备阶段已经进行了数据样本和输入特征的准备，因此在 RF 的分类实验中主要考虑决策树参数的优化。RF 分类器主要考虑的参数包括：

(1) 树的数量 ($n_estimators$): RF 包含多个决策树在内，每棵树都是通过数据集上进行随机采样并基于不同的随机特征进行训练而得到的。一般来说，树的数量增加，模型的准确率也会提高，但同时也会增加模型的训练时间和内存占用。

(2) Bootstrap ($bootstrap$): Bootstrap 是一种常用的自助采样方法，它通过从原始数据集中有放回地抽样来形成不同的训练数。该参数控制是否采用 Bootstrap 采样方法对每棵决策树生成训练数据集。

(3) 随机特征的数量 ($max_features$): RF 中的各决策树在训练时都基于一个随机的特征子集来进行划分，该参数用于控制每个随机特征子集中特征的数量。

(4) 叶子节点的最小样本数 (*min_samples_leaf*): 当叶子节点中的样本数小于每个叶子节点所需要的最小样本数时, 该节点将不再划分。设置更高的叶子节点的最小样本数可以降低模型的复杂度, 防止过拟合。

(5) 最小样本划分数 (*min_samples_split*): 该参数控制每个内部节点最少包含的样本数。当某个节点的样本数小于该值时, 就停止继续划分。该参数的主要作用是防止模型过拟合。如果参数设置得太小, 模型可能会过拟合, 导致泛化性能较差; 如果设置得太大, 则可能会导致欠拟合, 使模型的复杂度不足以拟合数据。

(6) 树的最大深度 (*max_depth*): 树的最大深度, 即树的最大层数。增加树的深度可以提高模型的拟合能力, 但也可能导致过拟合, 因此需要选择一个适中合理的值。

(7) 准则 (*criterion*): 准则用于衡量节点纯度, 常用的准则有 Gini 和熵 (*entropy*) 准则两种。Gini 准则基于 Gini 不纯度来评估节点的纯度, 而熵准则则基于信息熵来评估节点的纯度。一般来说, Gini 准则更适用于处理连续的特征变量, 而熵准则则更适用于处理离散的特征变量。

为了找到最优化的参数组合, 实验在超参数空间内进行了网格搜索, 网格搜索的参数设置如下:

- *n_estimators*: 100、200、300、400、500、700、900;
- *bootstrap*: True、False;
- *max_features*: sqrt、log2、None;
- *min_samples_leaf*: 1、2、4;
- *min_samples_split*: 2、5、10;
- *max_depth*: 10、20、30、40、50、70、90;
- *criterion*: Gini、entropy。

其中, *max_features* 的值分别表示每棵决策树考虑的特征数为总特征数量的平方根个特征、总特征数量的以 2 为底的对数个特征或所有特征。

网格搜索的结果表明, 能够产生最佳分类结果的参数组合为: 树的数量为 400 棵, 不使用 Bootstrap 采样方法, 叶子节点至少有 2 个样本, 节点划分时至少需要有 2 个样本, 树的最大深度为 20 层, 使用熵准则衡量节点纯度。实验结果将展示在第 3.4 节。

3.4 自动分类实验结果对比

3.4.1 整体分类表现

K 折交叉验证是一种常用的模型评估技术, 有助于更好地评估模型的性能, 并避免模型过拟合或欠拟合的问题。该方法将数据集分成 K 个互不相交的子集, 然后进行 K 次实验。在每次实验中, 将其中一个子集作为测试集, 其余 $K - 1$ 个子集作为训练集。最后将 K 次实验的结果取平均值得到最终的评估结果。具体来说, K 折交叉验证的步骤如下: (1) 将数据集分成 K 个互不重复的子集; (2)

选取其中一个子集作为测试集，其余 $K - 1$ 个子集作为训练集；(3) 在训练集上训练模型，并在测试集上进行预测；(4) 记录模型在测试集上的性能指标；(5) 第 2-4 步重复 K 次，每次选取不同的测试集；(6) 计算 K 次实验的平均性能指标，作为最终的评估结果。 K 折交叉验证的主要优点是可以充分利用数据集的全部信息，避免训练集和测试集不够充分的情况。同时， K 折交叉验证也可以减少随机性对评估结果的影响，提高评估结果的可靠性。

为了更加可靠、全面地评估和比较各分类方法的性能，对 GalSpecNet、rest-frame GalSpecNet、LDA、SVM 和 RF 分类器分别进行 K 折交叉验证实验。此外，Chen (2021) 设计和训练了一个用于区分 SDSS DR10 的 Seyfert1.9 和 Seyfert2 光谱的 CNN 模型（以下称为 Chen21's），该模型对 Seyfert1.9 光谱的分类得到了 91% 的精确率。Sharma et al. (2020b) 提出了一个用于恒星光谱分类的 CNN 模型（以下称为 Sharma20's），该模型在 SDSS 巡天数据上证明了深度学习算法对海量光谱数据的分类能力。这两个工作的目标、数据和方法都与本课题有相似之处，因此这两个模型也被用于与本文设计的模型进行比较。

各模型在相同数据样本上进行训练和评估，选取准确率 Acc、交叉熵损失 Loss 和 AUC 值作为分类性能的评估指标。Acc 是指分类器正确分类样本数占样本总数的比例。准确率越高，分类器的性能越好。Loss 用来衡量分类器在每个测试样本上的概率预测与真实标签的差距。损失值越小，分类器的性能越好。AUC 是用来评估模型分类能力的指标。AUC 值越大，分类模型性能越好。经过交叉验证实验得到的 Acc 的均值 *mean* 作为模型最终的准确率评估结果，其标准差 *std* 作为模型的稳定性评价，以 $mean \pm std$ 表示。表 3-3 展示了 K 折交叉验证 ($K=5$) 实验的结果。

表 3-3 GalSpecNet、rest-frame GalSpecNet、LDA、SVM、RF、Chen21's 和 Sharma20's 模型的 5 折交叉验证结果

Table 3-3 The 5-fold Cross-Validation Results of the GalSpecNet, rest-frame GalSpecNet, LDA, SVM, RF, Chen21's and Sharma20's Models

分类算法	Acc	Loss	AUC
GalSpecNet	0.9356±0.0044	0.1938±0.0084	0.9906±0.0007
rest-frame GalSpecNet	0.9454±0.0021	0.1600±0.0073	0.9946±0.0006
LDA	0.6976±0.0050	0.9643±0.0356	0.8833±0.0020
SVM	0.8107±0.0031	0.4805±0.0043	0.9431±0.0011
RF	0.7211±0.0009	0.7996±0.0122	0.9045±0.0024
Chen21's	0.5163±0.0315	1.4626±0.1556	0.7655±0.0217
Sharma20's	0.8158±0.0080	0.4736±0.0225	0.9518±0.0028

如表 3-3 所示，在三个评价的维度上，GalSpecNet 和 rest-frame GalSpecNet 模型的平均分类结果都好于其他五种分类模型。在三种经典的机器学习算法中，SVM 的表现最好，这可能是由于星系光谱数据的高维性和复杂性决定的。SVM

分类算法	Acc	Loss	AUC
GalSpecNet	0.9356±0.0044	0.1938±0.0084	0.9906±0.0007
rest-frame GalSpecNet	0.9454±0.0021	0.1600±0.0073	0.9946±0.0006
LDA	0.6976±0.0050	0.9643±0.0356	0.8833±0.0020
SVM	0.8107±0.0031	0.4805±0.0043	0.9431±0.0011
RF	0.7211±0.0009	0.7996±0.0122	0.9045±0.0024
Chen21's	0.5163±0.0315	1.4626±0.1556	0.7655±0.0217
Sharma20's	0.8158±0.0080	0.4736±0.0225	0.9518±0.0028

的工作原理是找到最能分离特征空间中不同类别的超平面，因此适合处理高维光谱数据和发现复杂决策边界。LDA 通过找到最能分离不同类别的特征的线性组合来实现分类，当光谱特征和类之间的关系很复杂时，它可能不会表现得很好。RF 是一种集成学习方法，因其对过拟合的鲁棒性和处理噪声数据的能力而闻名，然而当涉及捕获数据中的复杂关系时，它可能不如 SVM 有效。CNN 的结构设计对于从输入数据中找出相关的特征尤为重要，相比于 Chen21's 和 Sharma20's 模型而言，GalSpecNet 和 restframe GalSpecNet 可能从输入的星系光谱中学习到了更能提供有用信息的和更有识别力的表示。并且，Sharma20's 模型比 Chen21's 模型在训练时的数据规模更大、分类类别更多，因此从光谱中识别有效特征的能力也更强。此外，rest-frame GalSpecNet 模型的平均表现和稳定性都稍好于 GalSpecNet 模型。然而，rest-frame GalSpecNet 模型构建在精确的红移值的基础上，这可能需要光谱本身以外的其他信息。仅使用星系光谱训练的 GalSpecNet 模型操作更加简便、适用范围更广，以损失微小的分类准确率为代价换取更广泛的适用范围和人力节省是值得的，因此在后续实验中（第3.5节）使用 GalSpecNet 模型给出分类星表。

3.4.2 各类别分类表现

图 3-5展示了 GalSpecNet 模型在测试集上的混淆矩阵，比较测试集的真实类别与 GalSpecNet 模型的预测类别，该测试集对真实标签实现了归一化。每个方格的小数和颜色表示该预测结果数量占该真实标签数量的比例，方格颜色越深表示该占比越大，括号内是对应的样本数量。该混淆矩阵表明，模型在测试集上分类的整体准确率是 94.14%，且模型对每个子类的预测准确率都大于等于 90%。

本节实验中使用的各个模型和分类器都是经过多次重复训练得到的相对最优结果。设每周期包含 20 次相互独立的训练，如果在一个周期内训练得到了更好的模型，则旧的模型被丢弃，并启动一个新的周期。

利用 GalSpecNet 和 rest-frame GalSpecNet 模型、LDA、SVM 和 RF 分类器对一组公共测试样本进行预测，表 3-4展示了各模型和分类器对每种类别星系预测结果的 Acc、P、R 和 F1。如表 3-4所示，GalSpecNet 模型和 rest-frame GalSpecNet 模型对各类别星系的识别都性能最佳。其中，rest-frame GalSpecNet 模型对四种

表 3-4 GalSpecNet、rest-frame GalSpecNet、LDA、SVM、RF、Chen21's 和 Sharma20's 模型对各类别星系的分类结果评估
 Table 3-4 The Evaluation of the Classification Results of GalSpecNet、rest-frame GalSpecNet、LDA、SVM、RF、Chen21's and Sharma20's Classification Models for Various Types of Galaxies

	GalSpecNet	rest-frame GalSpecNet	LDA	SVM	RF	Chen21's	Sharma20's
SF	0.9669	0.9820	0.7706	0.8987	0.8608	0.7871	0.9157
Composite	0.9531	0.9704	0.7980	0.8184	0.8061	0.7389	0.8639
Acc	0.9663	0.9658	0.8438	0.9057	0.8192	0.6693	0.8975
Normal	0.9965	0.9781	0.9644	0.9791	0.9454	0.8529	0.9808
Overall	0.9707	0.9741	0.8442	0.9005	0.8579	0.7620	0.9145
SF	0.9680	0.9720	0.5421	0.8060	0.7234	0.5963	0.8428
Composite	0.8735	0.9255	0.5181	0.5515	0.5314	0.3342	0.6776
P	0.9248	0.9297	0.7483	0.8141	0.6640	0.4310	0.8095
Normal	0.9923	0.9634	0.9470	0.9518	0.8997	0.7518	0.9527
Overall	0.9369	0.9477	0.6889	0.7808	0.7046	0.5284	0.8207
SF	0.9065	0.9606	0.9194	0.8188	0.7771	0.6335	0.8424
Composite	0.9005	0.9298	0.1435	0.5910	0.4244	0.2816	0.6358
R	0.9588	0.9510	0.6741	0.8635	0.7298	0.5309	0.8334
Normal	0.9936	0.9468	0.9057	0.9634	0.8749	0.5985	0.9699
Overall	0.9398	0.9470	0.6607	0.8092	0.7015	0.5111	0.8204
SF	0.9362	0.9663	0.6821	0.8124	0.7493	0.6144	0.8426
Composite	0.8868	0.9276	0.2248	0.5706	0.4719	0.3057	0.6561
F1	0.9415	0.9402	0.7093	0.8381	0.6953	0.4758	0.8213
Normal	0.9929	0.9550	0.9259	0.9576	0.8872	0.6664	0.9612
Overall	0.9394	0.9473	0.6355	0.7946	0.7009	0.5156	0.8203

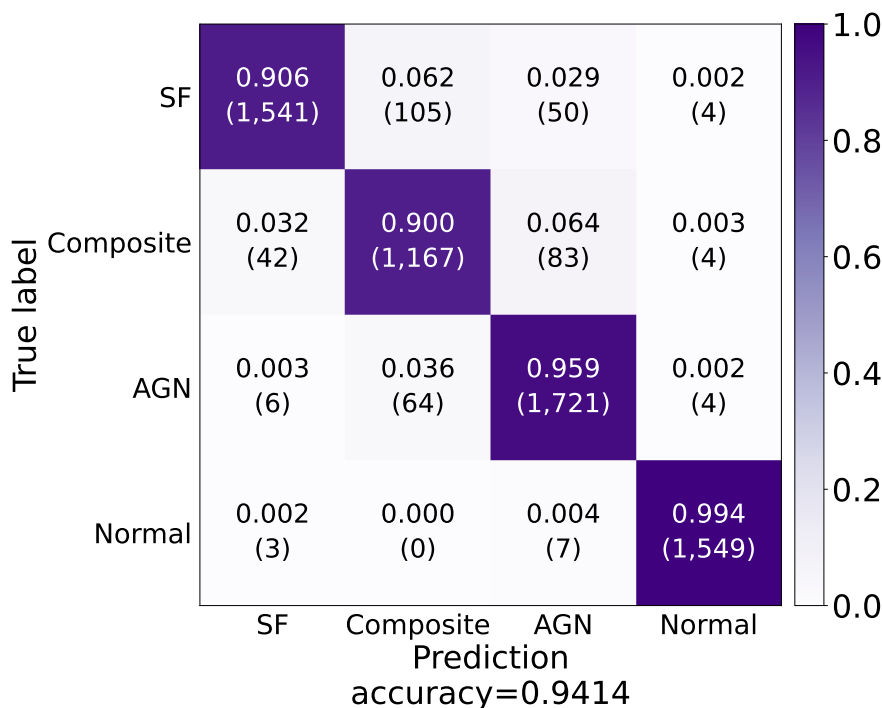


图 3-5 GalSpecNet 模型测试的混淆矩阵

Figure 3-5 Predictive Confusion Matrix of the GalSpecNet Model

类别的星系都能较好地识别，整体分类的准确率为 97.41%，尤其是对 SF 星系的分类准确率达到 98.20%。从 Acc、P、R 和 F1 四个评价角度来看，restframe GalSpecNet 模型对 SF 和 composite 星系的识别效果都是最好的。GalSpecNet 模型的性能略逊于 rest-frame GalSpecNet 模型，但整体分类的准确率和 F1 得分也达到了 97.07% 和 93.94%，尤其是对 Normal 星系分类的各项指标都大于 99%。

除了 Chen21’s 模型，其余模型对于 Normal 星系的分类准确率都高于 90%，SVM 分类器的 F1 达到 95.76%，说明 SVM 在特征空间中比较准确地找到了区分 Normal 星系和发射线星系的分类超平面。SVM 模型对于各类别星系的识别都优于 LDA 和 RF 模型，进一步证明了该模型处理高维光谱数据问题和发现复杂决策边界的有效性。LDA 在识别 Normal 星系时的表现优于 RF，对其余发射线星系设备的表现都较逊色，表明在该星系光谱分类问题中，将 Normal 星系与其他三种发射线星系区分开是一个相对简单、复杂度不高的部分。

对于发射线星系的识别和分类，LDA、SVM 和 RF 模型的性能则比两个基于 CNN 的 GalSpecNet 和 rest-frame GalSpecNet 模型差很多，各模型在预测 SF、composite 和 AGN 星系时分类结果的各项指标几乎都低于 90%。其中对 composite 星系的识别最为混淆，SVM 在识别 composite 星系时的精确率最高，但也只有 61.4%。特别是 LDA 模型在识别 composite 星系时，召回率仅有 14.35%，几乎不能识别出这种类别的星系。Chen21’s 和 Sharma20’s 模型在区分发射线星系时，改进空间最大的部分也是对 composite 星系的分类。

因此，LDA、SVM 和 RF 三种经典的机器学习模型在区分 Normal 星系和发

射线星系时表现较好，但不足以识别不同类型的发射线星系所具有的复杂特征。Chen21's 模型可能由于训练数据和模型规模等因素，对各类别星系的分类表现都较差。Sharma20's 模型的表现优于几种机器学习算法，但整体表现仍落后于本文设计和训练的 GalSpecNet 和 restframe GalSpecNet 模型。

3.4.3 红移和信噪比的影响

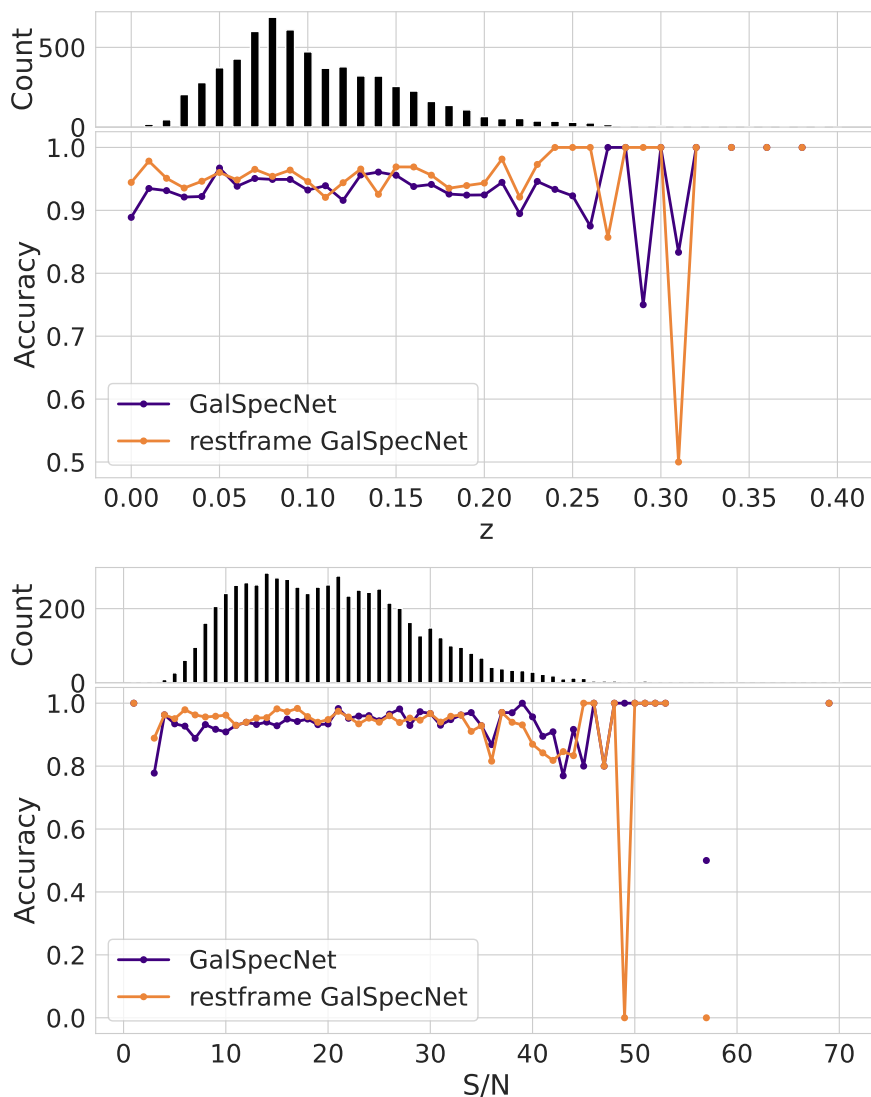


图 3-6 GalSpecNet 和 rest-frame GalSpecNet 模型对不同红移和信噪比的样本预测的准确率曲线

Figure 3-6 Accuracy Curves of the GalSpecNet and rest-frame GalSpecNet Models for Prediction of Samples with Different Redshifts and Signal/Noise Ratios

为了分析红移和信噪比这两个因素对 GalSpecNet 和 rest-frame GalSpecNet 模型性能的影响，使用这两个模型分别对同一组测试样本进行预测，这些测试样本与表3-4中使用的测试样本一致。

图3-6展示了 GalSpecNet 和 rest-frame GalSpecNet 模型在不同红移和信噪比

条件下的分类准确率变化情况。由该图可知，模型的预测精度与红移和信噪比之间不存在绝对的相关关系。在红移方面，当红移值 (0, 0.25) 在范围时，GalSpecNet 和 rest-frame GalSpecNet 模型都未显示出明显的红移依赖性，即模型对红移在该范围内的星系光谱具有相当稳定的分类能力。尤其是 GalSpecNet 模型可以根据直接观测到的星系光谱进行分类，而无需严格依赖于精确的红移测量，因此该模型可以推广应用到红移未知的光谱，适用范围更广。在信噪比方面，两个模型对信噪比范围 (5, 30) 内的光谱都表现出准确且稳定的分类。然而，当信噪比范围在 (30, 40) 时，模型的预测准确率表现出明显的波动，但总体的准确率仍保持在 90% 以上。值得一提的是，即使面对信噪比较低的光谱，模型依然能够实现较为准确的分类。在测试集中，仅有 1.3% 的红移值超过 0.25，信噪比大于 40 或小于 5 的样本也只占 1.7%，因此，对这部分样本的分类性能还需在后续工作中进一步评估。

3.4.4 模型泛化性评估

模型泛化性评估是指模型在训练数据集之外的新数据上的表现能力。这种能力对于将模型从一个数据集迁移到另一个数据集尤为重要。表3-3的交叉验证结果表明，模型在不同的 SDSS 数据样本上表现一致，说明模型在相同来源的数据样本上具有较强的分类能力和泛化能力。因此，本节的泛化性评估旨在关注模型对其他望远镜观测的光谱数据的分类能力，因此，考虑将在 SDSS 光谱数据上训练的模型应用于 LAMOST 的星系光谱分类。

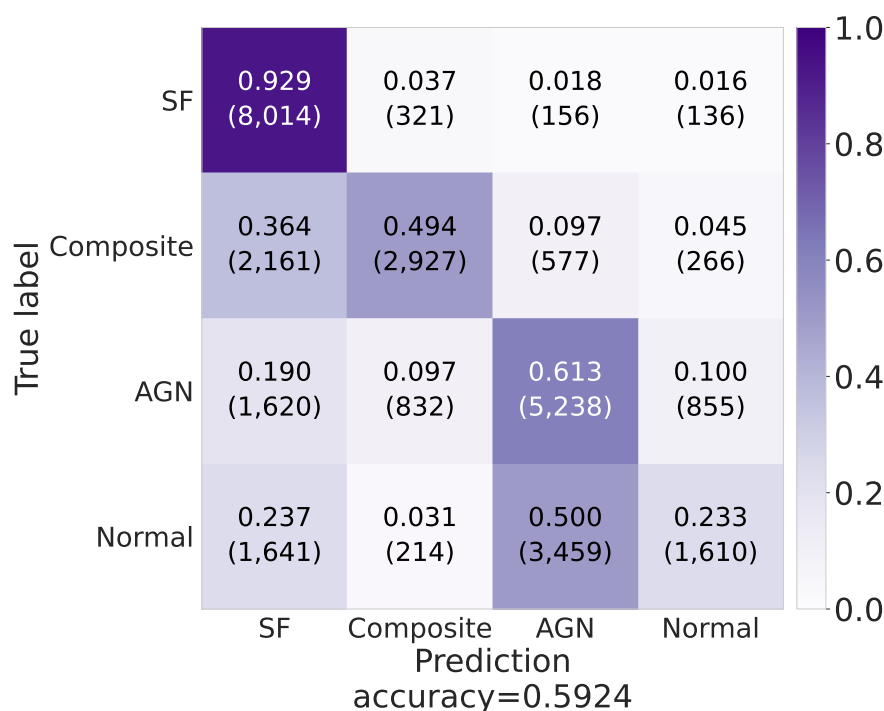


图 3-7 GalSpecNet 模型对 LAMOST 光谱样本预测的混淆矩阵

Figure 3-7 Confusion matrix for Prediction of LAMOST Spectral Samples by the GalSpecNet Model

评估 GalSpecNet 模型在 LAMOST 光谱数据上的泛化性能的方式有两种,一种是直接将模型应用于其他数据,另一种是对模型进行迁移学习。作为初步测试,本文采用第一种方式。具体地,将使用 SDSS 光谱训练得到的 GalSpecNet 模型直接应用于 LAMOST 星系光谱样本的类别预测。选取的 LAMOST 光谱测试样本是 GalSpecNet 模型的建模数据集在 LAMOST 上的对应星系。图 3-7 展示了实验结果的混淆矩阵,整体分类的准确率仅为 59.24%,表明 GalSpecNet 模型直接应用在 LAMOST 光谱数据上的泛化能力有限。根据混淆矩阵,尽管 GalSpecNet 模型完全没有使用 LAMOST 的光谱数据进行训练,但该模型仍然对 SF 星系提供了令人鼓舞的分类结果,其准确率为 92.9%。模型预测表现不佳的主要原因是对于 Normal 星系的分类。

模型在 LAMOST 的光谱泛化性测试时所呈现的分类性能欠佳,是由多种因素共同作用导致的。例如:

(1) SDSS 和 LAMOST 的星系光谱数据在光谱特性上存在差异,这种差异来源于观测设备的不同。例如, LAMOST 望远镜的分辨率略低于 SDSS 望远镜,且 LAMOST 的光谱通常没有经过绝对流量定标。GalSpecNet 模型在训练阶段主要基于 SDSS 光谱数据进行学习,可能形成了对 SDSS 光谱特性的适应性。在对 LAMOST 光谱进行分类时,其独特的光谱特征未能被模型有效地识别和提取,导致模型在 LAMOST 光谱分类上的性能下降。

(2) LAMOST 的训练和测试样本中存在质量较差的光谱(孟凡龙等, 2017),在测试过程中未对异常光谱进行筛选和去除。图 3-8 展示了一些从 LAMOST 训练样本中挑选的异常光谱,图 3-8a 的光谱连续谱趋势表现出异常,图 3-8c 的光谱在红蓝光谱的拼接区域出现流量跳跃,图 3-8b 的光谱流量出现断层,即存在连续若干个波长点处的流量为零,图 3-8d 的蓝端光谱出现显著噪声。

后续工作将对 LAMOST 数据样本进行更多预处理,识别并剔除其中的异常光谱。在此基础上,使用迁移学习方法进一步验证 GalSpecNet 模型对 LAMOST 光谱星系的分类和泛化能力。迁移学习是一种机器学习技术,旨在通过将从一个领域学到的知识应用于另一个相关但不同的领域,从而改善目标任务的性能。在星系光谱分类任务中,迁移学习可以用来解决不同望远镜之间光谱数据的差异性带来的问题。在源数据(SDSS 光谱数据集)上训练的模型已经学习到了一些有用的特征表示,这些特征可能对目标领域(LAMOST 光谱数据集)也是有效的。因此,可以将源领域的特征表示迁移到目标领域,并在目标领域上进行微调或重新训练,以适应目标任务。迁移学习后的模型对 LAMOST 光谱数据的分类表现可能比直接应用的表现更好,因为它能够充分利用源领域的知识和特征,并通过微调适应目标领域的特性,从而提高分类的准确性和泛化能力。通过迁移学习,可以有效地利用已有数据和模型,减少目标领域上的标记数据需求,并加快模型的训练速度。因此,迁移学习是未来工作的一个重要方向,可以帮助提高分类模型在不同望远镜数据上的适应性。

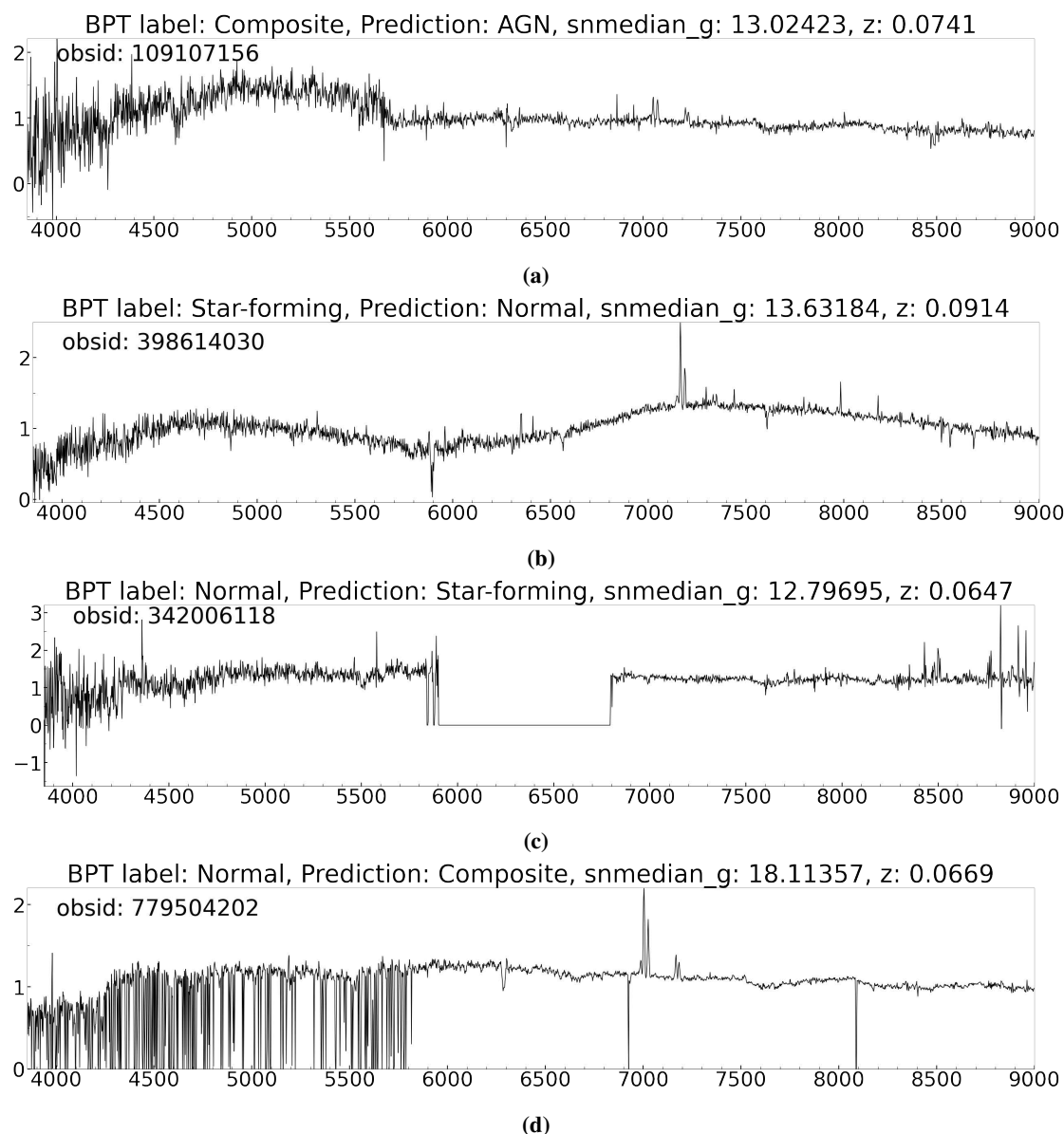


图 3-8 LAMOST 数据样本中的异常光谱

Figure 3-8 Anomalous Spectra in LAMOST Data Samples

3.5 分类星表

3.5.1 星表内容描述

使用训练好的 GalSpecNet 模型对总数据集的 118,756 个光谱进行了预测，并给出了预测的星表。模型只需约 10.21 秒即可给出对这些光谱的分类结果，表现出极高的分类效率。GalSpecNet 模型和给出的完整星表可以在 China-VO 的 PaperData 库中在线获取³。分类星表中包含了每个星系样本的基本信息、MPA-JHU 和朴茨茅斯团组给出的 BPT 分类结果、SIMBAD 和 NED 数据库对星系的分类结果、模型将样本预测为各类别给出的预测概率和对样本的最终预测类别。表 3-5 给出了该分类星表的数据描述，其中统一的标签表示按照表 3-1 整理得到

³<https://nadc.china-vo.org/res/r101152/>

的标签。

表 3-5 分类星表的内容描述

Table 3-5 Content Description of the Classification Catalogue

列名	单位	描述
specobjid	...	SDSS 天体的 SpecObjID
ra	deg	R.A. (J2000)
dec	deg	Decl. (J2000)
z	...	SDSS 给出的红移值
snmedian	...	SDSS 给出的 S/N 中值
bptclass	...	“Galspec” 星表给出的 BPT 标签
bpt	...	“emissionLinesPort” 星表给出的 BPT 标签
bpt_label	...	统一的 BPT 标签, 0 为 SF, 1 为 Composite, 2 为 AGN
SIMBAD_label	...	SIMBAD 数据库的统一标签, 0 为 SF, 2 为 AGN
main_type	...	SIMBAD 数据库的 main_type 标签
other_types	...	SIMBAD 数据库的 other_types 标签
NED_label	...	NED 数据库的统一标签, 0 为 SF, 2 为 AGN
pre_0	...	GalSpecNet 模型将样本预测为 SF 星系的概率
pre_1	...	GalSpecNet 模型将样本预测为 Composite 星系的概率
pre_2	...	GalSpecNet 模型将样本预测为 AGN 星系的概率
pre_3	...	GalSpecNet 模型将样本预测为 Normal 星系的概率
prediction	...	Predicted result of the GalSpecNet

在利用模型对星系光谱进行分类时, 模型对一个样本的最终预测类别通常为最大预测概率 $\max(pre_i), i \in [0, 3]$ 所对应的类别 i 。为探讨模型的预测概率阈值对分类结果性能的影响, 图 3-9展示了当模型对 AGN 星系的预测概率设定不同阈值时, GalSpecNet 模型对 AGN 预测结果的 Acc、P、R 和 F1 的变化曲线。从图中可以观察到, 随着概率阈值的提高, 模型对 AGN 预测的精确率 P 不断增大, 相反地, 召回率 R 不断减小。这是因为更高的阈值意味着只有当模型对某样本为 AGN 的预测概率更大时, 才会将其判定为 AGN。这样的策略倾向于筛选出那些模型高度确信的 AGN 样本, 从而提高分类结果的精确度; 部分实际为 AGN 但模型预测概率略低于阈值的样本被错误地划分为其他类别, 表现为筛选出的 AGN 样本的召回率减小。Acc 和 F1 综合考虑了精确率和召回率, 反映了模型整体分类性能的平衡。随着概率阈值的增大, 这两个指标现出先增大后减小的趋势。这是因为起初提高阈值有助于减少误分类样本, 提升精确率, 从而提高整体准确率和 F1 分数; 然而, 当阈值高到一定程度时, 模型对 AGN 的召回率显著降低, 导致大量真实的 AGN 样本被漏判, 对 Acc 和 F1 造成负面影响。

综上所述, 图 3-9揭示了设定不同预测概率阈值对 GalSpecNet 模型在 AGN 星系分类性能的影响规律。较低的阈值有助于获取更完备的 AGN 候选体样本,

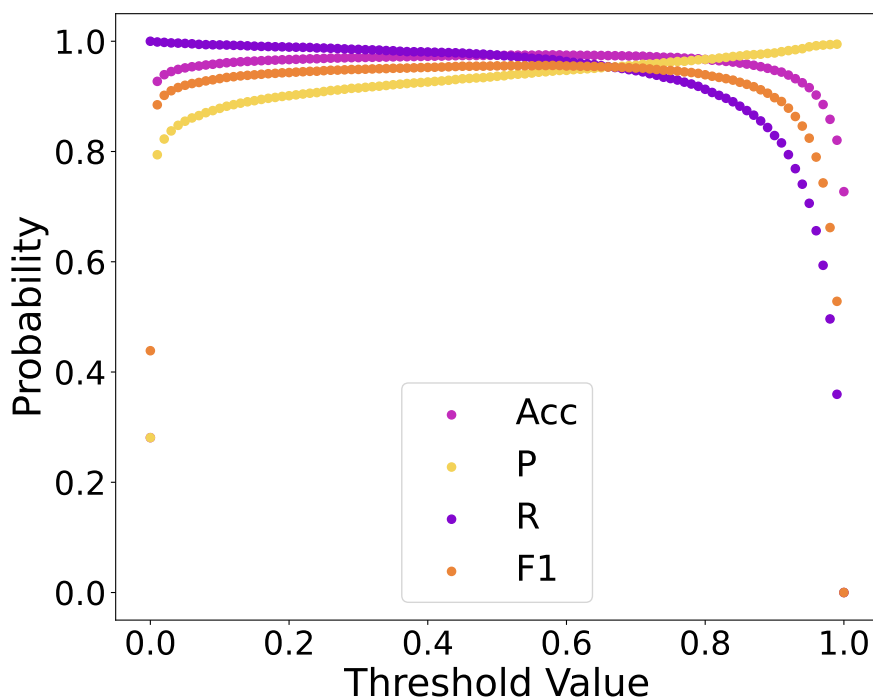


图 3-9 模型对 AGN 的预测概率取不同阈值时预测结果的 Acc、P、R 和 F1 曲线
Figure 3-9 Curves of Acc, P, R and F1 when the Model Takes Different Thresholds for the Predicted Probability of AGN

适合于需要广泛搜索 AGN、不严格要求每个候选体准确度的场景；而较高的阈值则能提供更精确的 AGN 候选体，适用于对候选体精度有较高要求的研究任务，该规律也同样适用于 SF、Composite 和 Normal 星系。在实际应用中，应根据具体科研目标 and 需求，合理选择适当的概率阈值，以实现最佳的分类效果。

3.5.2 模型不确定性评估

在涉及高安全性的领域中，深度学习模型的预测可靠性至关重要。同样地，在星系光谱自动分类任务中，确保分类结果的准确性和可信度是进行后续科学研究的保障。对模型预测结果的不确定性进行评估，有助于理解和解释模型的预测结果并提高对模型的信心。

本实验采用了蒙特卡洛 (Monte Carlo, MC) dropout 方法，基于模型的 dropout 层来量化评估模型预测的不确定性 (Gal, Ghahramani, 2016)。MC dropout 方法是通过在测试阶段保持模型的 dropout 层激活，对同一输入数据进行多次预测（本实验中为 50 次），每次预测时随机“丢弃”网络中的一部分神经元，从而产生一组预测结果的分布。最终，每个样本的预测类别由这 50 次预测输出的平均概率确定，而预测的不确定性则通过计算这些输出概率的标准差来衡量。模型的不确定性越高，说明在微小的网络结构调整下，预测结果的变动越大。

图 3-10 比较了 GalSpecNet 模型直接预测的概率与采用 MC dropout 方法得到的平均预测概率。结果显示两者相当，这意味着模型在 dropout 扰动下的预测结果并未发生显著变化，说明模型具有较好的稳定性。图 3-11 揭示了模型预测概率

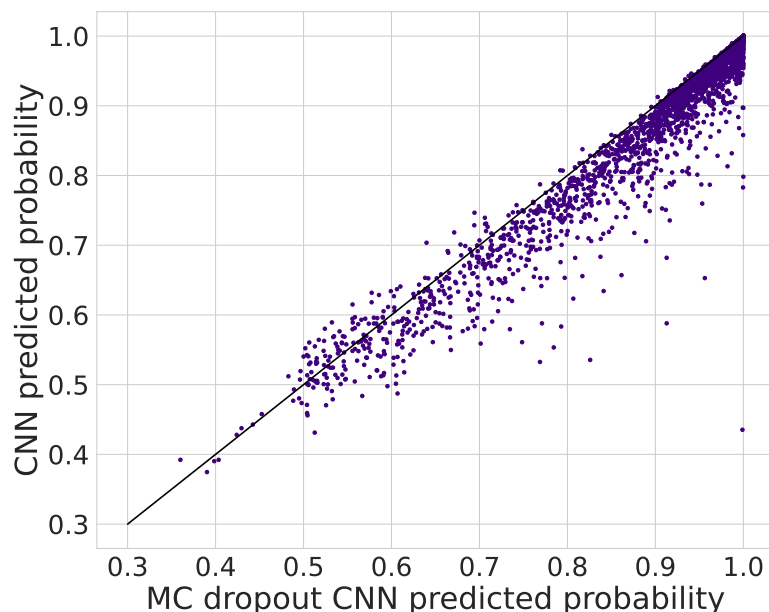


图 3-10 GalSpecNet 模型的预测概率与其在 MC dropout 方法下的预测概率

Figure 3-10 Predicted Probabilities of the GalSpecNet vs. Predicted Probabilities of the Model with MC Dropout Method

与其不确定性之间的负相关关系。随着预测概率的增加，对应的不确定性逐渐减小。这符合直觉：模型对某一类别的预测越有信心（概率越高），其不确定性就越低。实验结果显示，模型的平均准确率为 94.13%，平均不确定性为 0.0199，且 80% 的样本的不确定性小于 0.034，说明整体上模型的不确定性处于较低水平。

通过对模型不确定性的分析，可以得出结论：模型在 MC dropout 扰动下的预测结果与直接预测结果基本一致，显示出模型对输入数据的响应具有良好的鲁棒性；模型的平均准确率高且不确定性低，特别是大部分样本的不确定性远低于平均值，这证明了模型在星系光谱分类任务中的可靠性。并且，由于模型对每个样本的预测概率本身已能在一定程度上反映分类结果的可信度，即概率值越高，分类结果越可信，因此在分类星表中没有给出对模型预测不确定性的额外估计。对模型不确定性的分析进一步提高了给出的分类星表的可信度。

3.5.3 与其他星表的交叉验证

在由 GalSpecNet 模型预测给出的分类星表中，包含 41,250 个 SF 和 55,103 个 AGN 候选体。为了验证这些候选体的可靠性，采用了多种交叉验证方法。

首先，将 MPA-JHU 和 Portsmouth 的星系分类结果中相同的部分作为 BPT 标签，用于对照验证这些候选体。结果显示，37,940/41,250 个 SF 候选体和 8,670/10,249 个 AGN 候选体与 BPT 标签一致。其余的 44,854 个 AGN 候选体缺乏 BPT 标签，无法进行直接比对。与 BPT 标签比较的结果表明，GalSpecNet 模型在预测 SF 星系时的精确率为 99.64%，召回率为 91.25%。而在 AGN 星系的识别上，该模型的分类精确率为 84.59%，召回率为 97.61%。这些数据证实了 GalSpecNet 模型在识

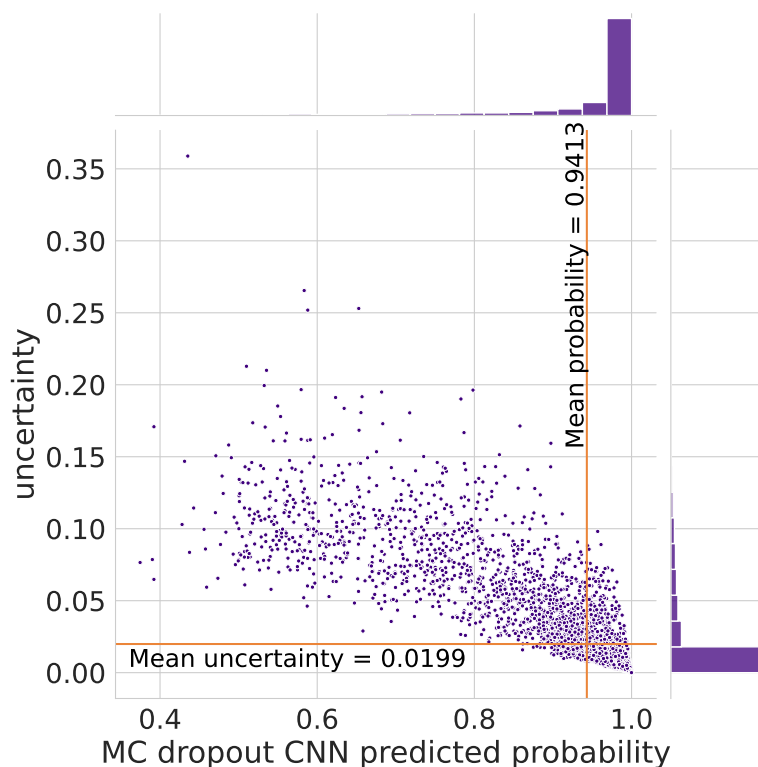


图 3-11 MC Dropout 方法下模型的预测概率与不确定性

Figure 3-11 Predicted Probability and Uncertainty of the Model with MC Dropout Method

别 SF 和 AGN 星系方面的可靠性，可以帮助天文学家筛选 SF 和 AGN 候选体以供后续科学研究。

为了进一步验证分类结果，将该分类星表与 SIMBAD 数据库⁴(Wenger et al., 2000) 和 NED 数据库⁵(Helou et al., 1991) 进行交叉匹配，交叉半径为 1 角秒。在 SIMBAD 数据库中，有 119/152 个 SF 候选体和 3,671/3,673 个 AGN 候选体与数据库分类一致；在 NED 数据库中，有 8/18 个 SF 候选体和 353/353 个 AGN 候选体与数据库分类一致。

此外，为了进一步评估模型性能，将 SDSS DR16 的所有星系光谱与 SIMBAD 数据库进行交叉匹配，匹配结果包含 SIMBAD 认证的 724 个恒星形成星系和 24,524 个 AGN 星系。GalSpecNet 模型正确预测了其中 594 个恒星形成星系，其中包括 127 个没有 BPT 分类的样本和 1 个 BPT 无法提供分类的样本；在 AGN 星系预测方面，模型正确识别了 21,344 个 AGN 星系，其中包括 5,400 个没有 BPT 分类的样本和 78 个 BPT 无法给出分类的样本。这一结果表明了，GalSpecNet 模型不仅能处理已有 BPT 标签的样本，还能有效地识别那些由于红移、信噪比限制或缺少必要发射线而在 BPT 诊断图中未被筛选出的 SF 和 AGN 候选体，显示出较强的适应性和发现能力。

⁴<https://simbad.u-strasbg.fr/simbad/>

⁵<http://ned.ipac.caltech.edu/>

3.6 本章小结

本章主要实现了星系光谱分类实验，内容包括实验数据准备、基于卷积神经网络的模型的网络设计和训练，得到了用于星系光谱自动分类的 GalSpecNet 和 restframe GalSpecNet 模型。三种经典的机器学习方法 LDA 判别分析、支持向量和随机森林，和两种基于卷积神经网络的光谱分类模型被用于与本文训练的模型进行比较，结果表明本文给出的模型尤其对于发射线星系的分类中表现出更好的性能。然后对模型进行了不确定性评估，证明了模型的可靠性。最后，基于 GalSpecNet 模型给出了一个分类星表，其中包含 41,250 个 SF 和 55,103 个 AGN 候选体。

第4章 星系光谱特征的自动提取方法及有效性分析

在星系光谱分类任务中，特征提取是至关重要的步骤之一，它直接影响着分类模型的性能和泛化能力。本章将介绍两种常用的自动特征提取方法，同时也将其与直接使用原始光谱特征的方法进行比较。从特征的降维可视化和基于不同特征的分类结果两个角度，分析它们在星系光谱分类中的有效性。

4.1 特征提取方法概述

原始光谱的特征经过如3.1节所述的数据预处理步骤后，被标准化为包含2575个采样点的光谱样本。尽管这些光谱特征具有较高的信息量，能够充分反映星系光谱的原始信息。但也存在维度高、噪声干扰大等问题，其高维度和复杂性也可能导致模型过拟合或计算效率低下。因此，一般需要对原始光谱特征进行特征提取。

光谱特征提取的核心是将原始数据转换为更具有信息量的特征表示的过程，目的在于将原始的、高维度的光谱数据转换为更具有代表性、信息浓度高的特征表示，以便于分类模型更好地理解 and 处理数据。特征提取的过程可以帮助降低数据的维度、减少噪声的影响、提取关键信息、加速模型训练和提升分类性能。在传统的光谱分析过程中，光谱特征的选择通常根据专家知识决定，例如BPT诊断图方法基于对发射线光谱物理机制的理解，选取[N II]、[O III]、[S II]、[O I]、 $H\alpha$ 和 $H\beta$ 六种特定的谱线为关键特征，用于区分不同类型的星系。为了更加充分、客观地利用光谱信息，本章侧重于运用统计学方法实现光谱特征的自动提取。

主成分分析 (Principal Component Analysis, PCA) 是一种常用的光谱特征自动提取方法。该方法通过对光谱的线性变换将原始光谱特征映射到一个低维子空间，具有相关性的高维变量被合成为线性无关的低维向量，从而保留了数据的主要信息。PCA产生的低维特征向量能够降低数据的维度，提高模型的计算效率，并尽可能地保留原始光谱特征的信息量。

图4-1展示了提取不同数量的PCA主成分时被保留的数据信息百分比，当提取1100个主成分时，保留的光谱信息达到98%以上。因此，后续实验利用PCA从原始光谱特征中提取了1100个主成分，原始光谱从2575维的特征空间被映射到1100维的特征空间，这些主成分可以表达原始光谱特征中98.05%的信息。

基于深度学习模型的特征提取是另一种常用的特征自动提取方法，该方法利用深度学习模型对光谱进行端到端的特征学习和提取。在本实验中，卷积神经网络通过卷积和池化等操作从输入数据中提取特征，经过一系列特征提取操作后，所提取的特征被送入全连接层实现进一步的分类和回归等任务。因此，在GalSpecNet模型中，输入数据提取的特征即最后一个卷积层的输出。根据3.2节

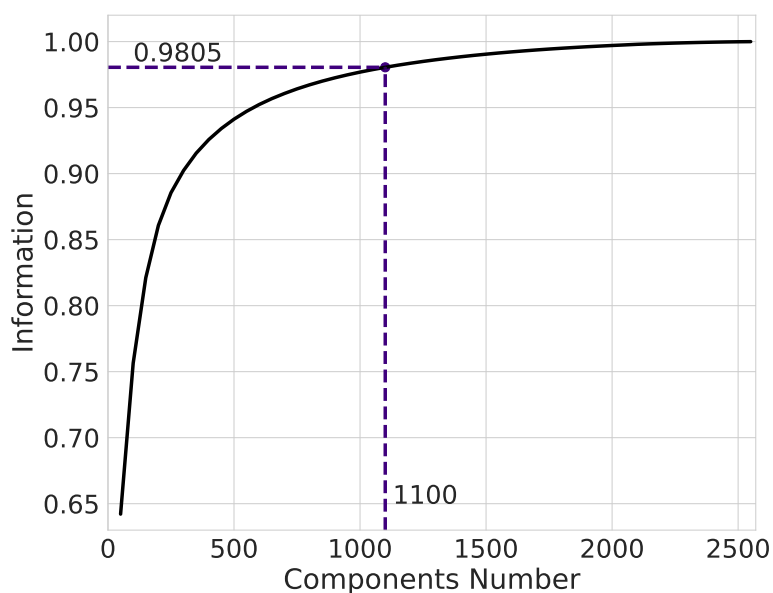


图 4-1 PCA 提取不同数量主成分时被保留的数据信息百分比

Figure 4-1 Percentage of Data Information that is Retained when PCA Extracts Different Numbers of Principal Components

对 GalSpecNet 模型结构的设计，最后一个卷积层在进行特征提取时，每个光谱样本由 32 个卷积核进行提取特征，每个卷积核输出包含 37 个值的特征谱，将这些特征展平后，每个光谱样本最终得到 1184 个提取特征。

4.2 基于 UMAP 的特征可视化

UMAP (Uniform Manifold Approximation and Projection; [McInnes et al. 2018](#)) 是一种用于数据降维和可视化的算法，它基于流形学习的思想，将高维数据映射到低维空间中，同时保留原始数据的结构和特征。该算法的核心思想是将数据看作是一个连续的流形结构，并尝试在这个结构上找到一个低维表示。它使用一种基于图形的方法，先构建一个高维空间中的近邻图，然后将其转换成一个低维空间 (二维或三维) 中的图形。在这个过程中，UMAP 将高维数据点之间的距离转换成低维空间中的相似度，同时也考虑到了数据点的密度和分布情况。相对于其他降维方法，UMAP 在保留数据结构和特征方面表现出色，特别是对于高维数据和噪声数据。

本小节分别使用原始光谱特征、基于 PCA 提取的光谱特征和基于卷积和池化等操作提取的光谱特征作为训练集样本的光谱特征，图 4-2 展示了 UMAP 方法将这些光谱特征降维至二维空间的可视化结果。图 4-2a 和 4-2b 分别是原始光谱特征和基于 PCA 提取的光谱特征的降维可视化结果，这两种光谱特征能较好地地区分 Star-Forming 和 Normal 星系，但 Composite 和 AGN 星系仍混作一团，很难加以区分。图 4-2c 是基于卷积等操作提取的光谱特征，该可视化结果表明该特征提取方法能较好地地区分四种类别的星系，相同类别的星系表现出较好的聚合效果，

尤其是 Composite 和 AGN 星系间呈现出明显的分界线。

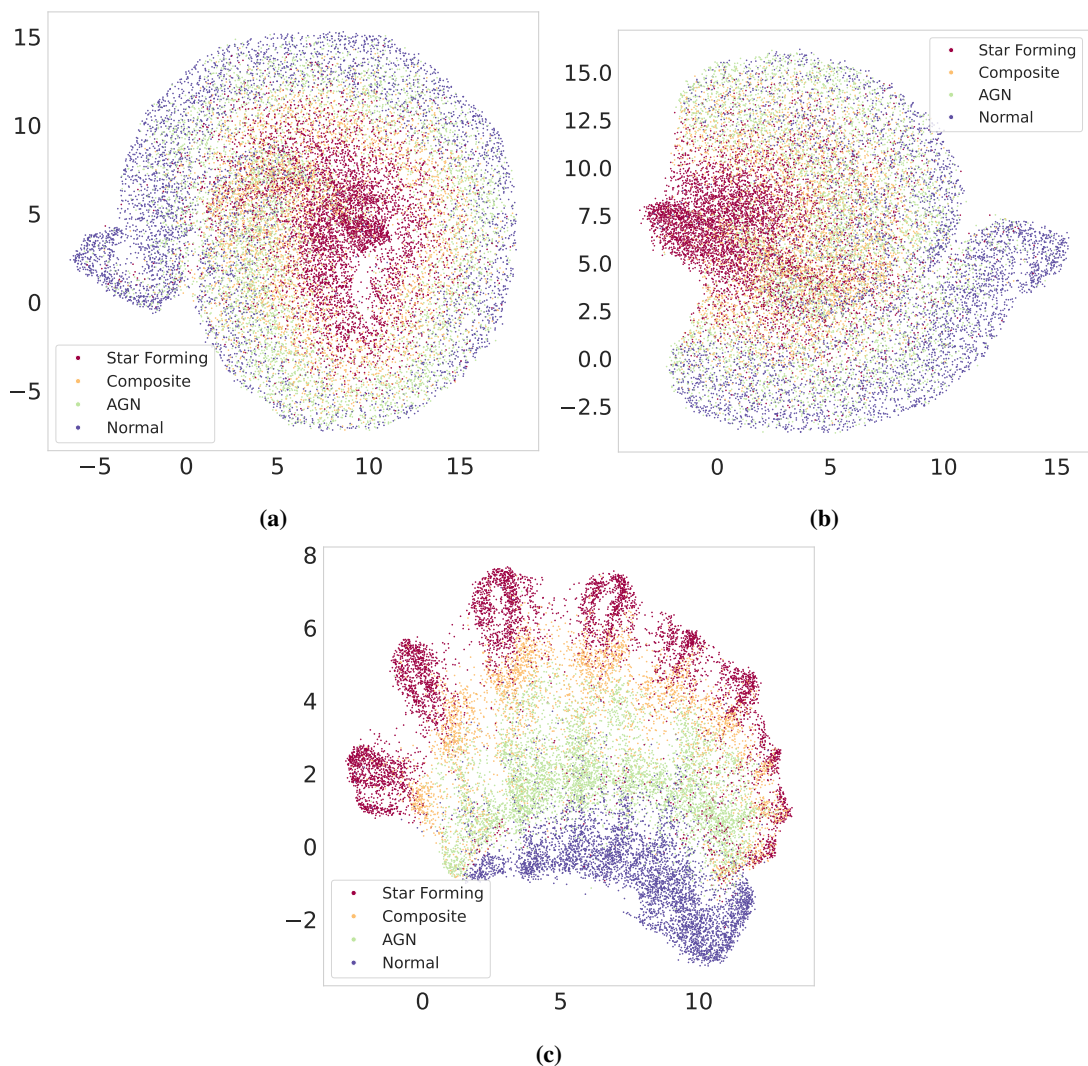


图 4-2 原始光谱特征、PCA 提取的光谱特征和卷积和池化等操作提取的光谱特征的降维可视化

Figure 4-2 Dimensionality Reduction Visualisation of Original Spectral Features, Spectral Features Extracted by PCA and by Convolution and Pooling Operations

4.3 基于不同特征的分类结果

为了评估不同特征提取方法在星系光谱分类任务中的有效性，针对训练集和测试集的光谱数据分别得到了三种提取的特征：原始光谱特征、基于 PCA 提取的特征，以及基于卷积和池化等操作提取的特征。

为了直观地比较不同特征提取方法在光谱分类任务中的表现，保持分类器的结构和参数设置不变，并针对每种特征训练了相应的分类器。然后在测试集数据上评估这些分类器的分类表现，从而确定最佳的特征提取方法。为了排除分类算法对某种特征提取方法的偏好，实验采用了 LDA、SVM 和 RF 作为分类算法，分别对每种特征的测试进行评估。通过这一实验设计，能够全面、客观地评估各

种特征提取方法对于星系光谱分类任务的贡献，并为相关研究提供有价值的参考和指导。

本节实验主要是为了评估不同特征对于分类结果的有效性，因此分类器的参数设置都比较基础。LDA 分类器使用 SVD 作为求解器，不进行正则化；SVM 分类器的惩罚系数设为 $C = 1$ 、采用系数为 $\gamma = 1/n_features$ 的高斯核函数，使用 OVR 作为处理多类别分类的策略、对每个类别进行均衡；RF 分类器中设置数的数量 $n_estimators = 100$ ，使用 Bootstrap 方法对数据进行采样，每个叶子节点至少 1 个样本，至少有 2 个样本才能进行节点分裂，不对树设置最大深度，节点会一直分裂直至所有的叶节点都包含纯净的类别或达到最小样本数，使用 Gini 准则衡量节点纯度。

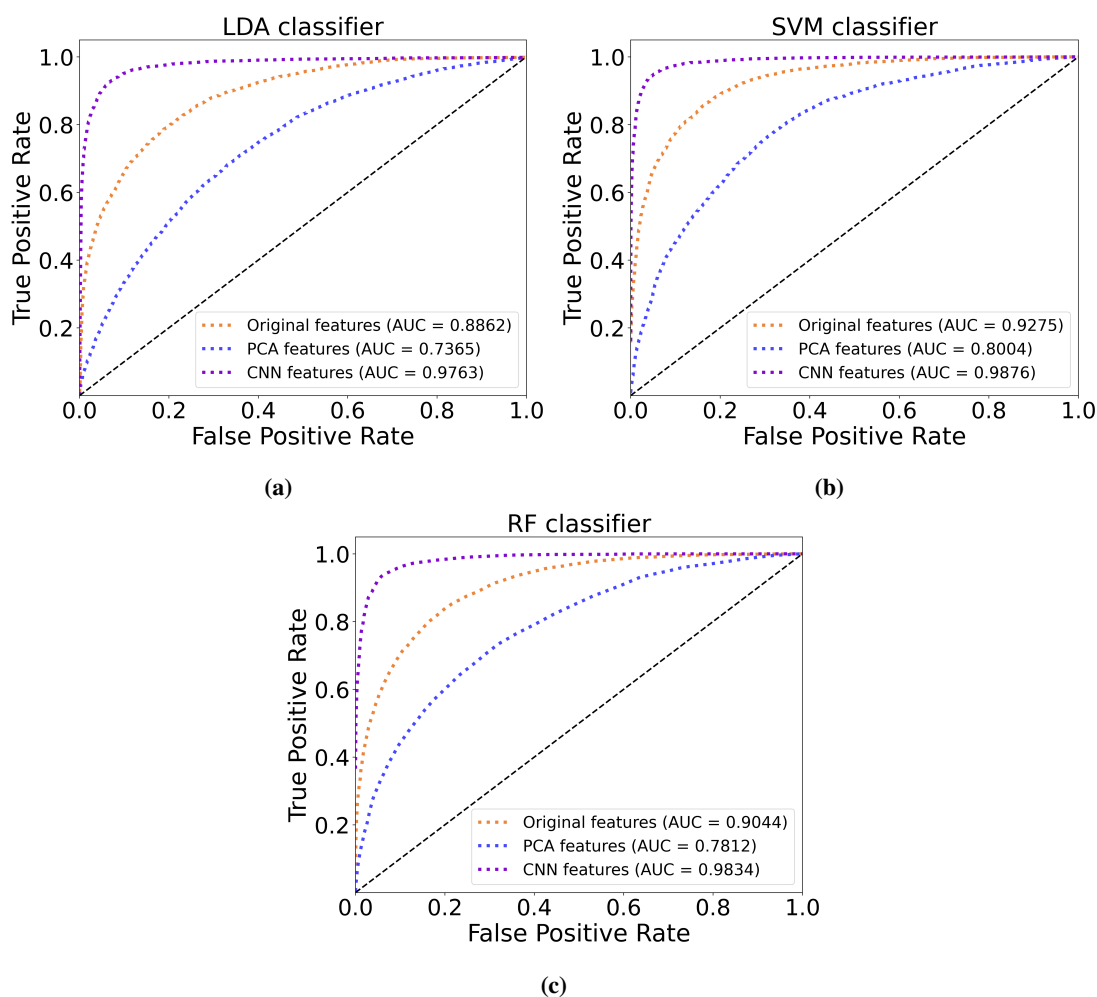


图 4-3 基于原始光谱特征、基于 PCA 提取的光谱特征和基于卷积和池化等操作提取的光谱特征的分类结果

Figure 4-3 Classification Results Based on Original Spectral Features, Spectral Features Extracted by PCA and Spectral Features Extracted by Convolution and Pooling Operations

图 4-3展示了基于三种特征训练的分类器的测试结果的 ROC 曲线，曲线越靠近左上角，分类器的性能越好。由于在数据准备时已经采用下采样方法平衡了各类别的样本数量，此处认为各类别的样本是同等重要的，因此采用宏平均的

ROC 曲线，每条 ROC 曲线的 AUC 值标注在图例中，AUC 值越大，分类器的性能越好。图中橙色、蓝色和紫色的曲线分别是基于原始光谱特征、PCA 提取的光谱特征和 CNN 提取的光谱特征得到的分类器结果；图 4-3a、图 4-3b 和图 4-3c 分别是 LDA、SVM 和 RF 分类器的测试结果。该实验可以得到以下几个结论：

(1) 由相同的光谱特征结合不同的分类算法的结果上看，分类算法的表现 $SVM > RF > LDA$ ，该结论与表 3-3 得到的结果一致，也说明了这些算法都没有表现出与其他算法不一致的、对某类特征的倾向性。

(2) 由不同的光谱特征在相同分类算法的结果上看，基于卷积和池化等操作提取的光谱特征的分类效果远好于原始光谱特征和基于 PCA 提取的光谱特征。当 $AUC = 1$ 时，说明该分类器的性能非常理想，而基于卷积和池化等操作提取的光谱特征结合三种分类算法得到的 AUC 值都在 0.97 以上。

(3) 比较 LDA 和 SVM 分类器，基于原始特征得到的分类结果 AUC 值相差约 0.04，基于 PCA 提取的特征的 AUC 值相差约 0.06，基于卷积和池化等提取的特征的 AUC 值相差约 0.01。相同的特征在不同的分类器上得到的 AUC 值差值越小，说明在光谱特征提取这一环节中，该特征提取方法的表现越好。因此，基于卷积和池化等操作的特征提取方法能够充分表达原始光谱的信息，并且对分类结果起到了正向作用，而基于 PCA 方法提取的光谱特征难以提取星系光谱中的复杂信息，不适用于该星系光谱分类任务。

4.4 本章小结

本章主要研究内容是对星系光谱特征的自动提取方法介绍及其有效性分析。从特征的降维可视化分析和分类两个角度，对原始光谱特征、基于 PCA 的特征提取方法和基于卷积和池化等操作提取的光谱特征进行了比较。这两个角度的实验结果都表明，基于卷积和池化等操作的特征提取方法不仅能够充分表达原始光谱特征中蕴含的复杂信息，并且能够对星系光谱分类任务产生正向作用，得到比使用原始光谱特征更优的分类结果。

第 5 章 模型可解释性研究

5.1 可解释性分析技术基础

可解释性分析已经成为深度学习模型研究中的一个重要方面。尽管 CNN 在众多分类任务中表现出良好的性能，但由于 CNN 网络的复杂架构和众多在训练过程中不断调整的权重参数，这类模型通常被认为是“黑箱”。这一特性意味着理解 CNN 的决策过程和依据是一项颇具挑战性的任务。对 CNN 模型的可解释性研究有助于理解模型决策、验证模型的正确性，是提升模型可信度和促进模型改进的重要手段。

本文采用基于梯度的类激活图 (Grad-CAM, Selvaraju et al. 2017) 方法开展对模型的可解释性研究。Grad-CAM 方法是一种适用于基于 CNN 架构的模型的解释算法，旨在通过可视化的方式揭示模型在作出特定分类决策时关注的输入区域。这种方法利用模型最后一个卷积层的梯度来确定对模型最终输出有贡献的输入特征区域。本章对模型预测的解释与分析主要从目视检查和客观分析两个层面展开。

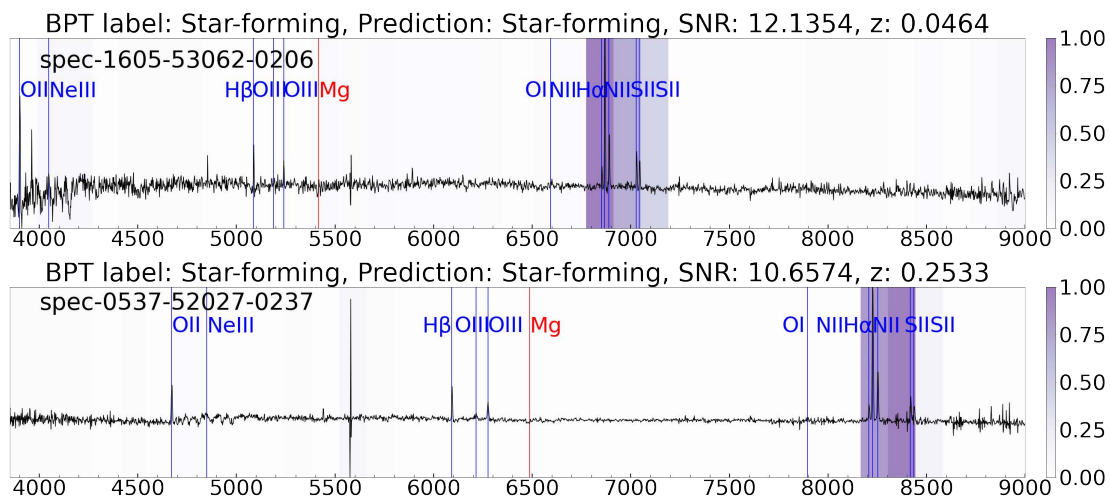
5.2 GalSpecNet 模型的可解释研究

5.2.1 目视检查

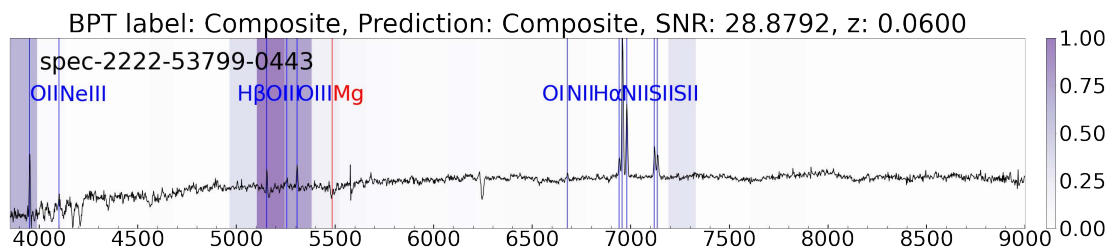
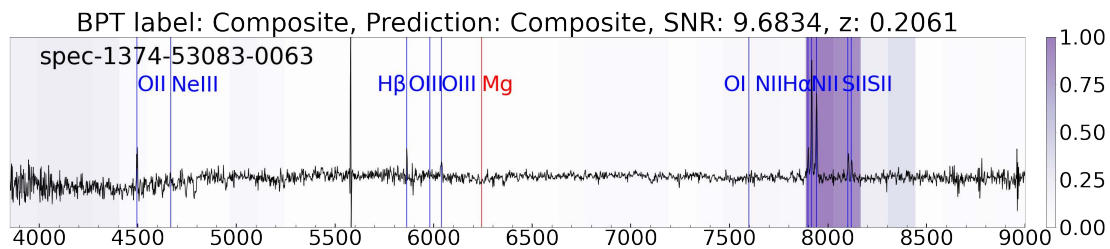
GalSpecNet 模型在对每个样本进行预测时，其内部结构的设计使得最后一个卷积层产生 32 个特征谱作为高级抽象特征的集合，每个特征谱由 37 个连续的区域组成。为探究模型在预测时对各个区域的关注程度，利用 Grad-CAM 方法计算模型在每个区域的关注权重。具体来说，给定一个训练样本，模型作出预测后，对于每个特征谱及其包含的 37 个区域，计算它们对应输出类别的概率得分相对于该区域特征值的梯度。这些梯度反映了模型在作出当前预测时，各区域特征对输出的影响。并将每个区域的梯度值在 32 个特征谱上实现全局平均池化，得到 37 个平均的关注权重，反映每个区域对预测的整体影响权重。根据对每个区域的关注权重，并以热图的形式给出，热图上颜色越深代表模型对该区域的关注度越高，即该区域对模型预测的贡献越大。

本小节实验以目视检查的方式，观察了 GalSpecNet 模型在对不同类别星系样本进行预测时所重点关注的光谱区域。图 5-1 给出了随机选择的一些热图示例，其中蓝线标识发射线，红线标识吸收线。总体来说，模型的注意力集中在 [O II] $\lambda 3727$ 、[Ne III] $\lambda 3869$ 、 $H\beta$ $\lambda 4861$ 、[O III] $\lambda \lambda 4959, 5007$ 、[N II] $\lambda \lambda 6548, 6584$ 、 $H\alpha$ $\lambda 6563$ 和 [S II] $\lambda \lambda 6716, 6731$ 等发射线（波长增加顺序）附近。

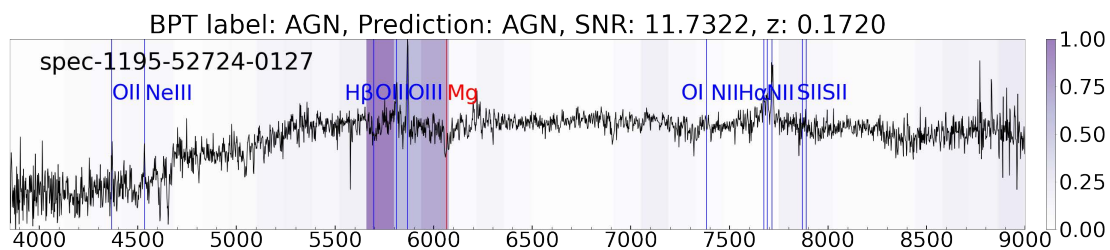
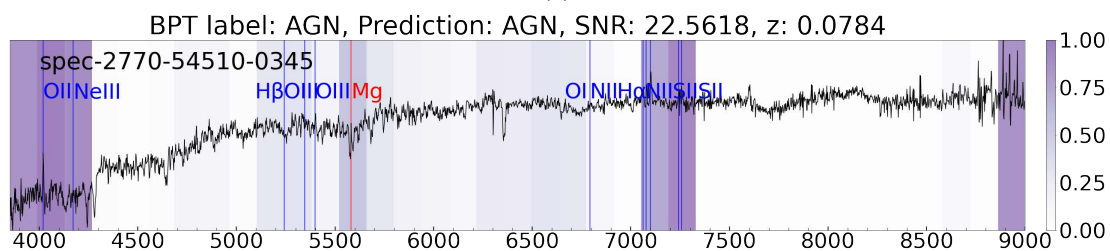
更具体地说，当模型预测 SF、Composite 和 AGN 星系时，[N II] 和 $H\alpha$ 发射线至关重要，这些谱线通常处于热图的同一区域，其次是 [S II] 发射线。如图 5-1a 所示，模型在预测 SF 星系时尤其如此，几乎完全聚焦于这些谱线。



(a)



(b)



(c)

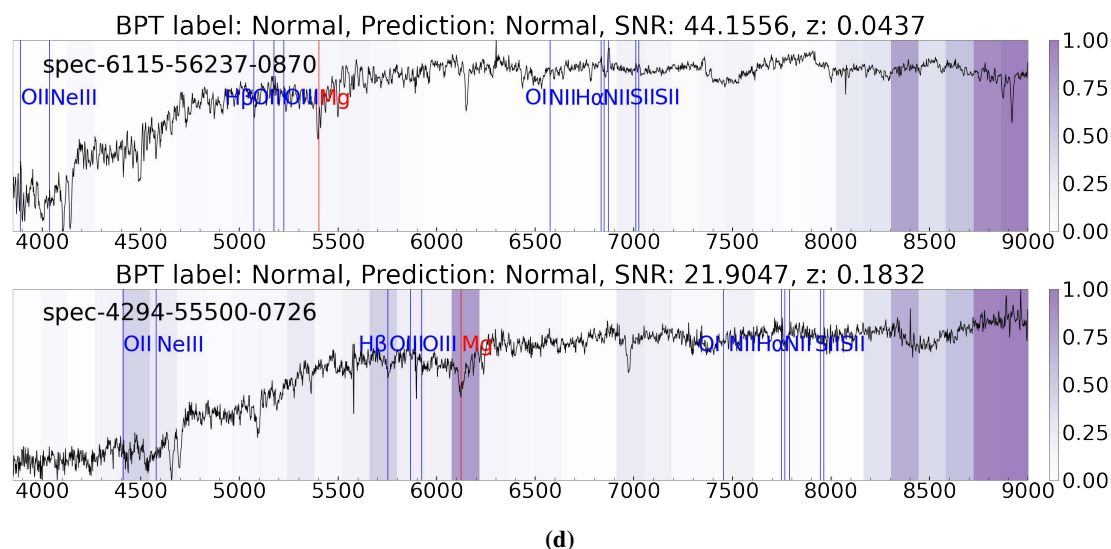


图 5-1 GalSpecNet 模型可解释性分析的热图样本

Figure 5-1 Heatmap Examples of the GalSpecNet for Interpretability Analysis

图 5-1b 展示了对 Composite 星系预测的可视化样本。除 [N II] 和 $H\alpha$ 发射线外， $H\beta$ 和 [O III] 发射线是模型在预测 Composite 星系时最感兴趣的谱线，其次是 [O II] 发射线。图 5-1c 展示了两个 AGN 星系的示例，与 SF 和 Composite 星系相比，模型在预测 AGN 时显示出更加复杂的关注模式，模型不仅关注 [N II]、 $H\alpha$ 、 $H\beta$ 和 [O III] 发射线，还包括对 [O II] 和 [Ne III] 发射线的关注。特别是，在对 AGN 星系进行分类时，Mg 吸收线有时也受到了关注。模型关注区域的相对不规则，反映了其光谱特征的多样性及潜在的复杂物理过程。

对于图 5-1d 所示的 Normal 星系，除 Mg 吸收线外，模型关注的谱线相对分散，未显示出对特定发射线的偏好。模型更倾向于观察光谱在整个波长范围、特别是红端光谱区域的整体特征。这与 Normal 星系相对温和的恒星形成活动和较少的电离特征相符。

在图 1-1 所示的 BPT 诊断图所利用的发射线中，只有 [O II] 发射线未受到模型的关注。在 BPT 诊断图中，该发射线主要用于区分 Seyfert 和 LINER 星系，这不属于本文分类模型的目标。根据 Baldwin et al. (1981)，[O II] $\lambda 3727$ 有助于区分不同的气体激发机制，[Ne III] $\lambda 3869$ 是一条可能有助于分类的谱线，但由于与其他发射线或吸收线混合，导致得到其精确的谱线流量测量比较困难，因此在构造诊断图时未被使用。综上所述，GalSpecNet 模型在对星系光谱进行分类时所关注的谱线与传统诊断图方法所依据的物理原理保持了一致，证实了基于 CNN 的星系光谱分类模型与传统的星系光谱分类理论识别星系光谱的关键特征相吻合。

5.2.2 客观分析

本节实验旨在通过客观分析手段，对 GalSpecNet 模型在星系光谱分类任务中的预测结果提供更深入的解释。通常，由于不同样本在同一区域具有不同内容，Grad-CAM 只能为模型的每次预测提供模型对单个样本的解释，无法评估模

表 5-1 模型预测各类别星系时关注的谱线及相应的权值

Table 5-1 The Spectral Lines and Their Corresponding Weights that the Model Focuses on when Predicting Various Types of Galaxies

SF		Composite		AGN		Normal	
line	weight	line	weight	line	weight	line	weight
[N II] $\lambda 6548$	0.72	[N II] $\lambda 6584$	0.65	[S II] $\lambda 6716$	0.52	Mg	0.35
H α	0.70	H α	0.65	[N II] $\lambda 6584$	0.52	H β	0.22
[N II] $\lambda 6584$	0.66	[N II] $\lambda 6548$	0.64	[S II] $\lambda 6731$	0.51	[O III] $\lambda 5007$	0.21
[S II] $\lambda 6716$	0.47	[S II] $\lambda 6716$	0.52	H α	0.48	[O III] $\lambda 4959$	0.21
[S II] $\lambda 6731$	0.45	[S II] $\lambda 6731$	0.50	[N II] $\lambda 6548$	0.44	[O II]	0.16
[Ne III]	0.12	H β	0.23	[O III] $\lambda 4959$	0.42	[Ne III]	0.15
[O II]	0.10	[O II]	0.21	H β	0.41	[S II] $\lambda 6716$	0.13
H β	0.05	[O III] $\lambda 5007$	0.20	[O III] $\lambda 5007$	0.39	[S II] $\lambda 6731$	0.13
[O III] $\lambda 4959$	0.05	[O III] $\lambda 4959$	0.20	Mg	0.27	[O I]	0.09
Mg	0.04	Mg	0.08	[Ne III]	0.25	[N II] $\lambda 6584$	0.08
[O III] $\lambda 5007$	0.04	[O I]	0.06	[O II]	0.23	H α	0.07
[O I]	0.02	[Ne III]	0.03	[O I]	0.12	[N II] $\lambda 6548$	0.06

型整体特征的重要性。然而，由于天文光谱中谱线的明确定义，可以在不同的数据中定位含有相同谱线的区域，从而得出模型整体的特征偏好。

为了得到在预测某个类别的星系时模型整体更加感兴趣的特征，使用 Grad-CAM 方法在 GalSpecNet 模型的训练集上可视化了所有正确预测的样本。然后，对 5.2.1 节中涉及的每条谱线的权重分别进行了均值计算。计算结果可以反映模型在预测某类别星系时，各谱线在整个训练集上展现出的重要程度。将 Grad-CAM 用于统计模型对特定类别的整体关注度，是该方法的一种创新性应用。

谱线及其对应的权重显示在表 5-1 中，权重值越高，表明该谱线对该类别预测的影响力越大。由该表可以得知，客观分析与目视检查结果存在显著一致性。在 GalSpecNet 模型对 SF、Composite 和 AGN 星系的分类过程中，[N II]、H α 和 [S II] 发射线是三条最关键的谱线。其他谱线的权值反映出，在预测这三类星系时，模型的注意力逐渐扩散。值得注意的是，只有在对 AGN 和 Normal 星系的预测中，Mg 吸收线的权重超过 0.2。而对于 Normal 星系来说，没有权重非常高的谱线，这表明该模型对于该类别星系没有特别关注的谱线。

5.3 本章小结

本章主要研究内容包括两部分。一是星系光谱特征的自动提取方法。将基于 PCA 提取的星系光谱特征、基于卷积等操作的星系光谱特征提取方法与原始光谱特征进行了比较，结果表明基于卷积等操作提取的光谱特征能够充分提取原始光谱中的关键信息，并有利于提高分类结果。二是模型可解释性分析。从目视检查和客观分析两方面对模型在预测各类别星系时关注的区域进行了分析和解释，证明了基于 CNN 模型的星系光谱自动分类方法与传统理论的一致性。

第6章 总结与展望

6.1 总结

本文构建了一个包含 10 个关键网络层的卷积神经网络模型 GalSpecNet, 该模型利用卷积和池化等操作对预处理的光谱进行特征提取, 并将提取的特征输入网络中的全连接层, 实现星系光谱的自动分类。星系光谱被分为四类, 包括恒星形成星系、复合星系、活动星系核和正常星系。主要工作总结如下:

1. 星系光谱自动分类模型 GalSpecNet 的训练与验证。基于 SDSS DR16 和 LAMOST DR8 的交叉星系, 采用 MPA-JHU 和 Portsmouth 给出的星系 BPT 分类结果作为数据标签, 构建和训练了 GalSpecNet 分类模型。在 SDSS 光谱样本上的测试结果表明, 模型的分​​类准确率达到 94% 以上, 其中对恒星形成星系和活动星系核的分类精确率分别为 99.64% 和 84.59%, 召回率分别为 91.25% 和 97.61%。该模型在无需其他参数测量的情况下, 仅凭原始光谱即可获得较好的分类性能, 光谱分类效率极高。并且, 该模型对光谱红移 ($z \leq 0.25$) 和信噪比 ($5 \leq S/N \leq 30$) 不敏感, 能够应用于更广泛的光谱范围。

在不添加其他额外信息和不进行人工特征筛选的情况下, 将 GalSpecNet 模型与基于 Fisher 线性判别分析、支持向量机和随机森林的经典机器学习分类器进行对比, 实验结果表明这些分类器可以区分发射线星系和正常星系, 但较难区分发射线星系的子类别, 尤其是对复合星系的识别表现较差, GalSpecNet 模型对各类别星系的分类表现都最好。

2. 给出分类星表。基于 GalSpecNet 模型给出了 SDSS DR16 和 LAMOST DR8 交叉星系的分类星表, 其中包括 41,699 个恒星形成星系候选体和 55,103 个活动星系核候选体。星表中同时给出了模型将样本预测为各类别的概率。用户可以修改概率阈值来过滤目标, 以平衡结果的精确性和完备性。通过与 SIMBAD 和 NED 数据库的交叉匹配, 进一步验证了分类星表的可靠性。并且, 模型可以识别更多因谱线难以精确测量而在传统 BPT 诊断图中未能分类的 SF 和 AGN 候选体。

3. 模型特征的自动提取方法研究。研究了 GalSpecNet 模型中卷积和池化等对光谱特征提取的效果, 通过与原始光谱特征和基于 PCA 的特征提取方法相比较, 证明了基于卷积等操作的特征提取方法在星系光谱分类中的优越性。

4. 模型可解释性分析。使用 Grad-CAM 方法及热图可视化技术, 对 GalSpecNet 模型在星系光谱分类时的注意力分布进行了全局评估和特征分析。并结合热图方法可视化和分析了模型学习到的特征, 实现了对模型分类的可解释性分析。结果显示, 模型重点关注的谱线包括 [O II] $\lambda 3727$ 、[Ne III] $\lambda 3869$ 、 $H\beta$ $\lambda 4861$ 、[O III] $\lambda \lambda 4959, 5007$ 、[N II] $\lambda \lambda 6548, 6584$ 、 $H\alpha$ $\lambda 6563$ 和 [SII] $\lambda \lambda 6716, 6731$ 等发射线。这些谱线与传统的星系光谱分类理论中的关键谱线高度吻合, 验证了模型的有效性和分类结果的可解释性。

本文的主要贡献包括以下两方面：

1. 提出了一种高效、准确的星系光谱自动分类模型 GalSpecNet，平均分类准确率超过 94%。相比传统的 BPT 诊断图方法，该模型无需对星系光谱进行谱线测量，分类效率更高，尤其适用于海量光谱的处理；同时，模型适用于谱线缺失或信噪比太低不足以进行精确的谱线测量的光谱，应用范围更广泛。在仅使用光谱数据、无需其他参数测量和人工特征筛选的情况下，分类性能优于 Fisher 线性判别分析、支持向量机和随机森林等经典的机器学习算法。

2. 利用光谱数据对应波长谱线特征明确的特点，本文创新地提出使用基于梯度的类激活图方法对模型谱线特征进行全局重要性分析，为模型对星系光谱的分类依据进行了解释。这一解释性分析增强了模型的可信度，验证了模型在分类时关注的谱线特征具有物理意义，验证了模型的实际应用价值。该解释方法对于天文光谱具有广泛的适用性，可推广应用到其他处理光谱数据的模型中。

6.2 展望

本文提出的 GalSpecNet 分类模型是作为一种有监督学习算法，其性能与训练数据的质量和代表性紧密相关。当前实验数据中光谱红移和信噪比集中在 $(0, 0.25)$ 和 $(5, 40)$ 范围内。未来的工作将进一步探索和改进对更高红移 ($z > 0.25$) 和更高信噪比 ($S/N > 40$) 光谱的分类性能。

目前 GalSpecNet 模型将发射线星系分类为恒星形成星系、复合星系、活动星系核和正常星系，未来工作可以尝试对其进行进一步细分，如将活动星系核细分为 Seyfert 星系和 LINER 星系等子类。由于这些子类星系的已知样本可能较少，数据分布不均衡，可以采用生成式神经网络等技术进行数据增强，通过生成样本对少数类进行上采样。

利用 GalSpecNet 模型在现有任务上获取的知识，可以迁移至其他类似的分类任务中，如在其他大型光谱巡天项目中筛选恒星形成星系和活动星系核。通过迁移学习，只需对模型参数进行微调，使其适应不同的数据特征和分布，而非从头开始训练，既可以利用已有的模型知识，避免重复训练，又可以节省训练时间和资源，同时有助于提高模型的泛化性能。

参考文献

- 孟凡龙, 潘景昌, 于敬敬, 等, 2017. 巡天光谱中拼接异常光谱的自动检测和异常分级方法[J]. 光谱学与光谱分析, 37(07): 2250.
- 张茜, 张健楠, 赵永恒, 2020. 基于聚类的星系光谱分析[J]. 天文研究与技术, 17(2): 233-243.
- 李乡儒, 刘中田, 胡占义, 等, 2007a. 巡天光谱分类前的预处理——流量标准化[J]. 光谱学与光谱分析, 27(7): 1448-1451.
- 李乡儒, 胡占义, 赵永恒, 2007b. 基于 Fisher 判别分析的有监督特征提取和星系光谱分类[J]. 光谱学与光谱分析, 27(9): 1898-1901.
- 汪梦欣, 罗阿理, 2020. 双活动星系核寄主星系的光谱合成分析[J]. 光谱学与光谱分析, 40(1): 290-293.
- 覃冬梅, 胡占义, 赵永恒, 2004. 基于支撑向量机的天体光谱自动分类方法[J]. 光谱学与光谱分析, 24(4): 507-511.
- 赵梅芳, 罗阿理, 吴福朝, 等, 2008. 自适应增强方法在光谱自动分类中的应用[J]. 光谱学与光谱分析, 28(02): 472-477.
- ABADI M, AGARWAL A, BARHAM P, et al., 2015. TensorFlow: Large-scale machine learning on heterogeneous systems[EB/OL]. <https://www.tensorflow.org/>.
- AIHARA H, PRIETO C A, AN D, et al., 2011. The eighth data release of the sloan digital sky survey: first data from sdss-iii[J]. The Astrophysical Journal Supplement Series, 193(2): 29.
- ALAM S, ALBARETI F D, PRIETO C A, et al., 2015. The eleventh and twelfth data releases of the sloan digital sky survey: final data from sdss-iii[J]. The Astrophysical Journal Supplement Series, 219(1): 12.
- ALONSO M S, LAMBAS D G, TISSERA P, et al., 2007. Active galactic nuclei and galaxy interactions[J]. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 375(3): 1017-1024.
- ARSIOLI B, DEDIN P, 2020. Machine learning applied to multifrequency data in astrophysics: blazar classification[J]. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 498(2): 1750-1764.
- BALDWIN J A, PHILLIPS M M, TERLEVICH R, 1981. Classification parameters for the emission-line spectra of extragalactic objects[J]. Publications of the Astronomical Society of the Pacific, 93(551): 5.
- BERNARDI M, SHETH R K, ANNIS J, et al., 2003. Early-type galaxies in the sloan digital sky survey. iv. colors and chemical evolution[J]. The Astronomical Journal, 125(4): 1882.
- BOLTON A S, SCHLEGEL D J, AUBOURG É, et al., 2012. Spectral classification and redshift measurement for the sdss-iii baryon oscillation spectroscopic survey[J]. The Astronomical Journal, 144(5): 144.
- BREIMAN L, 2001. Random forests[J]. Machine learning, 45: 5-32.
- BRICE M J, ANDONIE R, 2019. Automated morgan keenan classification of observed stellar spectra collected by the sloan digital sky survey using a single classifier[J]. The Astronomical Journal, 158(5): 188.
- BRINCHMANN J, CHARLOT S, WHITE S D, et al., 2004. The physical properties of star-forming galaxies in the low-redshift universe[J]. Monthly notices of the royal astronomical society, 351(4): 1151-1179.
- BRUZUAL G, CHARLOT S, 2003. Stellar population synthesis at the resolution of 2003[J]. Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 344(4): 1000-1028.

- BUSCA N, BALLAND C, 2018. Quasarnet: Human-level spectral classification and redshifting with deep neural networks[A]. arXiv: [1808.09955](https://arxiv.org/abs/1808.09955).
- CHANDRA V, HWANG H C, ZAKAMSKA N L, et al., 2020. Computational tools for the spectroscopic analysis of white dwarfs[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 497(3): 2688-2698.
- CHATTOPADHYAY T, FRAIX-BURNET D, MONDAL S, 2019. Unsupervised classification of galaxies. i. independent component analysis feature selection[J]. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 131(1004): 108010.
- CHEN Y C, 2021. Classifying seyfert galaxies with deep learning[J]. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 256(2): 34.
- CHENG T Y, COOKE R J, RUDIE G, 2022. Harvesting the $\text{Ly } \alpha$ forest with convolutional neural networks[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 517(1): 755-775.
- COLDWELL G V, PEREYRA L, ALONSO S, et al., 2017. Occurrence of liner galaxies within the galaxy group environment[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 467(3): 3338-3346.
- CUI X Q, ZHAO Y H, CHU Y Q, et al., 2012. The large sky area multi-object fiber spectroscopic telescope (lamost)[J]. *Research in Astronomy and Astrophysics*, 12(9): 1197.
- DANIEL S F, CONNOLLY A, SCHNEIDER J, et al., 2011. Classification of stellar spectra with local linear embedding[J]. *The Astronomical Journal*, 142(6): 203.
- DE SOUZA R, DANTAS M, COSTA-DUARTE M, et al., 2017. A probabilistic approach to emission-line galaxy classification[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 472(3): 2808-2822.
- DRAINE B T, 2010. *Physics of the interstellar and intergalactic medium: Vol. 19*[M]. Princeton University Press.
- DUCHI J, HAZAN E, SINGER Y, 2011. Adaptive subgradient methods for online learning and stochastic optimization[J]. *Journal of Machine Learning Research*, 12(Jul): 2121-2159.
- FERNANDES R C, STASIŃSKA G, SCHLICKMANN M, et al., 2010. Alternative diagnostic diagrams and the ‘forgotten’ population of weak line galaxies in the sdss[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 403(2): 1036-1053.
- FERNANDES R C, MATEUS A, SODRÉ L, et al., 2005. Semi-empirical analysis of sloan digital sky survey galaxies–i. spectral synthesis method[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 358(2): 363-378.
- FIorentin P R, BAILER-JONES C, LEE Y S, et al., 2007. Estimation of stellar atmospheric parameters from sdss/segue spectra[J]. *Astronomy & Astrophysics*, 467(3): 1373-1387.
- FISHER R A, 1936. The use of multiple measurements in taxonomic problems[J]. *Annals of eugenics*, 7(2): 179-188.
- FRAIX-BURNET D, BOUYEYRON C, MOULTAKA J, 2021. Unsupervised classification of sdss galaxy spectra[J]. *Astronomy & Astrophysics*, 649: A53.
- FUQIANG C, YAN W, YUDE B, et al., 2014. Spectral classification using restricted boltzmann machine[J]. *Publications of the Astronomical Society of Australia*, 31: e001.
- GAL Y, GHAHRAMANI Z, 2016. Dropout as a bayesian approximation: Representing model uncertainty in deep learning[C]//international conference on machine learning. PMLR: 1050-1059.
- GILDA S, GE J, et al., 2018. Parameterization of marvels spectra using deep learning[C]//American Astronomical Society Meeting Abstracts: Vol. 231. 349-02.

- GOODFELLOW I, BENGIO Y, COURVILLE A, 2016. Deep learning[M]. MIT press.
- GUIGLION G, MATIJEVIĆ G, QUEIROZ A B D A, et al., 2020. The radial velocity experiment (rave): Parameterisation of rave spectra based on convolutional neural networks[J]. *Astronomy & Astrophysics*, 644: A168.
- HEARST M A, DUMAIS S T, OSUNA E, et al., 1998. Support vector machines[J]. *IEEE Intelligent Systems and their applications*, 13(4): 18-28.
- HECKMAN T, 1980. An optical and radio survey of the nuclei of bright galaxies-activity in normal galactic nuclei[J]. *Astronomy and Astrophysics*, vol. 87, no. 1-2, July 1980, p. 152-164. Research supported by the University of Washington., 87: 152-164.
- HELOU G, MADORE B, SCHMITZ M, et al., 1991. The nasa/ipac extragalactic database[J]. *Databases & On-Line Data in Astronomy*: 89-106.
- HINTON G E, SRIVASTAVA N, KRIZHEVSKY A, et al., 2012. Improving neural networks by preventing co-adaptation of feature detectors[A]. arXiv: [1207.0580](https://arxiv.org/abs/1207.0580).
- HO L C, 2008. Nuclear activity in nearby galaxies[J]. *Annu. Rev. Astron. Astrophys.*, 46: 475-539.
- HOU W, LUO A L, DONG Y Q, et al., 2023. Spectroscopically identified cataclysmic variables from the lamost survey. ii. period estimates[J]. *The Astronomical Journal*, 165(4): 148.
- KAUFFMANN G, HECKMAN T M, TREMONTI C, et al., 2003a. The host galaxies of active galactic nuclei[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 346(4): 1055-1077.
- KAUFFMANN G, HECKMAN T M, WHITE S D, et al., 2003b. Stellar masses and star formation histories for 105 galaxies from the sloan digital sky survey[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 341(1): 33-53.
- KENNICUTT JR R C, 1992a. The integrated spectra of nearby galaxies-general properties and emission-line spectra[J]. *Astrophysical Journal, Part 1 (ISSN 0004-637X)*, vol. 388, April 1, 1992, p. 310-327., 388: 310-327.
- KENNICUTT JR R C, 1992b. A spectrophotometric atlas of galaxies[J]. *Astrophysical Journal Supplement Series (ISSN 0067-0049)*, vol. 79, no. 2, April 1992, p. 255-284., 79: 255-284.
- KEWLEY L J, ELLISON S L, 2008. Metallicity calibrations and the mass-metallicity relation for star-forming galaxies[J]. *The Astrophysical Journal*, 681(2): 1183.
- KEWLEY L J, DOPITA M, SUTHERLAND R, et al., 2001. Theoretical modeling of starburst galaxies[J]. *The Astrophysical Journal*, 556(1): 121.
- KEWLEY L J, GROVES B, KAUFFMANN G, et al., 2006. The host galaxies and classification of active galactic nuclei[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 372(3): 961-976.
- KINGMA D P, BA J, 2017. Adam: A method for stochastic optimization[A]. arXiv: [1412.6980](https://arxiv.org/abs/1412.6980).
- KONG X, LUO A L, LI X R, et al., 2018. Spectral feature extraction for db white dwarfs through machine learning applied to new discoveries in the sdss dr12 and dr14[J]. *Publications of the Astronomical Society of the Pacific*, 130(990): 084203.
- KOU S, CHEN X, LIU X, 2020. A new method to classify type iip/iil supernovae based on their spectra[J]. *The Astrophysical Journal*, 890(2): 177.
- KRIZHEVSKY A, SUTSKEVER I, HINTON G E, 2017. Imagenet classification with deep convolutional neural networks[J]. *Communications of the ACM*, 60(6): 84-90.
- KYRITSIS E, MARAVELIAS G, ZEAS A, et al., 2022. A new automated tool for the spectral classification of ob stars[J]. *Astronomy & Astrophysics*, 657: A62.
- LI X R, LIN Y T, QIU K B, 2019. Stellar spectral classification and feature evaluation based on a random forest[J]. *Research in Astronomy and Astrophysics*, 19(8): 111.

- LI X, WANG Z, ZENG S, et al., 2022. Estimation of stellar atmospheric parameters from lamost dr8 low-resolution spectra with $20 \leq s/n < 30$ [J]. *Research in Astronomy and Astrophysics*, 22(6): 065018.
- LIU C, CUI W Y, ZHANG B, et al., 2015. Spectral classification of stars based on lamost spectra [J]. *Research in Astronomy and Astrophysics*, 15(8): 1137.
- LIU W, ZHU M, DAI C, et al., 2019. Classification of large-scale stellar spectra based on deep convolutional neural network[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 483(4): 4774-4783.
- MARASTON C, STRÖMBÄCK G, 2011. Stellar population models at high spectral resolution[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 418(4): 2785-2811.
- MARASTON C, STRÖMBÄCK G, THOMAS D, et al., 2009. Modelling the colour evolution of luminous red galaxies—improvements with empirical stellar spectra[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society: Letters*, 394(1): L107-L111.
- MARASTON C, PFORR J, HENRIQUES B M, et al., 2013. Stellar masses of sdss-iii/boss galaxies at $z < 0.5$ and constraints to galaxy formation models[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 435(4): 2764-2792.
- MARCHETTI A, GRANETT B, GUZZO L, et al., 2013. The vimos public extragalactic redshift survey (vipers): spectral classification through principal component analysis[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 428(2): 1424-1437.
- MCINNES L, HEALY J, MELVILLE J, 2018. Umap: Uniform manifold approximation and projection for dimension reduction[A].
- MUTHUKRISHNA D, PARKINSON D, TUCKER B E, 2019. Dash: Deep learning for the automated spectral classification of supernovae and their hosts[J]. *The Astrophysical Journal*, 885(1): 85.
- ORTIZ M, GALAZ G, 2009. Spectral classification of galaxies using the principal component analysis: a web based tool[A].
- PARKS D, PROCHASKA J X, DONG S, et al., 2018. Deep learning of quasar spectra to discover and characterize damped $\text{Ly}\alpha$ systems[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 476(1): 1151-1168.
- PAT F, JUNEAU S, BÖHM V, et al., 2022. Reconstructing and classifying sdss dr16 galaxy spectra with machine-learning and dimensionality reduction algorithms[A]. arXiv: [2211.11783](https://arxiv.org/abs/2211.11783).
- PENG N, ZHANG Y, ZHAO Y, 2013. A svm-knn method for quasar-star classification[J]. *Science China Physics, Mechanics and Astronomy*, 56: 1227-1234.
- PERUZZI T, PASQUATO M, CIROI S, et al., 2021. Interpreting automatic agn classifiers with saliency maps[J]. *Astronomy & Astrophysics*, 652: A19.
- PORTILLO S K, PAREJKO J K, VERGARA J R, et al., 2020. Dimensionality reduction of sdss spectra with variational autoencoders[J]. *The Astronomical Journal*, 160(1): 45.
- RASTEGARNIA F, MIRTORABI M, MORADI R, et al., 2022. Deep learning in searching the spectroscopic redshift of quasars[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 511(3): 4490-4499.
- REIS I, POZNANSKI D, BARON D, et al., 2018. Detecting outliers and learning complex structures with large spectroscopic surveys—a case study with apogee stars[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 476(2): 2117-2136.

- RODRIGUEZ-MERINO L H, CHAVEZ M, BERTONE E, et al., 2005. Uvblue: a new high-resolution theoretical library of ultraviolet stellar spectra[J]. *The Astrophysical Journal*, 626(1): 411.
- SÁNCHEZ ALMEIDA J, AGUERRI J, MUÑOZ-TUÑÓN C, et al., 2010. Automatic unsupervised spectral classification of all sdss/dr7 galaxies[C]//ADA 6-Sixth Conference on Astronomical Data Analysis. 3.
- SANCHEZ-BLAZQUEZ P, PELETIER R, JIMENEZ-VICENTE J, et al., 2006. Medium-resolution isaac newton telescope library of empirical spectra[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 371(2): 703-718.
- SELVARAJU R R, COGSWELL M, DAS A, et al., 2017. Grad-cam: Visual explanations from deep networks via gradient-based localization[C]//Proceedings of the IEEE international conference on computer vision. 618-626.
- SHARMA K, KEMBHAVI A, KEMBHAVI A, et al., 2020a. Application of convolutional neural networks for stellar spectral classification[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 491(2): 2280-2300.
- SHARMA K, SINGH H P, GUPTA R, et al., 2020b. Stellar spectral interpolation using machine learning[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 496(4): 5002-5016.
- SHI F, LIU Y Y, SUN G L, et al., 2015. A support vector machine for spectral classification of emission-line galaxies from the sloan digital sky survey[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 453(1): 122-127.
- SOLARZ A, POLLO A, TAKEUCHI T, et al., 2012. Star-galaxy separation in the akari nep deep field[J]. *Astronomy & Astrophysics*, 541: A50.
- STAMPOULIS V, VAN DYK D A, KASHYAP V L, et al., 2019. Multidimensional data-driven classification of emission-line galaxies[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 485(1): 1085-1102.
- TAO Y, ZHANG Y, CUI C, et al., 2020. Automated spectral classification of galaxies using machine learning approach on alibaba cloud ai platform (pai)[J]. *Astronomical Data Analysis Software and Systems XXVII*, 522: 421.
- THOMAS D, STEELE O, MARASTON C, et al., 2013. Stellar velocity dispersions and emission line properties of sdss-iii/boss galaxies[J]. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 431(2): 1383-1397.
- TREMONTI C A, HECKMAN T M, KAUFFMANN G, et al., 2004. The origin of the mass-metallicity relation: insights from 53,000 star-forming galaxies in the sloan digital sky survey [J]. *The Astrophysical Journal*, 613(2): 898.
- UR RAHMAN S F, IQBAL M J, 2019. Accelerated expansion of the universe and chasing photons from the cmb to study the late time integrated sachs-wolfe effect over different redshift ranges[J]. *The European Physical Journal Plus*, 134(6): 302.
- VEILLEUX S, OSTERBROCK D E, 1987. Spectral classification of emission-line galaxies[J]. *Astrophysical Journal Supplement Series (ISSN 0067-0049)*, vol. 63, Feb. 1987, p. 295-310. NSERC-supported research., 63: 295-310.
- WANG L L, SHEN S Y, LUO A L, et al., 2021. Stellar populations of galaxies in the lamost spectral survey[J]. *The Astrophysical Journal Supplement Series*, 258(1): 9.
- WANG L L, ZHENG W Y, RONG L X, et al., 2023. Spectral classification of lamost emission line galaxies based on machine learning methods[J]. *New Astronomy*, 99: 101965.

- WANG N N, QIU B, MA J, et al., 2019. Fast classification method of star spectra data based on convolutional neural network[J]. *Spectroscopy and Spectral Analysis*, 39(10): 3297-3301.
- WANG R, LUO A L, CHEN J J, et al., 2020. Sscanet: Stellar parameters and chemical abundances network for lamost-ii medium resolution survey[J]. *The Astrophysical Journal*, 891(1): 23.
- WEN X Q, YANG J M, 2021. Classification of star/galaxy/qso and star spectral types from lamost data release 5 with machine learning approaches[J]. *Chinese Journal of Physics*, 69: 303-311.
- WENGER M, OCHSENBEIN F, EGRET D, et al., 2000. The simbad astronomical database-the cds reference database for astronomical objects[J]. *Astronomy and Astrophysics Supplement Series*, 143(1): 9-22.
- WU T, BU Y, XIE J, et al., 2023. Estimating stellar parameters and identifying very metal-poor stars using convolutional neural networks for low-resolution spectra (r 200)[A]. arXiv: [2302.11198](https://arxiv.org/abs/2302.11198).
- YIP C W, CONNOLLY A, SZALAY A, et al., 2004. Distributions of galaxy spectral types in the sloan digital sky survey[J]. *The Astronomical Journal*, 128(2): 585.
- YUDE B, JINGCHANG P, BIN J, et al., 2013. Spectral feature extraction based on the dcpca method [J]. *Publications of the Astronomical Society of Australia*, 30: e24.
- ZHANG K, SCHLEGEL D J, ANDREWS B H, et al., 2019. Machine-learning classifiers for intermediate redshift emission-line galaxies[J]. *The Astrophysical Journal*, 883(1): 63.
- ZHANG Y X, ZHOU X L, ZHAO Y H, et al., 2013. Statistical study of 2xmmi-dr3/sdss-dr8 cross-correlation sample[J]. *The Astronomical Journal*, 145(2): 42.
- ZHAO G, ZHAO Y H, CHU Y Q, et al., 2012. Lamost spectral survey—an overview[J]. *Research in Astronomy and Astrophysics*, 12(7): 723.
- ZHAO Z, WEI J, JIANG B, 2022. Automated stellar spectra classification with ensemble convolutional neural network[J]. *Advances in Astronomy*, 2022: 1-7.

致 谢

在有小小收获或感到受挫的日子，我曾为这篇致谢打过无数次腹稿。真正写到这里时却仍觉得千头万绪，不知怎样才能用文字充分表达自己未能言表的深深谢意。

首先，衷心感谢我的学位课题指导老师陶一寒助理研究员。陶老师在科研和生活中给予了我无处不在的关心、指导和帮助，总是以独到的见解和专业的知识对我循循引导。有时我小小的进步，如同树叶一时被风托起，在柏油马路上打了几个滚，发出一阵细微的动静，陶老师却总是给予我热烈的赞许。在我因为一些小错误走了很多弯路，不知怎样“狡辩”时，她也只是轻轻说一句“你又哪里粗心啦”。即便有时被焦虑的我打乱工作节奏，她也从来都是温柔耐心地回答我的每一个问题。有时我能力不足或运气太差，生活实在不尽如人意，陶老师的鼓励和肯定就总是我的自信来源。诸如这样的小事实在太多。能有陶老师作为这段学习生涯的小导师，已经是几年来最幸运的事情。

感谢我的导师樊东卫副研究员。樊老师技术精湛，为人谦逊低调，个人魅力十足。贯穿课题始终的文书材料、我拿捏不准的邮件措辞、每次答辩和讲演的稿件，小至标点符号、大至段落立意，樊老师都不厌其烦地帮我反复修改过。几年来我在专业上收获良多，个人的成长更是珍贵，许多为人处世的道理樊老师都因时制宜地传授给我，他对我的教诲不仅是“术”的精进，更在于“道”的启发。

感谢 China-VO 团组各位老师的悉心教导。崔辰州研究员以严谨求实的治学态度、开放包容的学术精神，在学习中既为我们提供了充分的专业指导，更赋予了我们充分的自由，营造了理想的学习环境。每次面临选择时，崔老师都设身处地地为我分析利弊、指点迷津。米琳莹老师热情大方、在她身边总能感受到积极向上的氛围，对待学生也关怀备至，总是以严格而不失温柔的态度敦促我们的学业。李长华老师和许允飞老师在学习中给予了我许多指导，尤其是为我的学位论文提出许多建设性的建议，极大提高了这篇论文的质量。感谢王有芬老师、杨丝丝老师、李珊珊老师、杨涵溪老师、韩军老师、何勃亮老师在生活中的关心和学业上的帮助。对诸位老师的感谢穷千词而不能绘其一。

想要感谢的老师还有很多。感谢张彦霞研究员在学位课题研究过程中给予我启明灯式的引导，每当我遇到难以解决的困难，向张老师请教后就都感到云开见日。张老师的专业严谨、鞭辟入里，她的人文关怀又让人觉得温暖细腻。每次老师与我的讨论和对我的论文修订，都表现出超乎预期的耐心，令我感动之余，更深感到自己的不足。在课题进展的各个阶段，华南师范大学李乡儒教授、LAMOST 宋轶晗工程师、河北师范大学孔民芝教授和德州学院王丽丽副教授等都给予了我无私的帮助与指导。感谢李楠研究员在引力透镜公众科学项目期间的耐心指导。感谢太阳磁活动研究团组的汪景琇院士和周桂萍研究员在生活中给予的关心和照顾。感谢教育处马怀宇老师、李响老师和梁艳春老师在学期间的

支持和关心。

感谢相伴过一程的朋友，还记得在雁栖湖畔数星星，倾听晚风的声音和假装听见宇宙轮盘转动的沉沉轰鸣。欲买桂花同载酒，终不似，少年游。感谢王林红、朱芯雨、李卓翰、孙得志、康子涵、冯林竞，我们一起干饭、运动（打游戏）、推心置腹，让我的这段旅程格外精彩。感谢郭懿琳师姐总是热情温和、给予我最贴心和最实用的建议。感谢同门的伙伴杨嘉宁、张琦乾、张震、马鹏辉、邵务俊、朱珈莹、左肖雄、陈朗、汤超，我们共同分享课题的困扰，也共同庆祝成功的喜悦。感谢挚友于濯、牛博阳、郭苗、郭小芳、郭畅妮在我人生各个阶段的支持和陪伴，与你们的友谊是我心中的一片净土。感谢周炫锦、科技园的鸽子和下班路上的小猫，耐心倾听了我的许多烦恼。还有许多没在此具名的好友，祝他日凌云，万事胜意。

灿灿萱草花，罗生北堂下。感谢父母一直在用自己的方式全心全意地爱我、尊重我和支持我在成长路上的每一个选择，他们从不要求我必须优秀，也很少阻拦我的任性。感谢我的两位哥哥在我需要倾诉时总是认真倾听和耐心安慰，给我犯错、失败和大不了从头再来的勇气，始终是我的避风港。

我想我应该还有许多需要感谢的人和事。毕业来得太晚，又来得匆匆，时间厚重又单薄如纸，我来不及一一道谢。往事暗沉不可追，来日之路光明灿烂。感谢星系和宇宙，感谢生命中所有来去，感谢在纷繁中缓慢却坚定的自己，感谢科学，也感谢文学。

2024年6月

作者简介及攻读学位期间发表的学术论文与其他相关学术成果

作者简介：

2016年09月——2020年06月，在贵州大学大数据与信息工程学院获得学士学位。

2020年09月——2024年06月，在中国科学院国家天文台攻读硕士学位。

已发表（或正式接受）的学术论文：

1. **Ying Wu**, Yihan Tao*, Dongwei Fan, Chenzhou Cui, Yanxia Zhang, Galaxy spectral classification and feature analysis based on convolutional neural network, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, Volume 527, Issue 1, January 2024, Pages 1163–1176, <https://doi.org/10.1093/mnras/stad2913>

参加的研究项目及获奖情况：

参加的研究项目：

1. 国家自然科学基金，青年科学基金项目，11803055，基于深度学习等机器学习算法的星系光谱自动分类方法研究，2019.01-2021.12，结题，参与
2. 国家重点研发计划，青年科学家项目，2022YFF0712400，多模态天文科学数据知识关联推荐系统，2022.11-2025.10，在研，参与

获奖情况：

1. 中国科学院大学 2022 年优秀学生干部
2. 中国科学院大学 2021 年优秀学生干部
3. 中国科学院大学 2021 年三好学生

