

Métodos Numéricos para la Ciencia e Ingeniería:

Informe Tarea n° 11

María Constanza Flores V.

14 de diciembre de 2015

1. Introducción

La técnica de la espectroscopía consiste estudiar la radiación emitida por una fuente como función de la longitud de onda. Las características de los espectros observados tales como la intensidad y forma del continuo y de las líneas de emisión y absorción, nos permiten entender las propiedades físicas del ente emisor de la radiación.

El objetivo de la presente tarea es modelar las líneas de absorción y el continuo de un segmento del espectro de una fuente. Para dicha modelación se utilizan técnicas Bayesianas.

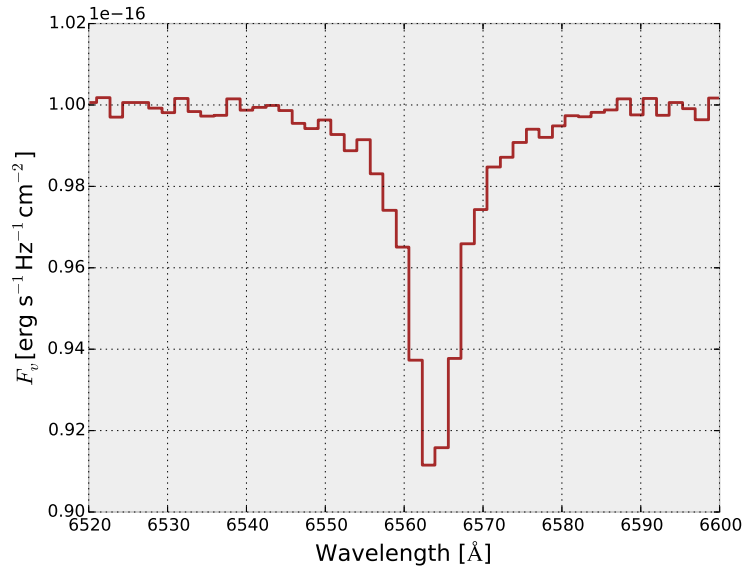


Figura 1: Segmento del espectro, graficado con datos del archivo `espectro.dat`

Para la modelación del espectro se consideran las siguientes simplificaciones:

1. El nivel del continuo es una constante $= 1e-16$.
2. La longitud de onda del centro de la línea es conocido: 6563 \AA .

La Figura 1 muestra un segmento del espectro graficado con los datos dados en el archivo `espectro.dat`. A partir de dichos datos, se puede modelar las características del espectro mencionadas anteriormente. Para esto se proponen dos modelos:

- **Modelo 1:** Una Gaussiana simple. En total se deben modelar 2 parámetros(amplitud y varianza), ya que la longitud de onda central es conocida.
- **Modelo 2:** La suma de dos gaussianas (que correspondería a la suma de las líneas punteadas de la Figura 2) En total se deben modelar 4 parámetros: las dos amplitudes y varianzas de las gaussianas.

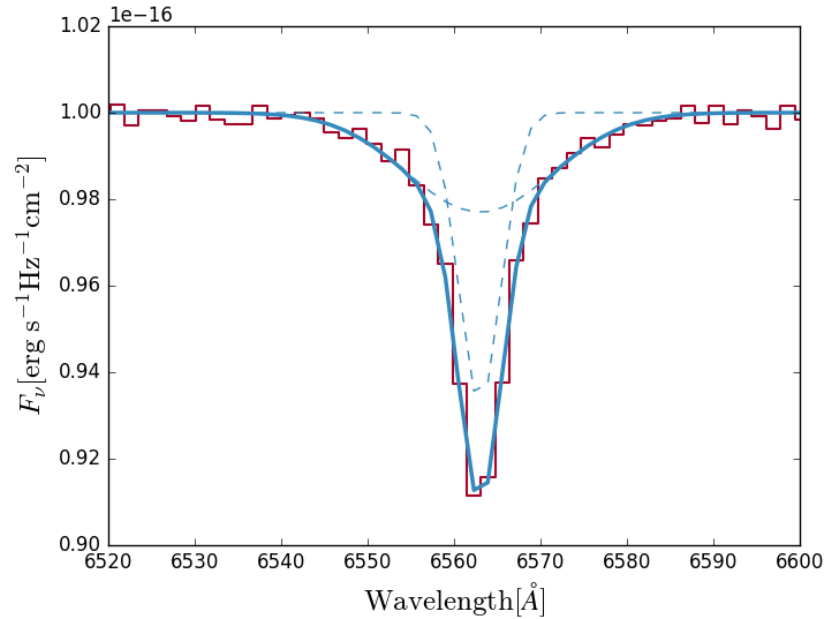


Figura 2: Espectro con los distintos modelos a utilizar. La línea azul representa el fit que debe obtenerse tanto del modelo 1 como del modelo 2, y las líneas punteadas son las gaussianas por separado del modelo 2. Los datos son representados en color café

En particular, se pide estimar, usando métodos Bayesianos, los parámetros (por ejemplo, la esperanza $E[\theta]$ de los parámetros), y sus intervalos de 68 % de credibilidad.

También se busca determinar cuál de los dos modelos anteriores representa mejor a los datos. Para ello se pide utilizar métodos de selección Bayesiana de modelos para decidir cuál de los dos modelos es una mejor representación de los datos.

2. Procedimiento

En estadística Bayesiana, y aplicado para el caso de modelamiento de de funciones, se puede reescribir el teorema de Bayes para los parámetros $\vec{\theta}$ de un modelo M , dado los datos \vec{d} :

$$P(\vec{\theta}|\vec{d}, M) = \frac{P(\vec{d}|\vec{\theta}, M)P(\vec{\theta}|M)}{P(\vec{d}|M)} \quad (1)$$

En donde $P(\vec{d}|\vec{\theta}, M)$ se conoce como la verosimilitud, $P(\vec{\theta}|M)$ es la probabilidad a priori, y el término del denominador se considera como una constante de normalización (dado que no afecta al modelo en sí y es muy complejo de calcular).

Es por ello que se dice en general que $P(\vec{\theta}|\vec{d}, M)$ es *proporcional* a la verosimilitud por la probabilidad a priori.

Para un set de datos $\vec{d} = (\vec{x}, \vec{y})$, sets de parámetros $\vec{\theta}_1 = (A, \sigma)$ y $\vec{\theta}_2 = (A_1, \sigma_1, A_2, \sigma_2)$ asociados a los modelos M_1 y M_2 respectivamente, se puede calcular la probabilidad de obtener la muestra como se mencionó en la ecuación (1).

Para poder realizar lo anterior, es necesario definirse un set de parámetros iniciales como *adivinanza*, los cuales deben intentar ser cercanos a los parámetros del modelo, y con cierta desviación asociada a dichos parámetros.

En general se definen todos los parámetros iniciales (*adivinanzas*) al ver la imagen del enunciado, a excepción de la amplitud de la gaussiana del primer modelo, en donde se define como la diferencia entre el mínimo valor y el máximo valor de F_ν (el cual es simplemente calculado en la consola de ipython).

Los valores utilizados se resumen a continuación:

1. Modelo 1:

- Amplitud: $9.17\text{e-}18 \text{ [erg s}^{-1}\text{Hz}^{-1}\text{cm}^{-2}\text{\AA}]$
- Varianza: 3.7 [\AA]

2. Modelo 2:

- Amplitud 1: $0.06\text{e-}16$ [$\text{erg s}^{-1}\text{Hz}^{-1}\text{cm}^{-2}\text{\AA}$]
- Varianza 1: 1.5 [\AA]
- Amplitud 2: $0.02\text{e-}16$ [$\text{erg s}^{-1}\text{Hz}^{-1}\text{cm}^{-2}\text{\AA}$]
- Varianza 2: 7 [\AA]

Se trabajó con el módulo pymc3, el cual es un algoritmo más sofisticado del algoritmo Hamiltoniano Monte Carlo. Se escogió trabajar con dicho módulo debido a que tiene herramientas útiles para hacer plots de diagnóstico, y además debiese estar más optimizado de lo que sería una un código propio.

3. Resultados

Los parámetros obtenidos para el modelo de una Gaussiana simple son los mostrados a continuación:

Parámetros	Resultados Modelo 1
Amplitud [$\text{erg s}^{-1}\text{Hz}^{-1}\text{cm}^{-2}\text{\AA}$]	$9.13\text{e-}17$
Intervalo de credibilidad al 68 % (Amplitud)	[$0.833\text{e-}16$, $0.992\text{e-}16$]
Varianza [\AA]	3.697
Intervalo de credibilidad al 68 % (Varianza)	[3.208 , 4.186]

Por otro lado, los parámetros obtenidos para el modelo de una Gaussiana doble son los siguientes:

Parámetros	Resultados Modelo 2
Amplitud 1 [$\text{erg s}^{-1}\text{Hz}^{-1}\text{cm}^{-2}\text{\AA}$]	$6.00\text{e-}17$
Intervalo de credibilidad al 68 % (Amplitud 1)	[$5.485\text{e-}17$, $6.523\text{e-}17$]
Varianza 1 [\AA]	7.00
Intervalo de credibilidad al 68 % (Varianza 1)	[-0.199 , 3.024]
Amplitud 2 [$\text{erg s}^{-1}\text{Hz}^{-1}\text{cm}^{-2}\text{\AA}$]	$1.98\text{e-}17$
Intervalo de credibilidad al 68 % (Amplitud 2)	[$0.165\text{e-}17$, $2.501\text{e-}17$]
Varianza 2 [\AA]	7.02
Intervalo de credibilidad al 68 % (Varianza 1)	[5.459 , 8.519]

Con los parámetros anteriormente nombrados se logró obtener los siguientes fits, mostrados en las Figuras 3 y 4:

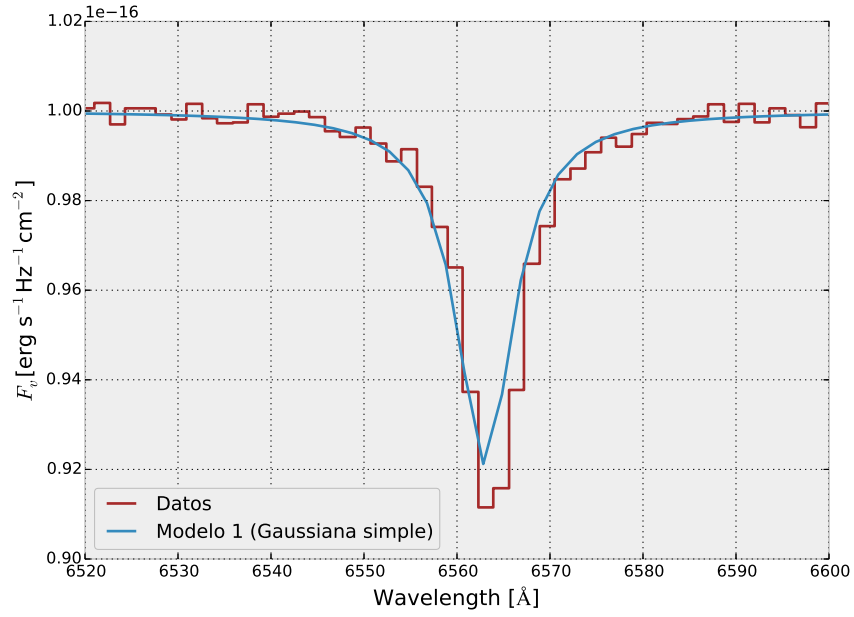


Figura 3: Fit obtenido, modelo 1

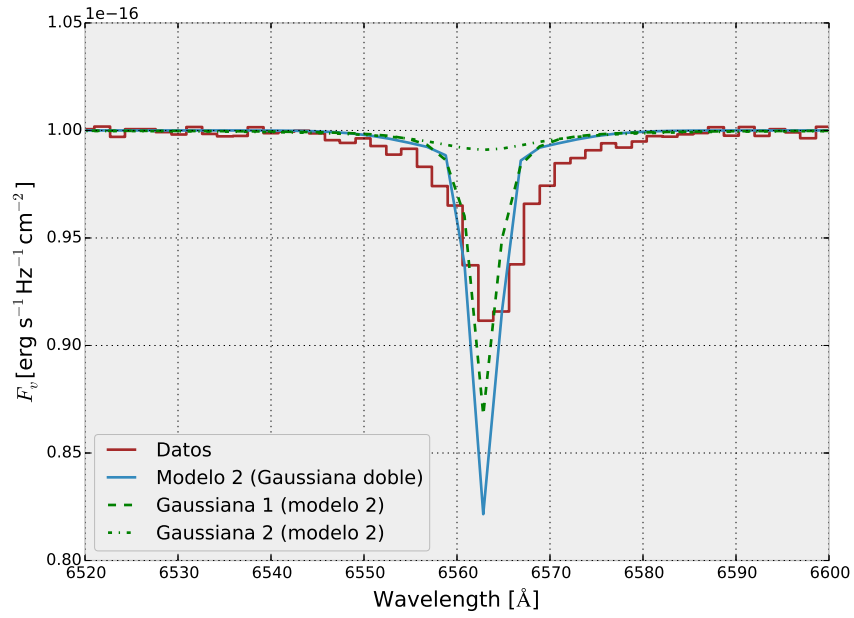


Figura 4: Fit obtenido, modelo 2

Las figuras 5, 6 y 7 muestran las densidades de probabilidad obtenidas para cada uno de los parámetros buscados con los distintos modelos, tambien el valor encontrado y su intervalo de credibilidad al 68 %.

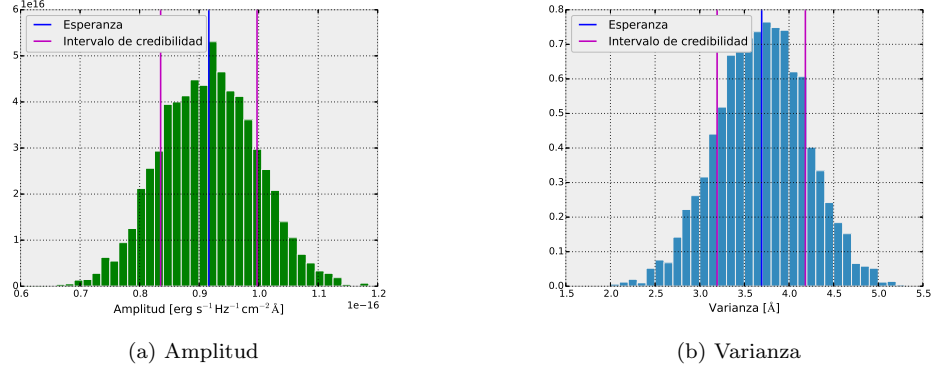


Figura 5: Densidades de probabilidad para los parámetros obtenidos del modelo 1

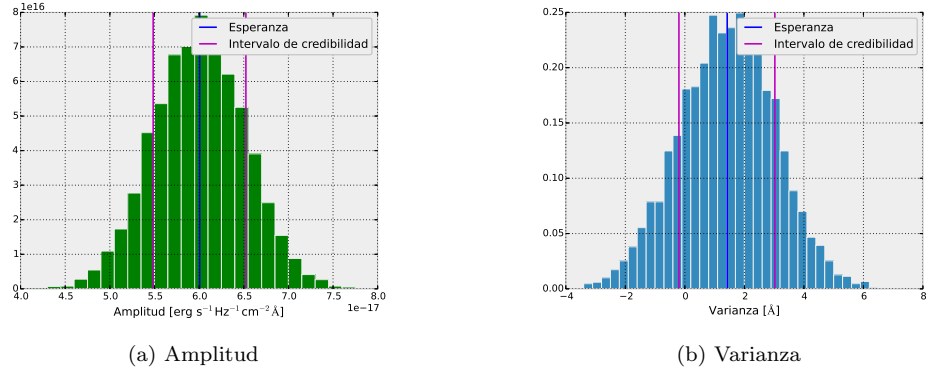


Figura 6: Densidades de probabilidad para los parámetros obtenidos para la gaussiana 1 del modelo 2

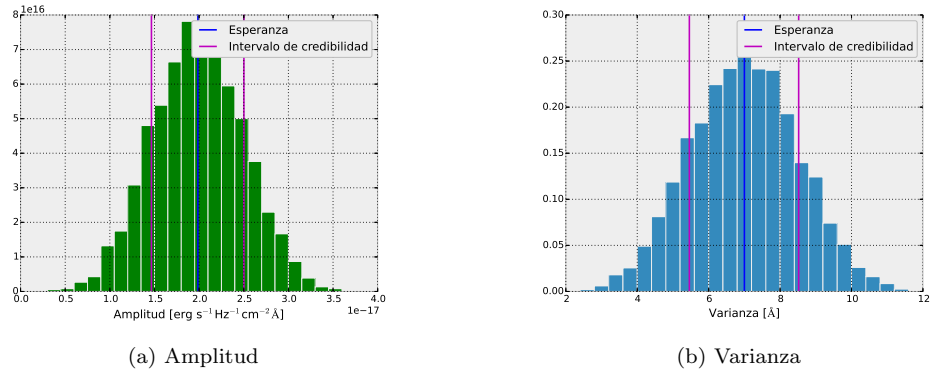


Figura 7: Densidades de probabilidad para los parámetros obtenidos para la gaussiana 2 del modelo 2

4. Conclusiones

Al ver los gráficos obtenidos (Figuras 3 y 4), se puede estimar, a grandes razgos, que los fits obtenidos están relativamente bien. Sin embargo, el fit obtenido para el modelo 2 no fue totalmente satisfactorio, pues se puede ver que se sale de los límites de los datos.

Para llegar a dichos resultados, se pudo notar que el método es bastante sensible a los parámetros iniciales (o *a priori*) que se le da, y también a las varianzas asociadas a dichos parámetros.

Debido a falta de tiempo, no se pudo estimar cuál de los dos modelos era el que mejor ajustaba a los datos.