

Métodos numéricos para la Ciencia e Ingeniería

Tarea 11: Ajuste de Curvas Bayesiano

Felipe Toledo B.

December 14, 2015

1 Introducción

En el presente trabajo se estudian modelos orientados a describir una línea de absorción de una observación espectroscópica, presentada en la Figura 1.

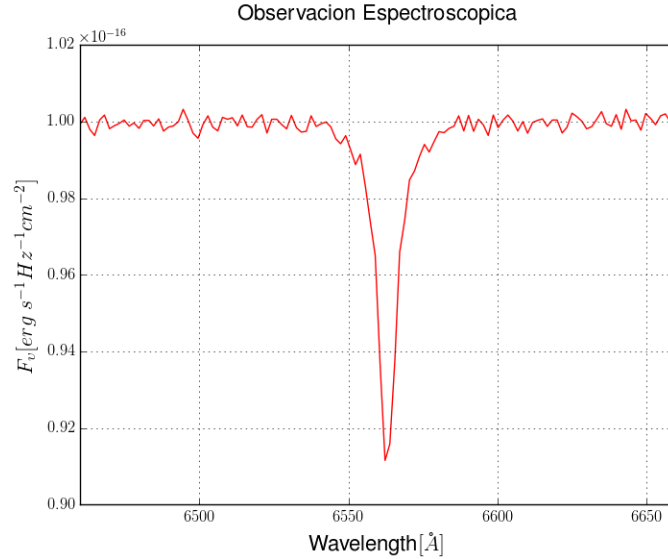


Figura 1: Datos originales observados. El nivel del continuo y la longitud de onda central de la línea de absorción son conocidos, con valores $1 \cdot 10^{-16} [\frac{erg}{s Hz cm^{-2}}]$ y $6563[\text{\AA}]$ respectivamente.

Para describir la línea se probarán dos modelos:

1. Línea Gaussiana Simple: A partir de la curva se observa que puede resultar conveniente describirla asumiendo que es de forma Gaussiana. En la ecuación (1) se explicita el modelo propuesto.

$$M_1(\lambda; A, b) = C_0 - Ae^{\frac{-(\lambda - \lambda_0)^2}{2b^2}} \quad (1)$$

Éste posee dos parámetros libres, A y b . El valor de λ_0 y C_0 se asume conocido, donde λ_0 es la longitud de onda central de la línea de absorción y C_0 corresponde al nivel del continuo.

2. Línea Gaussiana Doble: El modelo está explicitado en la ecuación (2). Se tienen los mismos parámetros conocidos λ_0 y C_0 , pero en éste hay cuatro parámetros libres: A_1 , A_2 , b_1 , b_2 .

$$M_2(\lambda; A_1, A_2, b_1, b_2) = C_0 - A_1 e^{-\frac{(\lambda - \lambda_0)^2}{2b_1^2}} - A_2 e^{-\frac{(\lambda - \lambda_0)^2}{2b_2^2}} \quad (2)$$

Los objetivos son estimar el valor de cada parámetro con un intervalo de credibilidad del 68%, usando métodos Bayesianos, y luego utilizar métodos de selección Bayesiana de modelos para decidir cuál de los dos propuestos representa mejor los datos.

2 Metodología

Para obtener una estimación de los parámetros Θ para cada modelo M , se utiliza la regla de Bayes (3) y los datos empíricos $\mathbf{x} = (\lambda, \mathbf{F})$.

$$P(\Theta|\mathbf{x}, M) = \frac{P(\mathbf{x}|\Theta, M)P(\Theta|M)}{P(\mathbf{x}|M)} \quad (3)$$

El término $P(\Theta|\mathbf{x}, M)$ indica la probabilidad a posteriori de que los parámetros representen a los datos \mathbf{x} para el modelo M . Se calcula utilizando la distribución de probabilidad de la derecha, donde $P(\mathbf{x}|\Theta, M)$ es la verosimilitud, que mide la cercanía de los datos respecto a $M(\Theta)$. La probabilidad $P(\Theta|M)$ corresponde a la distribución a priori de los parámetros, la que se fija arbitrariamente. Finalmente, el término $P(\mathbf{x}|M)$ es difícil de calcular por lo que se utiliza como constante de normalización, de forma que (3) queda como (4).

$$P(\Theta|\mathbf{x}, M) = K \cdot P(\mathbf{x}|\Theta, M)P(\Theta|M) \quad (4)$$

Para todos los casos se utiliza la función de verosimilitud (5), donde M representa el modelo a evaluar. El valor de σ corresponde al error asociado a cada punto, el cual se estima usando la desviación estándar de los puntos lejanos a la línea de absorción sobre el continuo (\approx error de medición).

$$P(\mathbf{x}|\Theta, M) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{N/2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^N (F_i - M(\lambda_i, \Theta))^2} \quad (5)$$

La probabilidad a priori de los parámetros de cada distribución dependerá de cada modelo y se detalla en las secciones 2.1 y 2.2.

2.1 Parámetros modelo 1: Línea Gaussiana Simple

El modelo descrito por (1) posee dos parámetros libres, A y b . Para utilizar técnicas Bayesianas de estimación es necesario definir una probabilidad a priori para el valor de cada parámetro. Dado que ambos valores están asociados a datos de un fenómeno continuo (mediciones físicas), serán modelados utilizando funciones Gaussianas.

2.1.1 Parámetro A

A priori se decide que la distribución de A es:

$$P(A) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_A} e^{-\frac{(A - \bar{A})^2}{2\sigma_A^2}} \quad (6)$$

Para determinar el valor de cada parámetro se debe tener en cuenta que A representa la amplitud en Flujo de la curva Gaussiana del modelo. Para determinarlos se presumirá que las mediciones no están muy alejadas de los valores medios esperados. Con todo esto, se decide lo siguiente:

- \bar{A} será la amplitud máxima medida respecto al continuo.
- σ_A corresponderá al error de medición de Flujo. Se utilizará el mismo valor que el σ de la verosimilitud, ya que corresponde al mismo fenómeno.

2.1.2 Parámetro b

Análogamente, la distribución escogida para b es:

$$P(b) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_b} e^{-\frac{(b-\bar{b})^2}{2\sigma_b^2}} \quad (7)$$

- $\bar{b} = 0.8493|\lambda_0 - \lambda(\frac{\bar{A}}{2})|$
- $\sigma_b = \Delta$ Se estima a partir de la resolución en longitud de onda (resolución horizontal) del modelo.

El valor de \bar{b} se determina usando la aproximación *Full Width at Half Maximum* (FWHM), donde $\lambda(\frac{\bar{A}}{2})$ es uno de los valores de longitud de onda en que la línea de absorción cae a la mitad en amplitud¹.

2.2 Parámetros modelo 2: Línea Gaussiana Doble

En este caso la distribución de probabilidad de cada parámetro también será Gaussiana y de forma análoga a los de la Sección 2.1. Entonces, en resumen:

Para las variables A_1 y A_2 :

- $\bar{A}_1 = \bar{A}_2 = \frac{\bar{A}}{2}$ La altura media de la línea de absorción debe ser $\approx \bar{A}$ al sumar las exponenciales.
- $\sigma_{A_1} = \sigma_{A_2} = \frac{\sigma_A}{2}$ El error en F recibe el mismo escalamiento que A_1, A_2 .

Y para b_1, b_2 :

- $\bar{b}_1 = \bar{b}_2 = \bar{b}$ El ancho de la curva se mantiene igual.
- $\sigma_{b_1} = \sigma_{b_2} = \sigma_b$ El error proviene del mismo fenómeno (es igual).

3 Implementación y Resultados

Para operar numéricamente con los datos, y evitar *overflows* o divisiones por cero, se escalan los valores del espectro multiplicándolo por $2.5 \cdot 10^{18}$. Esta corrección es considerada e invertida al momento de retornar los valores calculados.

El error de los datos, calculado usando el estimador Gaussiano de varianza² respecto al continuo, es $\sigma^2 = 0.1695$

3.1 Modelo 1: Línea Gaussiana Simple

El valor de los parámetros estimados a priori es:

- $\bar{A} = 8.848 \cdot 10^{-18} [\frac{erg}{s \ Hz \ cm^{-2}}]$
- $\sigma_A = 1.646 \cdot 10^{-19} [\frac{erg}{s \ Hz \ cm^{-2}}]$

¹Se asume que la línea de absorción es aproximadamente simétrica.

²Se calcula usando los datos con $\lambda < 6525[\text{\AA}]$ y $\lambda > 6600[\text{\AA}]$. El estimador usado es $\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^N (F_i - C_0)$.

- $\bar{b} = 4.0[\text{\AA}]$
- $\sigma_b = 1.6[\text{\AA}]$

Tras implementar el algoritmo, se obtienen las distribuciones de probabilidad a posteriori para cada estimador, las cuales pueden observarse en las Figuras 2 y 3. A partir de ellas se determinan los valores óptimos Θ^* , estimados como la esperanza de cada distribución.

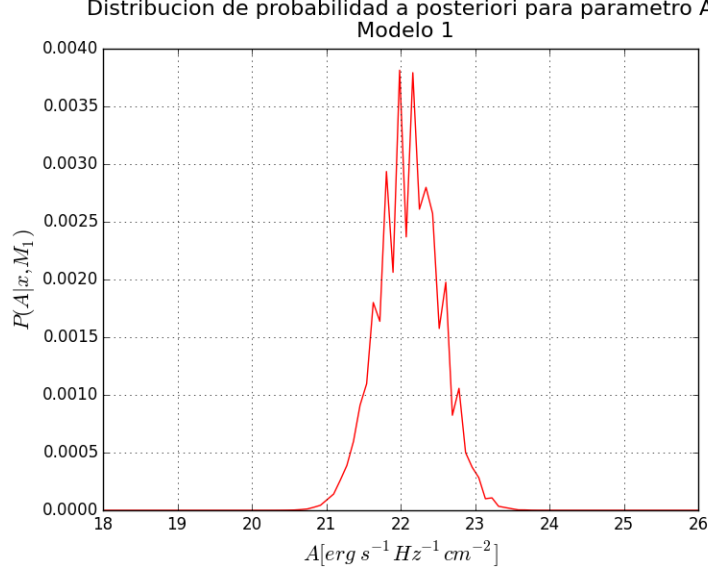


Figura 2: Distribución de probabilidad a posteriori para parámetro A del Modelo 1.

Para los intervalos de confianza se integra cada distribución desde su valor medio hacia afuera simétricamente, deteniéndose en los valores extremos tales que el valor del área sea 0.68. El enfoque es válido debido a que la distribución a posteriori para cada parámetro está asociada a una densidad de probabilidad.

Así, en resumen, se obtiene:

- $A^* = 8.846 \cdot 10^{-18} [\frac{erg}{s Hz cm^{-2}}]$
- Intervalo de confianza de A al 68%: $A \in [8.618, 9.043] \cdot 10^{-18} [\frac{erg}{s Hz cm^{-2}}]$
- $b^* = 4.2782$
- Intervalo de confianza de b al 68%: $b \in [4.109, 4.417] \cdot 10^{-18} [\frac{erg}{s Hz cm^{-2}}]$

Con los valores determinados se obtiene el ajuste de la Figura 4.

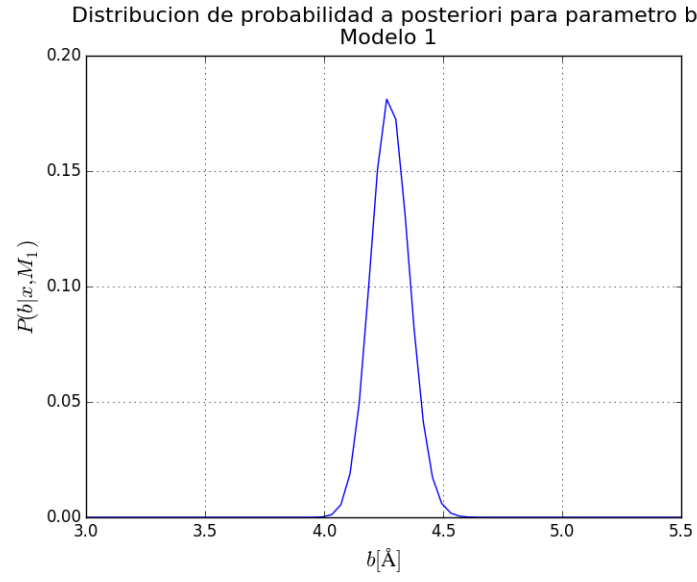


Figura 3: Distribución de probabilidad a posteriori para parámetro b del Modelo 1.

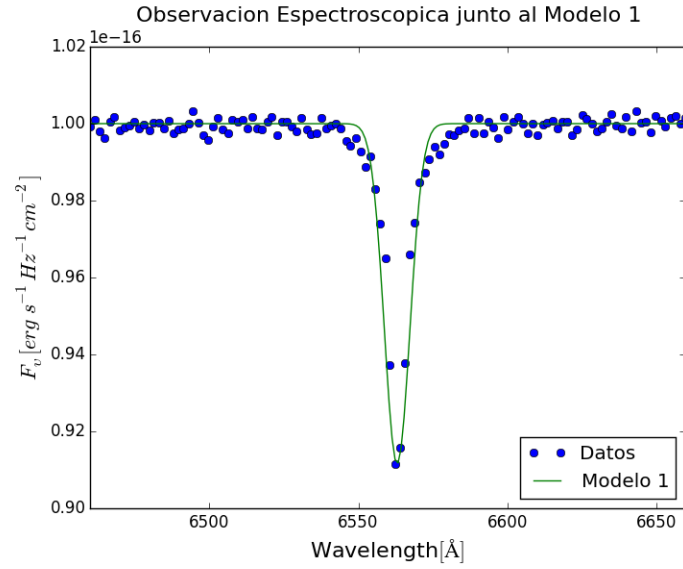


Figura 4: Ajuste bayesiano del Modelo 1 junto a los datos originales.