

# MÉTODOS DE MINIMIZAÇÃO PARA A DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS ESTELARES

CAUP2012-04UNF-BI

Sérgio Filipe Assunção Batista

Orientador: Dr. Sérgio Sousa

Co-orientador: Dr. Nuno C. Santos

# Sumário:

- ▣ Objectivo do Projecto;
- ▣ Introdução e formulação do Problema;
- ▣ Método de Minimização: *Downhill Simplex*;
- ▣ Trabalho futuro e expectativas;

# 1. Objectivo:

A análise do espectro de uma estrela permite determinar os seus parâmetros atmosféricos, tais como:

1.  $T_{\text{eff}}$ ;
2.  $\text{Log}(g)$ ;
3.  $[\text{Fe}/\text{H}]$ ;
4.  $\xi$  (microturbulência);

$(T_{\text{eff}}, \log(g), [\text{Fe}/\text{H}], \xi)$

## 2. Relevância da Determinação destes parâmetros

1. Determinar outros parâmetros indirectos (e.g., idade de uma estrela);
2. Estudar os trajetos evolutivos das estrelas;
3. Estudar o enriquecimento químico da galáxia;
4. Complementar diversos estudos suportados por simulações numéricas;
5. Entre outros;

# 3. Espectroscopia



Fig.1 - Telescópio 3.6-m ESO, localizado em La Silla (Chile). *Fonte:* <http://obswww.unige.ch/Instruments/harps/>

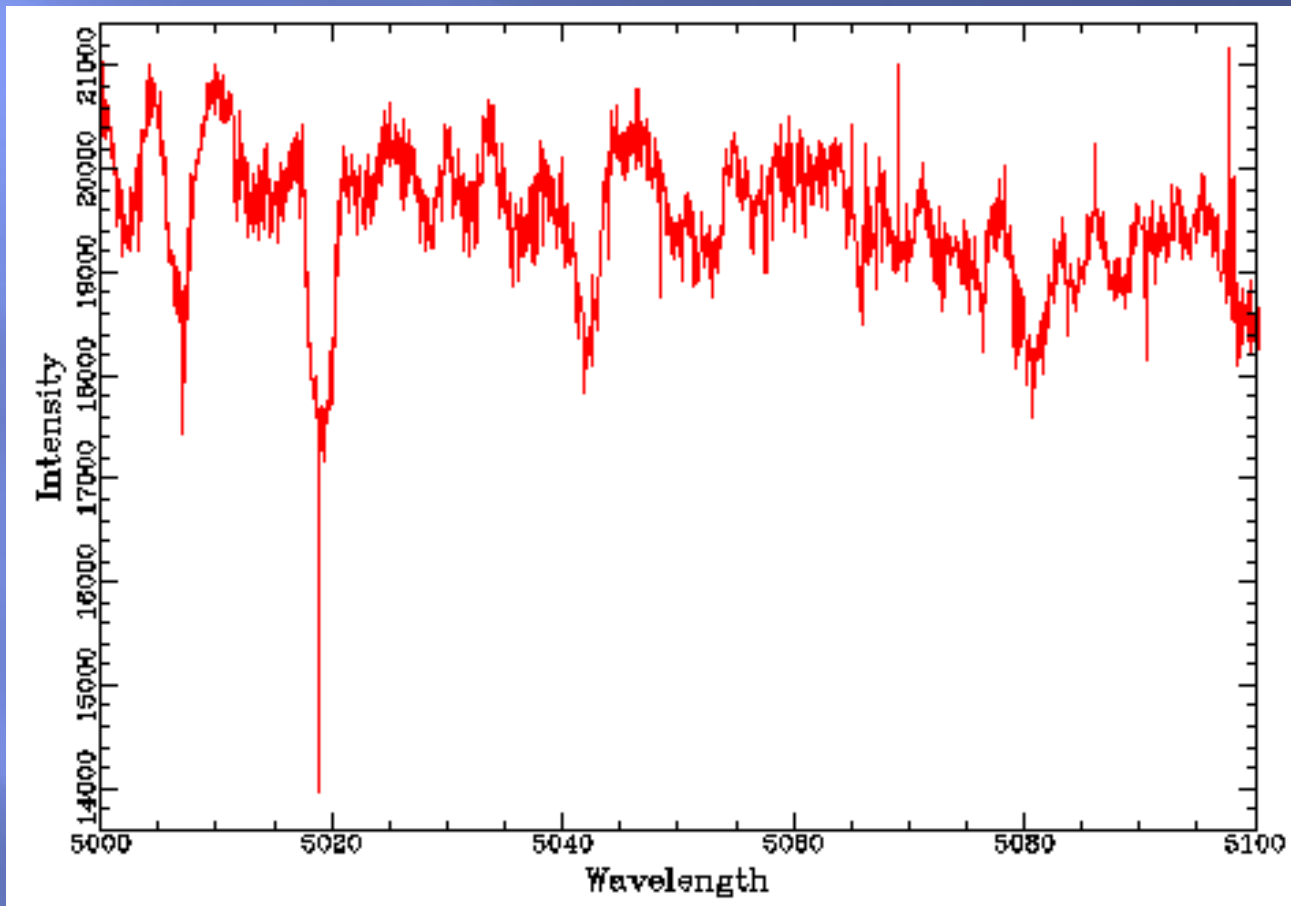


Fig.2 - Espectro da estrela HD224221, obtido a partir do arquivo ÉLODIE, disponível em <http://atlas.obs-hp.fr/elodie/>.

# 4. Procedimento

1. Medir as EW's (Equivalent Widths) através de um programa apropriado (IRAF);
2. Gerar um modelo apropriado de atmosferas estelares (e.g. ATLAS);
3. Converter o modelo num formato que possa ser lido pelo MOOG;
4. Executar o MOOG. Neste passo, o programa irá utilizar um ficheiro gerado em (1), contendo as EW's das linhas de FeI e FeII;
5. Ler o novo valor de [Fe/H] e determinar o valor de  $\chi^2$  (processo iterativo);



# 4. Procedimento

1. Medir as EW's (Equivalent Widths) através de um programa apropriado (IRAF);
2. Gerar um modelo apropriado de atmosferas estelares (e.g. ATLAS);
3. Converter o modelo num formato que possa ser lido pelo MOOG;
4. Executar o MOOG. Neste passo, o programa irá utilizar um ficheiro gerado em (1), contendo as EW's das linhas de FeI e FeII;
5. Ler o novo valor de [Fe/H] e determinar o valor de  $\chi^2$  (processo iterativo);



# 4. Procedimento

1. Medir as EW's (Equivalent Widths) através de um programa apropriado (IRAF);
2. Gerar um modelo apropriado de atmosferas estelares (e.g. ATLAS);
3. Converter o modelo num formato que possa ser lido pelo MOOG;
4. Executar o MOOG. Neste passo, o programa irá utilizar um ficheiro gerado em (1), contendo as EW's das linhas de FeI e FeII;
5. Ler o novo valor de [Fe/H] e determinar o valor de  $\chi^2$  (processo iterativo);

# MOOG

- Ajuda a determinar a composição química de estrelas;

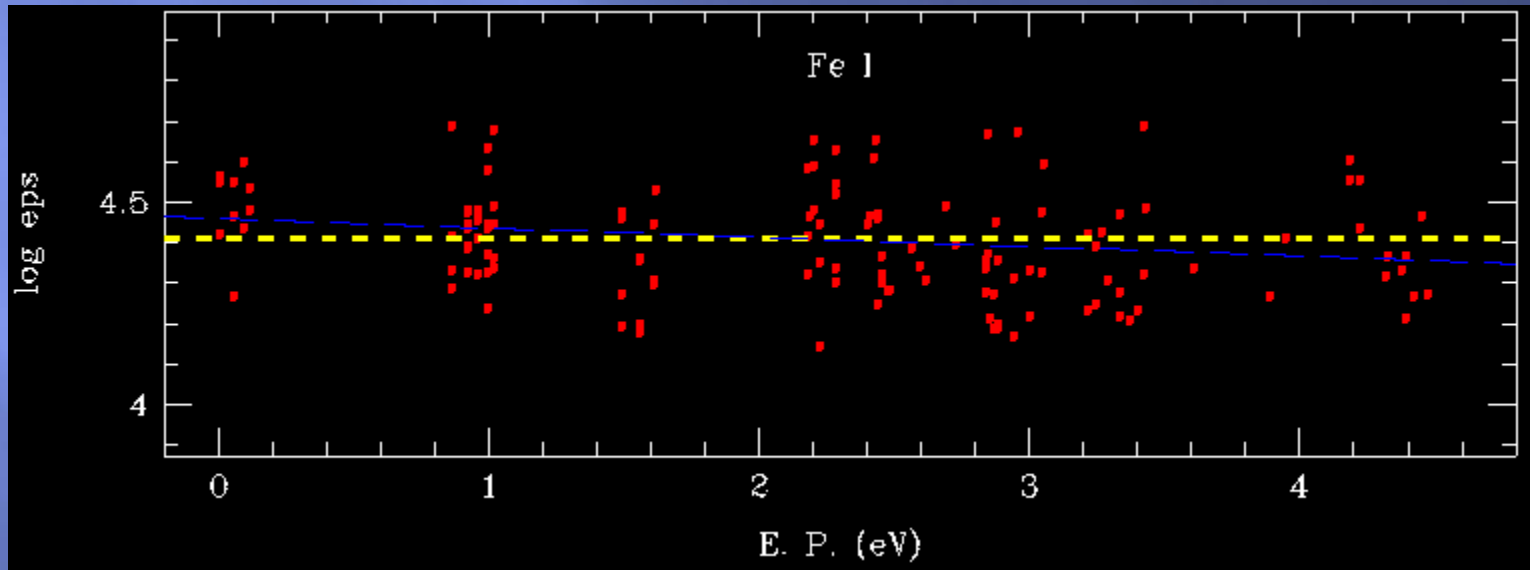


Fig.3 - Gráfico das abundâncias das linhas de Fe I em função do seu potencial de excitação. A linha a amarelo representa a abundância média das linhas de Fe I e a linha a azul representa a tendência linear das abundâncias medidas. *Fonte:* <http://www.as.utexas.edu/~chris/moog.html>

# MOOG

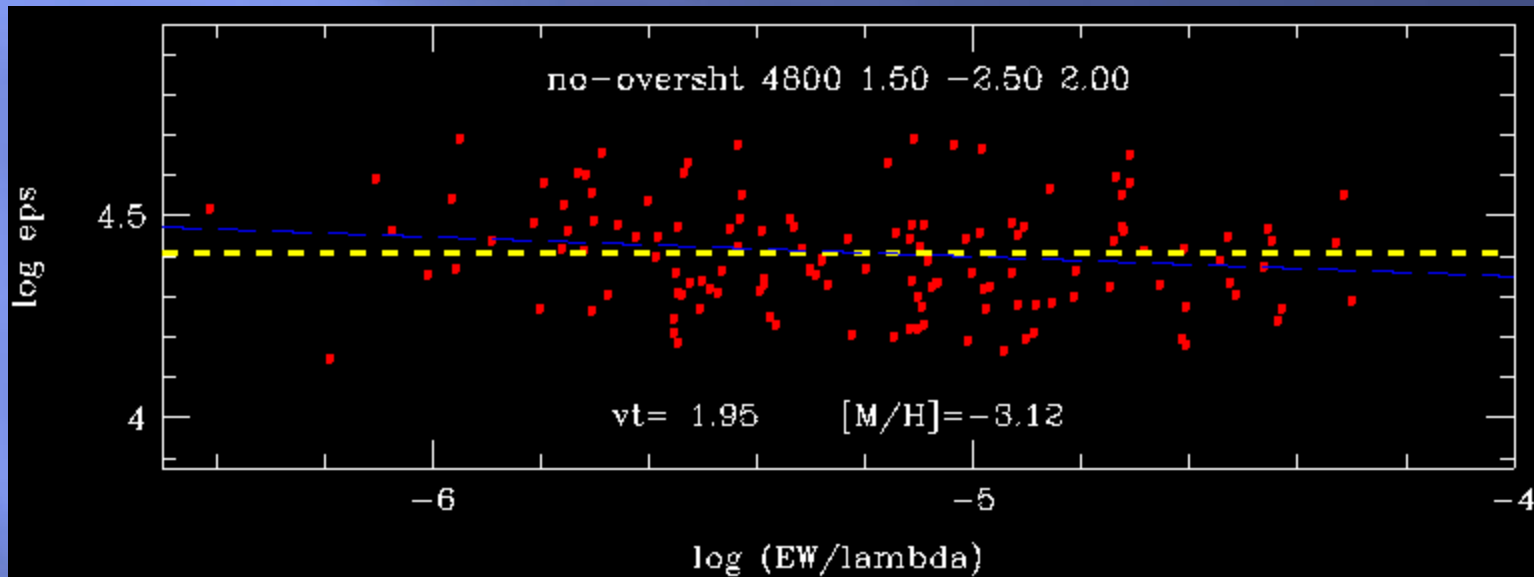


Fig.4 - Gráfico das larguras equivalentes reduzidas das linhas de FeI em função do comprimento de onda. A linha a amarelo representa a abundância média das linhas de FeI e a linha a azul representa a tendência linear das abundâncias medidas. *Fonte:* <http://www.as.utexas.edu/~chris/moog.html>

# 4. Procedimento

1. Medir as EW's (Equivalent Widths) através de um programa apropriado (IRAF);
2. Gerar um modelo apropriado de atmosferas estelares (e.g. ATLAS);
3. Converter o modelo num formato que possa ser lido pelo MOOG;
4. Executar o MOOG. Neste passo, o programa irá utilizar um ficheiro gerado em (1), contendo as EW's das linhas de FeI e FeII;
5. Ler o novo valor de [Fe/H] e determinar o valor de  $\chi^2$  (processo iterativo);

# 5. Downhill *Simplex* Method

Função Objectivo:

$$\chi^2 = w_1 c_1^2 + w_2 c_2^2 + w_3 c_3^2 \quad (5.1)$$

Onde:

- ▣  $w_i \geq 0, i = 1,2,3 \rightarrow$  constantes ajustáveis ao modelo;
- ▣  $c_1 \rightarrow$  declive do gráfico  $\text{Ab}(\text{Fe}/\text{H})$  vs  $\log_{10}(W/\lambda)$ ;
- ▣  $c_2 \rightarrow$  declive do gráfico  $\text{Ab}(\text{Fe}/\text{H})$  vs potencial de excitação;
- ▣  $c_3 \rightarrow c_3 = [\text{Fe}^{\text{I}}/\text{H}] - [\text{Fe}^{\text{II}}/\text{H}]$ ;

## Função Objectivo:

$$\chi^2 = 61.25c_1^2 + 1.69c_2^2 + c_3^2 \quad (5.2)$$

Onde:

- ▣  $c_1 \rightarrow$  declive do gráfico  $\text{Ab}(\text{Fe}/\text{H})$  vs  $\log_{10}(W/\lambda)$ ;
- ▣  $c_2 \rightarrow$  declive do gráfico  $\text{Ab}(\text{Fe}/\text{H})$  vs potencial de excitação;
- ▣  $c_3 \rightarrow c_3 = [\text{FeI}/\text{H}] - [\text{FeII}/\text{H}]$ ;

$$4D \rightarrow (T_{\text{eff}}, \log(g), [\text{Fe}/\text{H}], \xi)$$

*Simplex*  $\leftrightarrow$  Figura geométrica a N-dimensões  
constituída por N+1 pontos

Se N=2: a figura *simplex* é um triângulo;

Se N=3: a figura *simplex* é um tetraedo (não necessariamente regular);



**Inicialização:** vector com estimativas dadas por nós para  $(T_{\text{eff}}, \log(g), [\text{Fe}/\text{H}], \xi)$ .

1. Calcular o *simplex* inicial com base nas estimativas;
2. Calcula-se o valor de  $\chi^2$  nos vértices do *simplex* inicial;
3. Usualmente o *simplex* move-se até onde o valor de  $\chi^2$  é máximo;
4. Os passos sucessivos podem ser visto como reflexões, contracções e expansões do espaço 4-Dimensional (Fig.5);

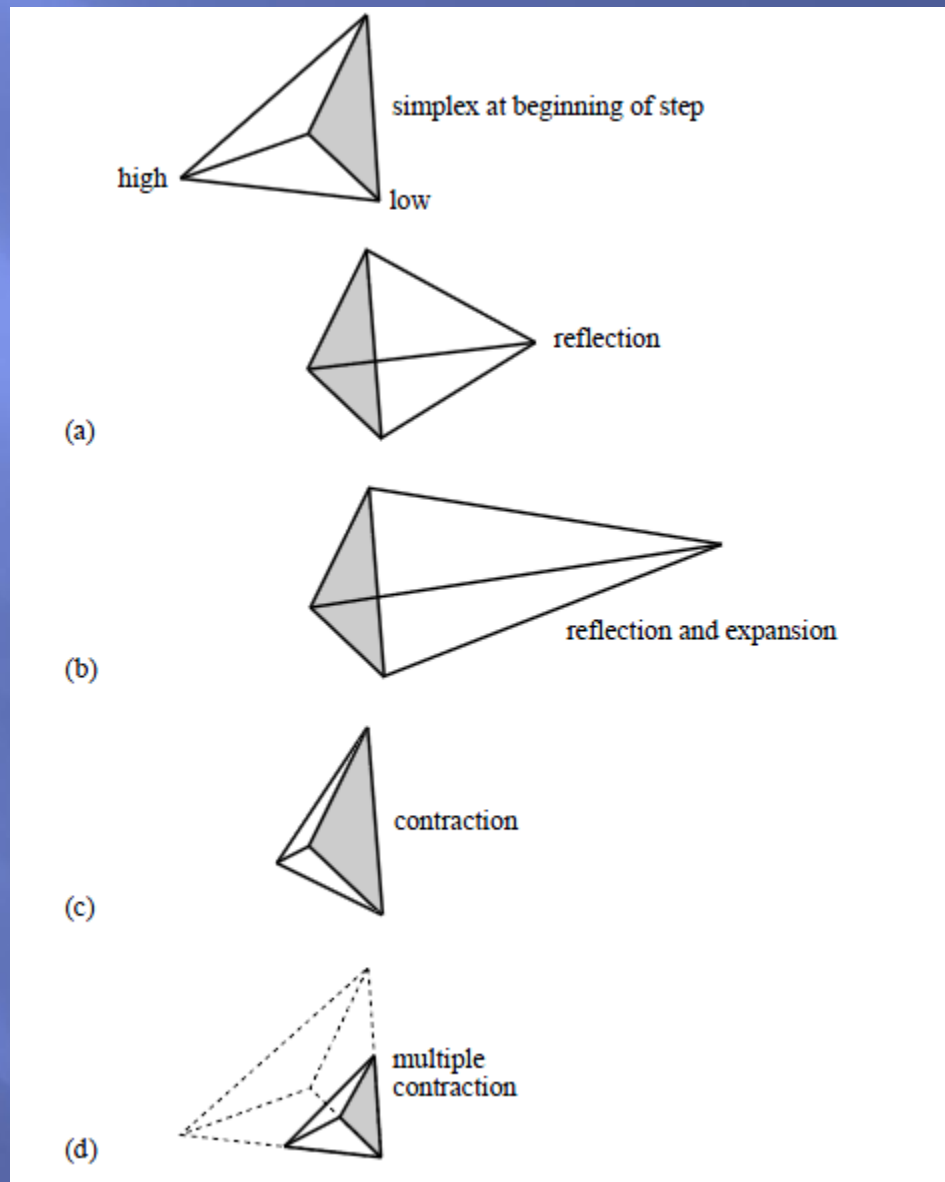


Fig.5 – Iterações possíveis no método *simplex*. Fonte: Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T. And Flannery, B. P. (2002), *Numerical Recipes in C The art of scientific computing*, 2<sup>nd</sup> Edition, Cambridge Press University

5. Quando o *simplex* encontra um vale, o *simplex* contrai para o vale;

6. Uma sequência de iterações seguintes irá fazer o *simplex* convergir para o mínimo;

**Critério de paragem?**

$$\chi^2 < \text{Tolerância}$$

A solução obtida deve verificar três condições do modelo standard:

1.  $[Fe^I/H] = [Fe^{II}/H]$  (equilíbrio de ionização);
2. Independência da metalicidade com o potencial de excitação (equilíbrio da excitação);
3. Independência da metalicidade com a largura equivalente das riscas;

# 6. Trabalho Futuro e expectativas

## Métodos de Minimização de funções num espaço N-dimensional:

1. Métodos baseados apenas em avaliações da função objectivo:
  - Método do Downhill Simplex (Nelder and Mead, 1965);
  - Método de Rosenbrock (1960);
  - Método de Hooke and Jeeves (1969);
2. Métodos que requerem cálculo das derivadas da função objectivo:
  - Método do gradiente conjugado (Descida mais rápida);
  - Método de Newton  $\leftrightarrow$  cálculo da matriz Hessiana;
3. Métodos estocásticos:
  - Simulated Annealing (Algoritmo de Metropolis-Hastings);
  - Algoritmos Genéticos;

# 6. Trabalho Futuro e expectativas

## Métodos de Minimização de funções num espaço N-dimensional:

1. Métodos baseados apenas em avaliações da função objetivo:
  - Método do Downhill Simplex (Nelder and Mead, 1965);
  - Método de Rosenbrock (1960);
  - Método de Hooke and Jeeves (1969);
2. Métodos que requerem cálculo das derivadas da função objetivo:
  - Método do gradiente conjugado (Descida mais rápida);
  - Método de Newton ↔ cálculo da matriz Hessiana;
3. Métodos estocásticos:
  - Simulated Annealing (Algoritmo de Metropolis-Hastings);
  - Algoritmos Genéticos;

# 6. Trabalho Futuro e expectativas

## Métodos de Minimização de funções num espaço N-dimensional:

1. Métodos baseados apenas em avaliações da função objectivo:
  - Método do Downhill Simplex (Nelder and Mead, 1965);
  - Método de Rosenbrock (1960);
  - Método de Hooke and Jeeves (1969);
2. Métodos que requerem cálculo das derivadas da função objectivo:
  - Método do gradiente conjugado (Descida mais rápida);
  - Método de Newton  $\leftrightarrow$  cálculo da matriz Hessiana;
3. Métodos estocásticos:
  - Simulated Annealing (Algoritmo de Metropolis-Hastings);
  - Algoritmos Genéticos;



# 6. Trabalho Futuro e expectativas

## Métodos de Minimização de funções num espaço N-dimensional:

1. Métodos baseados apenas em avaliações da função objectivo:
  - Método do Downhill Simplex (Nelder and Mead, 1965);
  - Método de Rosenbrock (1960);
  - Método de Hooke and Jeeves (1969);
2. Métodos que requerem cálculo das derivadas da função objectivo:
  - Método do gradiente conjugado (Descida mais rápida);
  - Método de Newton  $\leftrightarrow$  cálculo da matriz Hessiana;
3. Métodos estocásticos:
  - Simulated Annealing (Algoritmo de Metropolis-Hastings);
  - Algoritmos Genéticos;

# Algoritmos Genéticos (AG)

## Computação paralela?

- ▣ Algoritmos genéticos  $\leftrightarrow$  Evolução das espécies;
- ▣ A ideia é efectuar uma selecção natural de um grupo de parâmetros  $G$  (população);
- ▣ Neste grupo é permitida o cruzamento entre “raças”, após o qual as raças são seleccionadas naturalmente (isto é, as piores raças são mortas);
- ▣ Também podem ser introduzidas mutações (isto é, com uma dada probabilidade pode-se efectuar trocas de estados:  $0 \rightarrow 1$  ou  $1 \rightarrow 0$ );
- ▣ Os parâmetros de  $G$  podem ser considerados como uma sequência genética de ADN;

## Minimização de um $\chi^2$ :

1. Gerar a **população** inicial de soluções teste;
2. Avaliar a qualidade do ajuste de cada membro da população actual (calcular  $\chi^2$ );
3. Selecionar pares de soluções ("**pais**") da população actual, com uma probabilidade proporcional à qualidade do ajuste;
4. Produzir duas novas gerações ("**filhos**"), a partir dos pares de soluções ("**pais**") selecionadas em 3;
5. Repetir os passos 3 e 4 até que o **número de filhos** seja igual ao **número de indivíduos da população inicial**;
6. Substituir a população dos **pais** pelos **filhos**;
7. Repetir os passos de 2 a 6 até que seja satisfeito um dado **critério de convergência**;

# Bibliografia:

Kurucz, R. L. (1990), *Stellar Atmosphere: Beyond Classical Models*”, NATO Asi Ser., ed. L. Crivelli et al., 441

Kurucz, R. L. (1993), *Stellar Atmosphere Programs and 2km/s grid*, Kurucz CD-ROM No.13, Smithsonian Astrophysical Observatory, Cambridge, MA

Saffe, C. (2011), *FUNDPAR: A program for Deriving Fundamental Parameters from Equivalent Widths*, RMAA, 47, 3-14;

Sousa, S. G., Santos, N. C., Israelian, G., Mayor, M. and Monteiro M. J. P. F. G. (2007), *A&A*, 469, 783-791

Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T. And Flannery, B. P. (2002), *Numerical Recipes in C The art of scientific computing*, 2<sup>nd</sup> Edition, Cambridge Press University

Obrigado.