

Cuaderno de laboratorio

Guía cronológica de pasos y resultados

El tamaño de la base de datos será siempre de 5000 curvas, con 400 valores de ω , entre 0.8 y 1.2

De momento se usa una Red Neuronal con una única capa oculta de 512 neuronas (activación ReLu)

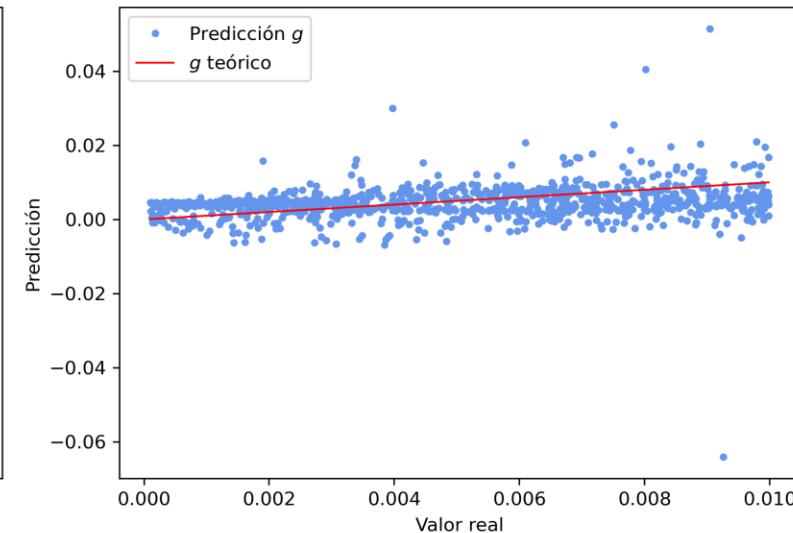
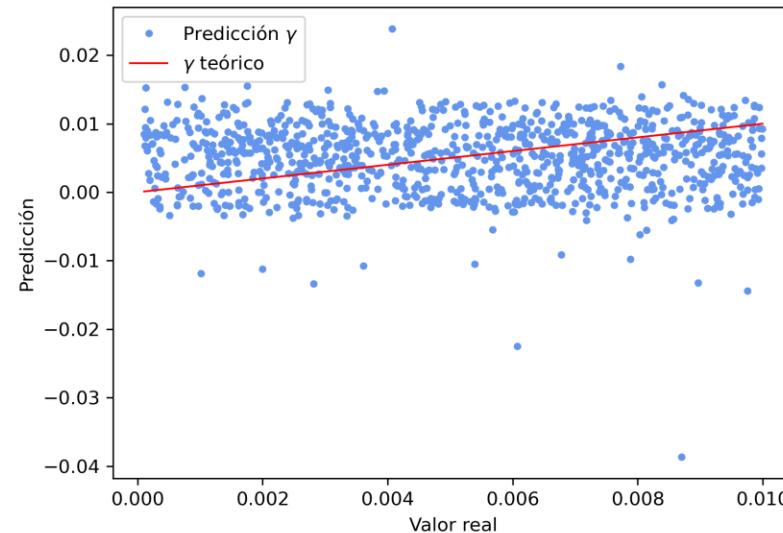
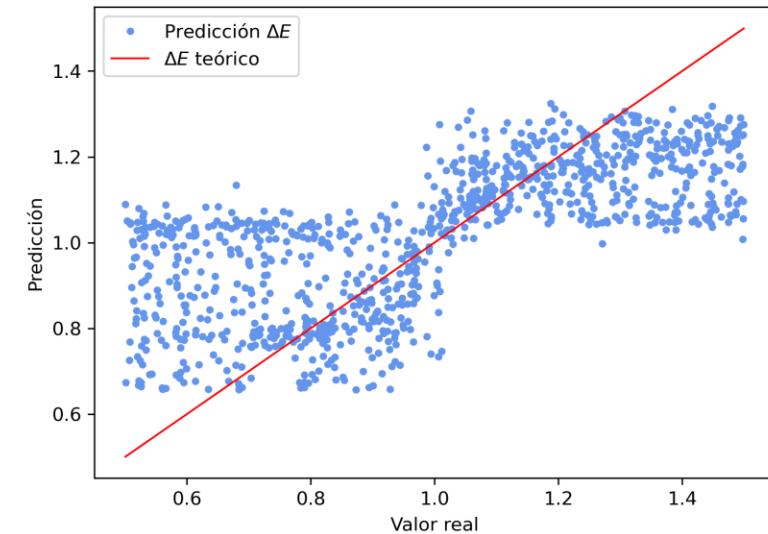
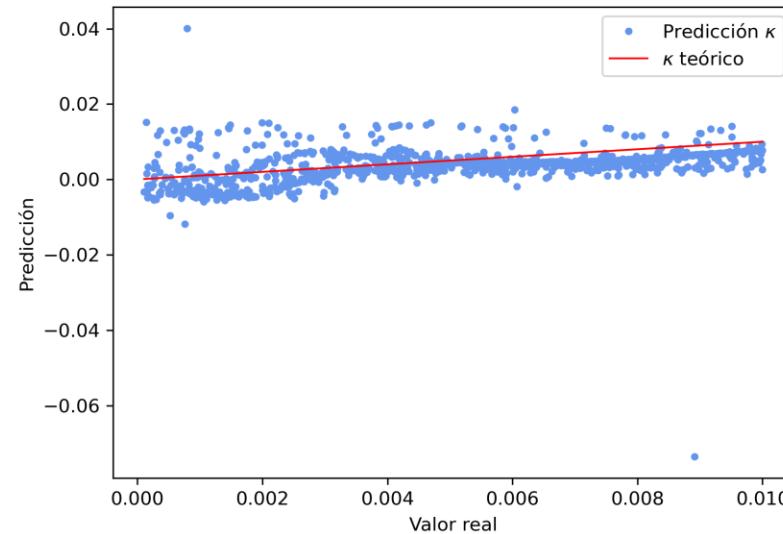
16/11/2023: Creación de la red neuronal

Nada se ajusta bien

*El tamaño de la base de datos será siempre de 5000 curvas, con 400 valores de ω , entre 0.8 y 1.2

**Se usa batch_size=30 y epochs=50

Comparación entre valor real y la predicción

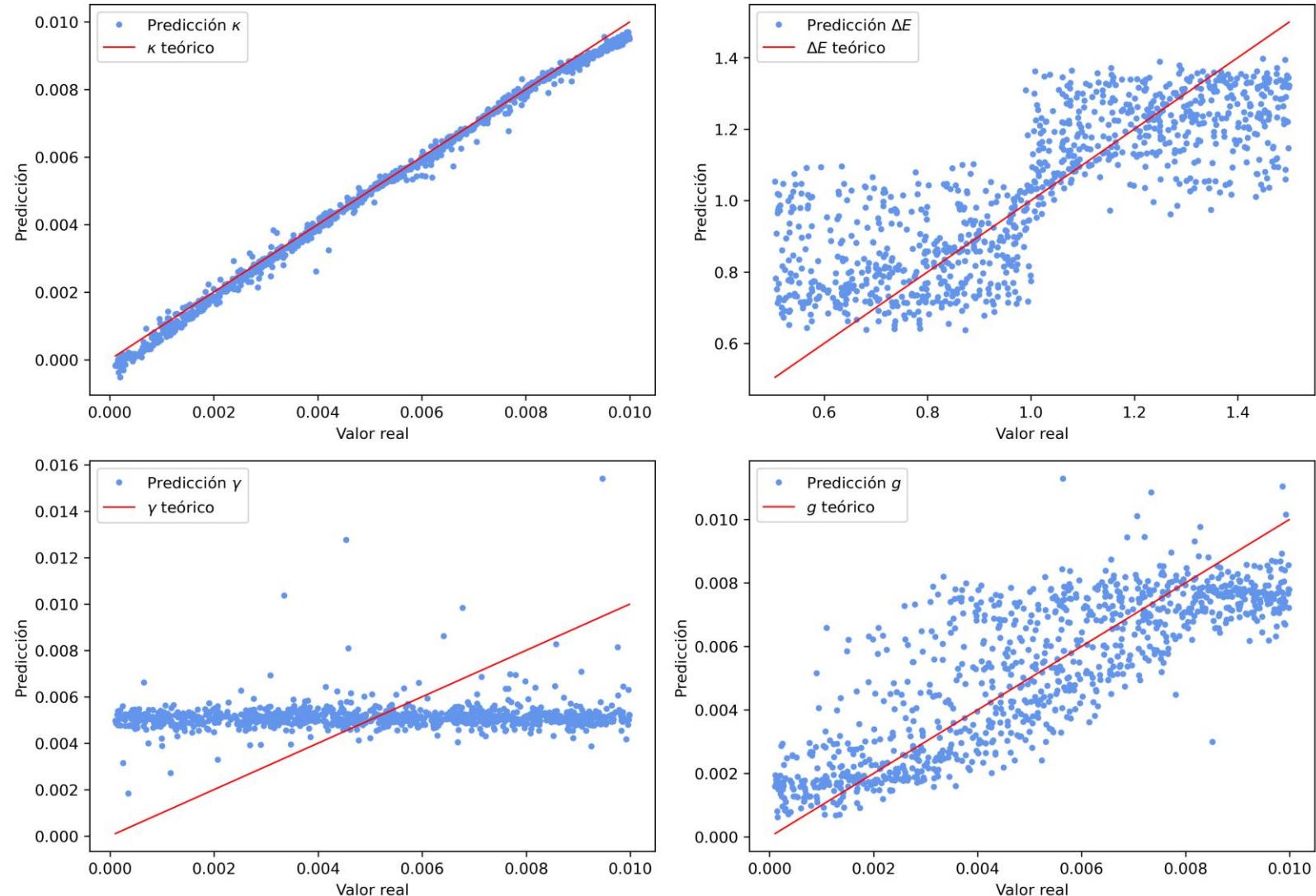


21/12/2023: Normalización de los datos

Se ajusta perfecto κ , ΔE sigue con el escalón, γ no ajusta, y g empieza a ser predicho

*Se usa batch_size=30 y epochs=50

Comparación entre valor real y la predicción



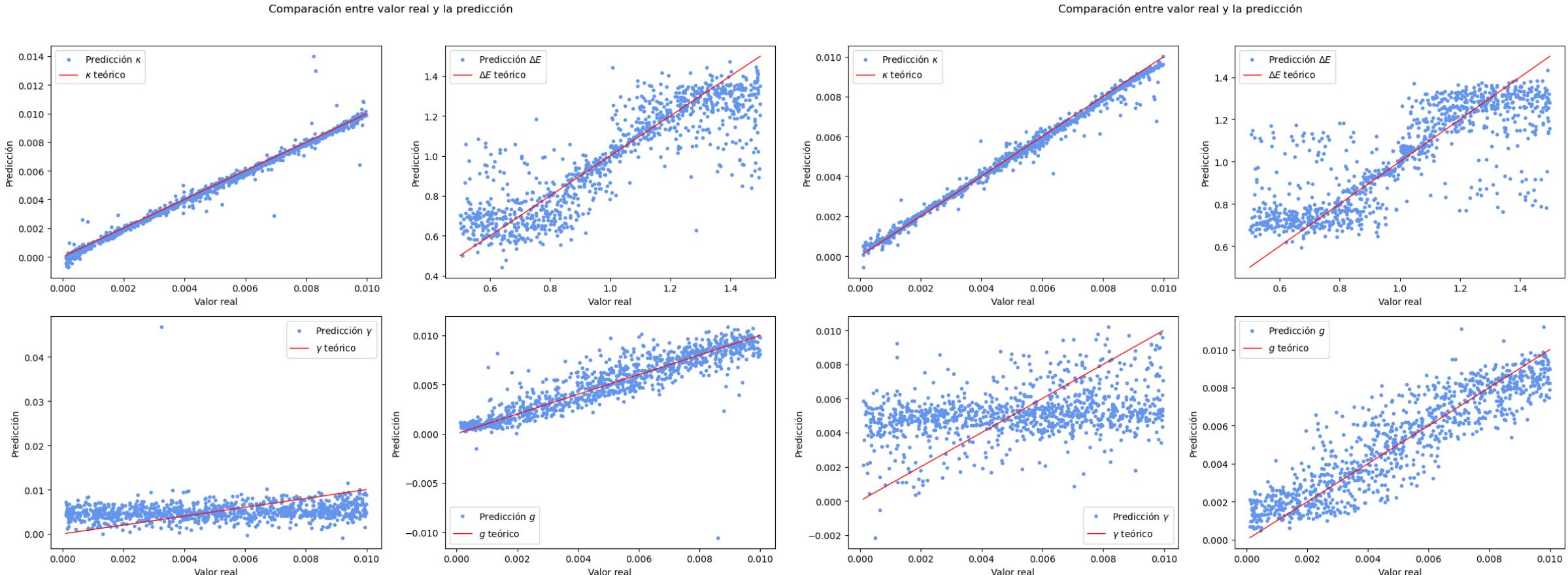
A partir de ahora se va a usar una red neuronal de 5 capas de activación ReLu:
1024, 512, 256, 64, 16 neuronas, respectivamente

22/12/2023: Pruebas extras de épocas y tamaño de la base de datos

USAREMOS ESTE A PARTIR DE AHORA

*Se usa batch_size=50 y epochs=5000 (13 min de ejecución)

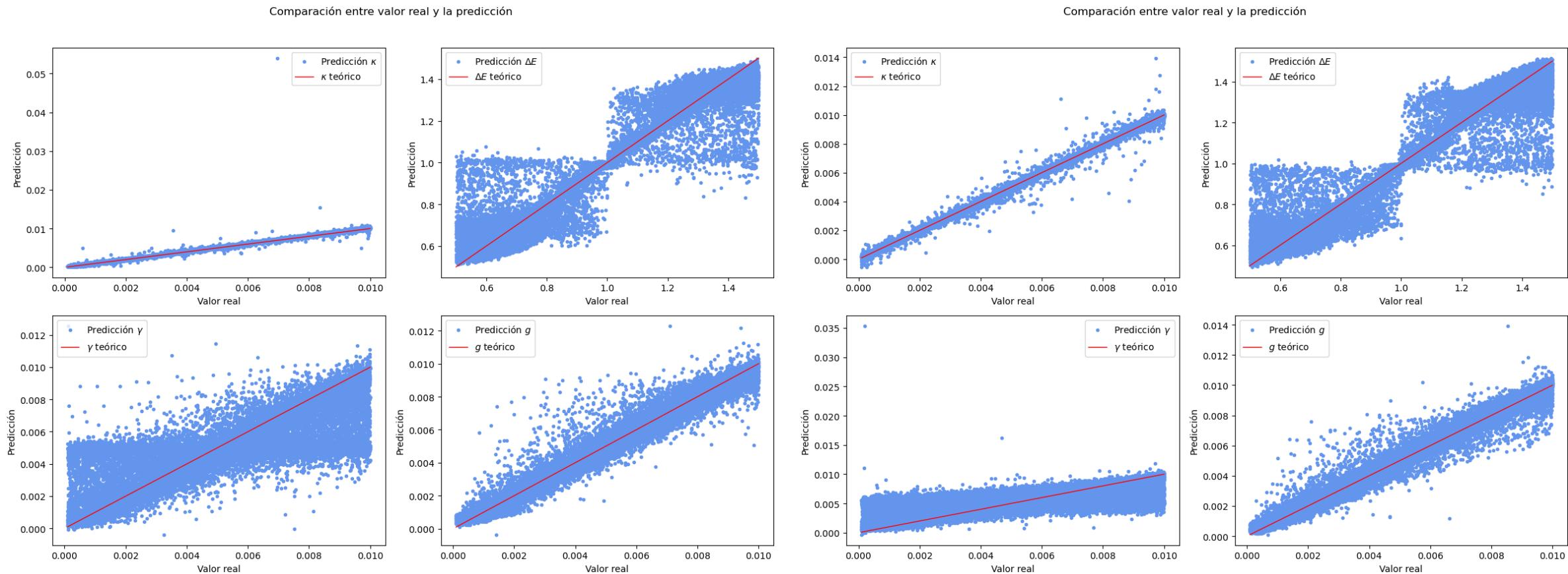
*Se usa batch_size=50 y epochs=1000 (menos de 3 min de ejecución)



Más épocas mejora notablemente, pero falta arreglar ΔE (función escalón) y γ (no lo predice)

22/12/2023: Pruebas extras de épocas y tamaño de la base de datos

*Se usa una base de datos de 100k curvas, batch_size=50 y epochs=5000
(11h de ejecución)

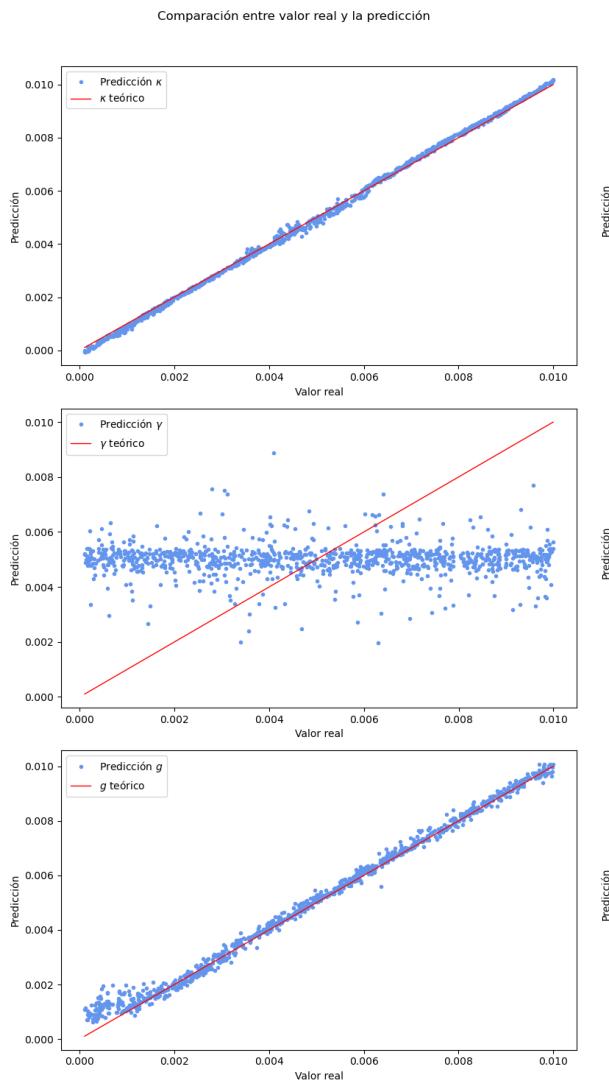


Más número de datos no mejora nada de forma significativa respecto al aumento de las épocas

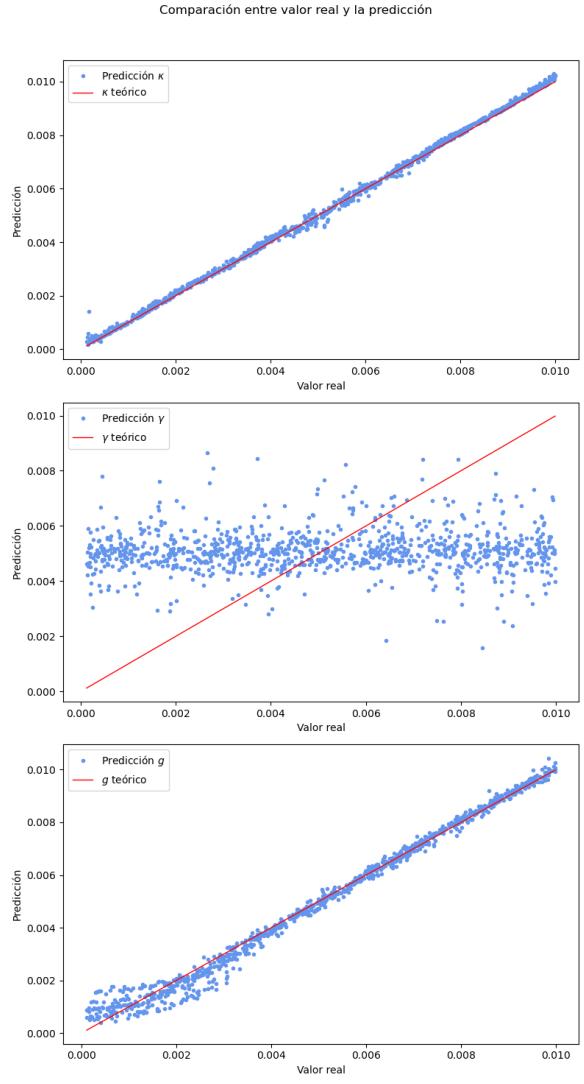
A partir de ahora se va a usar una red neuronal de 5 capas de activación ReLu:
256, 128, 64, 32, 16 neuronas, respectivamente

24/01/2024: Pruebas fijando ΔE

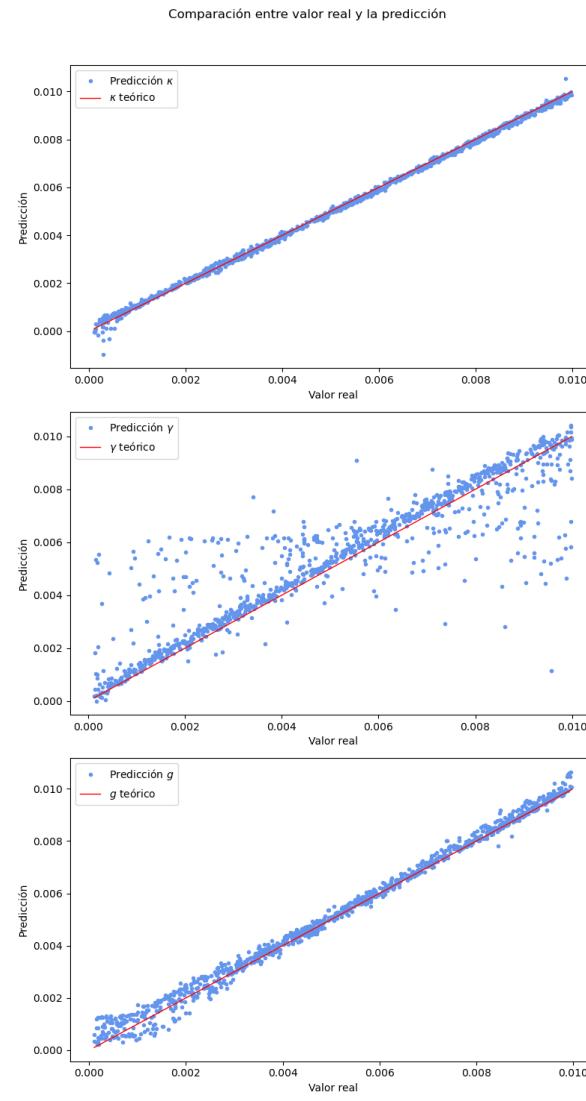
$\Delta E = 0.5$



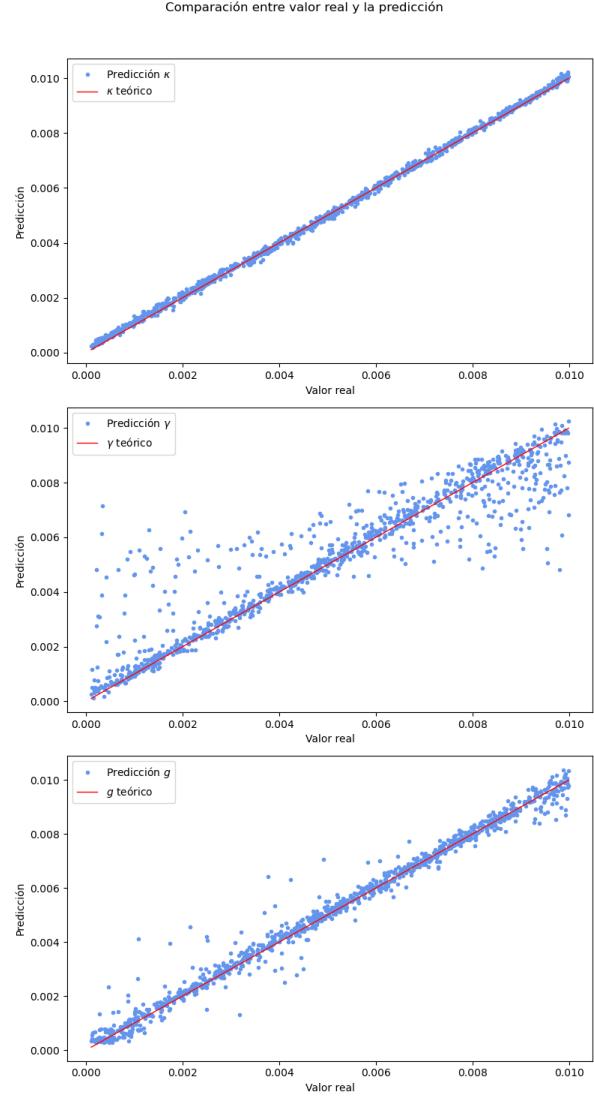
$\Delta E = 0.75$



$\Delta E = 0.95$



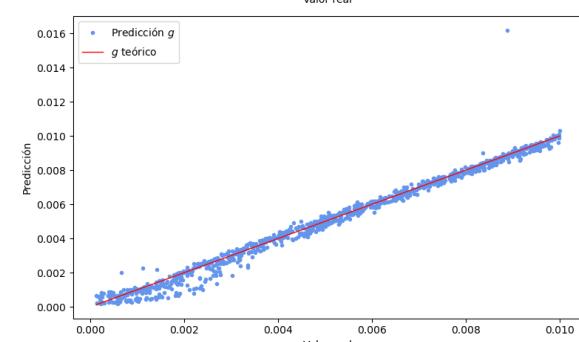
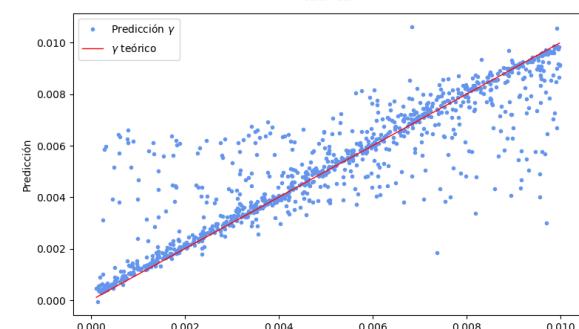
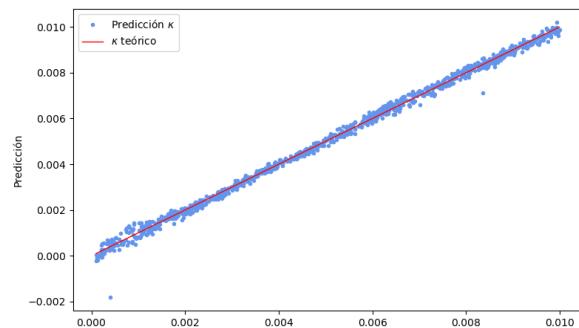
$\Delta E = 1.0$



24/01/2024: Pruebas fijando ΔE

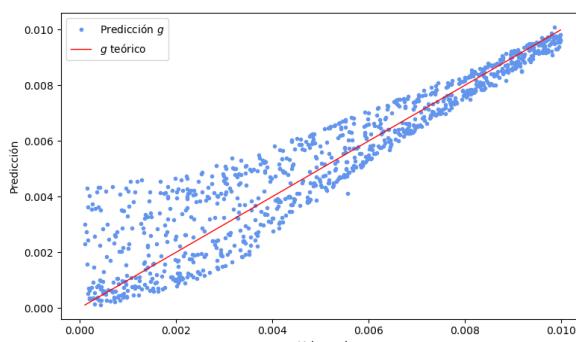
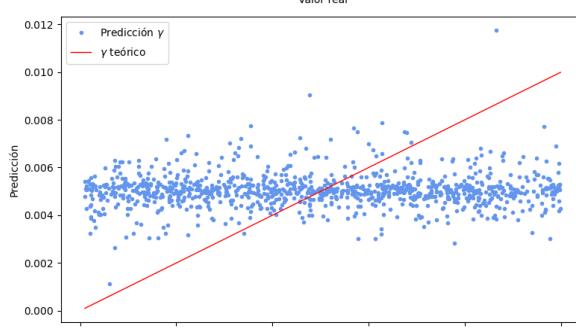
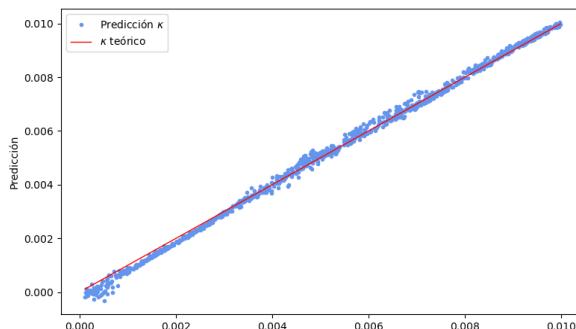
$\Delta E = 1.05$

Comparación entre valor real y la predicción



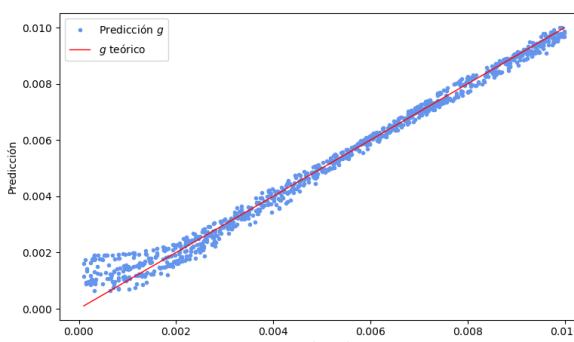
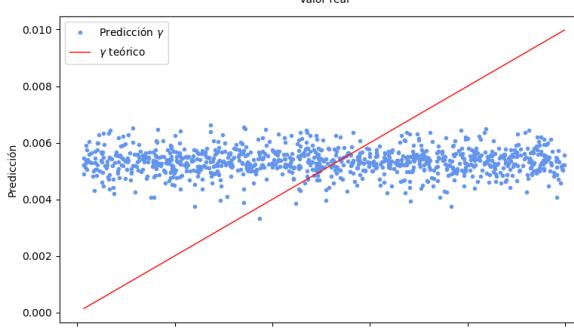
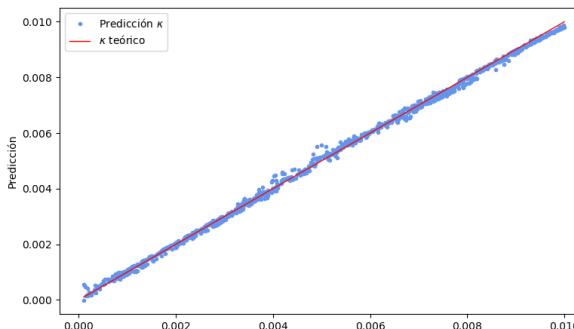
$\Delta E = 1.25$

Comparación entre valor real y la predicción



$\Delta E = 1.5$

Comparación entre valor real y la predicción



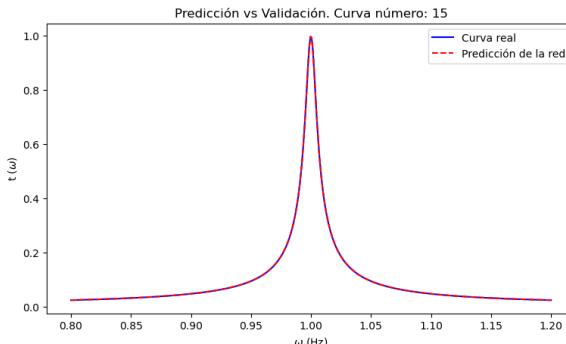
Podemos ver que los mejores resultados se obtienen para ΔE cercano o en resonancia, ya que no tiene ningún problema para predecir γ , el cual es nuestro mayor problema, y que para g pequeño, tiene algún problema.

En la siguiente diapositiva mostramos algunas curvas y su predicción.

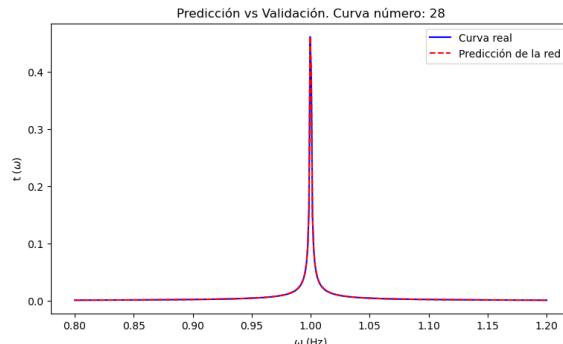
24/01/2024: Pruebas fijando ΔE

Ligero fallo en κ

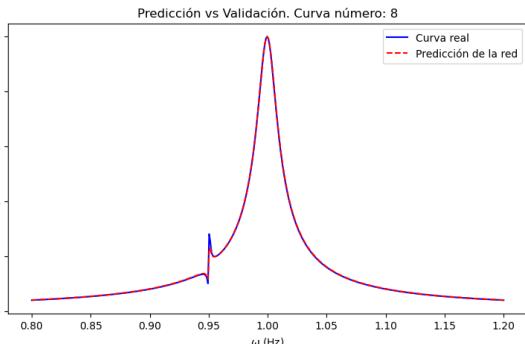
$\Delta E = 0.5$



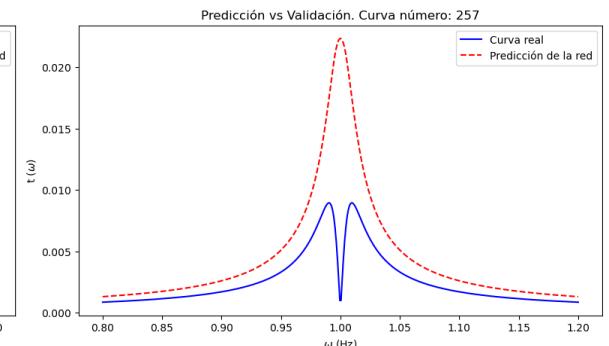
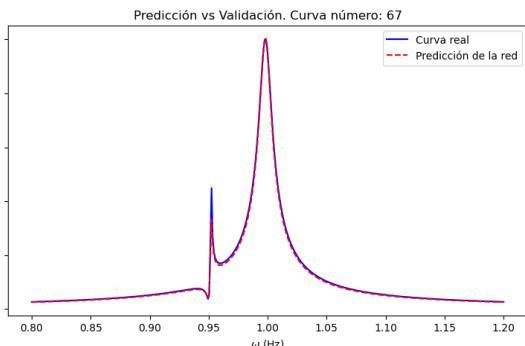
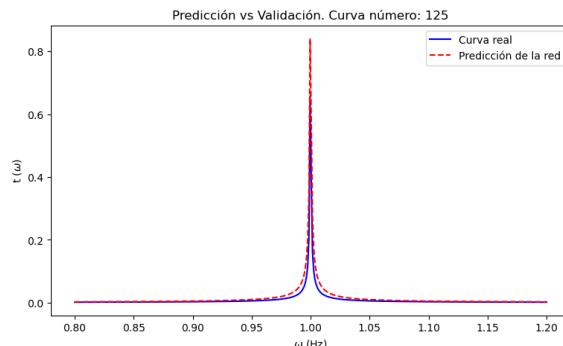
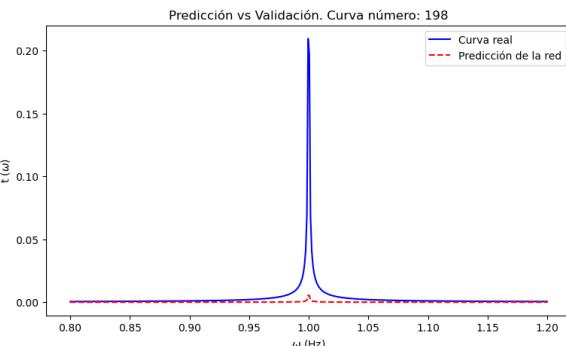
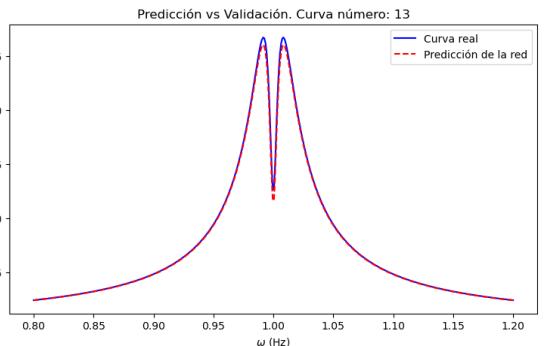
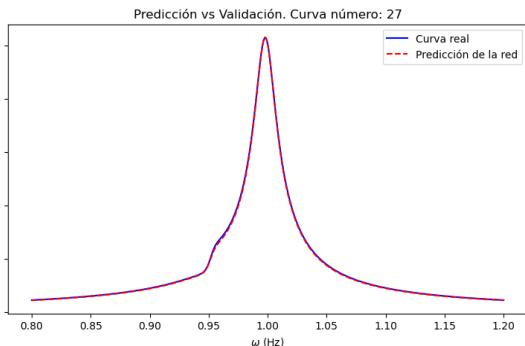
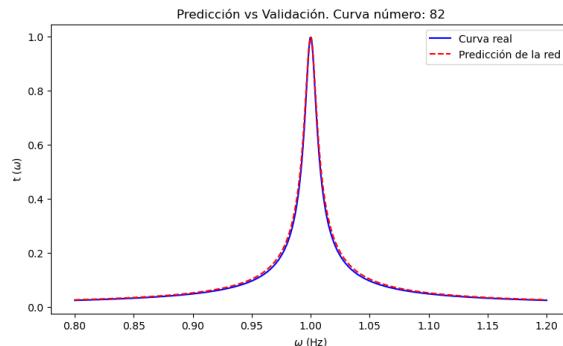
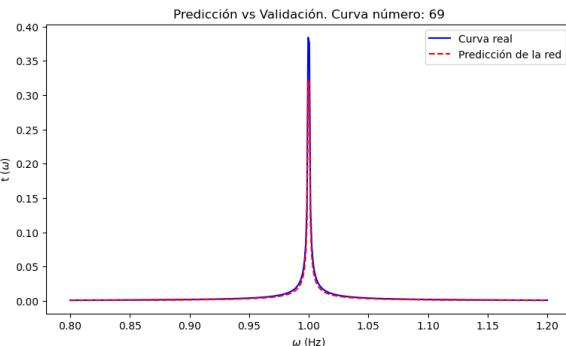
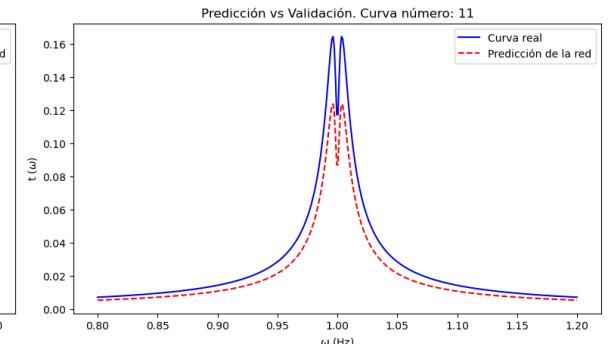
$\Delta E = 0.75$



$\Delta E = 0.95$



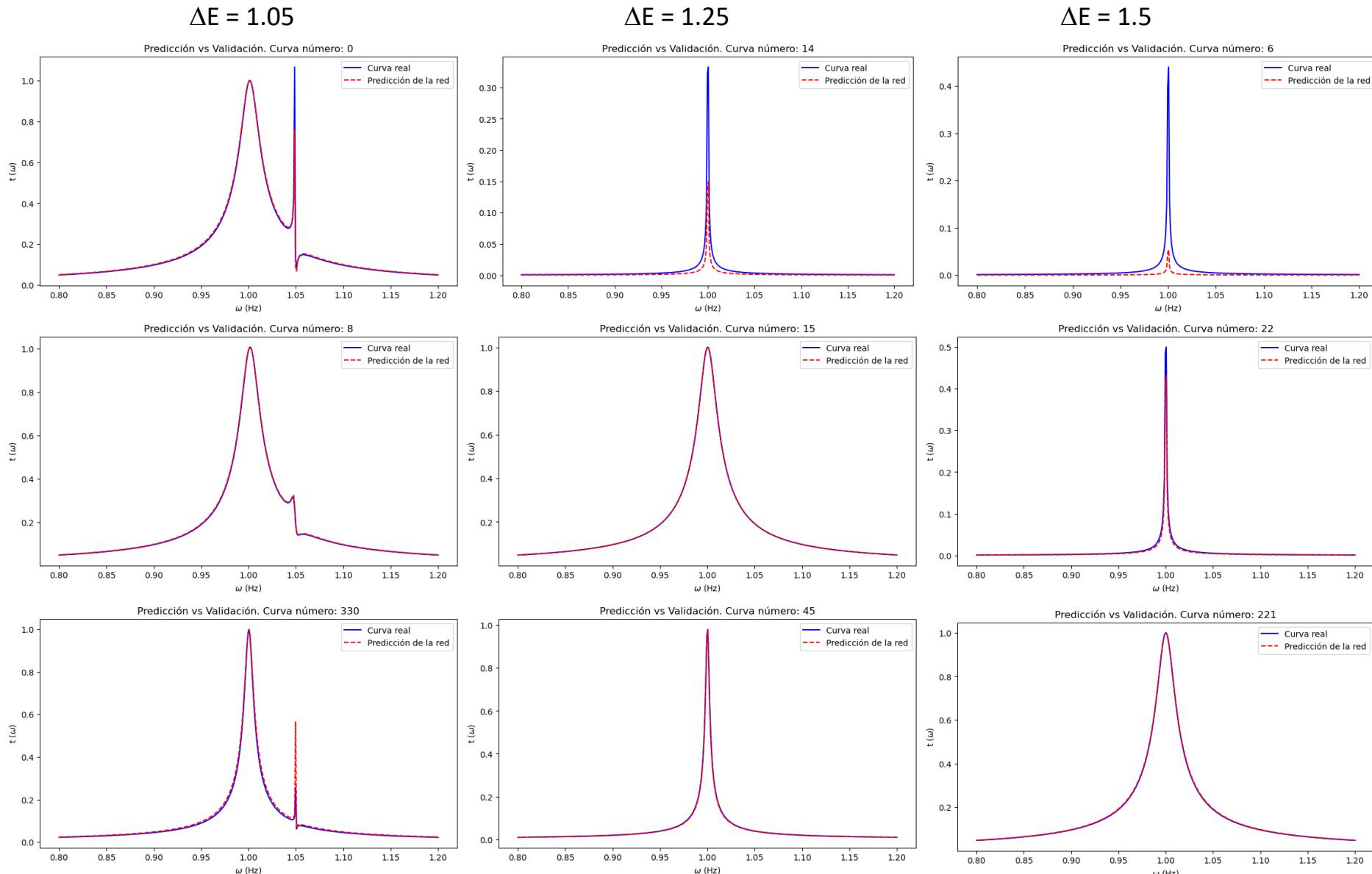
$\Delta E = 1.0$



Falla al predecir las tres, pero g el que menos ha fallado



24/01/2024: Pruebas fijando ΔE



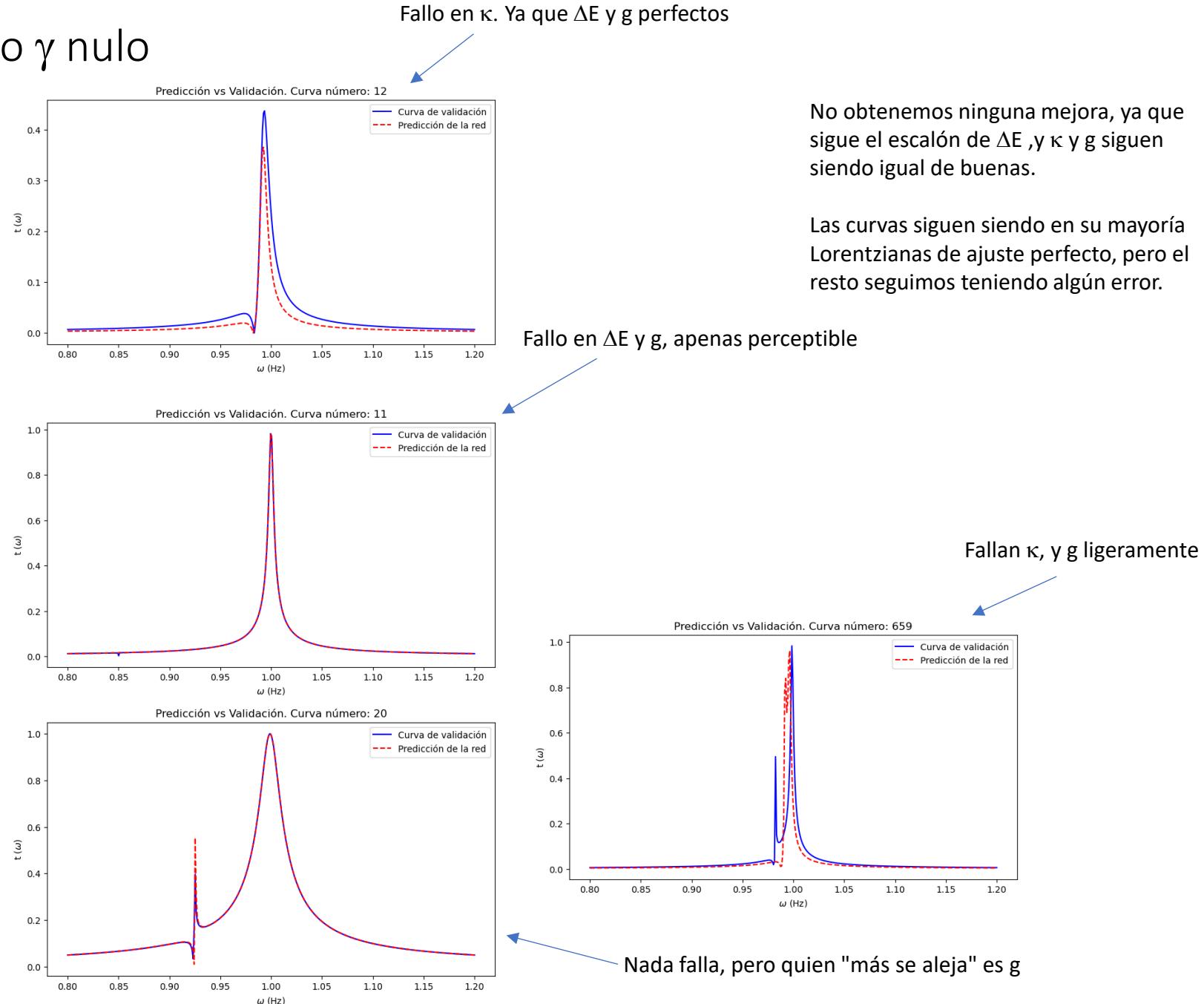
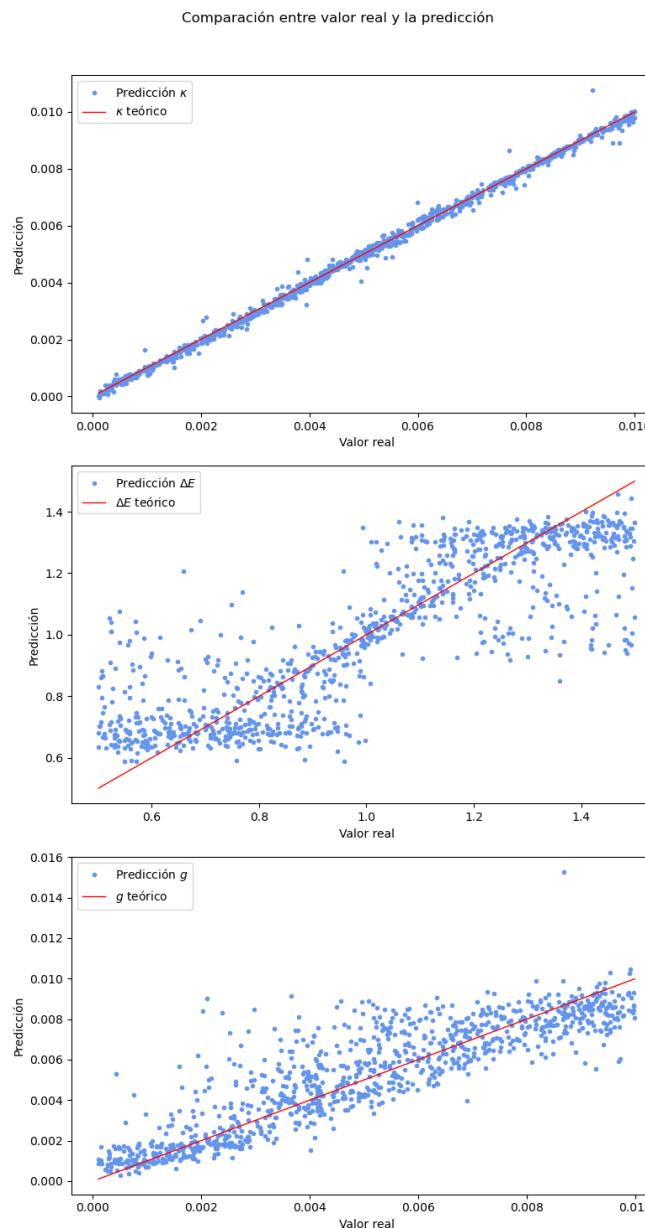
Se observa que en las Lorentzianas perfectas, si la red falla en la altura, se debe a un fallo en la predicción de κ . Pero si lo que ocurre es un fallo ligero, quedando la predicción por debajo o por encima de la curva, o en los "fanos" (semi picos cerca de resonancia) no se ajustan perfectos, se debe a mala predicción de γ . En las Lorentzianas, pequeños fallos en γ no afectan visualmente en la predicción de la curva

Apenas se han detectado fallos en la predicción de g.

Para $\Delta E = 1.0$, hay muy pocas curvas que fallen en γ , y alguna curva que se equivoque en κ . Y aquellas en las que falla g , no ajusta el doble pico y lo ajusta como un pico simple, y además, tampoco acierta γ .

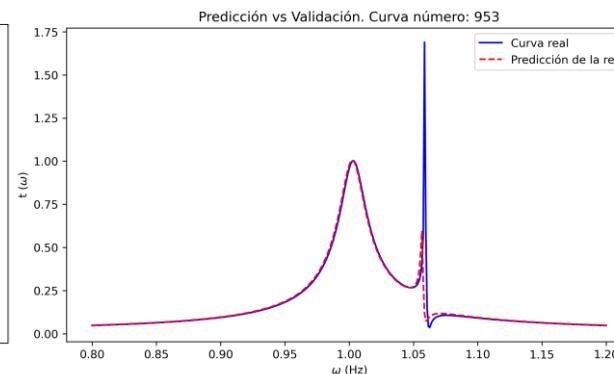
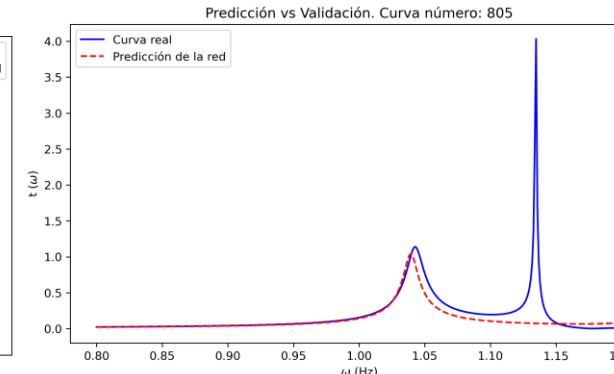
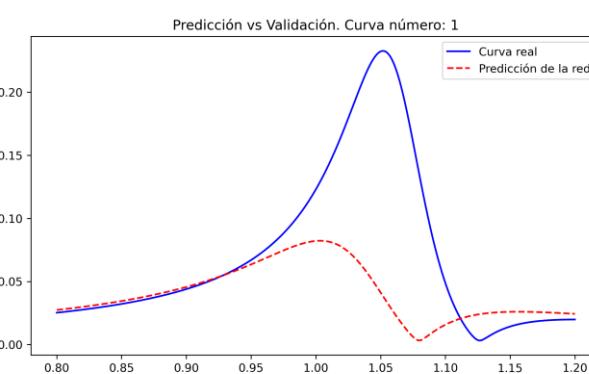
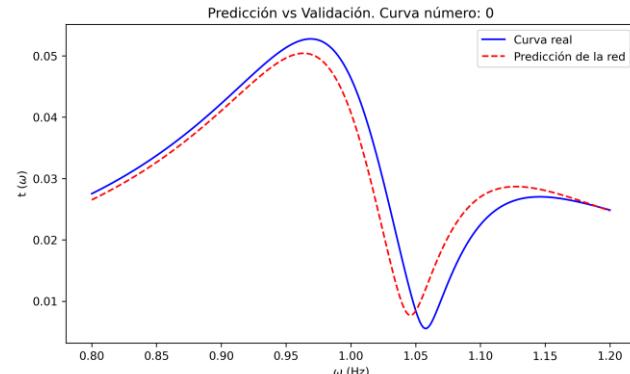
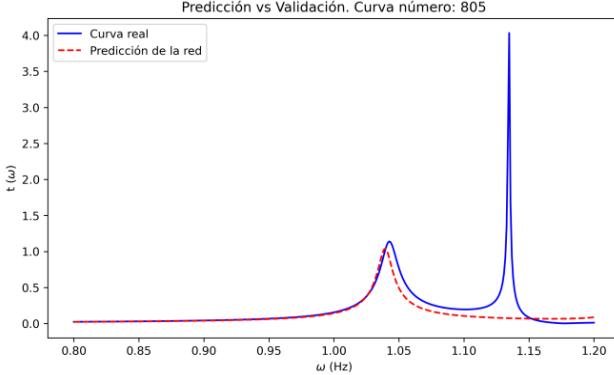
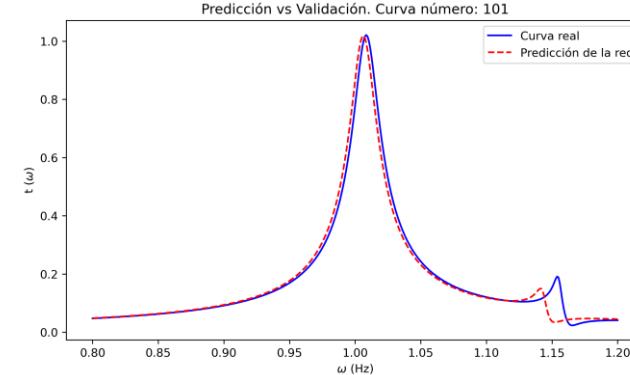
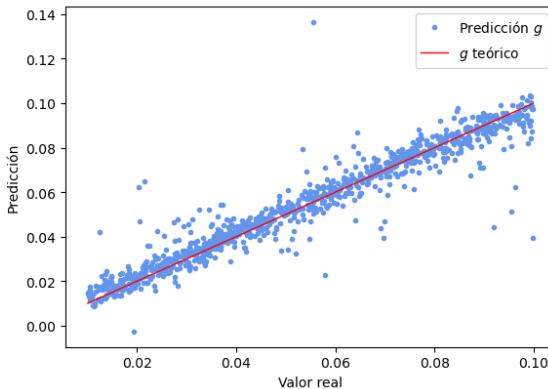
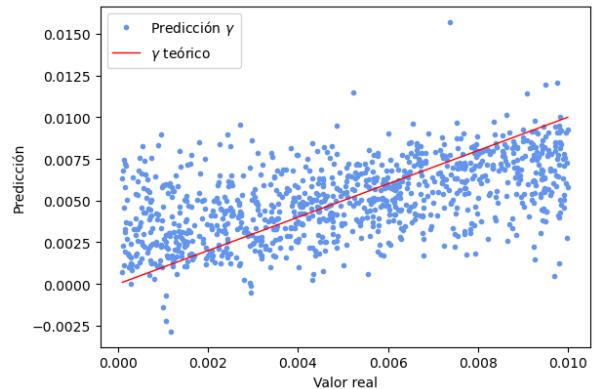
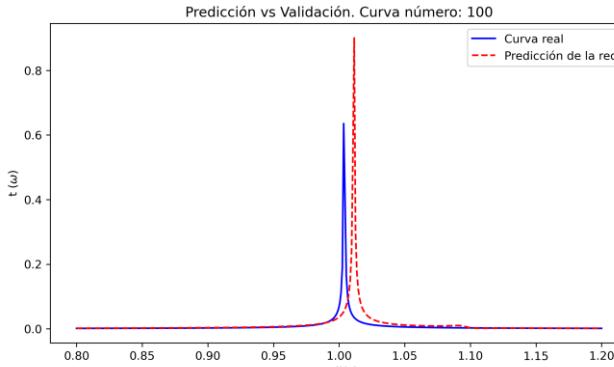
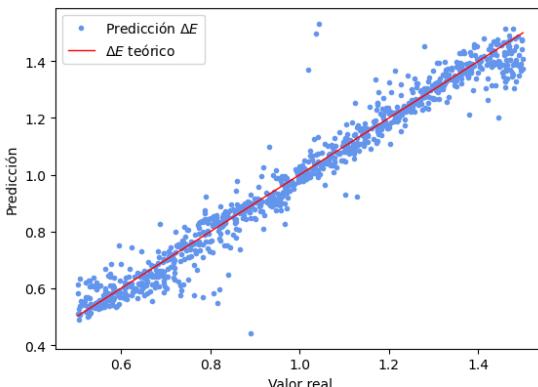
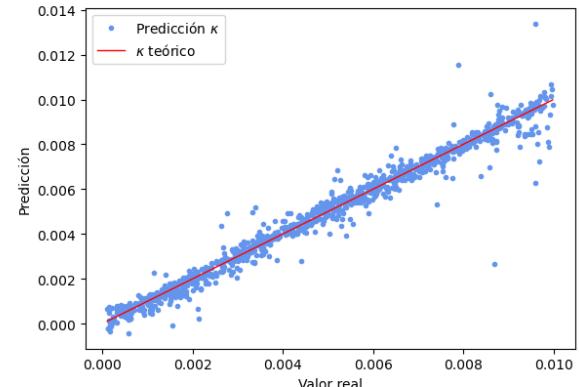
Podríamos decir que κ es la altura del pico (ligeros fallos, se notan mucho), γ cuan pronunciado es el pico (la curva que lo empieza) y la altura del "fano" (en caso de haberlo), y g la anchura del pico (ligeros fallos, generan ligeras desviaciones visuales)

24/01/2024: Pruebas haciendo γ nulo



24/01/2024: Pruebas con g grande

Comparación entre valor real y la predicción



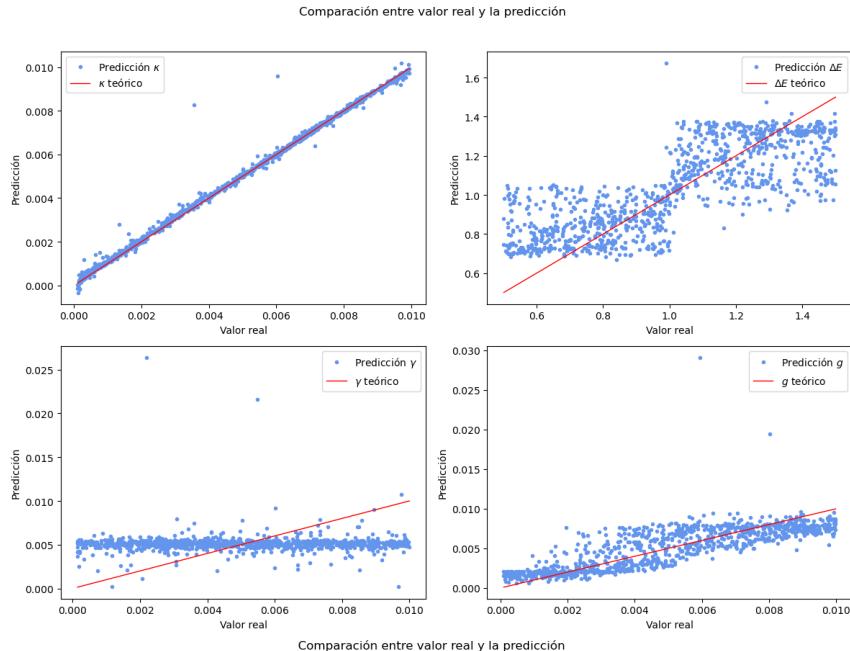
Aunque se mejora a la perfección el ajuste de ΔE , γ sigue indeterminado.

Observando las curvas, parece que hay formas un tanto peculiares (son la mayoría), y la red tiene muchos problemas para ajustarlas. En su mayoría predice bien ΔE y g , pero la caga con κ y γ

26/01/2024: Probamos nuevas normalizaciones

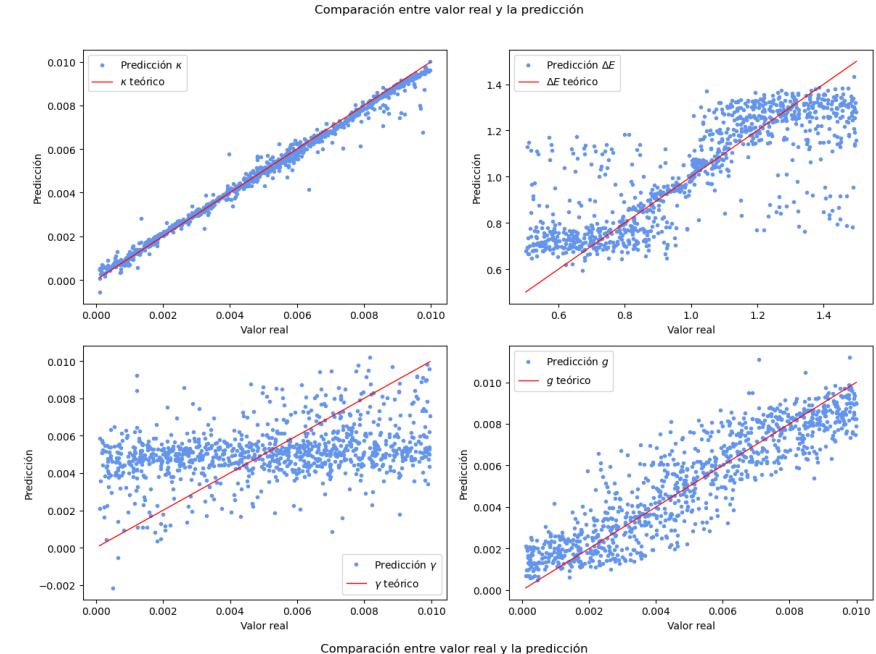
EL QUE HEMOS USADO Y
SEGUIREMOS USANDO

MaxAbsScaler
(no merece la pena
mirar curvas)

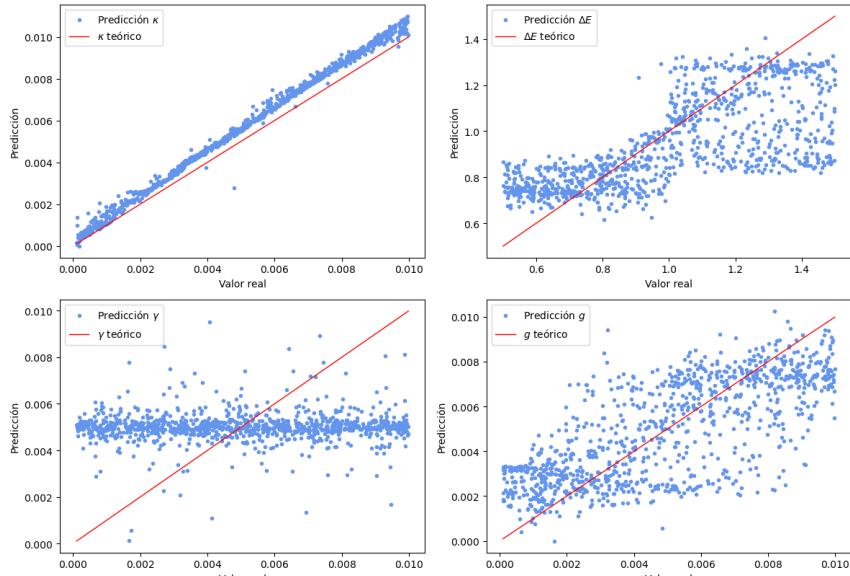


StandardScaler

*Como es el que
hemos estado
usando, ya sabemos
el tipo de curvas que
devuelve

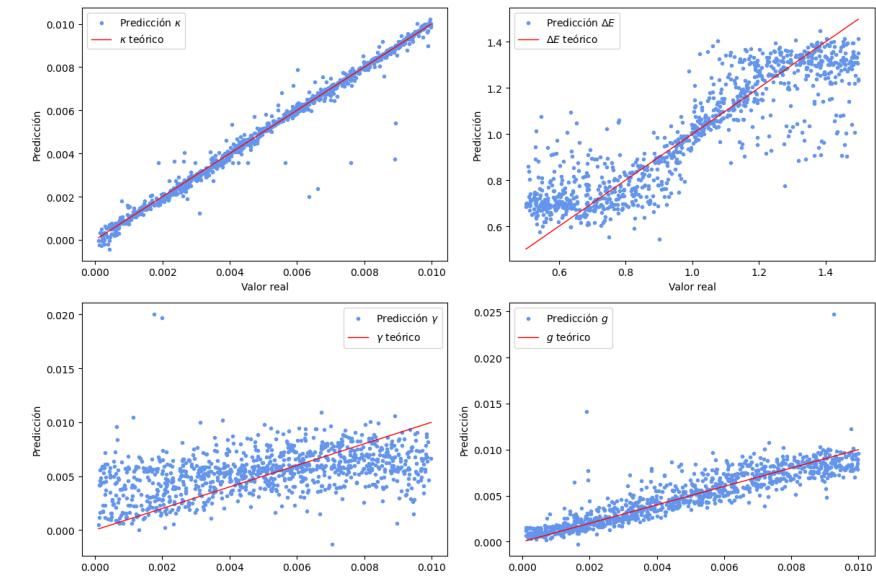


MinMaxScaler
(no merece la pena
mirar curvas)

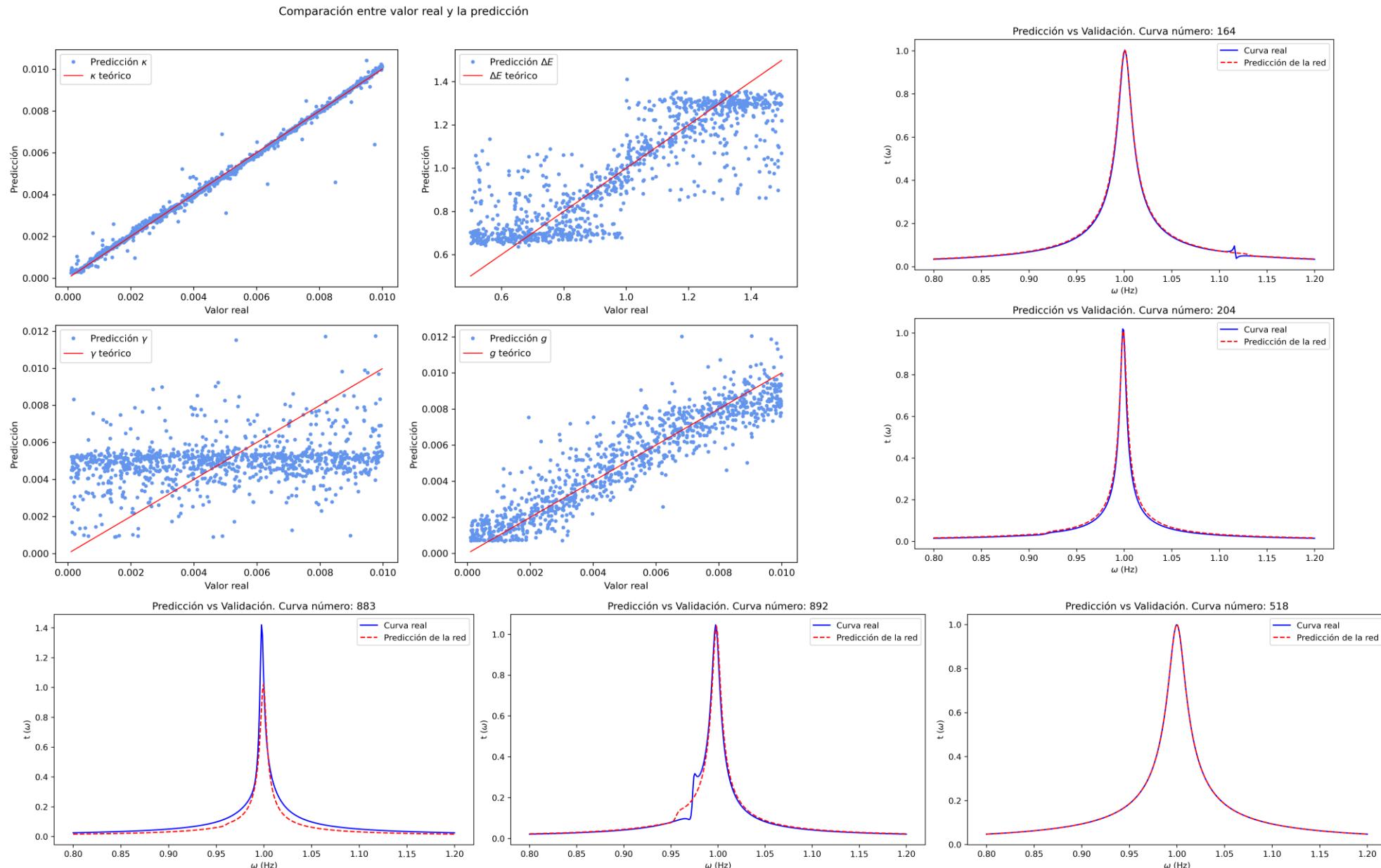


RobustScaler

*A nivel de curvas es
algo más impreciso
que el
StandardScaler



08/02/2024: Añadimos condición para que la red solo prediga valores positivos



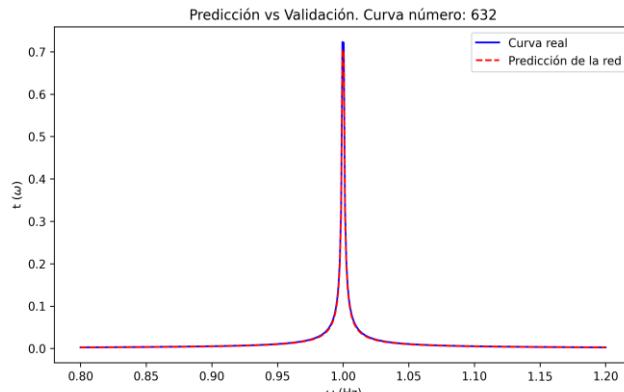
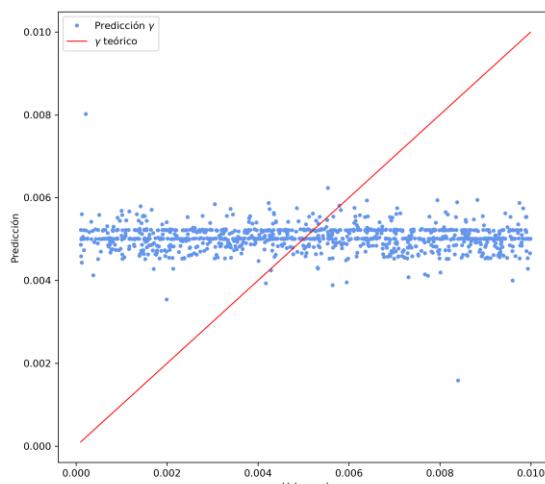
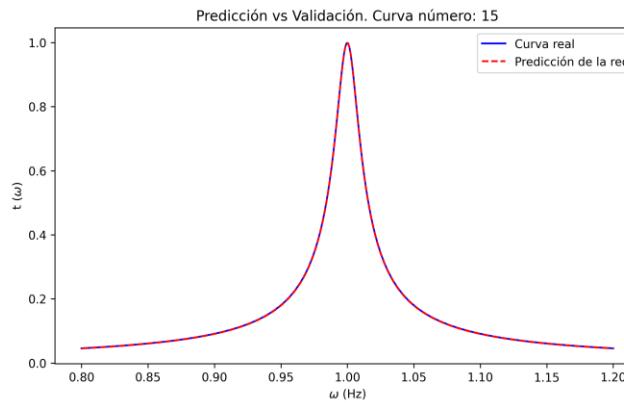
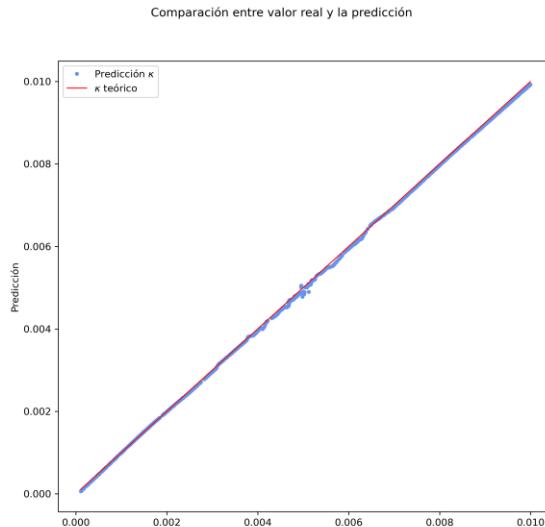
No hay mejorías significantes, pero nos viene bien para quitar aquellas curas en las que predecía valores negativos

08/02/2024: Fijar todo menos gamma y ver la función respecto de gamma
(buscamos ver si es constante o simetrías).

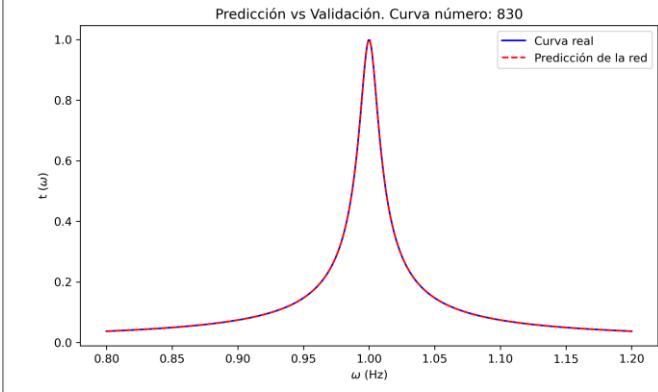
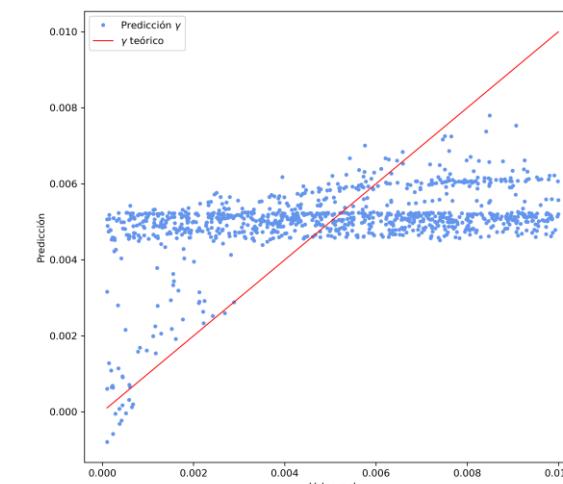
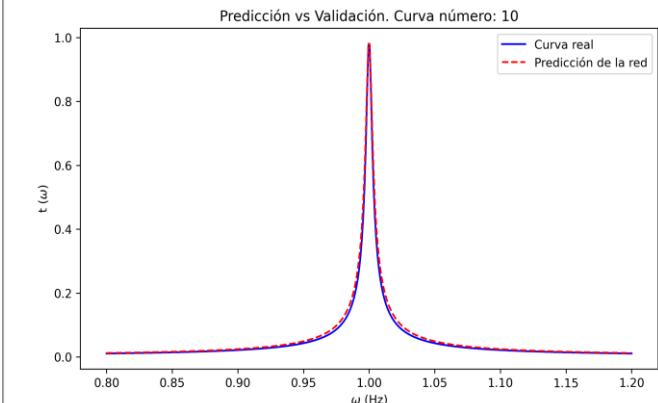
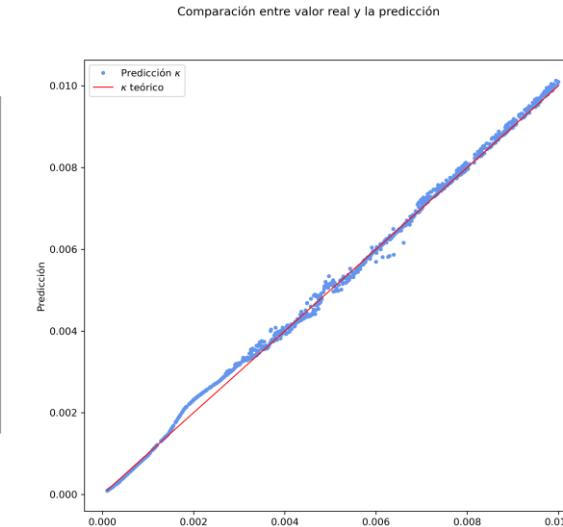
Primero hemos dejado que prediga κ y γ . $g=6.75e-4$

Aunque falla en las predicciones de γ prácticamente siempre, esto no afecta a las curvas. Luego γ debe ser un parámetro insignificante. Además, como g es pequeño, no se generan "fanos".

$\Delta E=0.5$



$\Delta E=0.95$

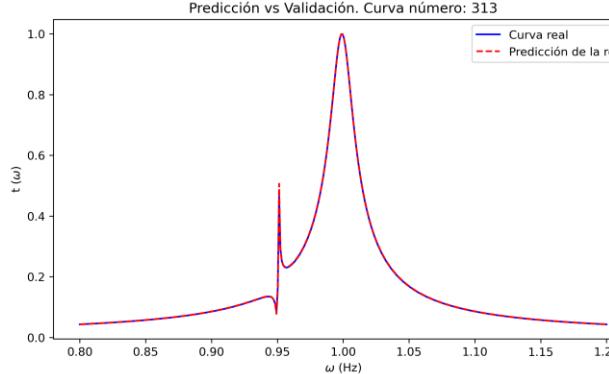
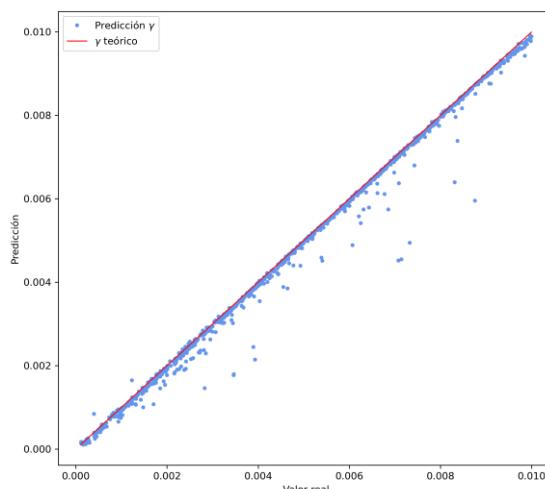
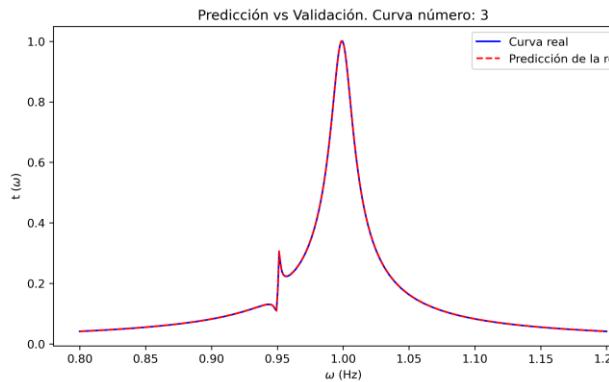
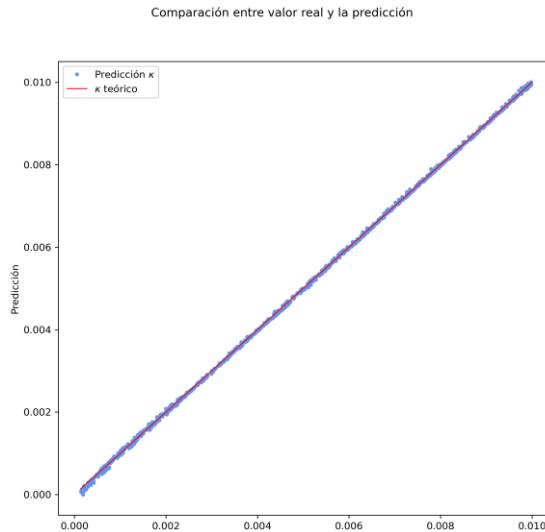


08/02/2024: Fijar todo menos gamma y ver la función respecto de gamma
 (buscamos ver si es constante o simetrías).

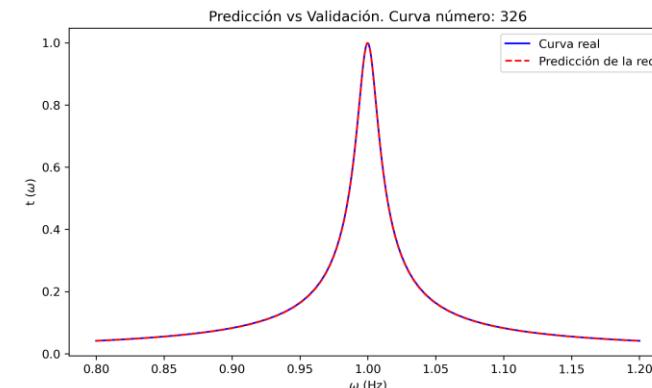
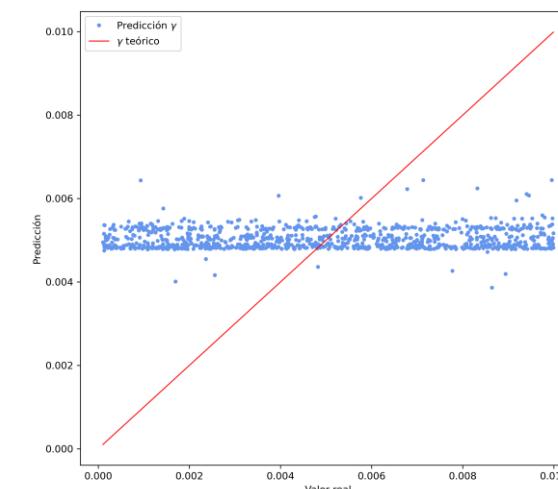
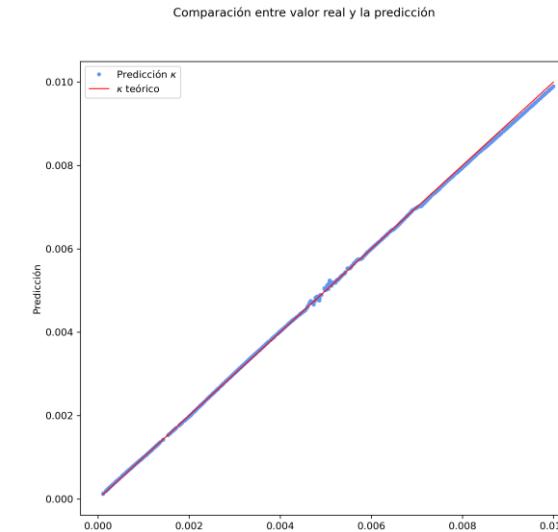
$g=6.75e-3$

Cerca de resonancia hay "fanos", y aunque a veces falla un poco γ , sigue sin ser notorio en las curvas. Y para 0.5 es como antes, solo Lorentzianas que se predicen perfectamente, aunque γ lo falle.

$\Delta E=0.95$



$\Delta E=0.5$

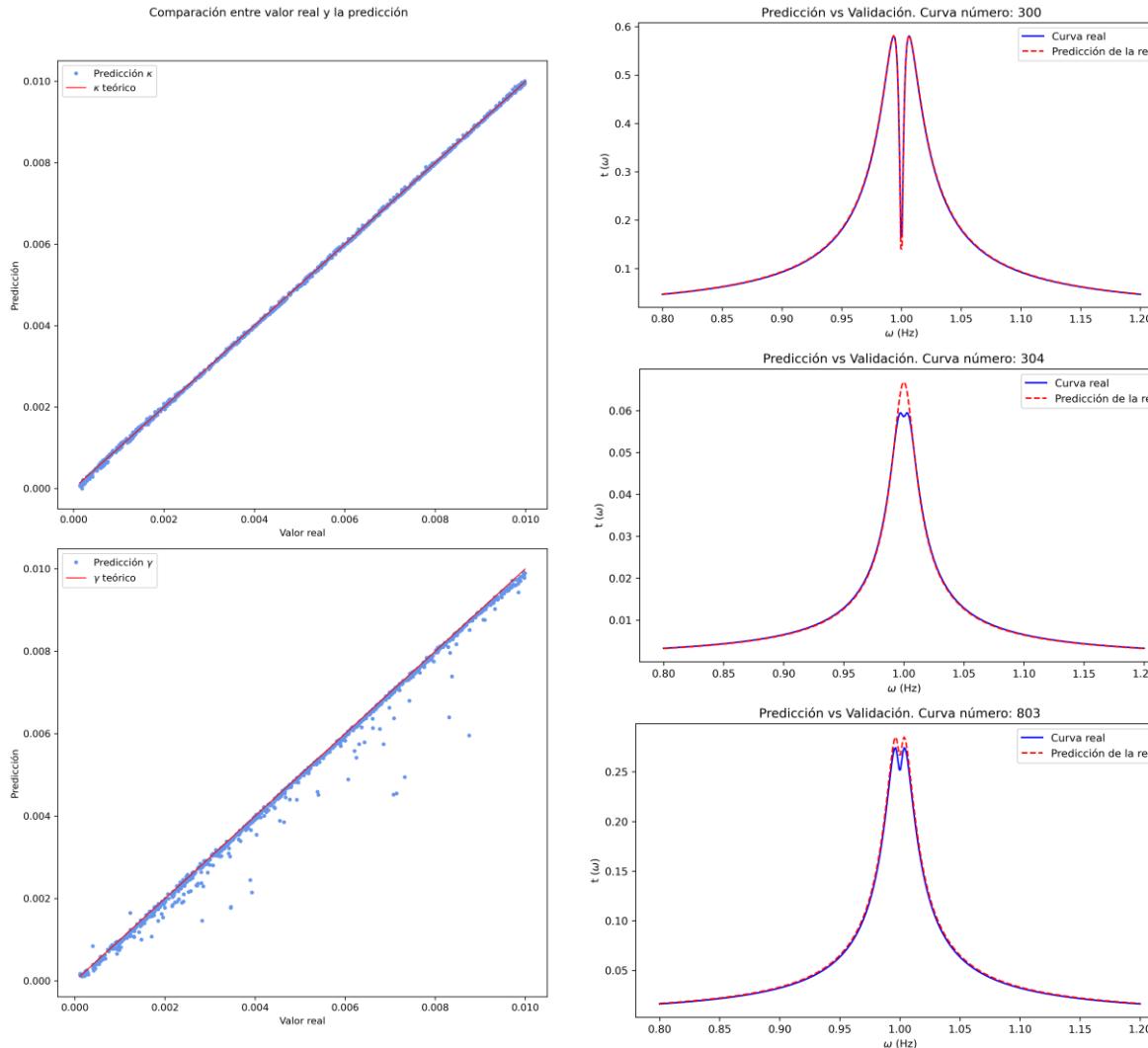


08/02/2024: Fijar todo menos gamma y ver la función respecto de gamma
 (buscamos ver si es constante o simetrías).

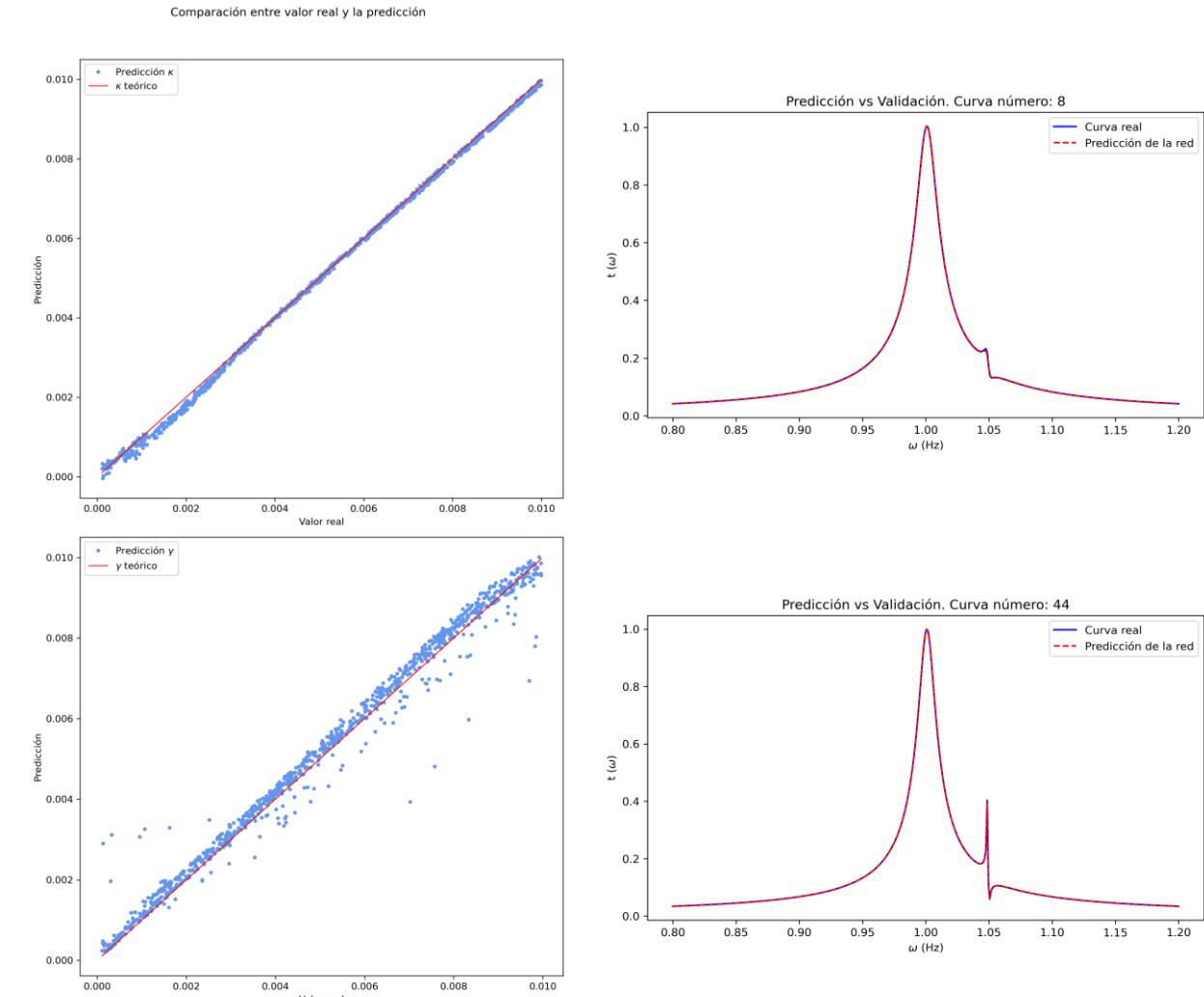
$g=6.75e-3$

Cerca de resonancia hay "fanos", y aunque a veces falla un poco γ , sigue sin ser notorio en las curvas, solo se ve cuando falla κ . Y en resonancia, pequeños errores en κ se notan, y solo algunos fallos de γ son visibles.

$\Delta E=1.0$



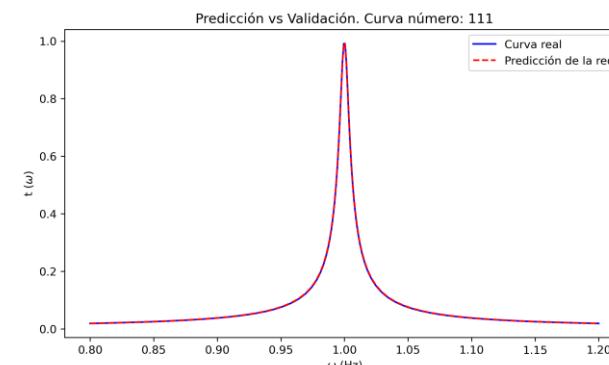
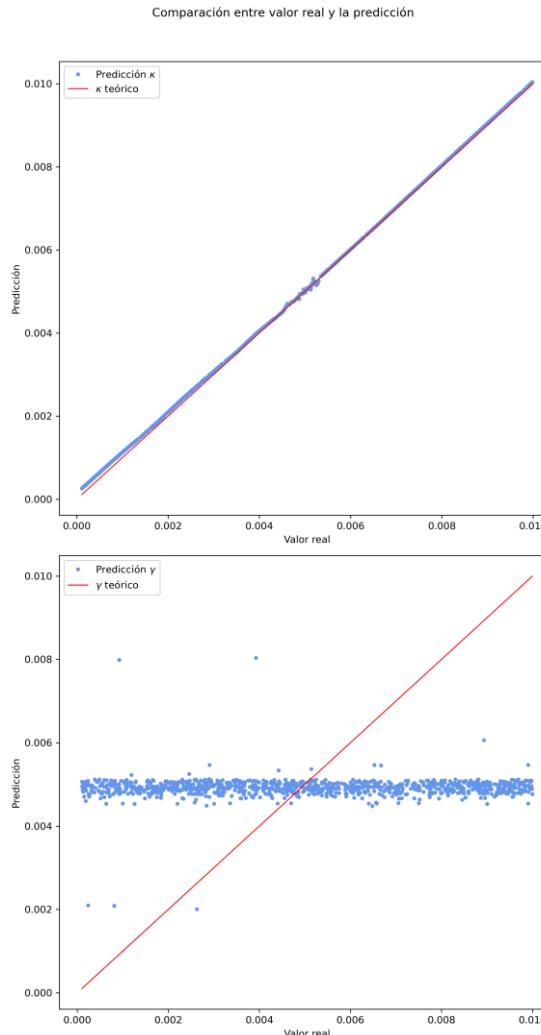
$\Delta E=1.05$



09/02/2024: Fijar todo menos gamma y ver la función respecto de gamma
(buscamos ver si es constante o simetrías).

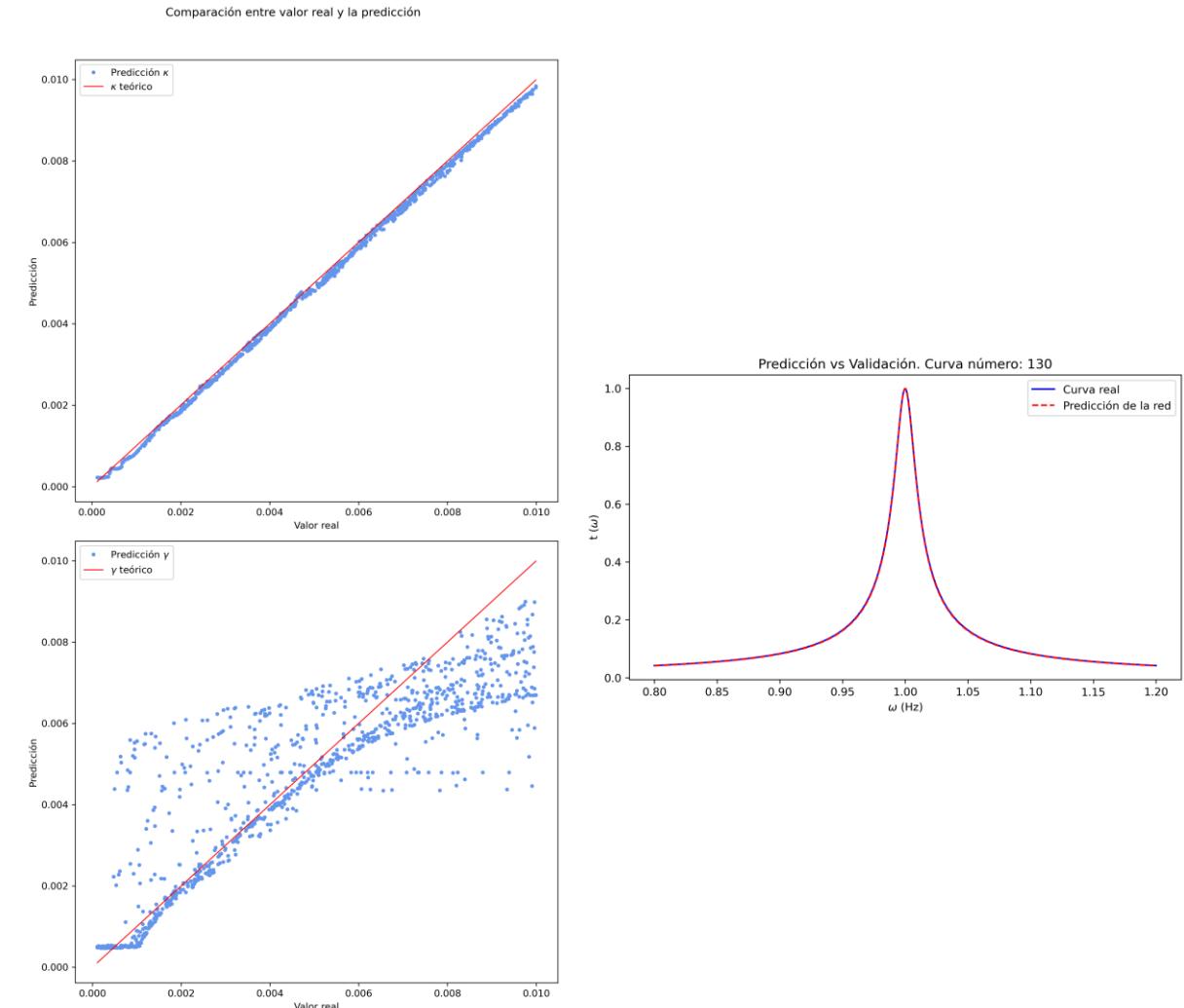
$g=1.05e-3$

$\Delta E=0.5$



Da igual lo impreciso que sea γ , fuera de resonancia, son todo Lorentzianas que ajustan perfectamente. Cerca de resonancia han desaparecido los "fanos", y se observa un intento de predecir γ , para este valor intermedio de g , pero no termina de ajustarse perfectamente. Y seguimos con que fallar en γ no afecta visualmente

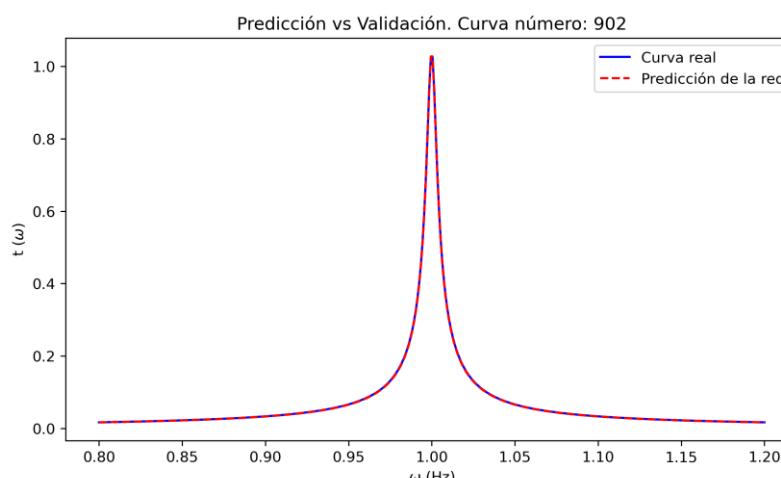
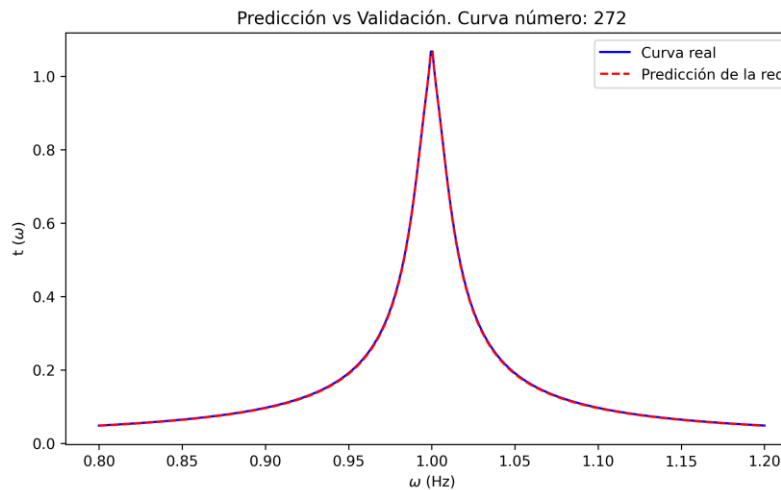
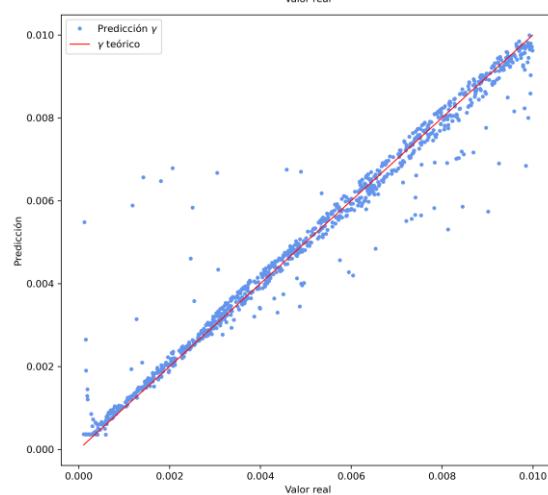
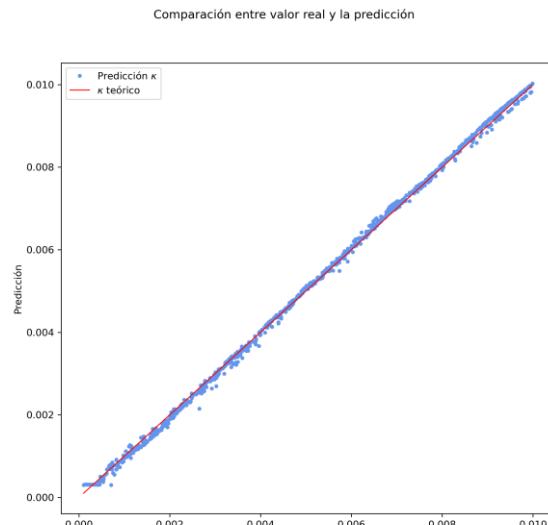
$\Delta E=0.95$



09/02/2024: Fijar todo menos gamma y ver la función respecto de gamma (buscamos ver si es constante o simetrías).

$g=1.05e-3$

$\Delta E=1.0$



Apenas se equivoca prediciendo γ , pero aun estando en resonancia no hay dobles picos, lo único que podemos ver son picos que se achatan y terminan en punta en vez de redondeado como en una Lorentziana.

Podemos concluir entonces, que para g pequeña y mediana, no tenemos "fanos" ni dobles picos. Si g es pequeña, γ lo falla la inmensa mayoría de veces. Pero si g es mediana o grande, entonces solo falla la predicción para ΔE fuera de resonancia, pero conforme nos acercamos a ella, se mejora la precisión muy significativamente.

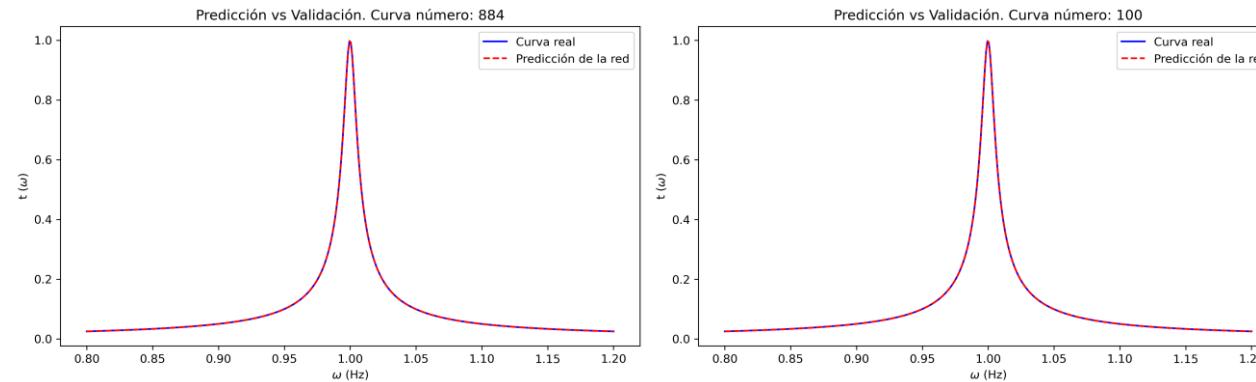
Además, los fallos en γ apenas afectan a la forma de la predicción de la curva, mientras que los errores en κ (incluso siendo minúsculos), nos dan deformaciones bastante evidentes.

09/02/2024: Fijar todo menos gamma y ver la función respecto de gamma (buscamos ver si es constante o simetrías).

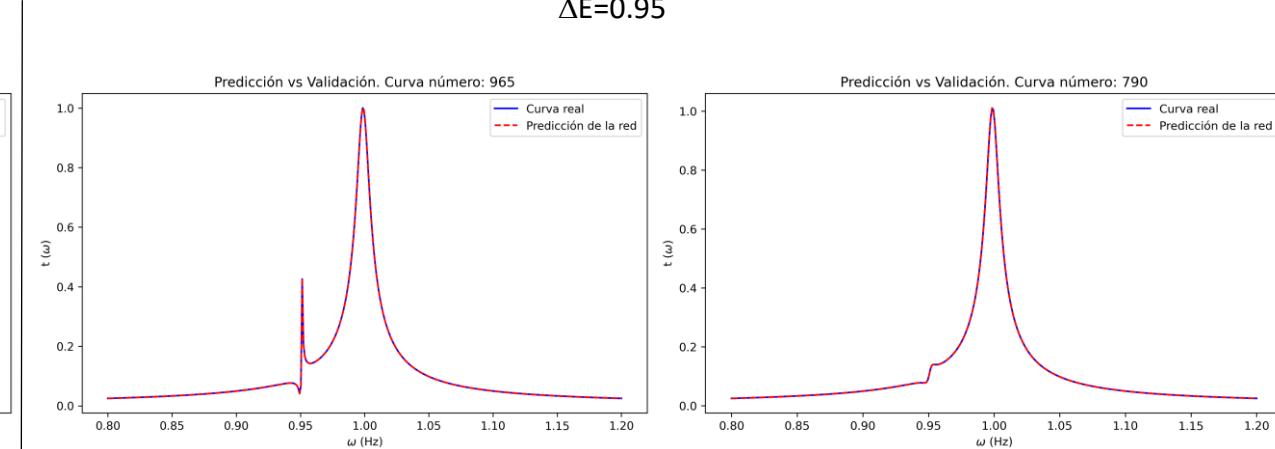
Usaremos un g grande, $g=7.6\text{e-}3$. Fijamos κ en un valor intermedio-grande, $\kappa=5\text{e-}3$.

Y vamos probando distintos ΔE

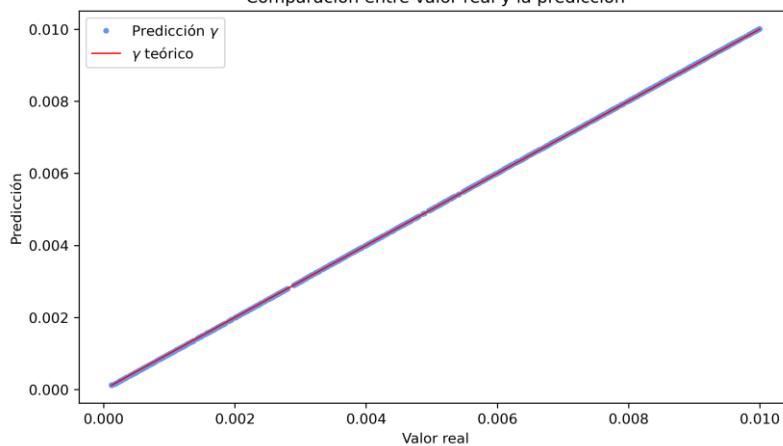
$\Delta E=0.5$



$\Delta E=0.95$

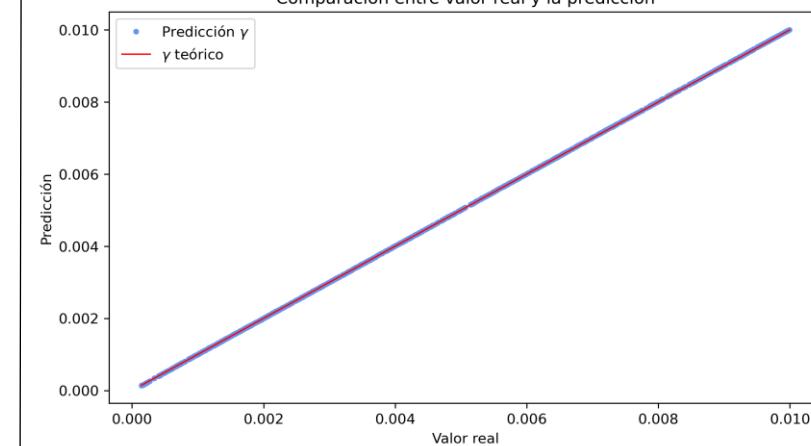


Comparación entre valor real y la predicción



Independientemente del valor de γ , la función es exactamente igual (visualmente), y predice perfectos todos los γ

Comparación entre valor real y la predicción



Cerca de la resonancia, según el valor de γ , cambia cómo se deforma la curva, generando el "fano", γ grande deforma poco y γ pequeña genera los "fanos" más destacados.

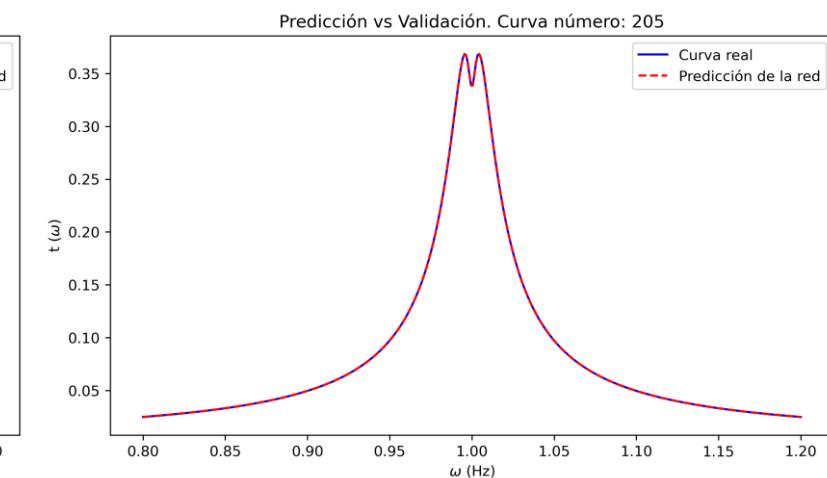
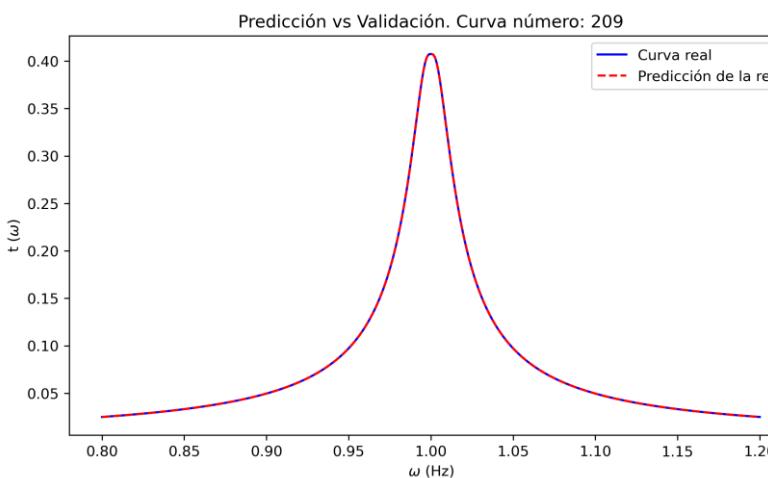
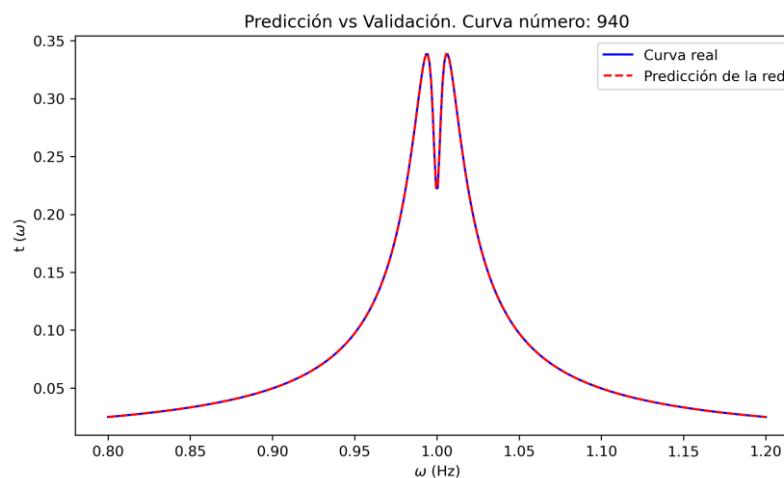
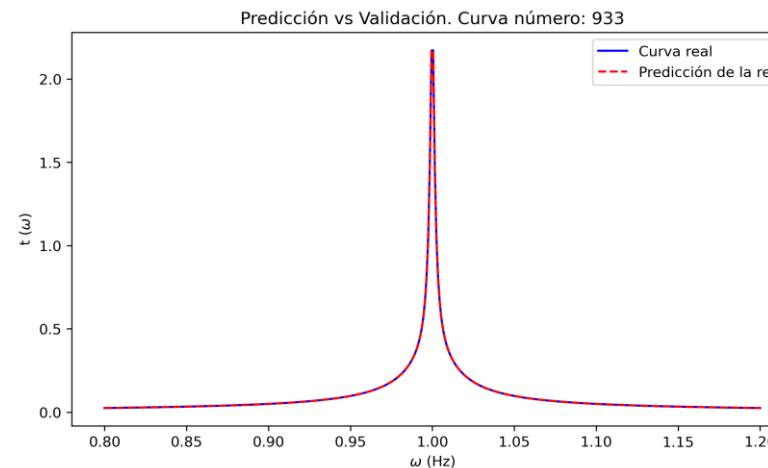
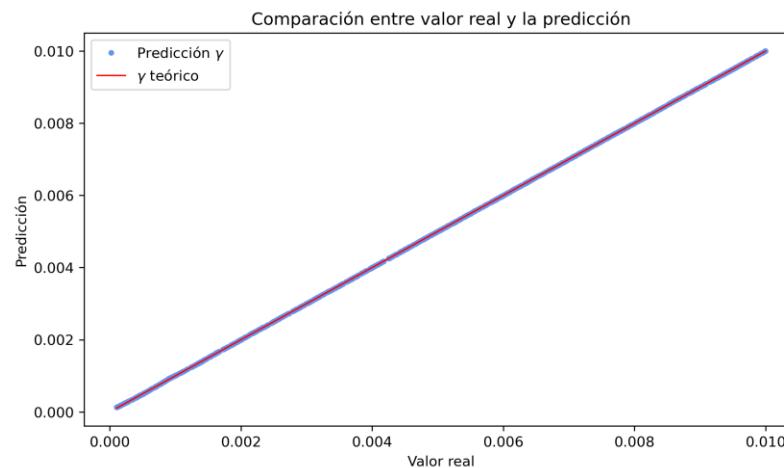
Y como se puede ver, la predicción es perfecta

09/02/2024: Fijar todo menos gamma y ver la función respecto de gamma (buscamos ver si es constante o simetrías).

Usaremos un γ grande, $\gamma=7.6\text{e-}3$. Fijamos κ en un valor intermedio-grande, $\kappa=5\text{e-}3$.

Y vamos probando distintos ΔE

$\Delta E=1.0$



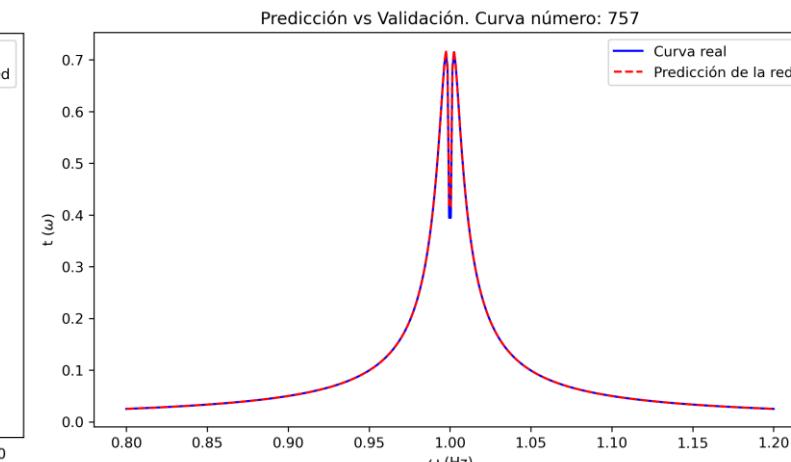
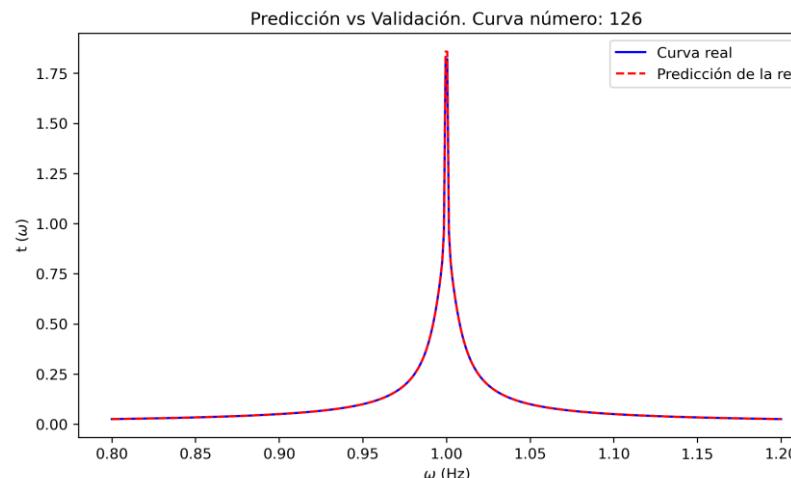
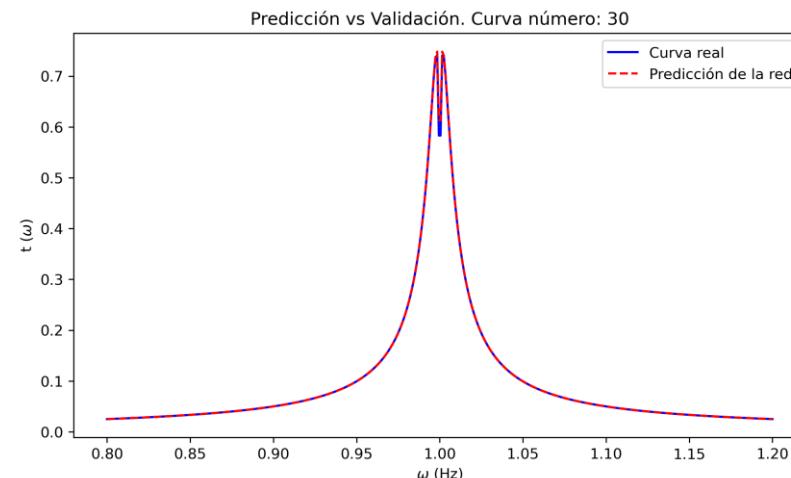
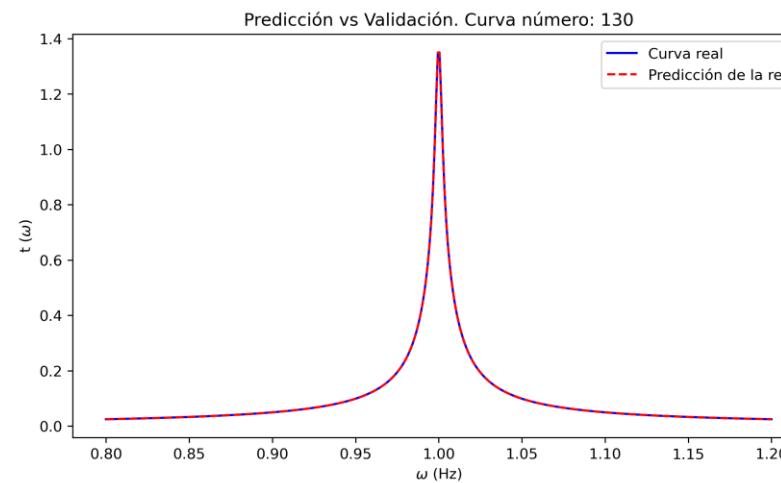
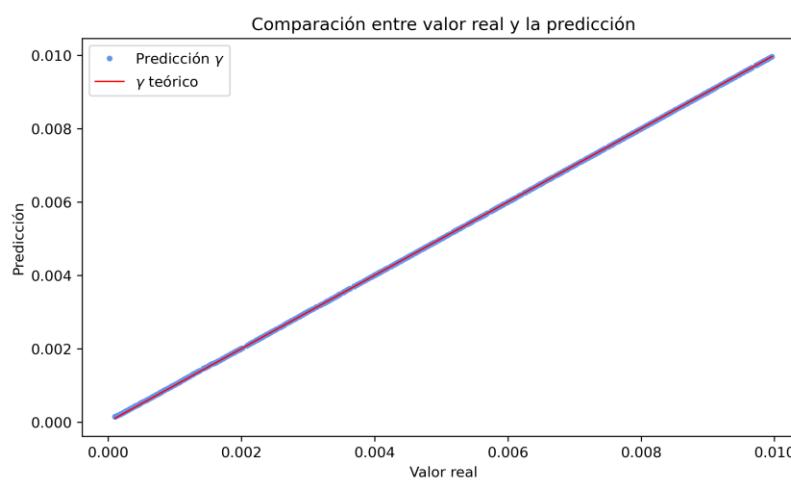
Se predicen perfectos todos los γ , y según su valor tenemos Lorentzianas de distinta amplitud, así como dobles picos de distintas amplitudes.

Si γ grande, tenemos Lorentzianas de poca amplitud. Si γ es mediana hasta $3.5\text{e-}3$ (aprox), tenemos Lorentzianas de amplitud mayor. Y conforme disminuimos γ , aparecen dobles picos de mayor amplitud

09/02/2024: Fijar todo menos gamma y ver la función respecto de gamma (buscamos ver si es constante o simetrías).

Usaremos un g mediano, $g=2.5\text{e-}3$. Fijamos κ , $\kappa=5\text{e-}3$. Y miramos directamente la resonancia

$\Delta E=1.0$

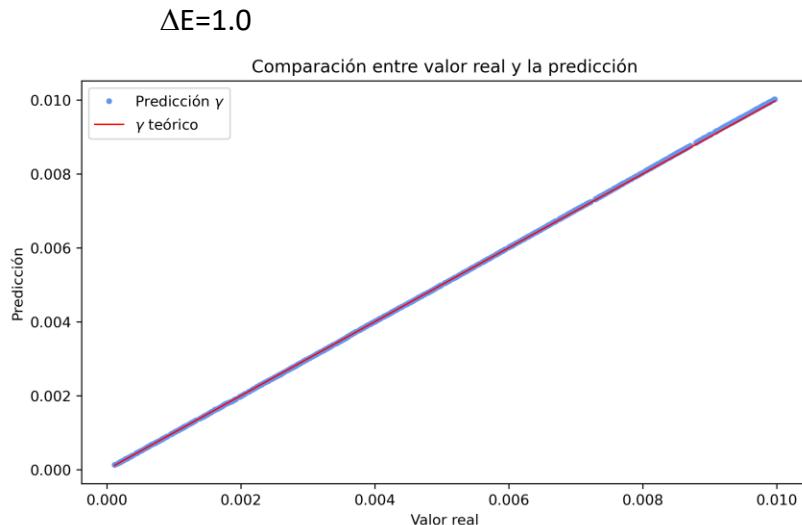


Se predicen perfectos casi todos los γ , falla ligeramente en los pequeños (los de los dobles picos).

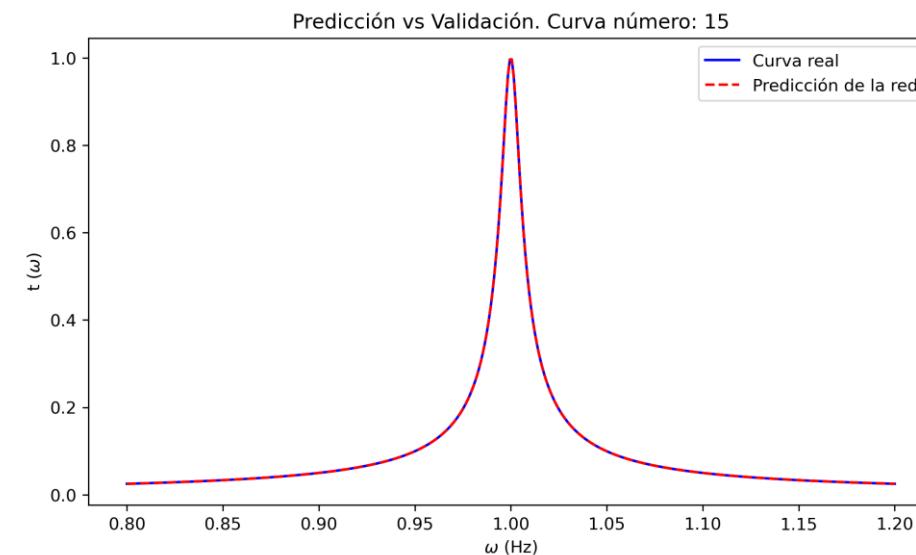
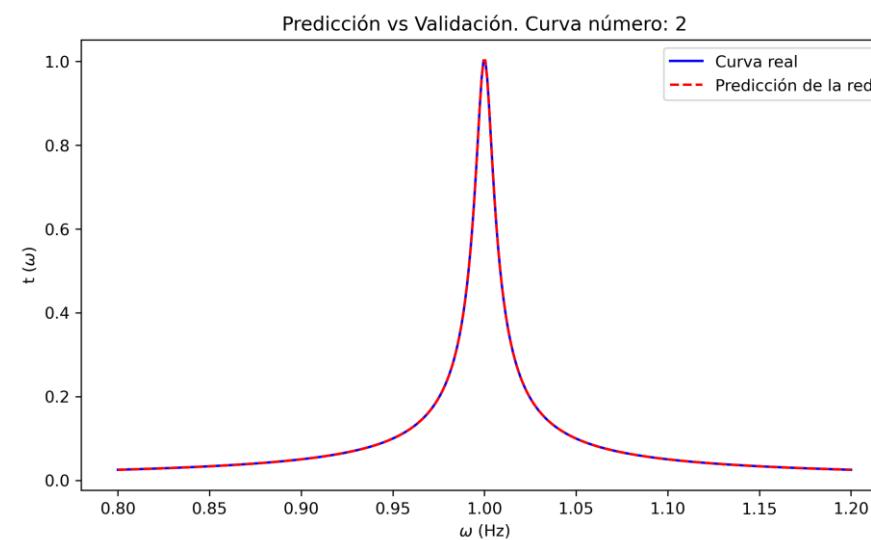
A nivel de curvas, aparecen muchos menos dobles picos que con g grande, y la amplitud de las Lorentzianas es mucho menor, hasta el punto de haber bastantes terminadas en punta

09/02/2024: Fijar todo menos gamma y ver la función respecto de gamma (buscamos ver si es constante o simetrías).

Ahora con un g pequeño, $g=2.5e-4$. Y $\kappa=5e-3$. Y miramos directamente la resonancia



Da igual cual sea el valor de γ , la diferencia entre los más grandes y los más pequeños es apenas imperceptible de manera visual (avanzando curvas se nota un ligero desplazamiento cuando pasa de uno pequeño a uno grande, o viceversa). Son todo Lorentzianas y no hay ningún doble pico.



09/02/2024: Fijar todo menos gamma y ver la función respecto de gamma (buscamos ver si es constante o simetrías).

Si reescribimos la función como:

$$t(\omega) = \frac{-\kappa [(\Delta E - \omega) - i\gamma] [((\Omega - \omega)(\Delta E - \omega) - \kappa\gamma) - i((\Omega - \omega)\gamma - (\Delta E - \omega)\kappa)]}{\omega^4 - 2\omega^3(\Delta E + \Omega) + \omega^2(\Omega^2 + \Delta E^2 + 4\Delta E\omega + 2g^2 - \gamma^2 - \kappa^2) - 2\omega(\omega^2\Delta E + \Delta E^2\Omega + \Delta Eg^2 + \omega g^2 - \omega\gamma^2 - \Delta E\kappa^2) + (\Omega^2\Delta E^2 + g^4 + \kappa^2\gamma^2 - 2g^2\kappa\gamma + 2\Omega\Delta Eg^2 - \omega^2\gamma^2 - \Delta E^2\kappa^2)}$$

Y obtenemos las raíces del denominador:

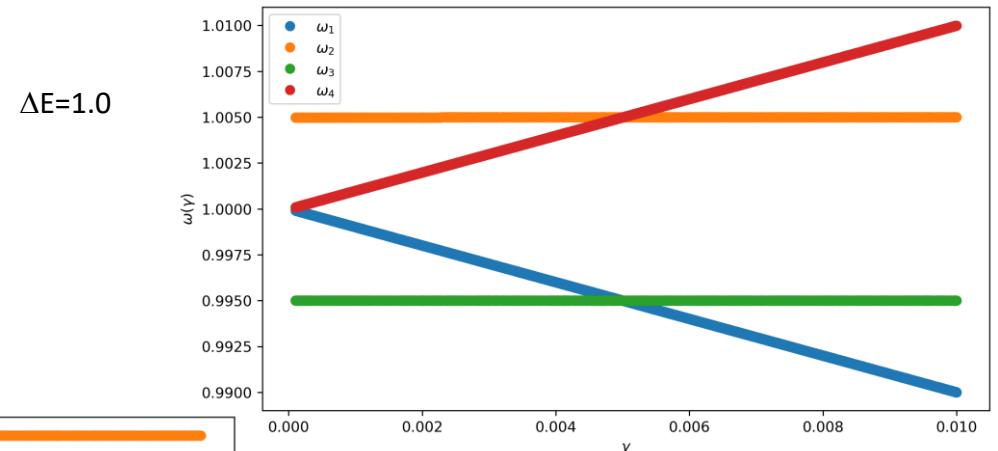
$$\omega_1 = \frac{1}{2} \left(-\sqrt{\Delta E^2 - 2\Delta E(\kappa + \gamma + \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma + \Omega)^2 + \Delta E + \kappa - \gamma + \Omega \right)$$

$$\omega_2 = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\Delta E^2 - 2\Delta E(\kappa + \gamma + \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma + \Omega)^2 + \Delta E + \kappa - \gamma + \Omega \right)$$

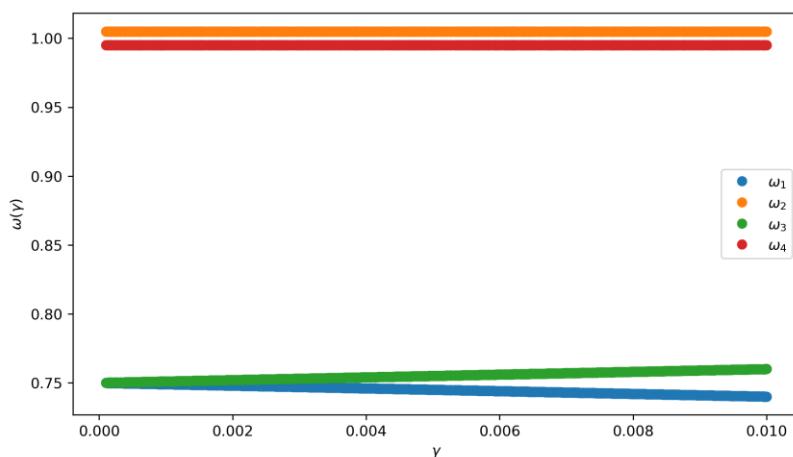
$$\omega_3 = \frac{1}{2} \left(-\sqrt{\Delta E^2 + 2\Delta E(\kappa + \gamma - \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma - \Omega)^2 + \Delta E - \kappa + \gamma + \Omega \right)$$

$$\omega_4 = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\Delta E^2 + 2\Delta E(\kappa + \gamma - \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma - \Omega)^2 + \Delta E - \kappa + \gamma + \Omega \right)$$

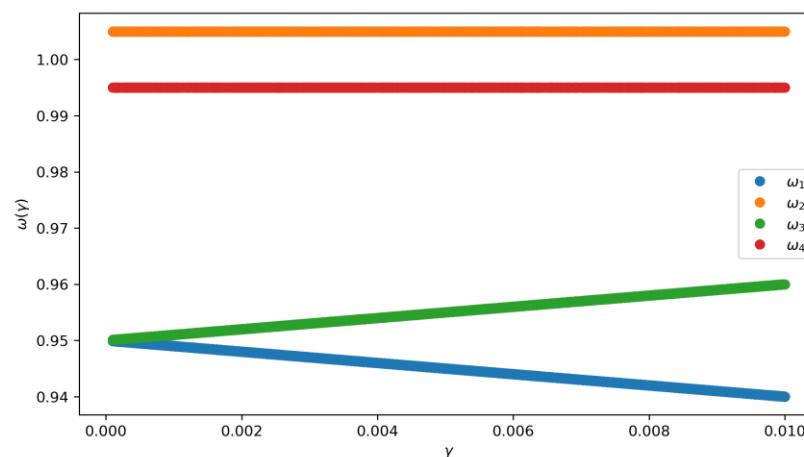
Usaremos $g=2.5e-4$, $\kappa=5e-3$, y distintos ΔE para ver la relación entre ω y γ , $\omega(\gamma)$



$\Delta E=0.75$



$\Delta E=0.95$



Fuera de la resonancia tenemos comportamientos planos en las ω con la raíz positiva (ω_2 y ω_4). Y comportamientos lineales que nacen del valor de ΔE , uno creciente y otro decreciente, en las raíces negativas (ω_1 y ω_3). Conforme nos alejamos de la resonancia, más cercanos son los planos y menos pendientes los lineales.
En la resonancia, los comportamientos planos los llevan ω_2 y ω_3 , y los lineales son de pendiente 1.

09/02/2024: Fijar todo menos gamma y ver la función respecto de gamma (buscamos ver si es constante o simetrías).

Si reescribimos la función como:

$$t(\omega) = \frac{-\kappa [(\Delta E - \omega) - i\gamma] [((\Omega - \omega)(\Delta E - \omega) - \kappa\gamma) - i((\Omega - \omega)\gamma - (\Delta E - \omega)\kappa)]}{\omega^4 - 2\omega^3(\Delta E + \Omega) + \omega^2(\Omega^2 + \Delta E^2 + 4\Delta E\omega + 2g^2 - \gamma^2 - \kappa^2) - 2\omega(\omega^2\Delta E + \Delta E^2\Omega + \Delta Eg^2 + \omega g^2 - \omega\gamma^2 - \Delta E\kappa^2) + (\Omega^2\Delta E^2 + g^4 + \kappa^2\gamma^2 - 2g^2\kappa\gamma + 2\Omega\Delta Eg^2 - \omega^2\gamma^2 - \Delta E^2\kappa^2)}$$

Y obtenemos la raíces del denominador:

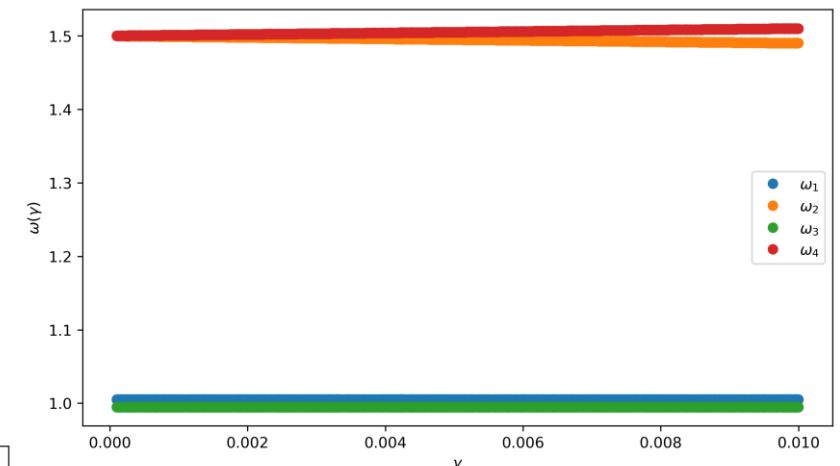
$$\omega_1 = \frac{1}{2} \left(-\sqrt{\Delta E^2 - 2\Delta E(\kappa + \gamma + \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma + \Omega)^2 + \Delta E + \kappa - \gamma + \Omega \right)$$

$$\omega_2 = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\Delta E^2 - 2\Delta E(\kappa + \gamma + \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma + \Omega)^2 + \Delta E + \kappa - \gamma + \Omega \right)$$

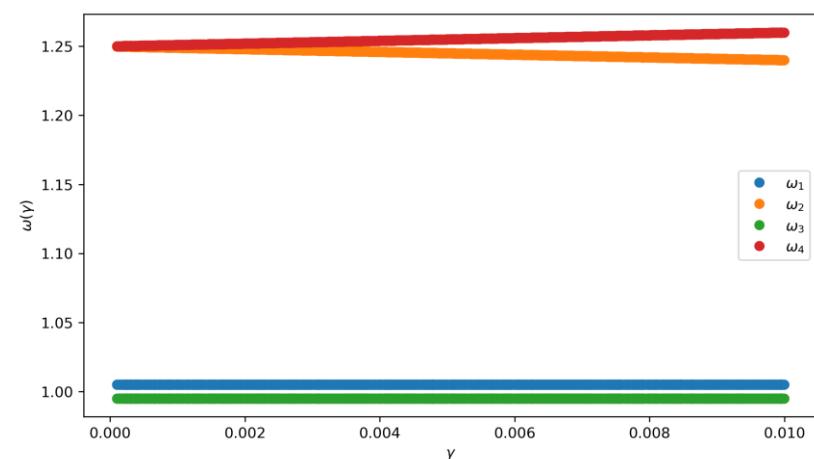
$$\omega_3 = \frac{1}{2} \left(-\sqrt{\Delta E^2 + 2\Delta E(\kappa + \gamma - \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma - \Omega)^2 + \Delta E - \kappa + \gamma + \Omega \right)$$

$$\omega_4 = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\Delta E^2 + 2\Delta E(\kappa + \gamma - \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma - \Omega)^2 + \Delta E - \kappa + \gamma + \Omega \right)$$

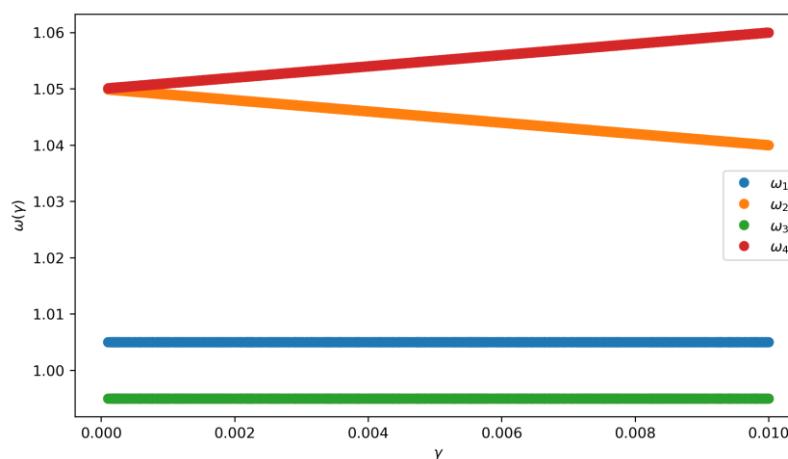
Usaremos $g=2.5e-4$, $\kappa=5e-3$, y distintos ΔE para ver la relación entre ω y γ , $\omega(\gamma)$



$\Delta E=1.25$

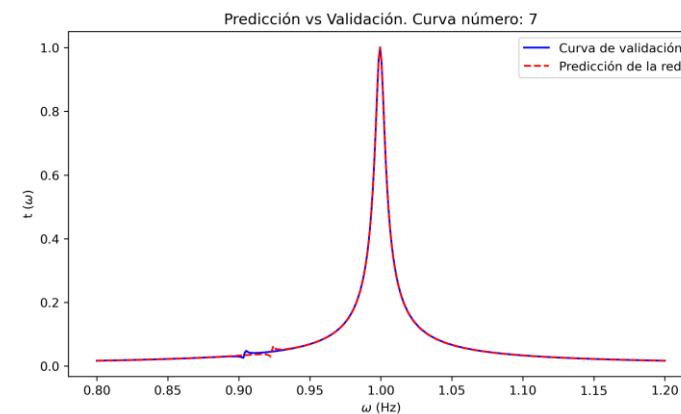
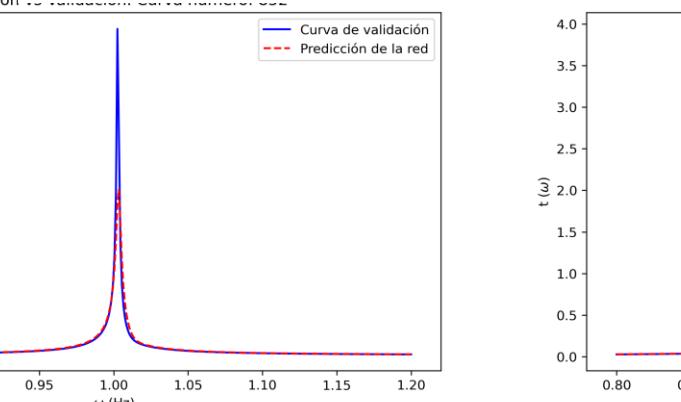
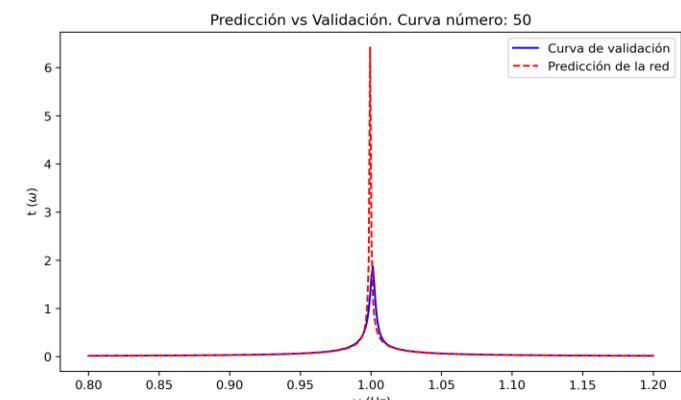
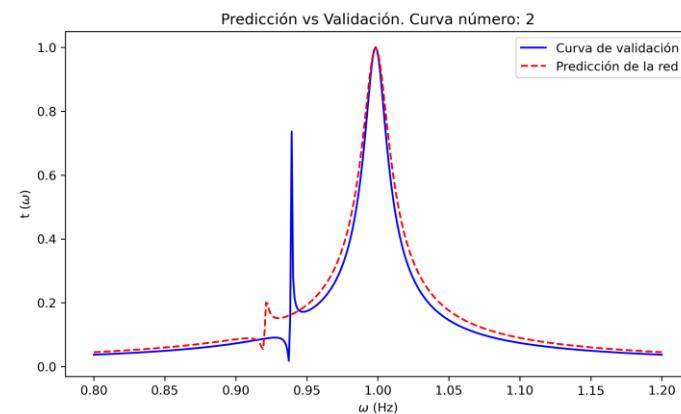
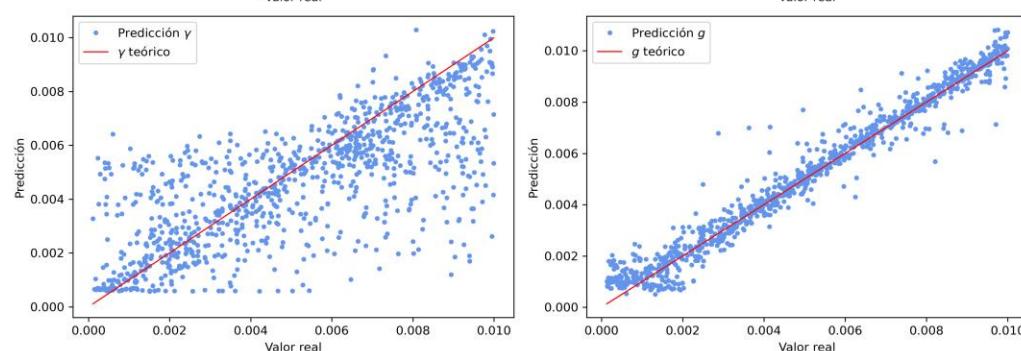
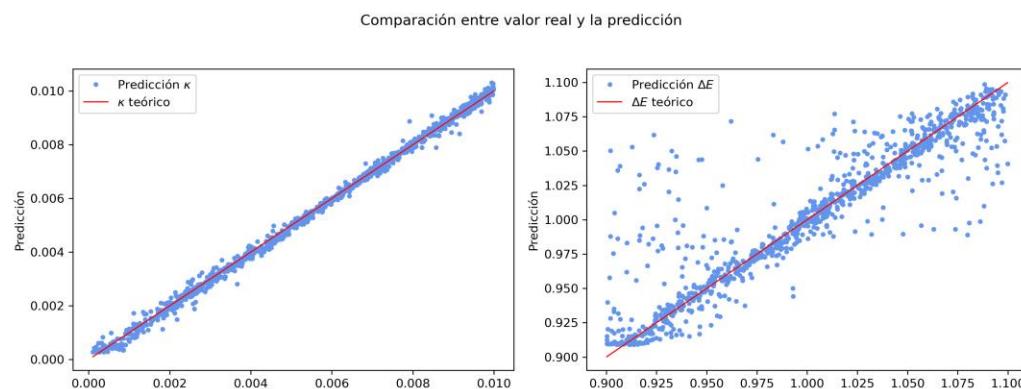


$\Delta E=1.05$



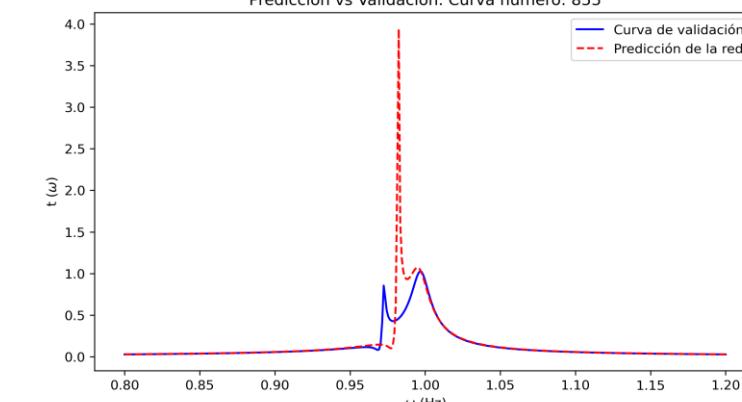
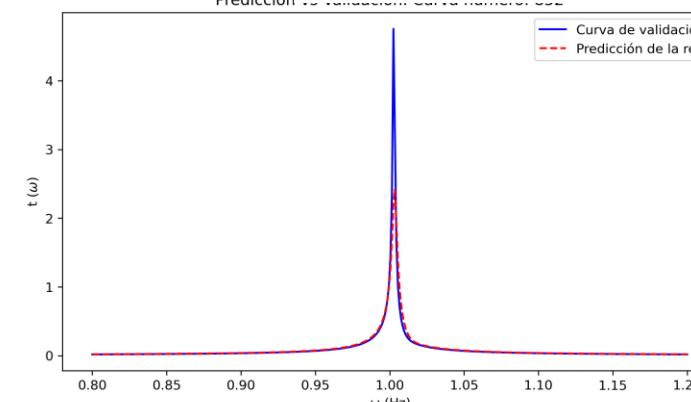
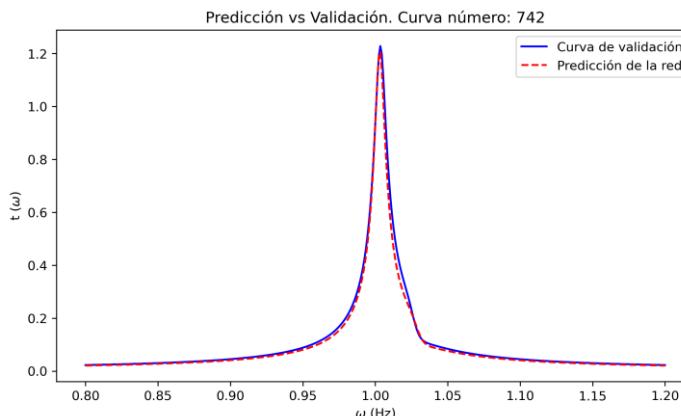
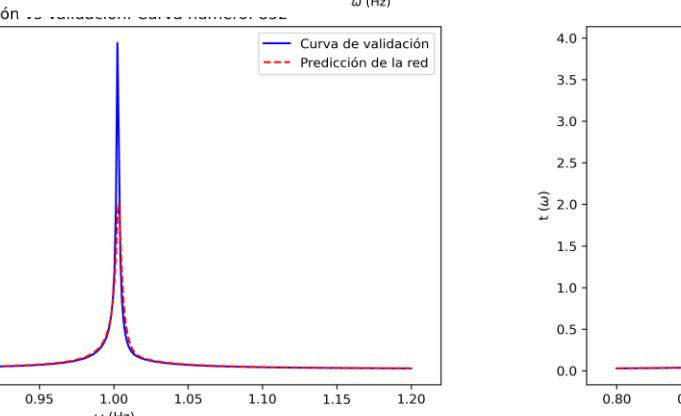
El comportamiento es el mismo que hemos mencionado antes, pero se invierten las posiciones de los planos y los lineales (ahora los planos quedan en ω_1 y ω_3).

09/02/2024: Recortar el rango de ΔE a 0.9-1.1.



Se mejora muy notablemente la predicción de ΔE , desapareciendo casi la forma de escalón. Además, podemos ver que siguen presentándose todo tipo de formas, y se mejora notablemente la precisión de γ .

Por ende, tenemos unas curvas mucho más precisas en la mayoría de los casos.



10/02/2024: Fijar todo menos gamma y ver la función respecto de gamma (buscamos ver si es constante o simetrías).

Si reescribimos la función como:

$$t(\omega) = \frac{-\kappa [(\Delta E - \omega) - i\gamma] [((\Omega - \omega)(\Delta E - \omega) - \kappa\gamma) - i((\Omega - \omega)\gamma - (\Delta E - \omega)\kappa)]}{\omega^4 - 2\omega^3(\Delta E + \Omega) + \omega^2(\Omega^2 + \Delta E^2 + 4\Delta E\omega + 2g^2 - \gamma^2 - \kappa^2) - 2\omega(\omega^2\Delta E + \Delta E^2\Omega + \Delta Eg^2 + \omega g^2 - \omega\gamma^2 - \Delta E\kappa^2) + (\Omega^2\Delta E^2 + g^4 + \kappa^2\gamma^2 - 2g^2\kappa\gamma + 2\Omega\Delta Eg^2 - \omega^2\gamma^2 - \Delta E^2\kappa^2)}$$

Y obtenemos la raíces del denominador:

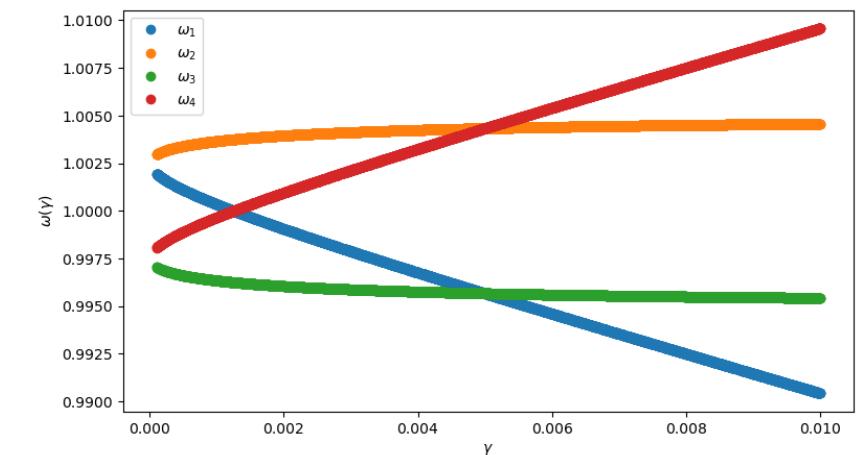
$$\omega_1 = \frac{1}{2} \left(-\sqrt{\Delta E^2 - 2\Delta E(\kappa + \gamma + \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma + \Omega)^2 + \Delta E + \kappa - \gamma + \Omega \right)$$

$$\omega_2 = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\Delta E^2 - 2\Delta E(\kappa + \gamma + \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma + \Omega)^2 + \Delta E + \kappa - \gamma + \Omega \right)$$

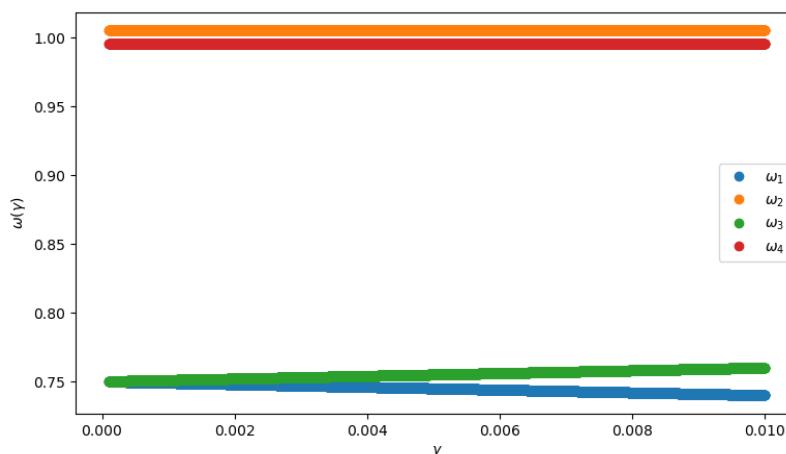
$$\omega_3 = \frac{1}{2} \left(-\sqrt{\Delta E^2 + 2\Delta E(\kappa + \gamma - \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma - \Omega)^2 + \Delta E - \kappa + \gamma + \Omega \right)$$

$$\omega_4 = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\Delta E^2 + 2\Delta E(\kappa + \gamma - \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma - \Omega)^2 + \Delta E - \kappa + \gamma + \Omega \right)$$

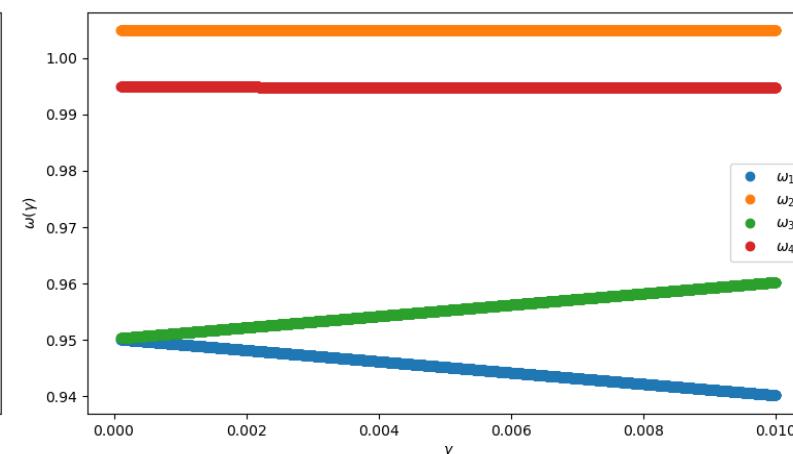
Ahora usamos, $g=2.5e-3$, $\kappa=5e-3$.



$\Delta E = 0.75$



$\Delta E = 0.95$



Fuera de la resonancia y acercándonos a ella, es un comportamiento análogo al de g pequeña. Pero en la resonancia, la dependencia deja de ser horizontal o lineal, y pasa a tener un poco de curvatura.

10/02/2024: Fijar todo menos gamma y ver la función respecto de gamma (buscamos ver si es constante o simetrías).

Si reescribimos la función como:

$$t(\omega) = \frac{-\kappa [(\Delta E - \omega) - i\gamma] [((\Omega - \omega)(\Delta E - \omega) - \kappa\gamma)] - i ((\Omega - \omega)\gamma - (\Delta E - \omega)\kappa)}{\omega^4 - 2\omega^3(\Delta E + \Omega) + \omega^2(\Omega^2 + \Delta E^2 + 4\Delta E\omega + 2g^2 - \gamma^2 - \kappa^2) - 2\omega(\omega^2\Delta E + \Delta E^2\Omega + \Delta Eg^2 + \omega g^2 - \omega\gamma^2 - \Delta E\kappa^2) + (\Omega^2\Delta E^2 + g^4 + \kappa^2\gamma^2 - 2g^2\kappa\gamma + 2\Omega\Delta Eg^2 - \omega^2\gamma^2 - \Delta E^2\kappa^2)}$$

Y obtenemos la raíces del denominador:

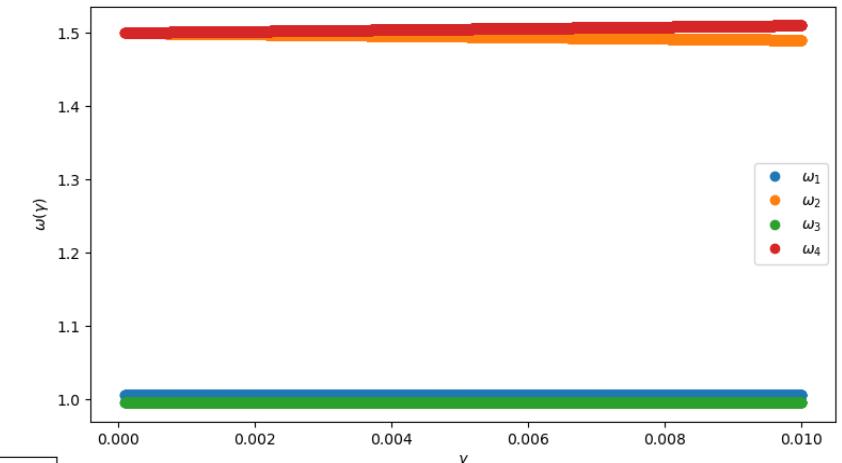
$$\omega_1 = \frac{1}{2} \left(-\sqrt{\Delta E^2 - 2\Delta E(\kappa + \gamma + \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma + \Omega)^2 + \Delta E + \kappa - \gamma + \Omega \right)$$

$$\omega_2 = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\Delta E^2 - 2\Delta E(\kappa + \gamma + \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma + \Omega)^2 + \Delta E + \kappa - \gamma + \Omega \right)$$

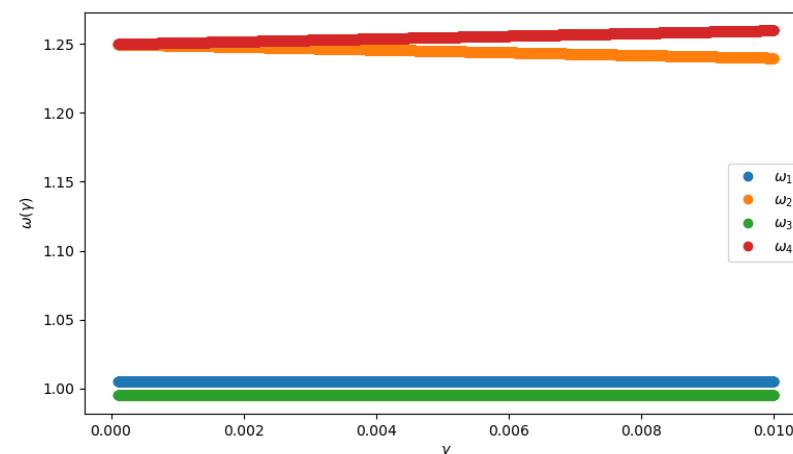
$$\omega_3 = \frac{1}{2} \left(-\sqrt{\Delta E^2 + 2\Delta E(\kappa + \gamma - \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma - \Omega)^2 + \Delta E - \kappa + \gamma + \Omega \right)$$

$$\omega_4 = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\Delta E^2 + 2\Delta E(\kappa + \gamma - \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma - \Omega)^2 + \Delta E - \kappa + \gamma + \Omega \right)$$

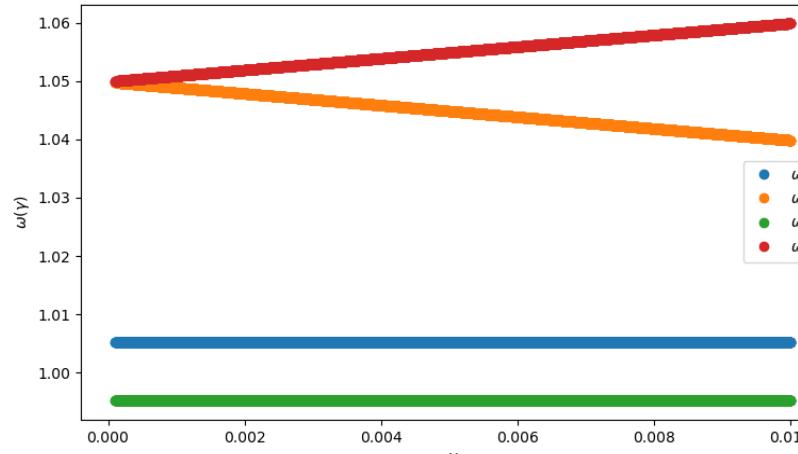
Ahora usamos, $g=2.5e-3$, $\kappa=5e-3$.



$\Delta E = 1.25$



$\Delta E = 1.05$



El comportamiento es el mismo que hemos mencionado antes, pero se invierten las posiciones de los planos y los lineales (ahora los planos quedan en ω_1 y ω_3).

10/02/2024: Fijar todo menos gamma y ver la función respecto de gamma (buscamos ver si es constante o simetrías).

Si reescribimos la función como:

$$t(\omega) = \frac{-\kappa [(\Delta E - \omega) - i\gamma] [((\Omega - \omega)(\Delta E - \omega) - \kappa\gamma)] - i ((\Omega - \omega)\gamma - (\Delta E - \omega)\kappa)}{\omega^4 - 2\omega^3(\Delta E + \Omega) + \omega^2(\Omega^2 + \Delta E^2 + 4\Delta E\omega + 2g^2 - \gamma^2 - \kappa^2) - 2\omega(\omega^2\Delta E + \Delta E^2\Omega + \Delta Eg^2 + \omega g^2 - \omega\gamma^2 - \Delta E\kappa^2) + (\Omega^2\Delta E^2 + g^4 + \kappa^2\gamma^2 - 2g^2\kappa\gamma + 2\Omega\Delta Eg^2 - \omega^2\gamma^2 - \Delta E^2\kappa^2)}$$

Y obtenemos la raíces del denominador:

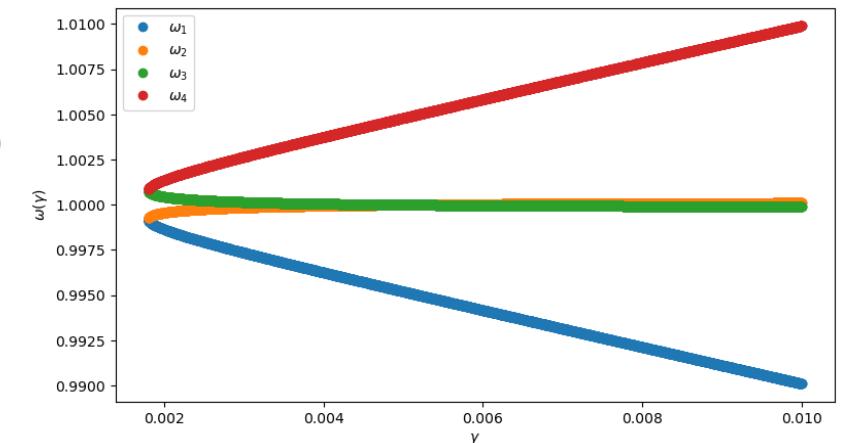
$$\omega_1 = \frac{1}{2} \left(-\sqrt{\Delta E^2 - 2\Delta E(\kappa + \gamma + \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma + \Omega)^2 + \Delta E + \kappa - \gamma + \Omega \right)$$

$$\omega_2 = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\Delta E^2 - 2\Delta E(\kappa + \gamma + \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma + \Omega)^2 + \Delta E + \kappa - \gamma + \Omega \right)$$

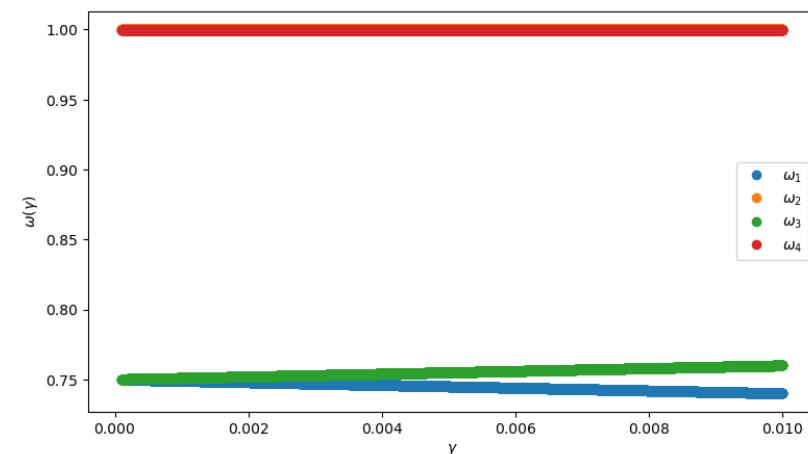
$$\omega_3 = \frac{1}{2} \left(-\sqrt{\Delta E^2 + 2\Delta E(\kappa + \gamma - \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma - \Omega)^2 + \Delta E - \kappa + \gamma + \Omega \right)$$

$$\omega_4 = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\Delta E^2 + 2\Delta E(\kappa + \gamma - \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma - \Omega)^2 + \Delta E - \kappa + \gamma + \Omega \right)$$

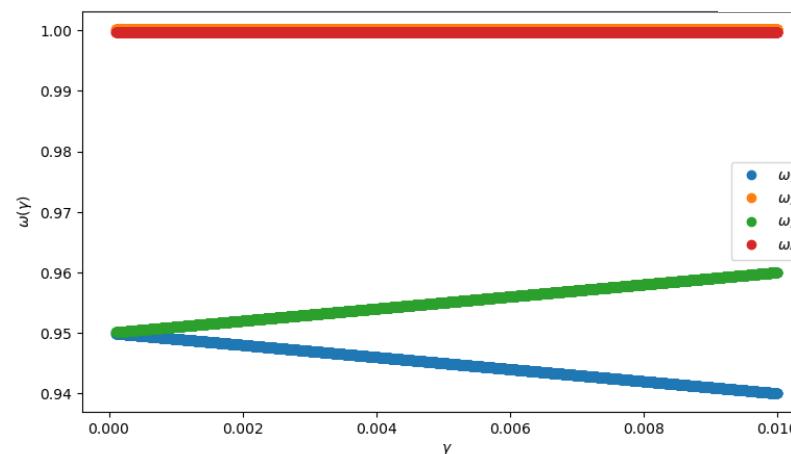
Probemos un κ más pequeño, con g intermedio. $\kappa=2e-4$, $g=1e-3$



$\Delta E = 0.75$



$\Delta E = 0.95$



Fuera de la resonancia y acercándonos a ella, es un comportamiento análogo al de g pequeña, y se solapan ω_2 y ω_4 . Pero en la resonancia, al igual que antes, se curvan las rectas, pero con mayor intensidad de curvatura.

10/02/2024: Fijar todo menos gamma y ver la función respecto de gamma (buscamos ver si es constante o simetrías).

Si reescribimos la función como:

$$t(\omega) = \frac{-\kappa [(\Delta E - \omega) - i\gamma] [((\Omega - \omega)(\Delta E - \omega) - \kappa\gamma)] - i ((\Omega - \omega)\gamma - (\Delta E - \omega)\kappa)}{\omega^4 - 2\omega^3(\Delta E + \Omega) + \omega^2(\Omega^2 + \Delta E^2 + 4\Delta E\omega + 2g^2 - \gamma^2 - \kappa^2) - 2\omega(\omega^2\Delta E + \Delta E^2\Omega + \Delta Eg^2 + \omega g^2 - \omega\gamma^2 - \Delta E\kappa^2) + (\Omega^2\Delta E^2 + g^4 + \kappa^2\gamma^2 - 2g^2\kappa\gamma + 2\Omega\Delta Eg^2 - \omega^2\gamma^2 - \Delta E^2\kappa^2)}$$

Y obtenemos la raíces del denominador:

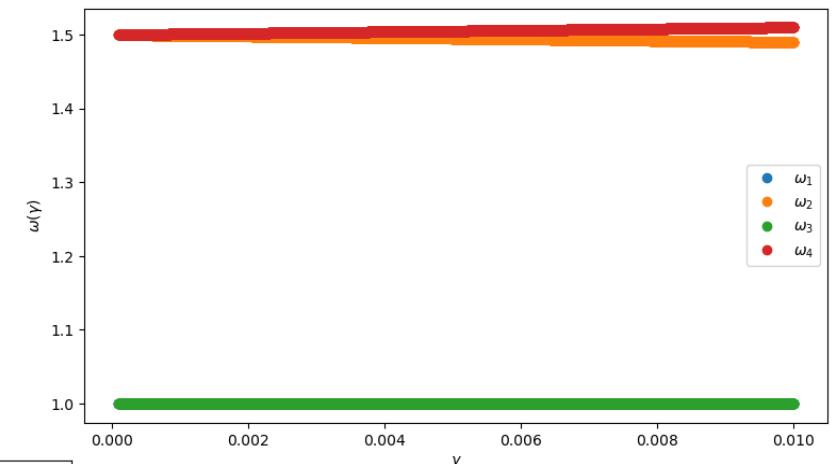
$$\omega_1 = \frac{1}{2} \left(-\sqrt{\Delta E^2 - 2\Delta E(\kappa + \gamma + \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma + \Omega)^2 + \Delta E + \kappa - \gamma + \Omega \right)$$

$$\omega_2 = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\Delta E^2 - 2\Delta E(\kappa + \gamma + \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma + \Omega)^2 + \Delta E + \kappa - \gamma + \Omega \right)$$

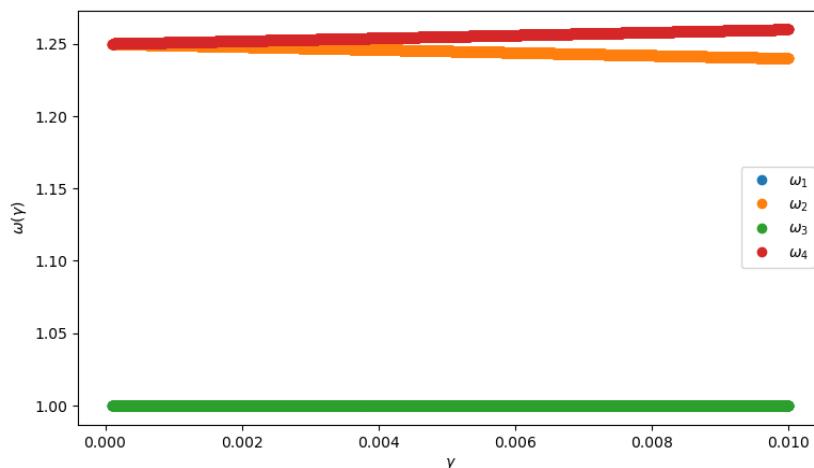
$$\omega_3 = \frac{1}{2} \left(-\sqrt{\Delta E^2 + 2\Delta E(\kappa + \gamma - \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma - \Omega)^2 + \Delta E - \kappa + \gamma + \Omega \right)$$

$$\omega_4 = \frac{1}{2} \left(\sqrt{\Delta E^2 + 2\Delta E(\kappa + \gamma - \Omega)} - 4g^2 + (\kappa + \gamma - \Omega)^2 + \Delta E - \kappa + \gamma + \Omega \right)$$

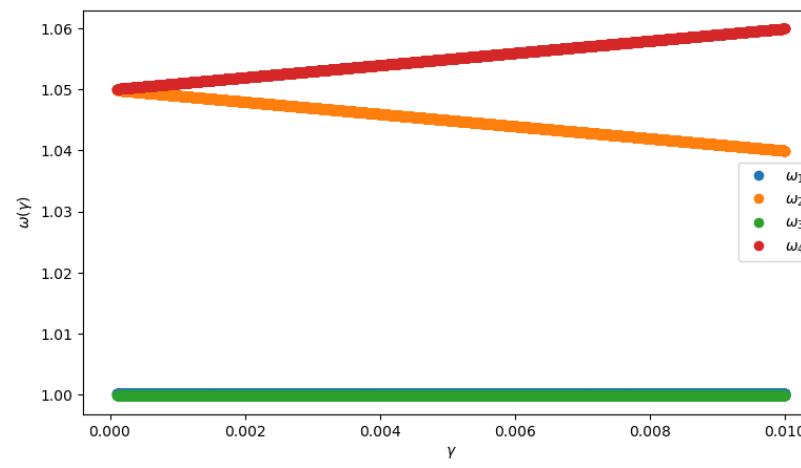
Probemos un κ más pequeño, con g intermedio. $\kappa=2e-4$, $g=1e-3$



$\Delta E = 1.25$



$\Delta E = 1.05$

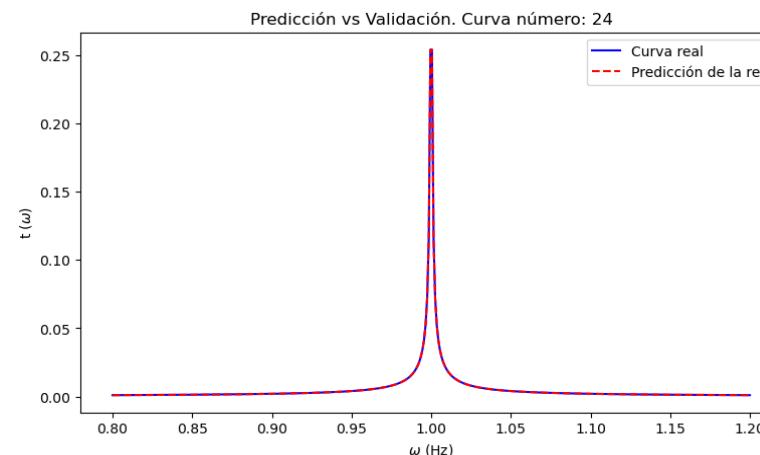
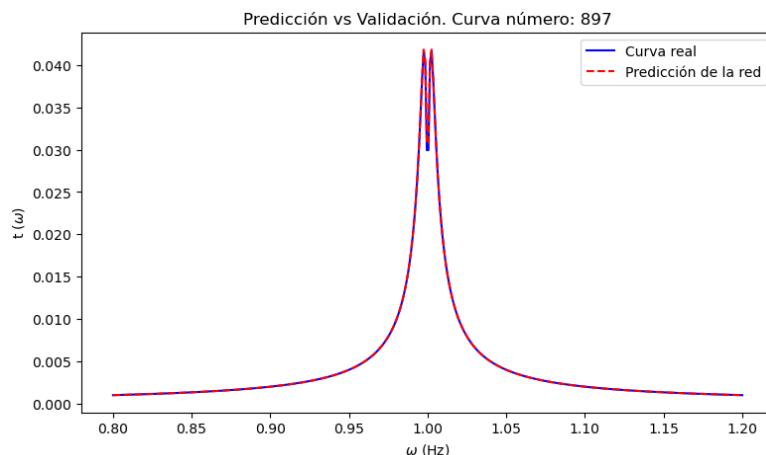
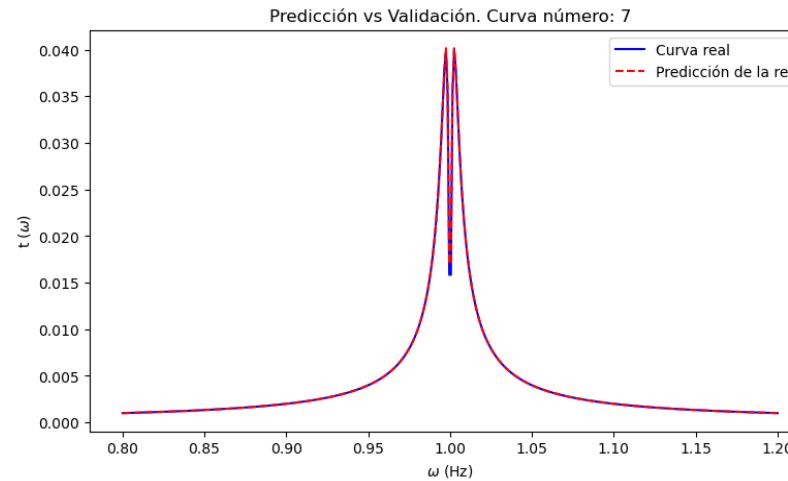
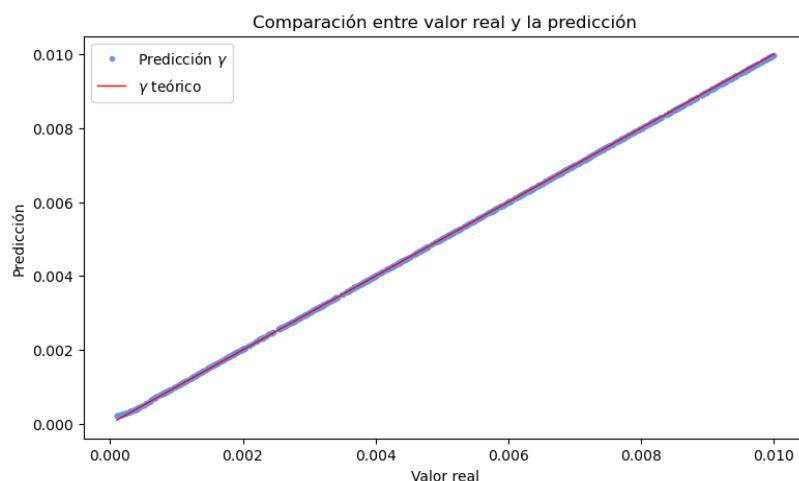


No varía respecto del κ anterior

10/02/2024: Fijar todo menos gamma y ver la función respecto de gamma (buscamos ver si es constante o simetrías).

Analicemos ahora un κ pequeño, $\kappa=2.0\text{e-}4$. Con g mediano, $g=2.5\text{e-}3$. Y vemos la resonancia

$\Delta E=1.0$

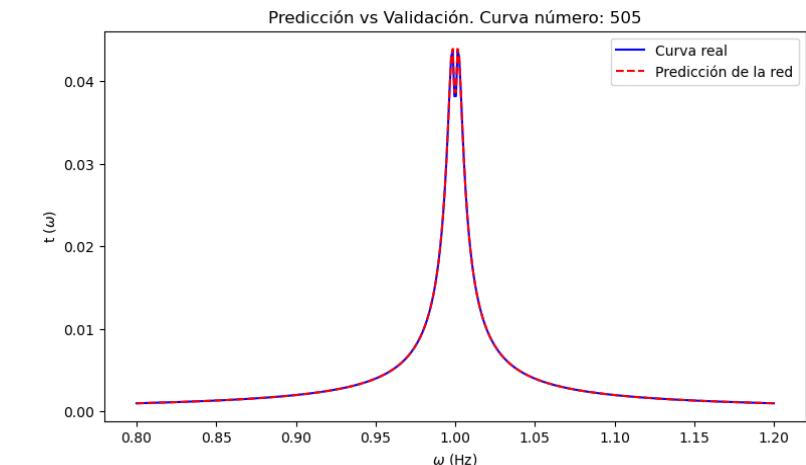


*Si tanto κ como g son pequeños, solo tenemos Lorentzianas las cuales no cambian su forma (sin importar el valor de γ), lo único que varía es la escala del eje y, de manera muy ligera, lo que nos indica el tamaño de la curva. γ pequeño es más altura y γ grande menor altura.

Se predicen perfectos casi todos los γ , falla ligeramente en los pequeños (los de los dobles picos).

A nivel de curvas, tenemos bastantes dobles picos, pero el tamaño de las curvas es menor (menor valor en el eje y), debido al κ pequeño.

Fuera de resonancia será análogo a κ grande, pero con menor altura de las curvas

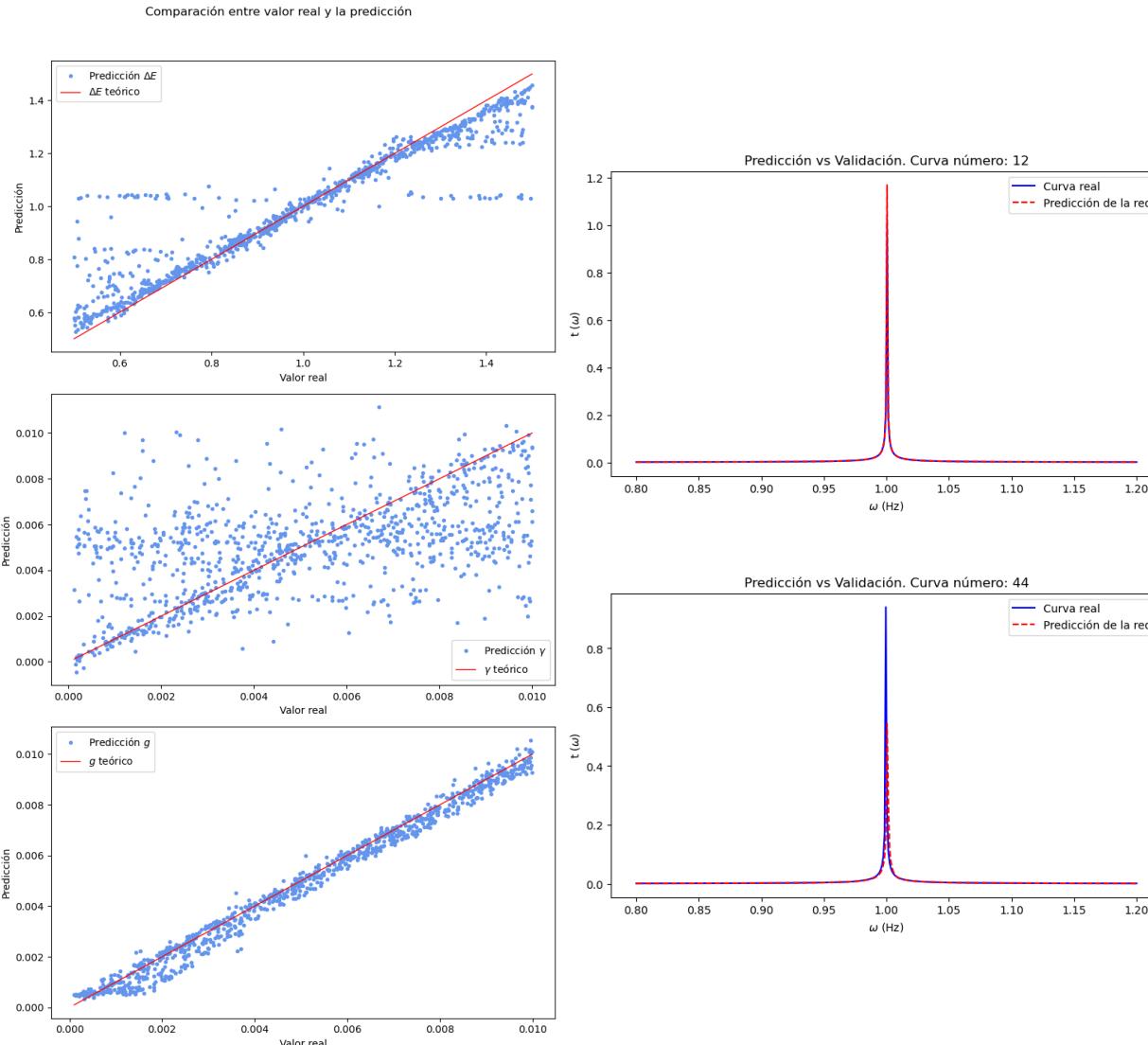


Podemos extraer las siguientes conclusiones:

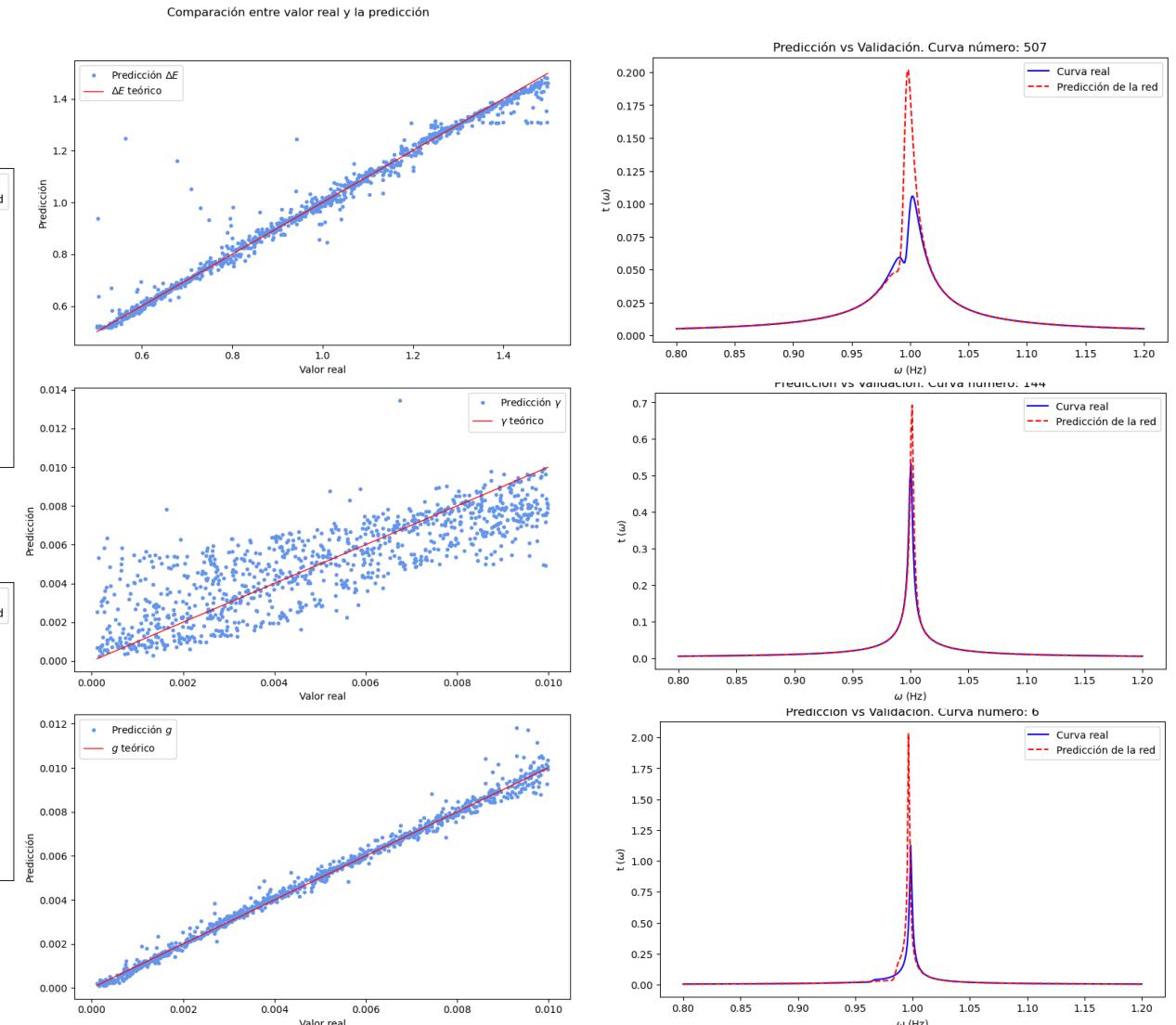
1. γ es un parámetro prácticamente despreciable, el cual adquiere su mayor importancia en la resonancia o cerca de ella, haciendo que los "fanos" y los dobles picos reduzcan su tamaño, cuando éste es grande.
2. κ es el parámetro más dominante, ya que determina la altura de nuestras curvas, y un pequeño fallo en su predicción, desvía completamente la forma de la curva (principalmente en la altura).
3. ΔE solo nos sirve para ver los puntos de resonancia y el lado en el que debe haber un "fano" o deformación, y salvo fallos en zona de resonancia (los cuales son notorios por muy pequeños que sean), no presenta problemas para el ajuste. Aunque parezca lo contrario, es el parámetro que menos veces falla junto a κ , y aunque pocas veces lo obtiene perfecto, tiene desviaciones muy ligeras, las cuales no afectan (excepto en resonancia).
4. g es quien nos limita la anchura de la Lorentziana, y cuanto menor sea su valor, mayor será la anchura de la curva. Pero si g es demasiado pequeño, también nos desaparecen los "fanos" y los dobles picos. Pequeños fallos en la predicción de g , hacen que, si estamos cerca de resonancia, falle en la predicción de la forma del "fano" o doble pico que haya, y fuera de resonancia, si erra al predecir g , se ve una ligera desviación (un pequeño desplazamiento) por encima o por debajo de la curva (o a izquierda o derecha en caso de haber alguna deformación).
5. Si estamos fuera y lejos de resonancia, fallos en la predicción de γ y g , no afectan de manera visual a la curva. Pero en los entornos de la resonancia, fallar al predecir γ o g , nos lleva a no pillar la forma del "fano" o doble pico. Si el fallo es en γ , no acertará la forma; si es en g , acertará la forma, pero estará desplazado.
6. Cuando falla en la predicción de ΔE (fuera de resonancia), falla también al predecir g , pero uno compensa al otro, y en su mayoría, apenas se ve alterada la forma de la curva.
7. Fallos en el desplazamiento vertical u horizontal, también pueden deberse a un fallo en ΔE y no necesariamente uno de g .

17/02/2024: Vamos a fijar únicamente un parámetro (κ , γ y g), en tres valores distintos ($2\text{e-}4$, $1\text{e-}3$, $7\text{e-}3$) y veamos qué tal se comporta la red

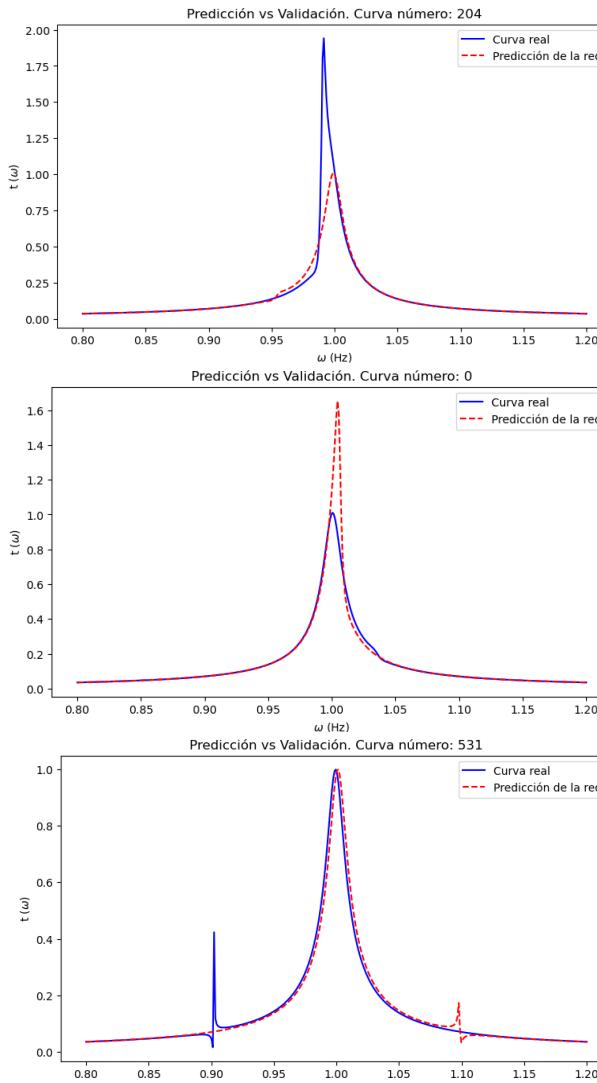
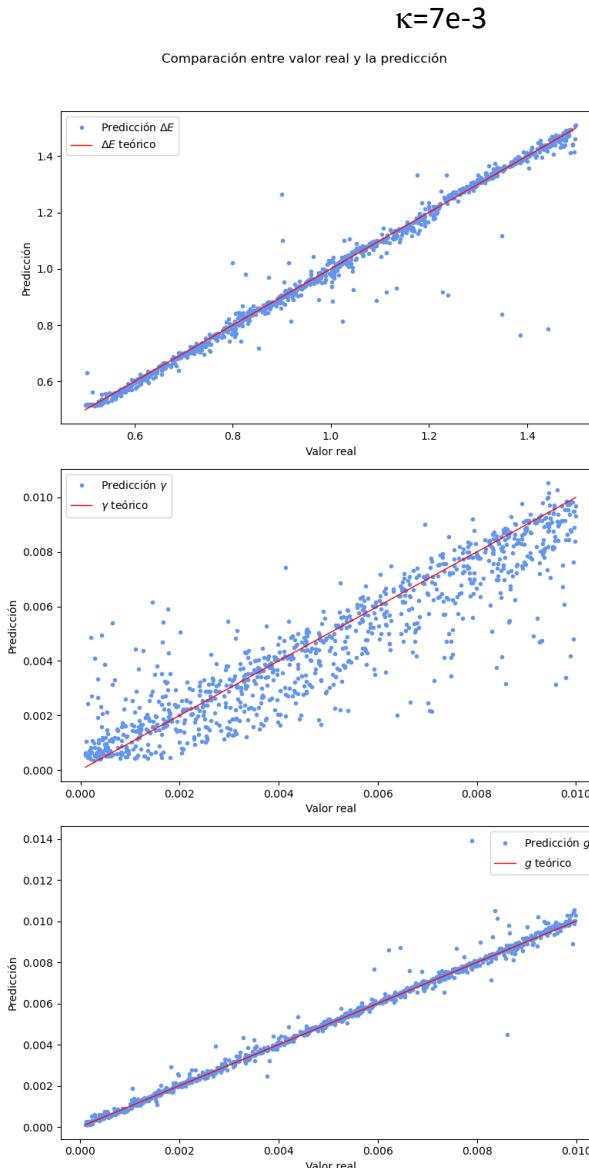
$\kappa=2\text{e-}4$



$\kappa=1\text{e-}3$



17/02/2024: Vamos a fijar únicamente un parámetro (κ , γ y g), en tres valores distintos ($2\text{e-}4$, $1\text{e-}3$, $7\text{e-}3$) y veamos qué tal se comporta la red



En el κ pequeño, no hay ningún "fano" ni doble pico, solo Lorentzianas estrechas. Los fallos en las predicciones se deben a ligeros errores en cualquiera ΔE y/o g (es más sensible, cuanto más cerca de resonancia estemos). Fallos grandes en γ , apenas son perceptibles en la forma de la curva.

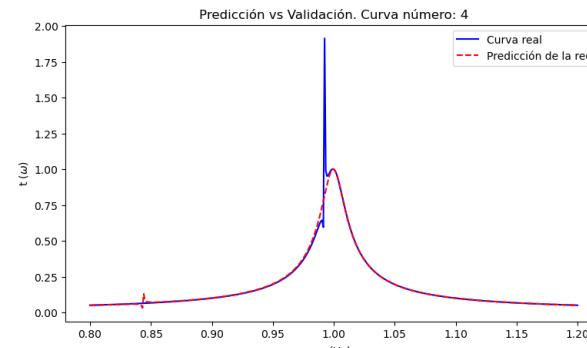
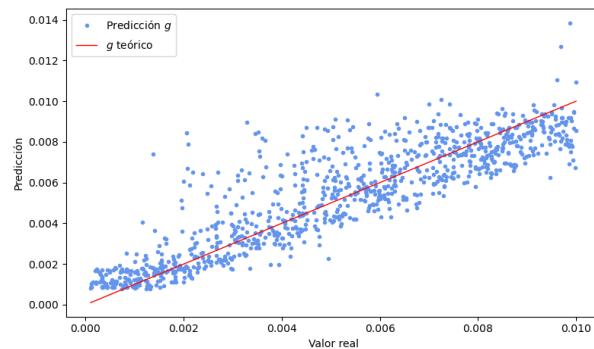
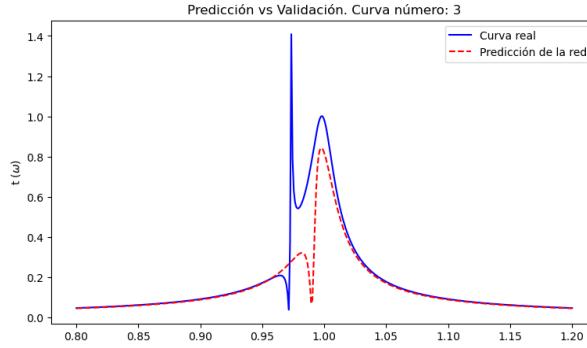
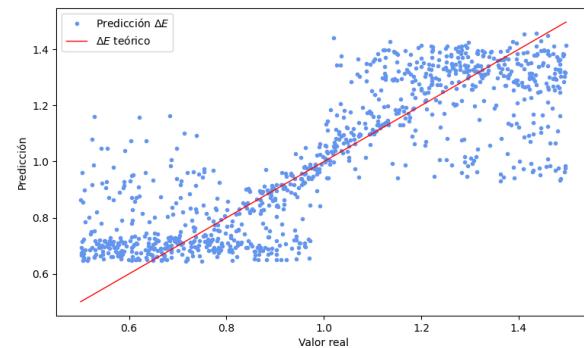
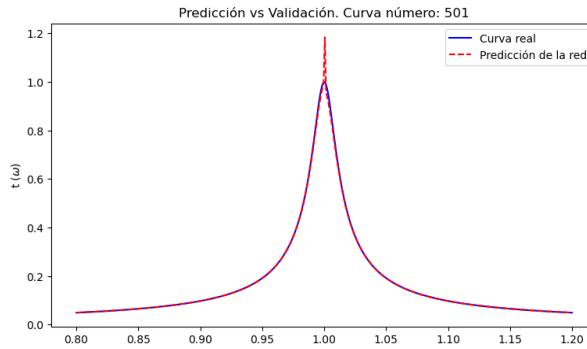
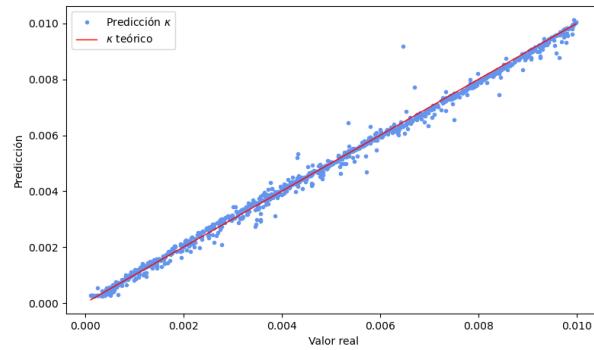
Para κ mediano, empezamos a tener deformaciones, y los fallos observados, se deben a mala predicción de γ .

Y para κ grande, las Lorentzianas son más anchas, y apenas falla al predecir curvas, excepto algunas resonancias, donde falla ligeramente en ΔE , lo cual lleva a grandes desviaciones. γ mejora mucho su predicción y se predice bastante bien.

22/02/2024: Vamos a fijar únicamente un parámetro (κ , γ y g), en tres valores distintos ($2\text{e-}4$, $1\text{e-}3$, $7\text{e-}3$) y veamos qué tal se comporta la red

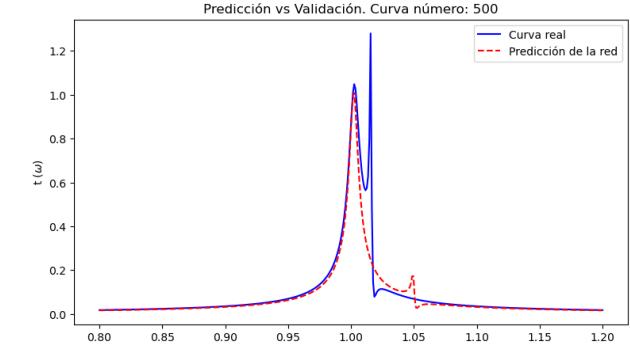
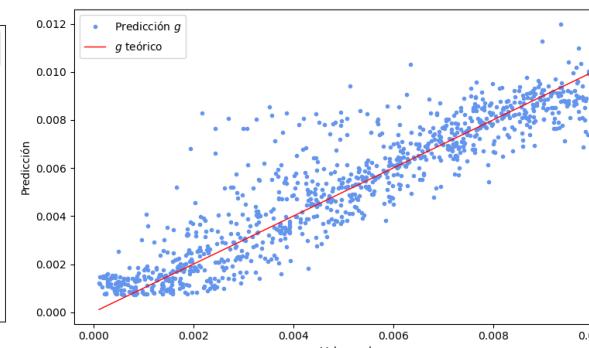
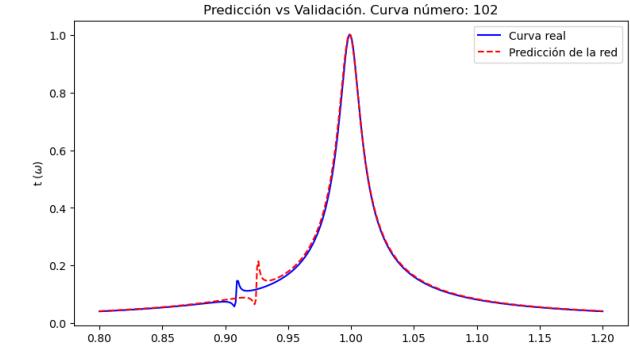
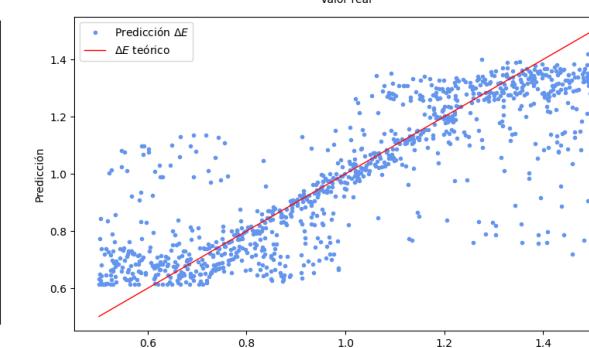
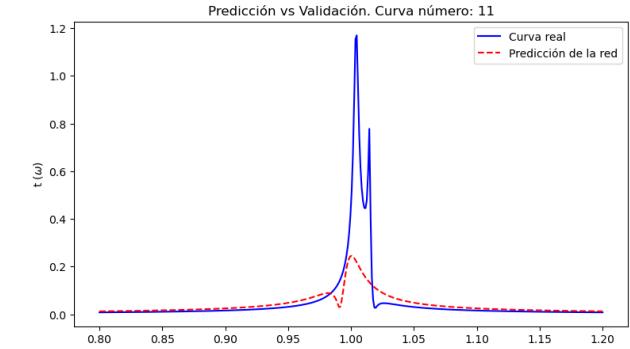
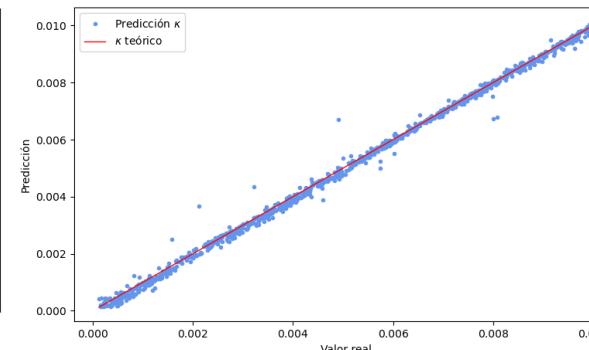
$\gamma=2\text{e-}4$

Comparación entre valor real y la predicción



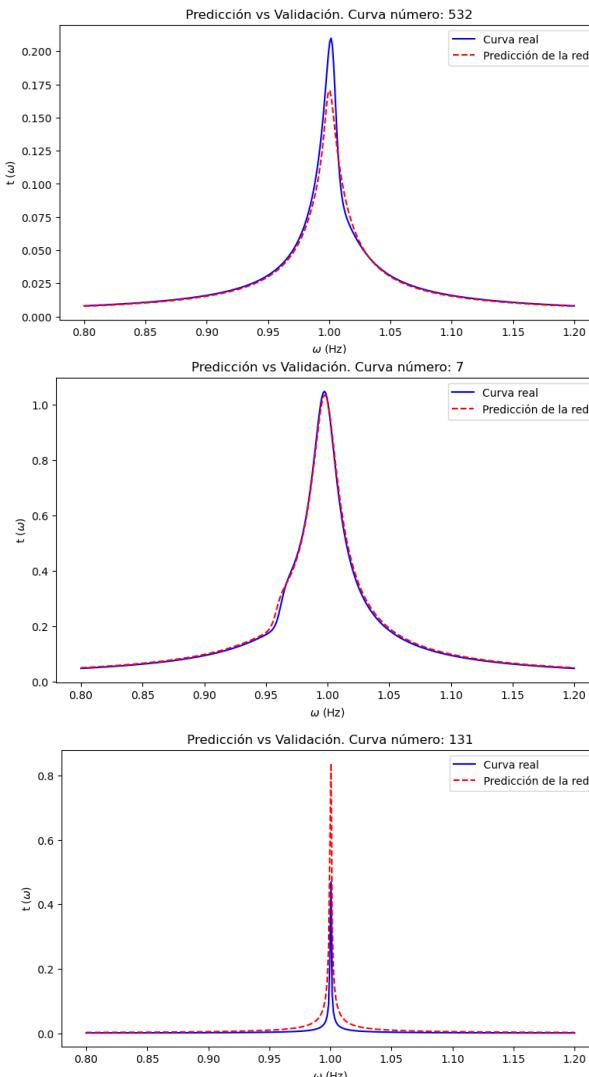
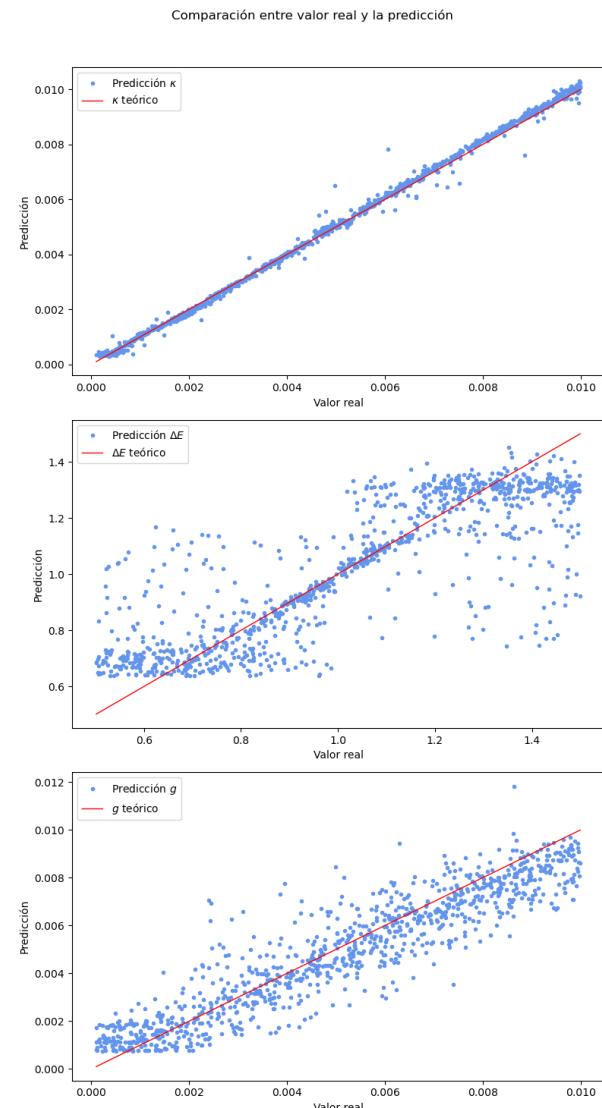
$\gamma=1\text{e-}3$

Comparación entre valor real y la predicción



22/02/2024: Vamos a fijar únicamente un parámetro (κ , γ y g), en tres valores distintos ($2\text{e-}4$, $1\text{e-}3$, $7\text{e-}3$) y veamos qué tal se comporta la red

$$\gamma=7\text{e-}3$$



En el γ pequeño, ΔE falla bastante y se ve en seguida en qué curvas lo ha hecho (ya sea resonancia o no). En general, ha fallado muchas curvas.

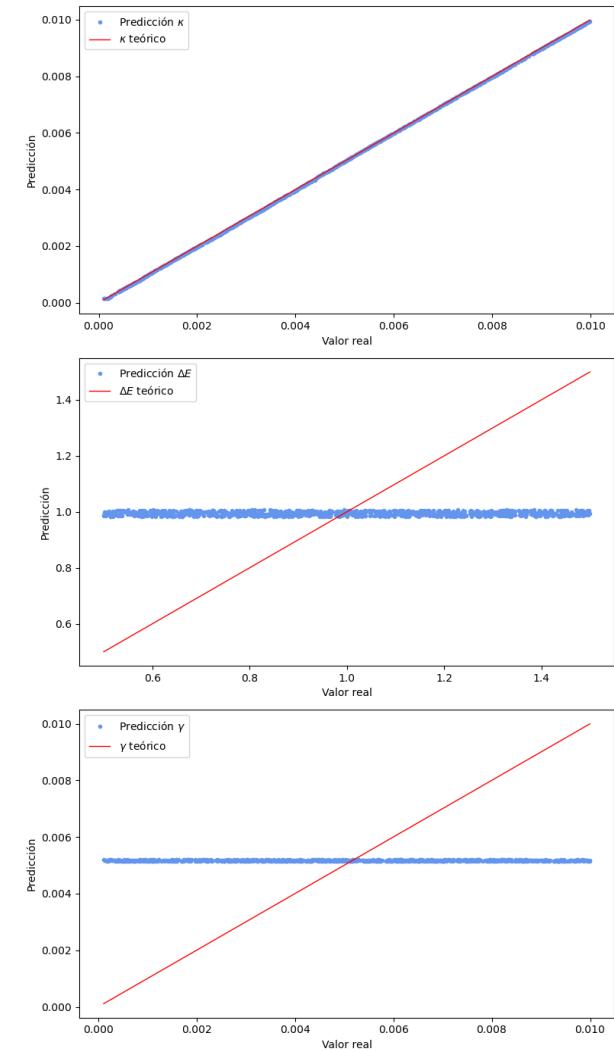
Para γ mediano, sigue fallando mucho en ΔE , y hay muchos dobles picos y "fanos", lo que genera curvas bastante feas, ya que ligeros fallos son muy perceptibles en resonancia. Y no se aprecian mejoras en las predicciones, respecto a γ pequeña.

Y para γ grande, desaparecen los dobles picos y "fanos", quedando únicamente algunas curvas asimétricas o deformadas, que apenas dan error en las predicciones. Aunque a nivel de parámetros parece no haber mucha mejoría, visualmente se predicen mejor las curvas, ya que donde para errores que en los otros casos deformaría la curva, en este caso no se aprecia apenas.

22/02/2024: Vamos a fijar únicamente un parámetro (κ , γ y g), en tres valores distintos ($2\text{e-}4$, $1\text{e-}3$, $7\text{e-}3$) y veamos qué tal se comporta la red

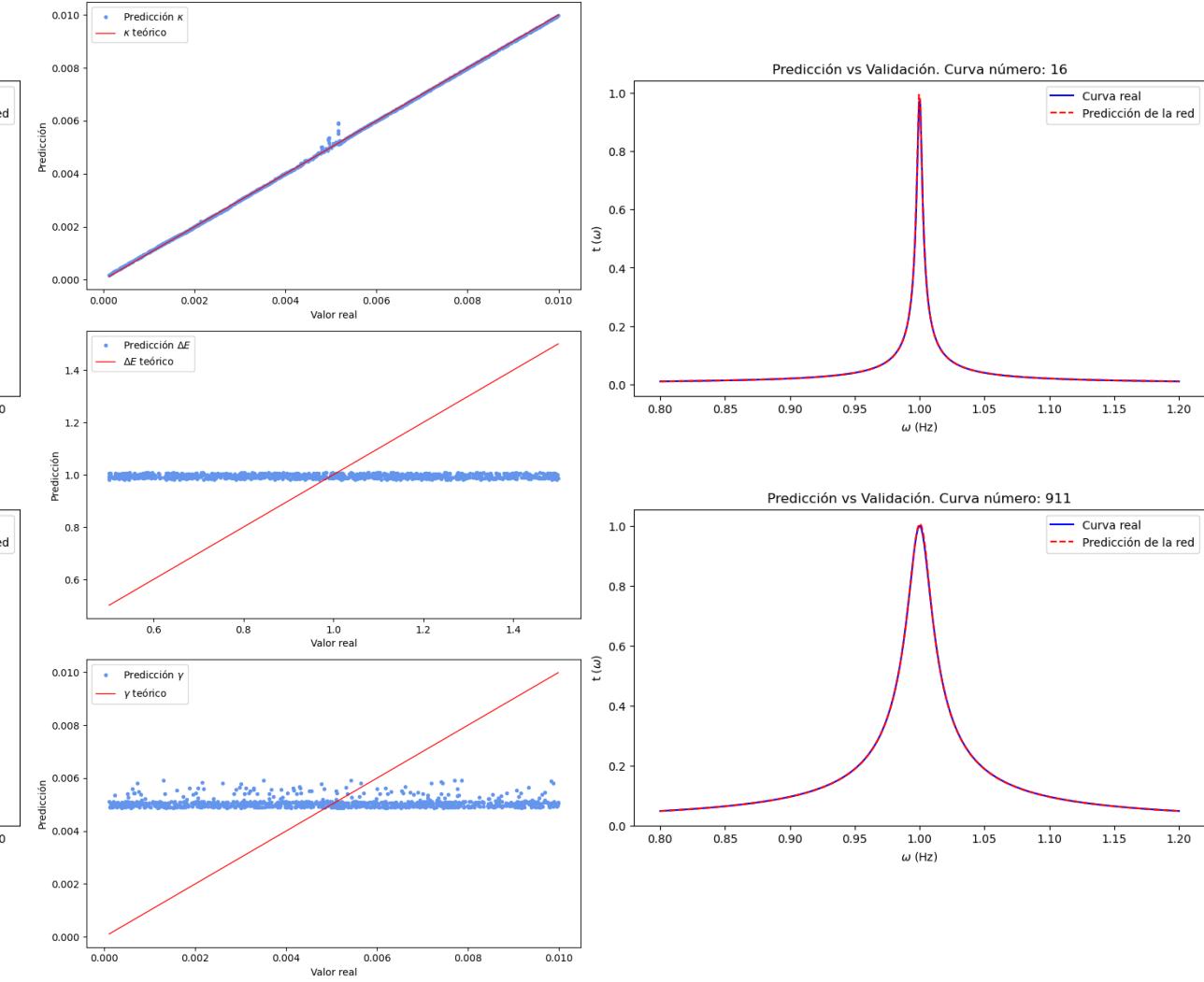
$g=2\text{e-}4$

Comparación entre valor real y la predicción



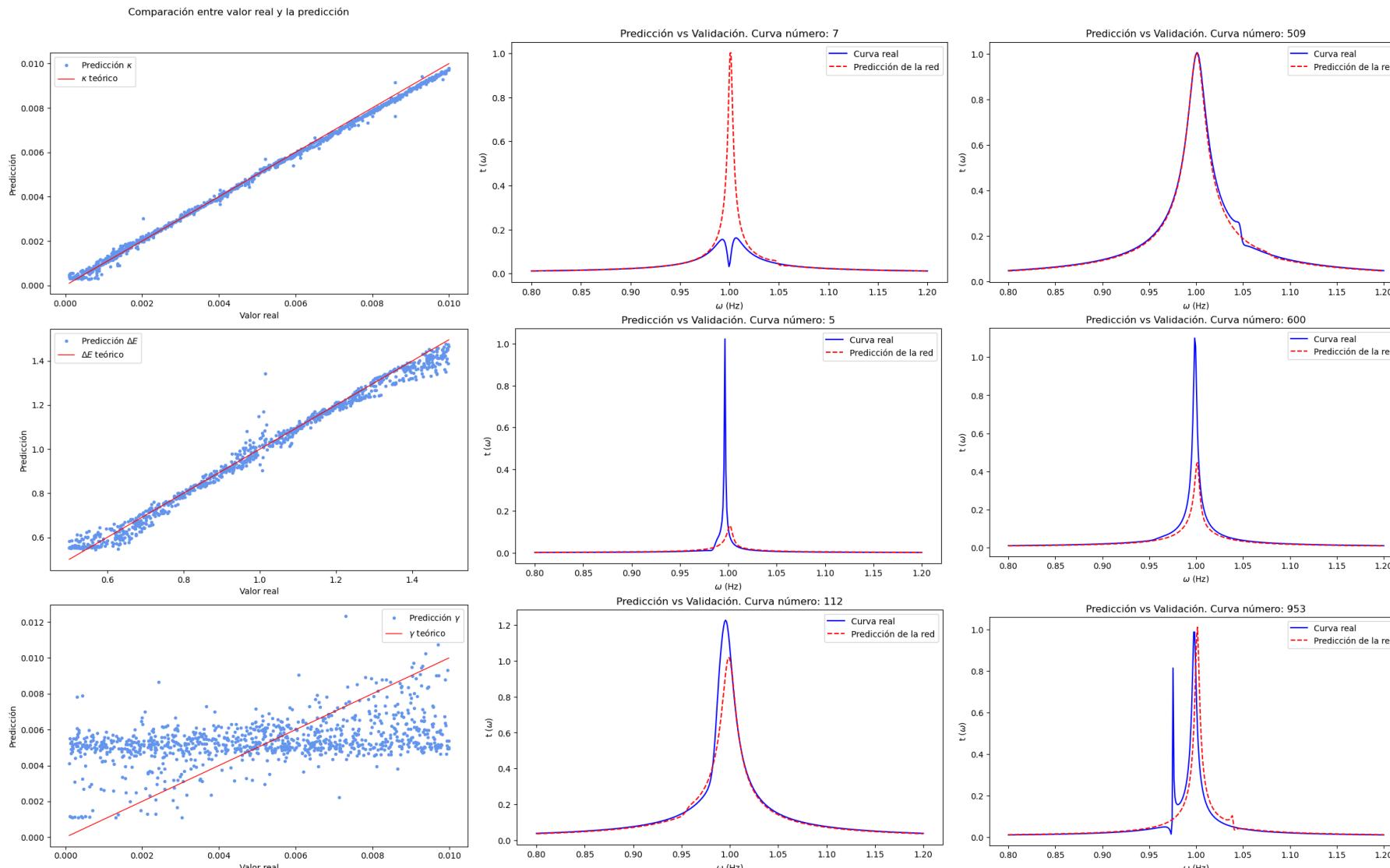
$g=1\text{e-}3$

Comparación entre valor real y la predicción



22/02/2024: Vamos a fijar únicamente un parámetro (κ , γ y g), en tres valores distintos ($2\text{e-}4$, $1\text{e-}3$, $7\text{e-}3$) y veamos qué tal se comporta la red

$g=7\text{e-}3$



En g pequeño, la red es incapaz de predecir el valor de ΔE y γ . Esto se debe a que su aporte en las curvas es totalmente insignificante, ya que todas las curvas han sido predichas perfectamente, a pesar de fallar enormemente en la predicción de estos dos parámetros. Luego, para g pequeña, el único parámetro relevante es la κ . Como cabe esperar, no tenemos ningún tipo de doble pico o deformaciones, todo son Lorentzianas perfectas.

Para g mediano, ocurre lo mismo que con g pequeño

Y para g grande, el tema es totalmente distinto, la red ya es capaz de predecir ΔE sin mucho problema, pero γ sigue siendo un misterio. Para este caso ya tenemos dobles picos, "fanos" y deformaciones, que como hemos mencionado ya varias veces, son las curvas que más cuesta predecir, ya que corresponden a la zona de resonancia.

Nuevas conclusiones tras ver muchas curvas y predicciones, y comprobar en qué parámetro/s ha fallado:

- Cuando el valor de ΔE se aleja de la resonancia (todo lo que no esté entre 0.95 y 1.05), las curvas son Lorentzianas y salvo un fallo en la predicción de κ que se salga de $\pm 5\%$, el cual genera un error en la altura de la curva; excepto en ese caso, la predicción de la curva es perfecta, prácticamente sin importar si predice bien ΔE , γ o g (salvo desviaciones muy grandes de ΔE o g , principalmente de ΔE . Errores de $\pm 100\%$ en γ , del $\pm 60\%$ en g o del $\pm 30\%$ en ΔE). Aunque, a veces, los errores de una compensan los de la otra, y sale una curva bastante buena.
- Los problemas vienen cuando nos encontramos en el rango de valores de ΔE de la resonancia, donde un error mediano en γ o g (del orden de $\pm 15\%$), o un minúsculo error en ΔE (orden de ± 0.01 , $\pm 1\%$); nos van a llevar a una nefasta curva. Aunque, es la región donde más precisa es la predicción de γ .

Para resolver esto último, se hicieron las pruebas entrenando la red en un rango mucho más cercano a la resonancia (ΔE entre 0.9 y 1.1), y a pesar de mejorar un montón la predicción de los parámetros, como un ligero fallo, ya desvía totalmente la forma de la curva, no conseguimos añadir esa precisión extra que necesitamos.

- También se ha observado que, en muchos casos, en zona de resonancia, si falla la predicción de ΔE (aunque sea muy poco), la predicción del resto de parámetros también tiende a ser mala, en especial γ o g .
- Si g es pequeño o mediano ($< 2e-3$), el único parámetro relevante a predecir correctamente es κ (y obviamente el propio g)
- γ es un parámetro que solo nos afecta a la anchura de la Lorentziana y a la aparición de "fanos" y dobles picos, ya que cuando éste es grande, desaparecen por completo y se estrechan las curvas.

26/02/2024:

Estaba mal la fórmula, teníamos $+i \frac{g^2}{i(\Delta E - \omega) + \gamma}$, pero realmente es:

$$-i \frac{g^2}{i(\Delta E - \omega) + \gamma}$$

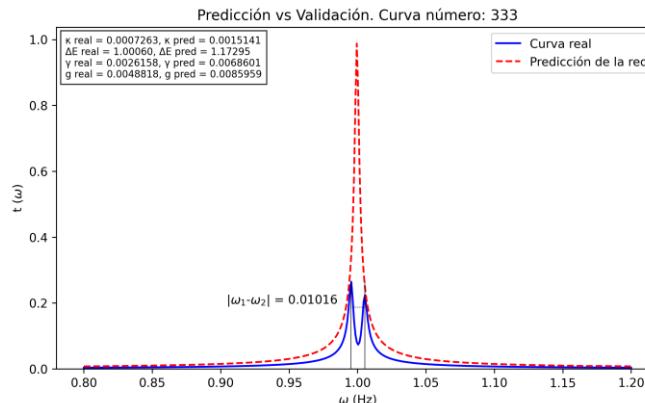
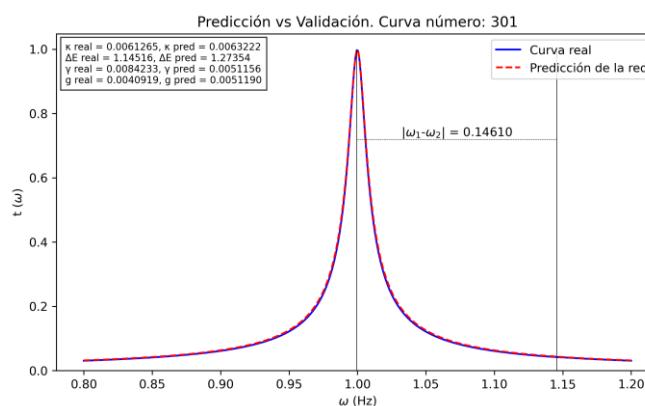
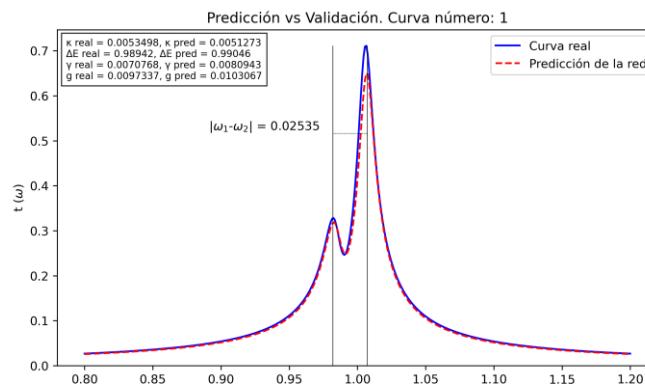
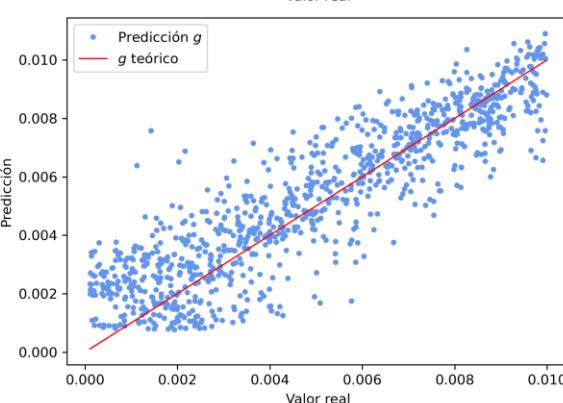
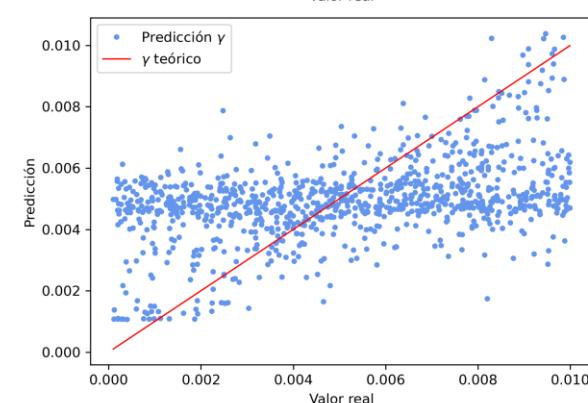
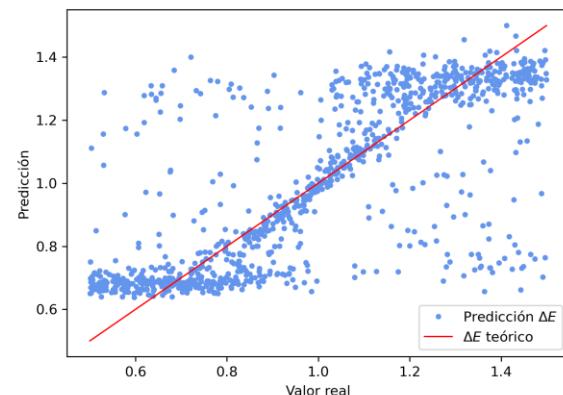
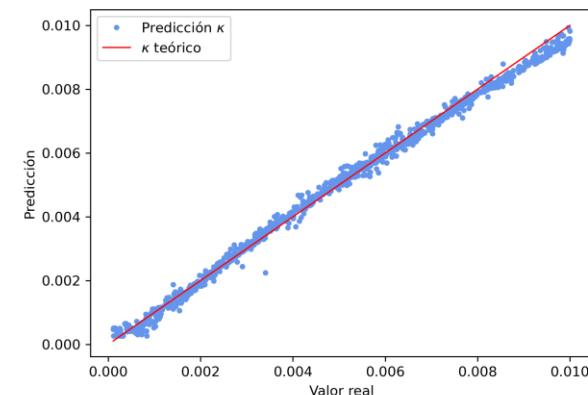
Partimos de la red de 5 capas (256, 128, 64, 32, 16), que no predice valores negativos. Con StandardScaler, batch_size=50, epochs=1000.

26/02/2024: Corregimos la fórmula y añadimos líneas verticales en las curvas, con las soluciones de las dos raíces de la parte real del denominador

$$\omega_1 = \frac{(\Delta E + \Omega) + \sqrt{(\Delta E - \Omega)^2 + 4(\kappa\gamma + g^2)}}{2}$$

$$\omega_2 = \frac{(\Delta E + \Omega) - \sqrt{(\Delta E - \Omega)^2 + 4(\kappa\gamma + g^2)}}{2}$$

Comparación entre valor real y la predicción



A nivel de predicción de parámetros, tenemos el mismo comportamiento que con el signo equivocado. Es decir, κ perfecto, ΔE en escalón, γ nefasto ,y g bastante correcto.

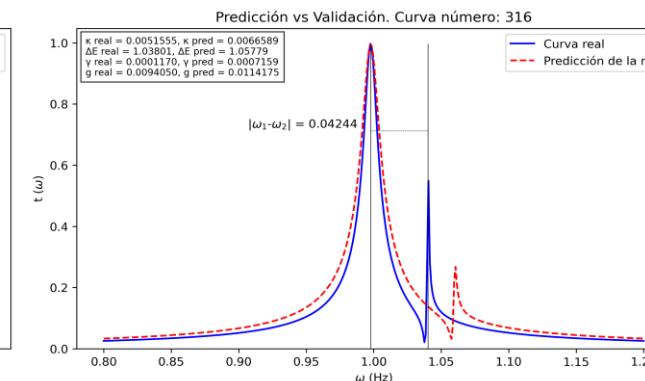
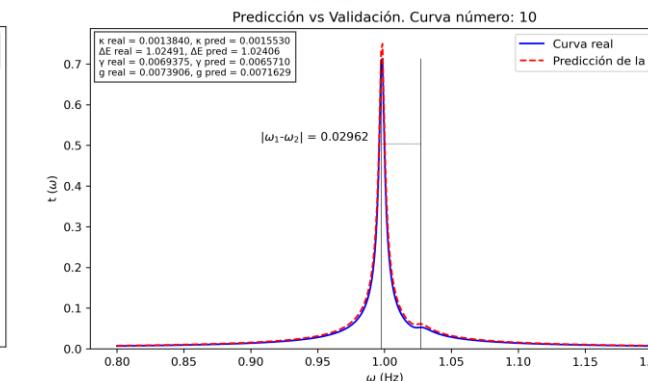
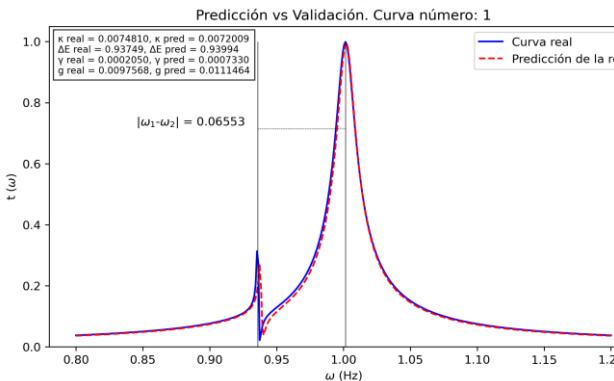
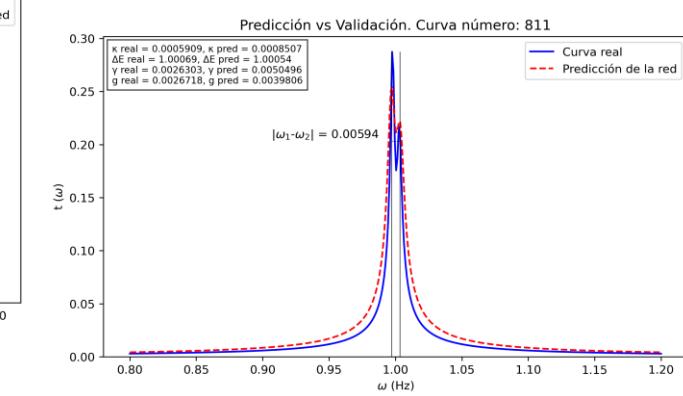
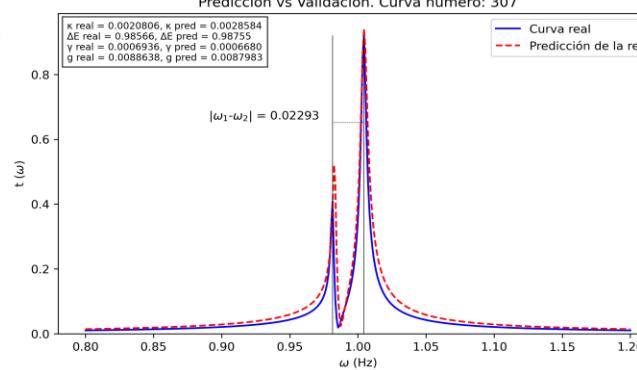
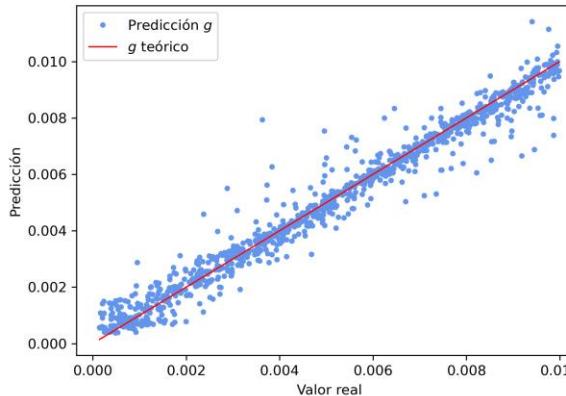
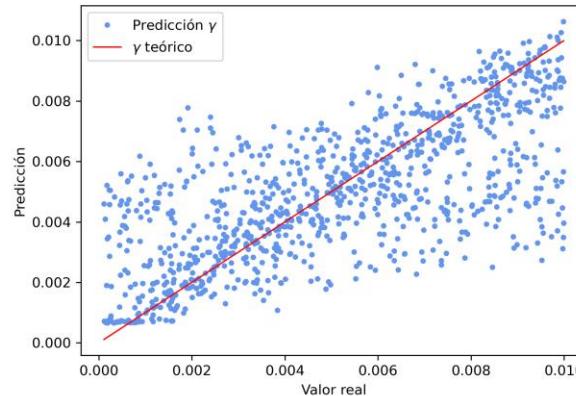
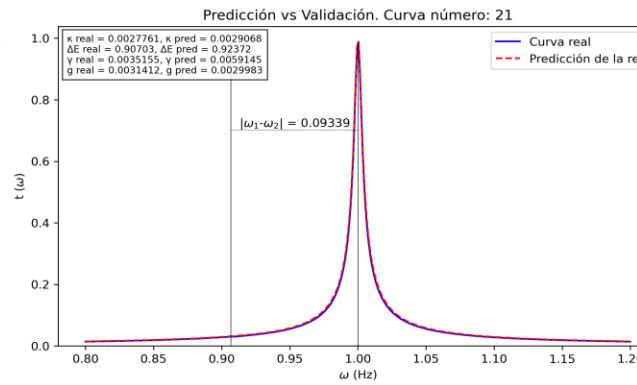
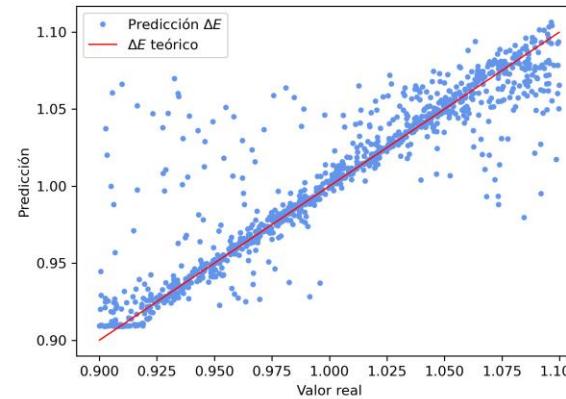
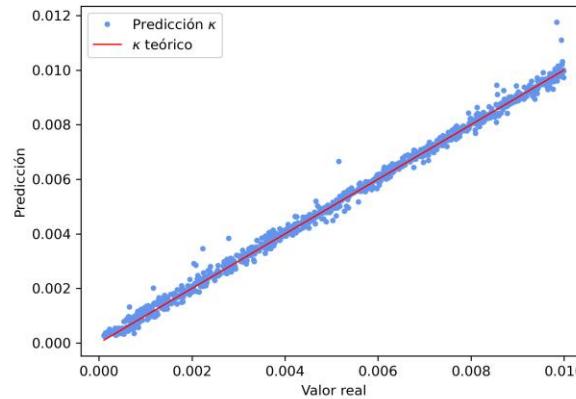
En cuanto a las curvas, ahora sí aparecen dobles picos (cosa que antes no pasaba apenas). Hay un poco de todo en las predicciones. Predice bien las lorentzianas (en su mayoría), y los fanos y dobles picos le siguen generando problemas.

Se ha añadido un cuadro con el valor real y la predicción, para así poder compararlos. Y también, he añadido las líneas verticales indicando los polos de la parte real del denominador (si uno de los polos está fuera de nuestro rango de ω , entre 0.8 y 1.2, no lo dibuja para evitar conflictos).

Como podemos ver en la segunda imagen de las curvas, a veces, no hay fanos o picos visibles, pero las soluciones de ω marcan una línea igualmente.

29/02/2024: ΔE acortado (0.9-1.1)

Comparación entre valor real y la predicción



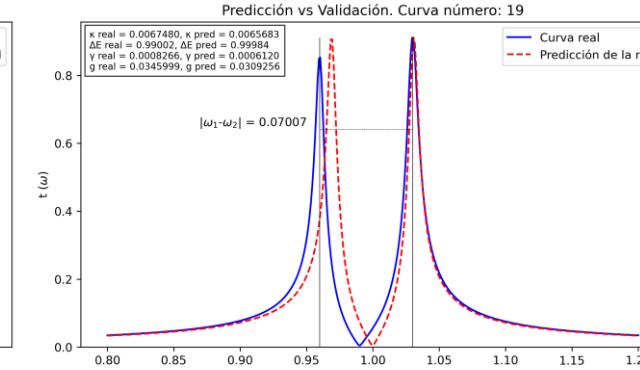
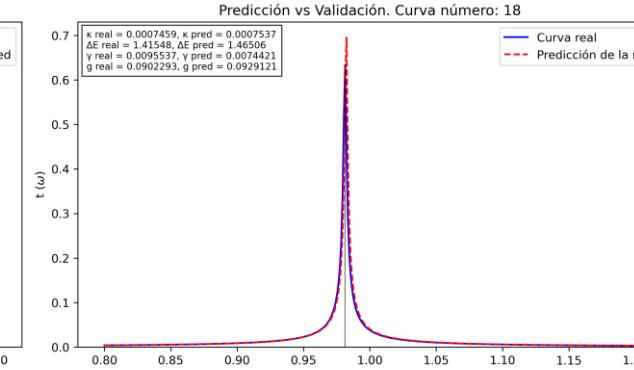
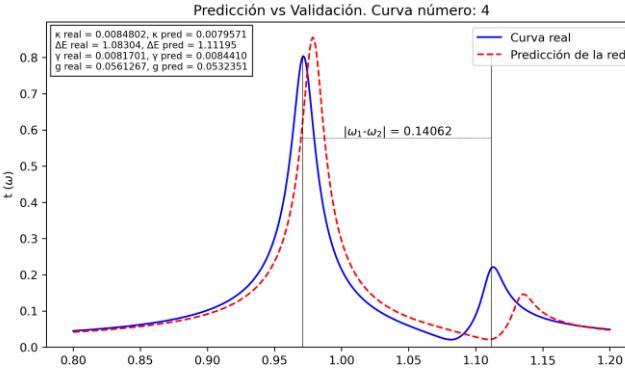
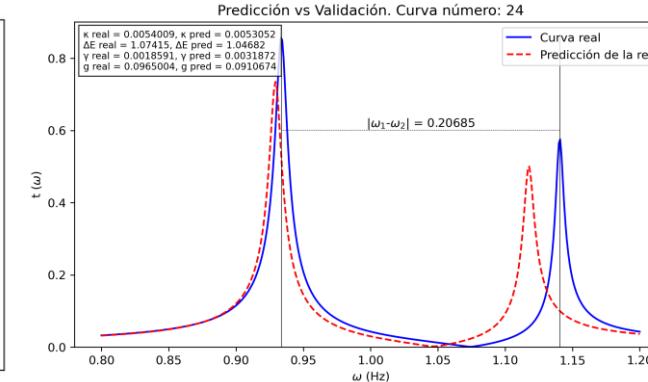
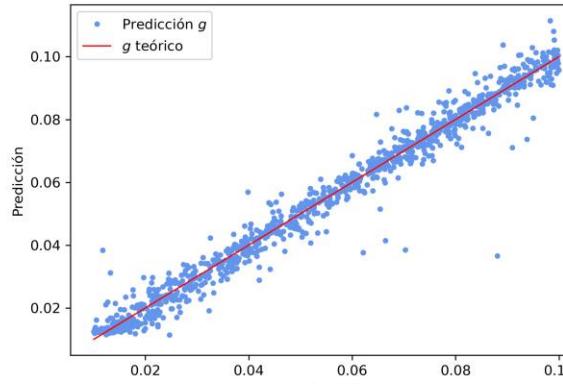
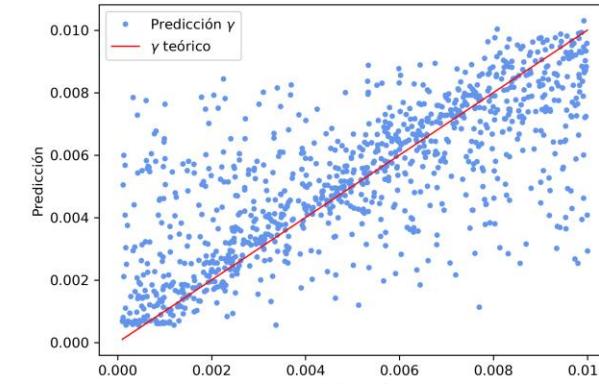
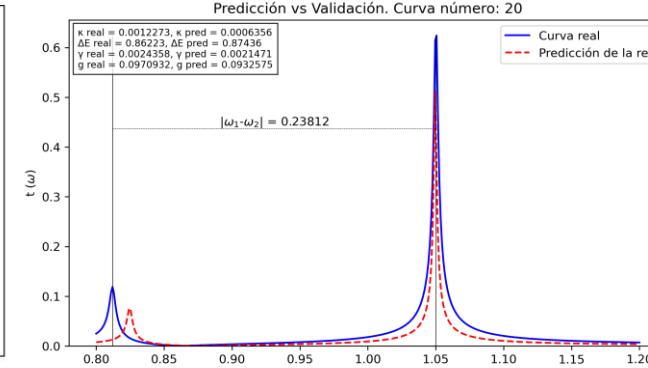
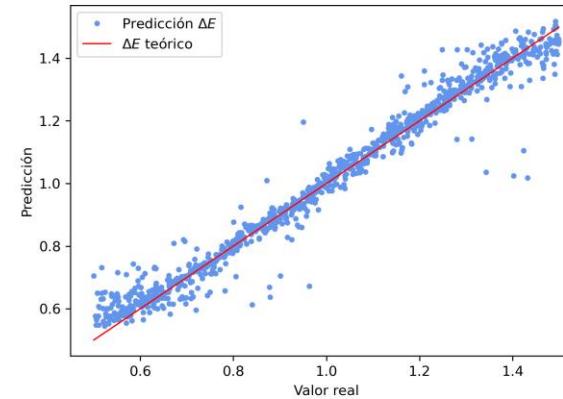
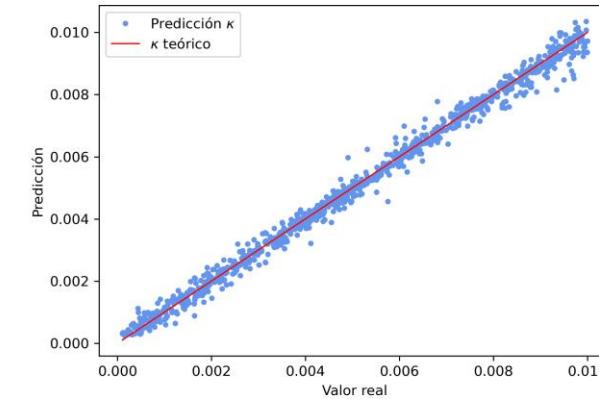
Como cabía esperar, la predicción mejora mucho, sobretodo la de ΔE , pero γ también ha mejorado bastante.

A nivel de curvas, hay unas predicciones bastante buenas, pero seguimos teniendo algunas curvas que se desvían bastante.

Esta vez, con el signo corregido, tenemos unos fanos mejores y mayor cantidad de ellos, así como de dobles picos.

29/02/2024: g grande $\square(1e-2, 1e-1)$

Comparación entre valor real y la predicción

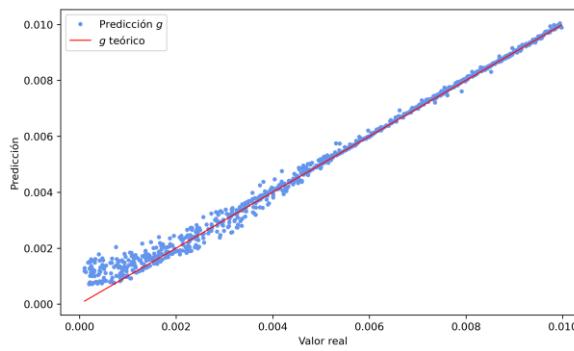
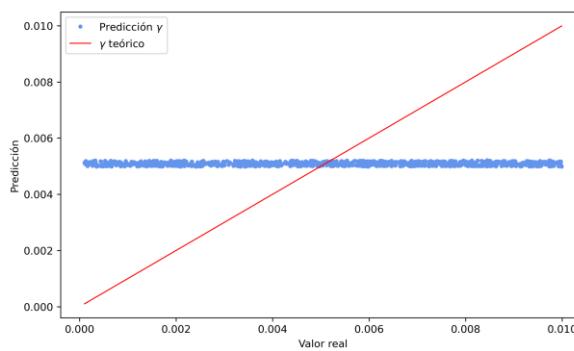
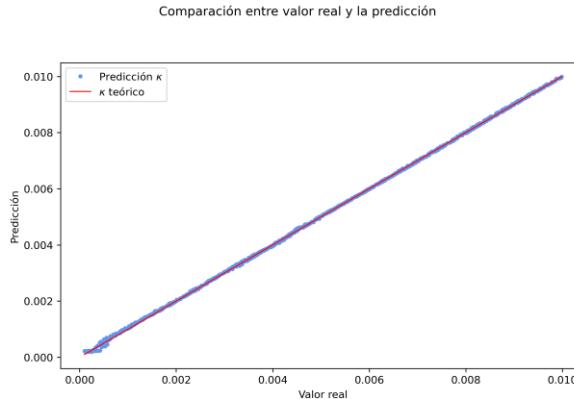


La predicción de los parámetros es muy buena. ΔE es perfecta, y γ tiene menor dispersión.

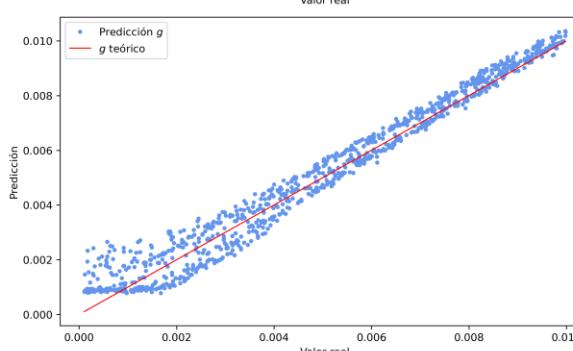
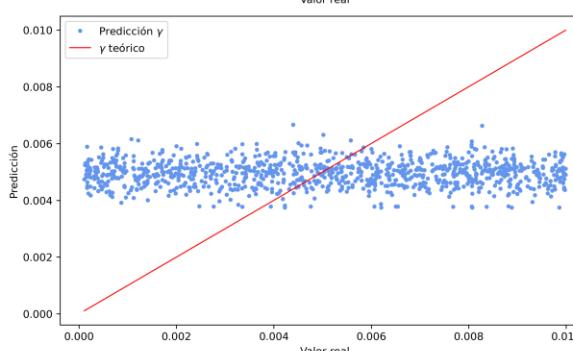
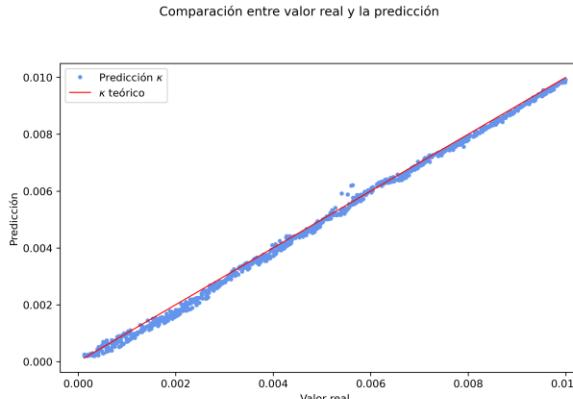
En las curvas se observan muchos dobles picos, muy alejados unos de otros (es obvio, ya que g es mayor), pero a la red le cuesta mucho predecirlos al 100% ya que es muy susceptible a fallos pequeños.

29/02/2024: Fijamos ΔE

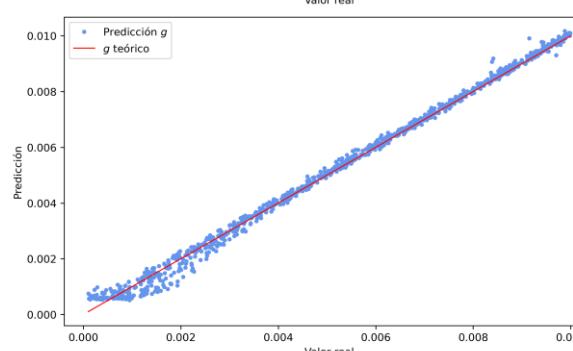
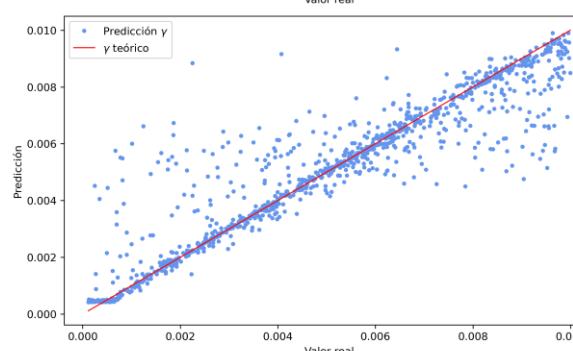
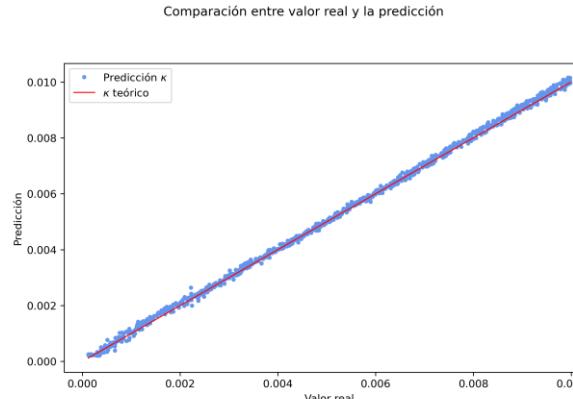
$\Delta E = 0.5$



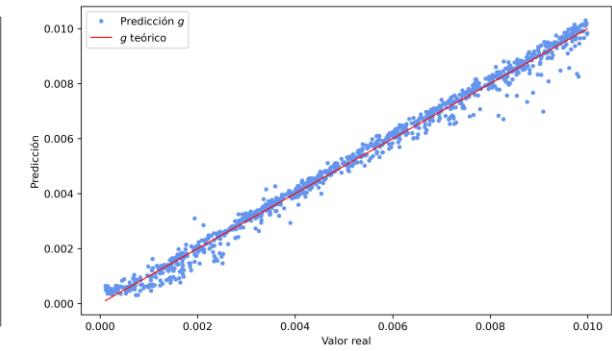
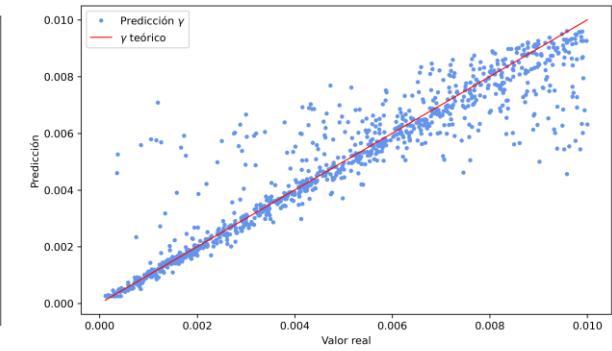
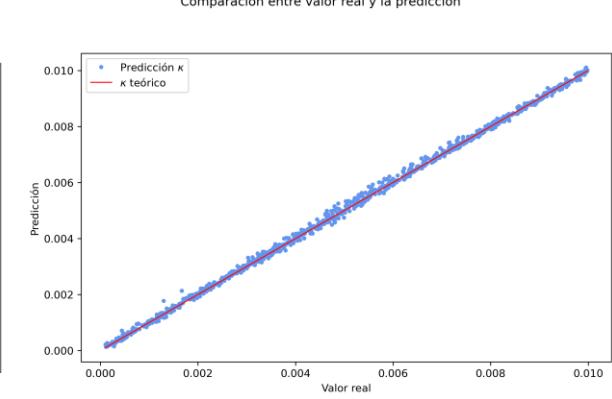
$\Delta E = 0.75$



$\Delta E = 0.95$



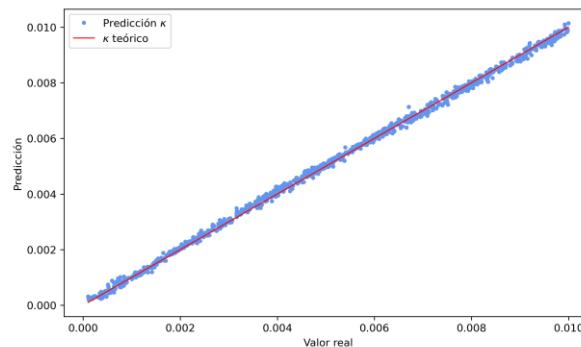
$\Delta E = 1.0$



05/03/2024: Fijamos ΔE

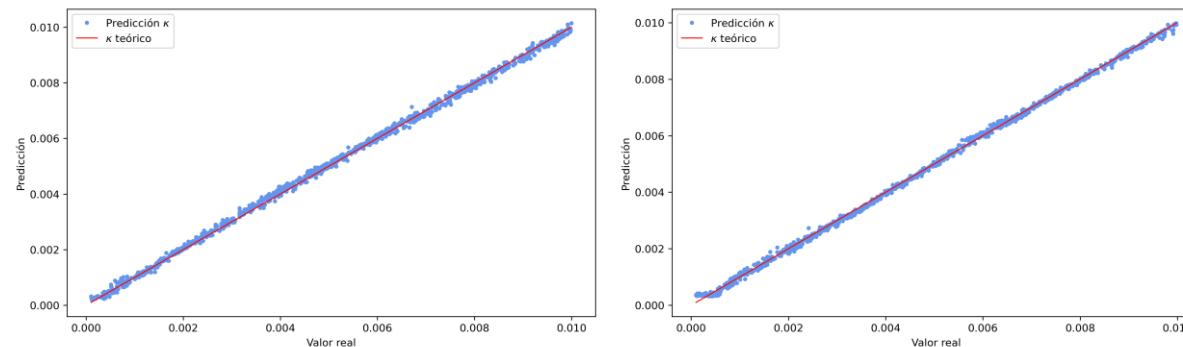
$\Delta E = 1.03$

Comparación entre valor real y la predicción



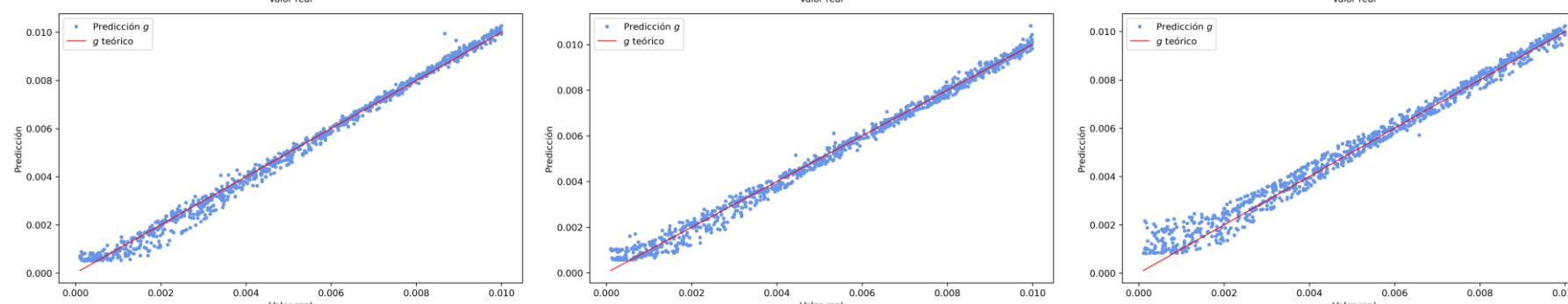
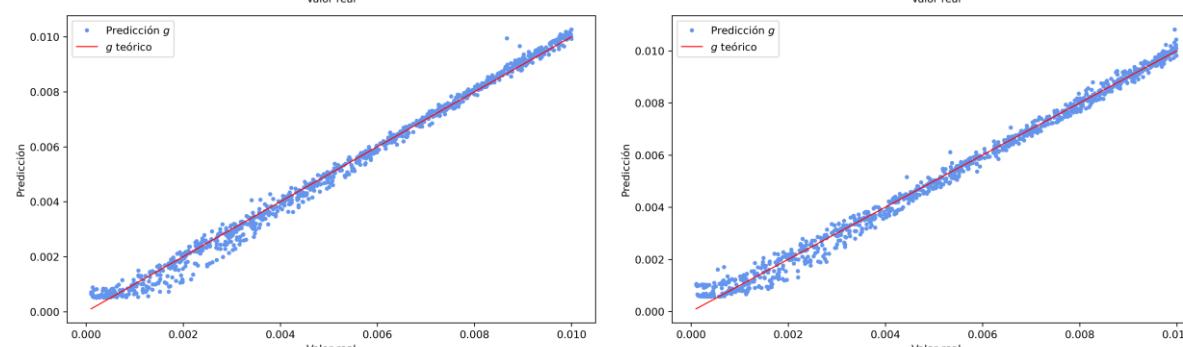
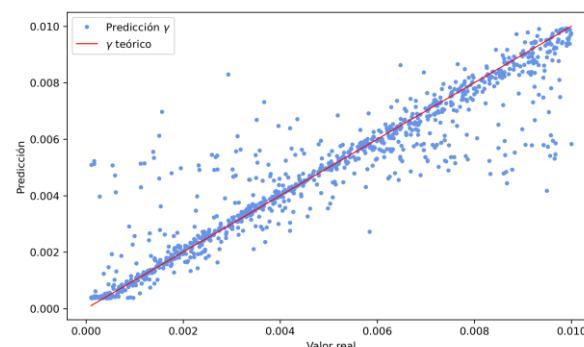
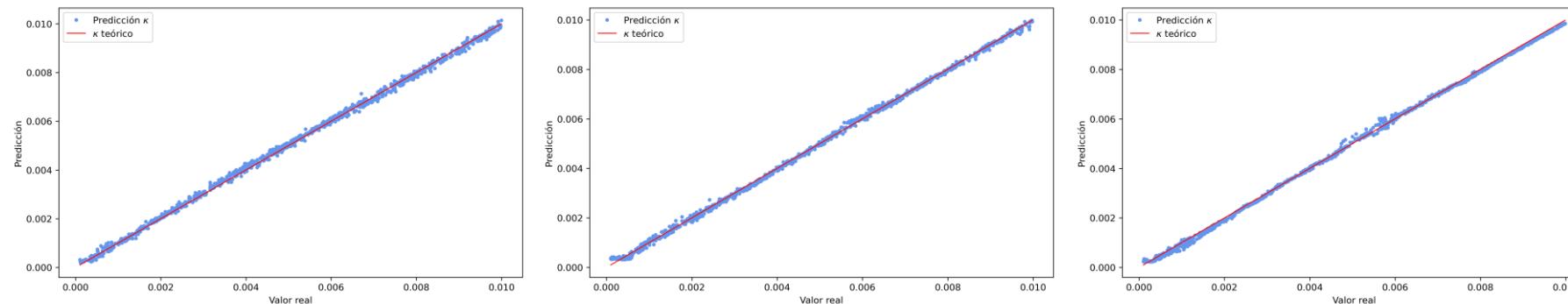
$\Delta E = 1.10$

Comparación entre valor real y la predicción



$\Delta E = 1.4$

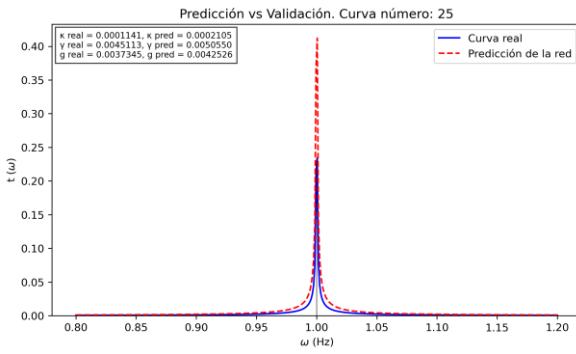
Comparación entre valor real y la predicción



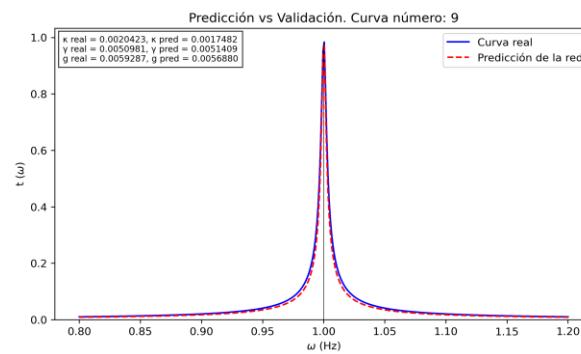
κ y g se predicen siempre de manera prácticamente perfecta, aunque al alejarse de la resonancia, g tiene problemas para valores pequeños. Sin embargo, γ es totalmente omitido y no se predice, salvo en las inmediaciones de la resonancia y en la resonancia.

29/02/2024: Fijamos ΔE

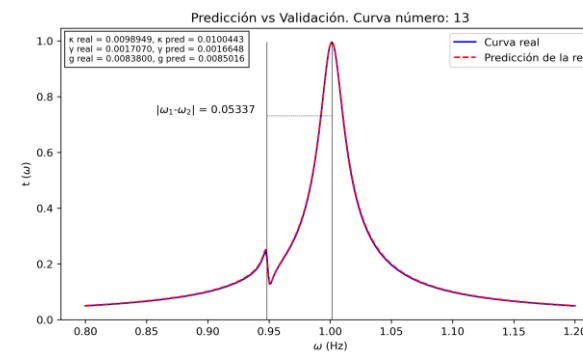
$\Delta E = 0.5$



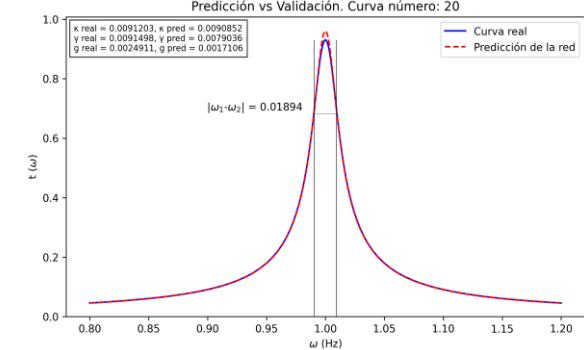
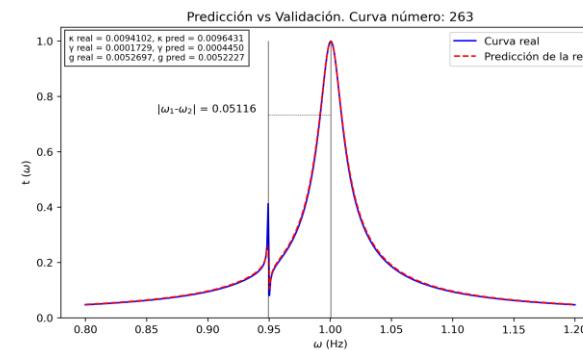
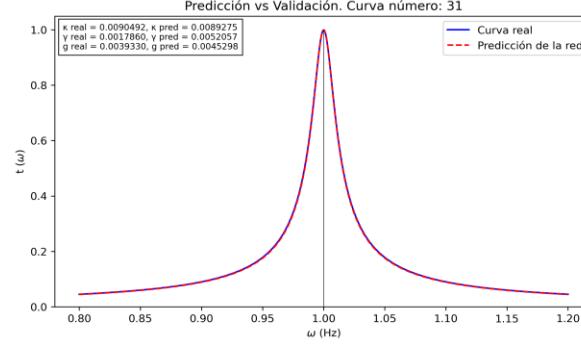
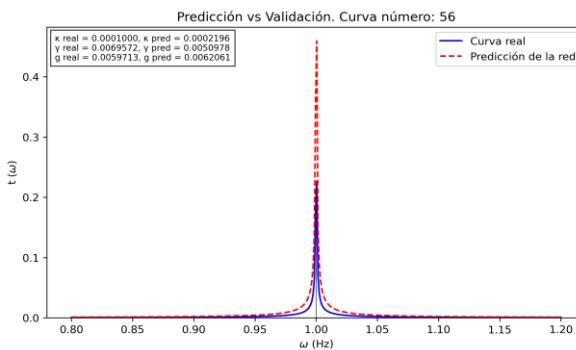
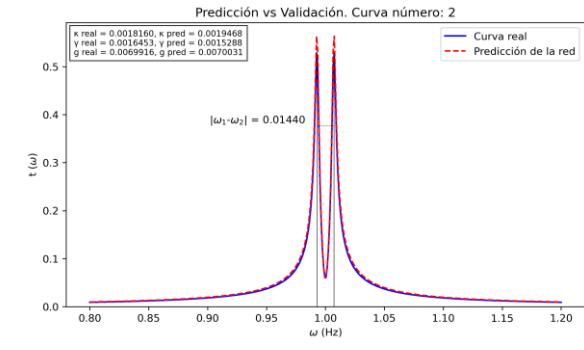
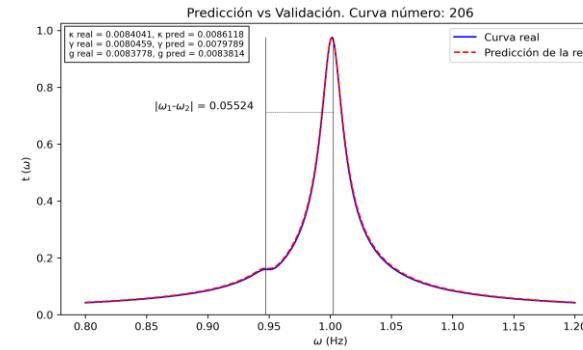
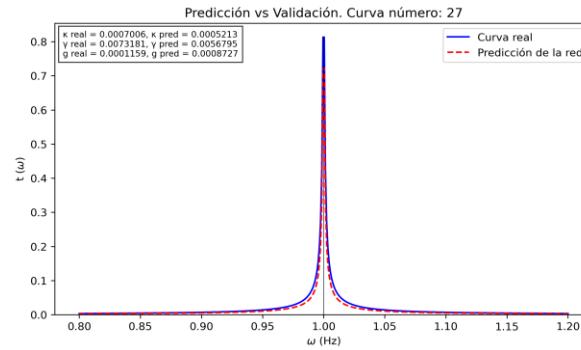
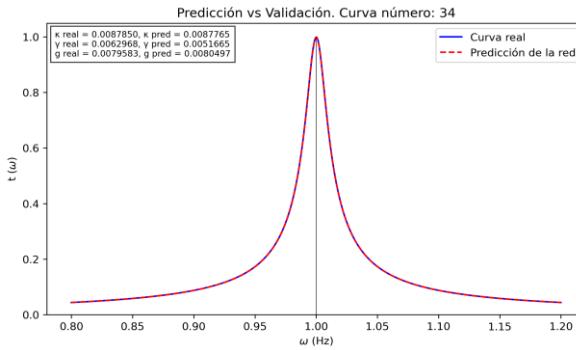
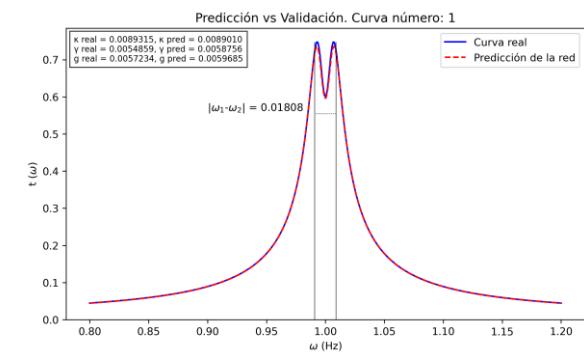
$\Delta E = 0.75$



$\Delta E = 0.95$

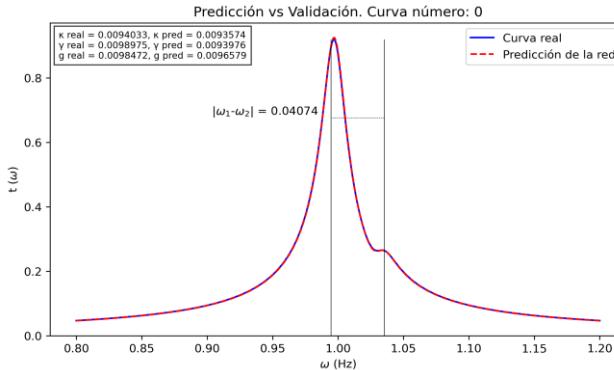


$\Delta E = 1.0$

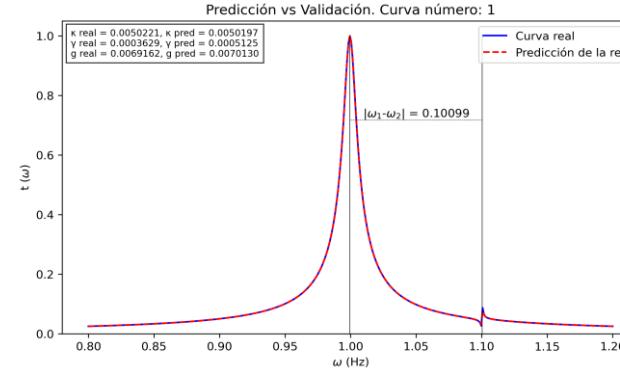


05/03/2024: Fijamos ΔE

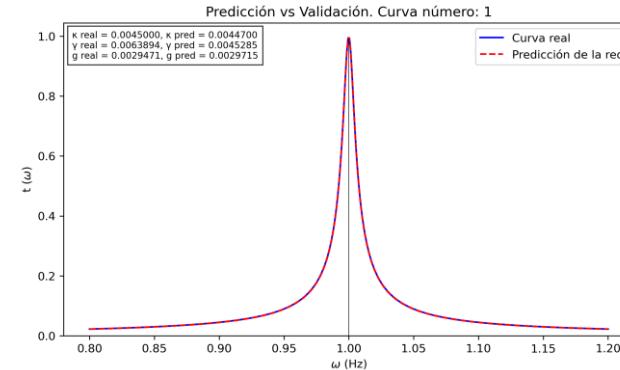
$\Delta E = 1.03$



$\Delta E = 1.10$



$\Delta E = 1.4$

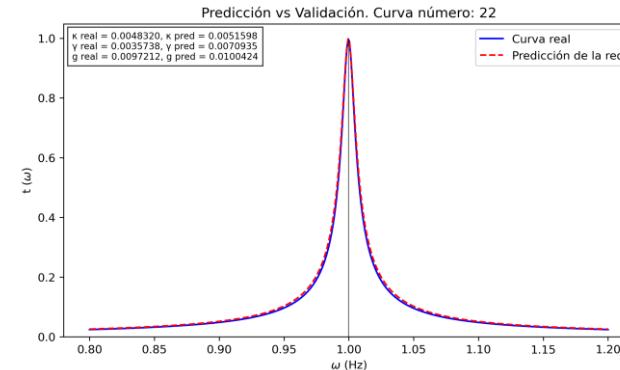
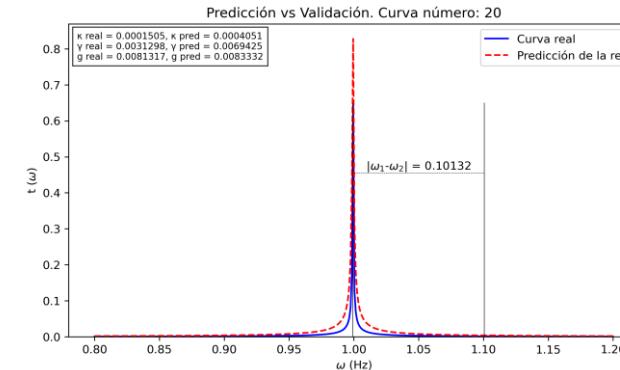
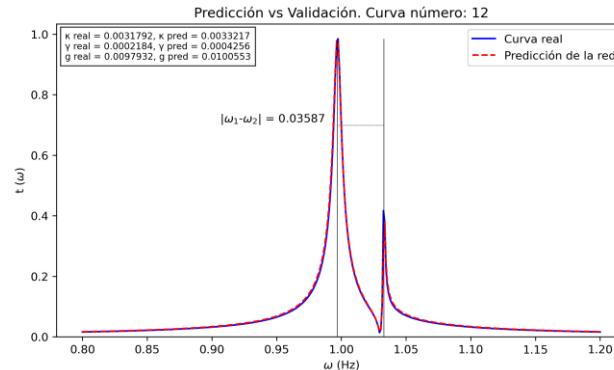
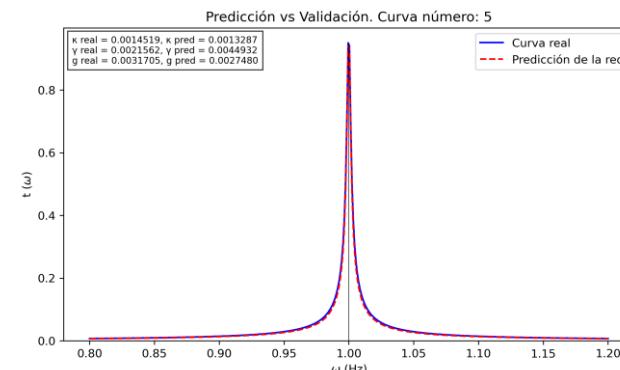
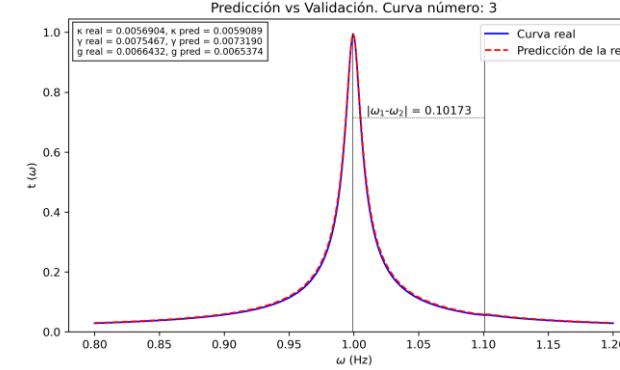
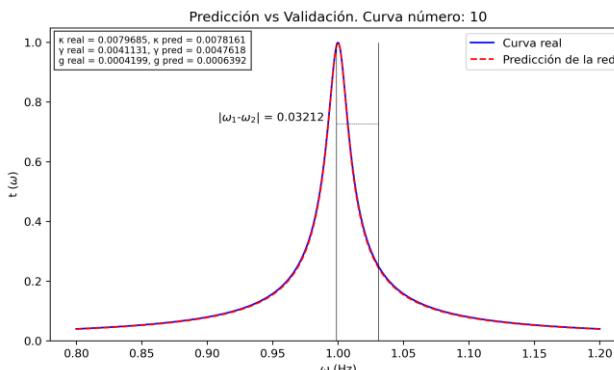


Fuera de la resonancia γ es totalmente pasado por alto y no lo predice, pero en las curvas no afecta de ninguna manera el hecho de fallar en su predicción. Los problemas de predicción están mayoritariamente en los κ pequeño, que los falla un poco y desvía bastante la curva.

En las inmediaciones de la resonancia, falla muy pocas veces g y en su mayoría, las predicciones de las curvas son perfectas. Comienzan a aparecer deformaciones en forma de fano, y como cabe esperar, se presencian fanos, si $\Delta E < 1$ a la izquierda y para $\Delta E > 1$ en la derecha de la curva.

En la resonancia todas las curvas se predicen perfectamente (o casi perfecto) y son dobles picos, excepto los valores de g grandes, que entonces se trata de una Lorentziana.

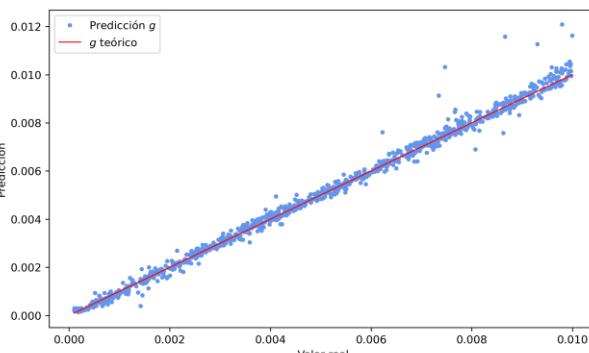
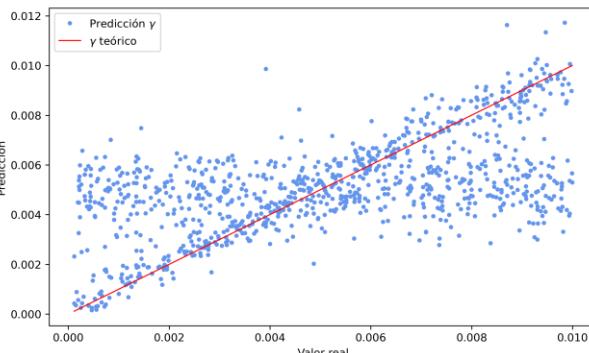
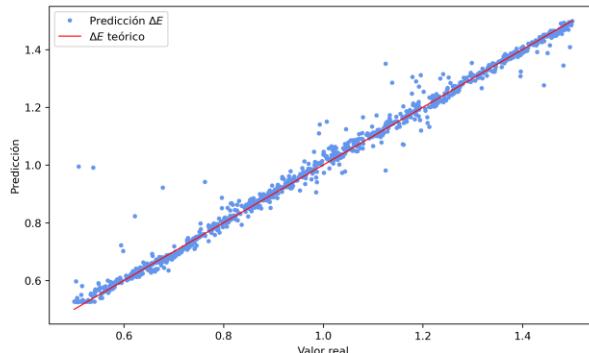
En general, los fallos de γ y g no son perceptibles en las curvas. Y los κ pequeños, suelen darnos problemas, ya que ahí sí toma importancia la precisión de γ y g .



07/03/2024: Fijamos κ

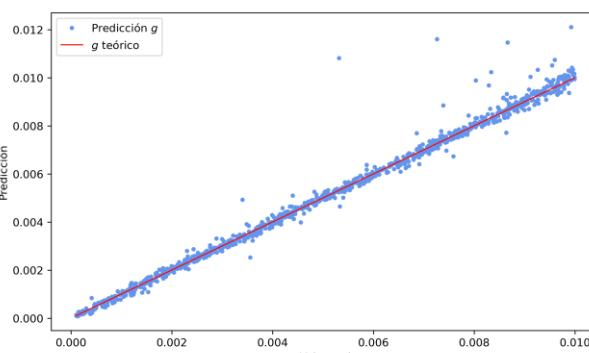
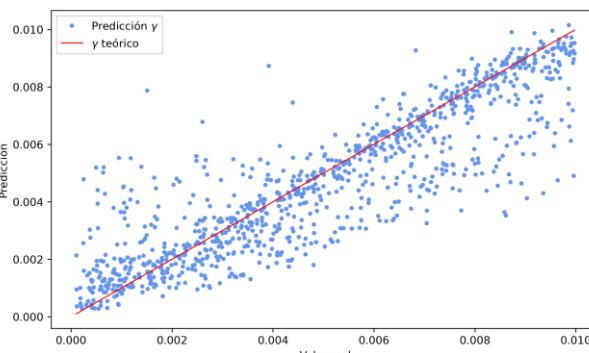
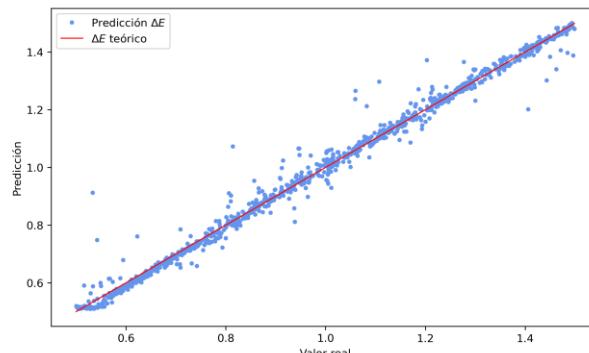
$\kappa = 2e-4$

Comparación entre valor real y la predicción



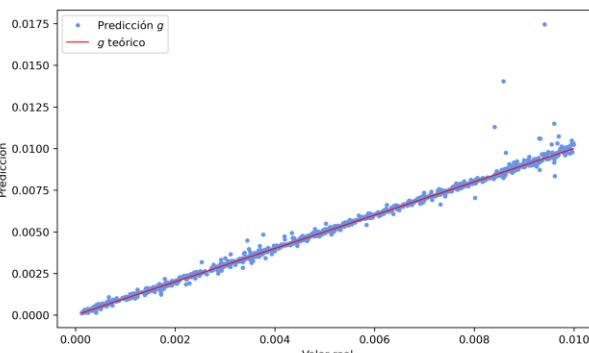
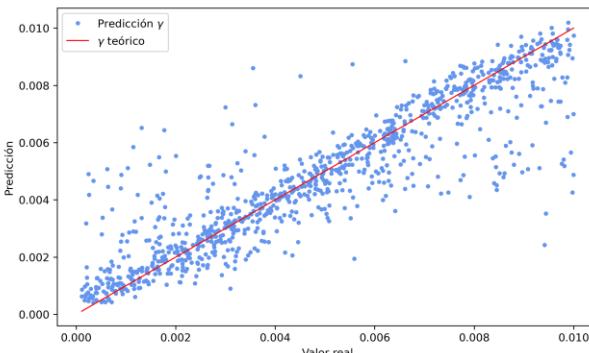
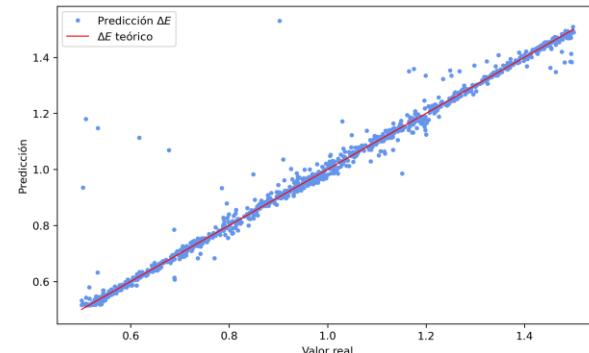
$\kappa = 1e-3$

Comparación entre valor real y la predicción



$\kappa = 7e-3$

Comparación entre valor real y la predicción

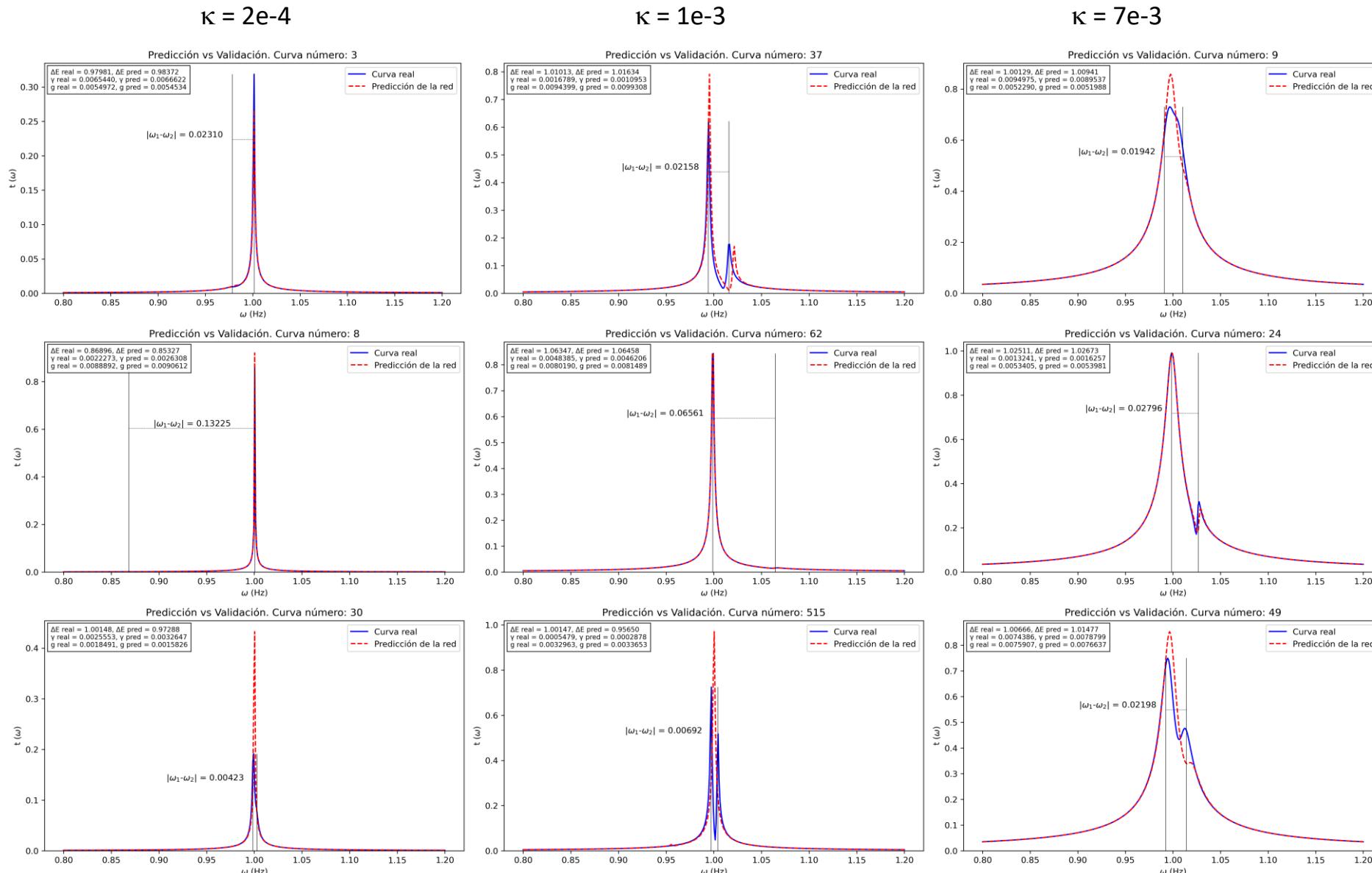


En el κ pequeño, hay una superposición de valores de γ sin predecir, con una predicción que sigue la tendencia del acierto

Para κ mediano, se predice muy bien γ .

Y para κ grande, apenas mejora respecto de κ mediano

07/03/2024: Fijamos κ



En el κ pequeño, no hay ningún "fano" ni doble pico, solo Lorentzianas estrechas, como mucho vemos ligeras deformaciones. En general las curvas se predicen bastante bien, independientemente de errar con γ o g , sin embargo, en zona de resonancia, fallos en ΔE o g , sí son notables y son las pocas curvas que ha predicho mal.

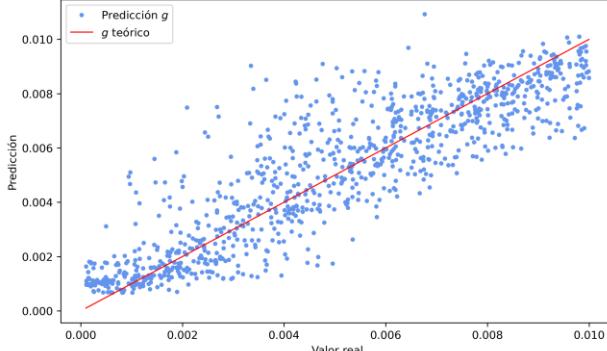
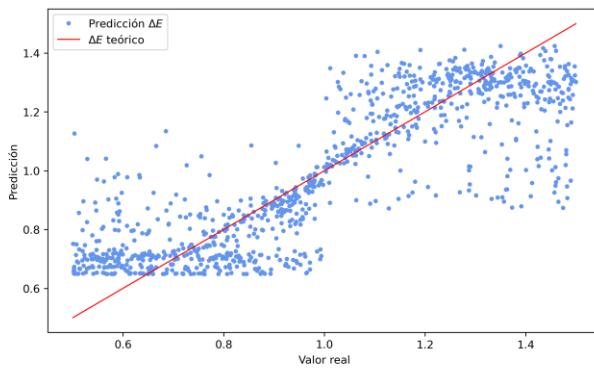
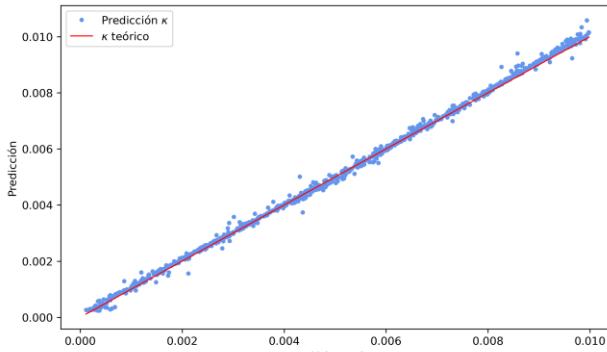
Para κ mediano, empezamos a tener deformaciones y algún doble pico (muy pocos), en resonancia es donde más fallan las curvas, ya que ligeras desviaciones en γ o g , suponen efectos importantes, y por supuesto, si lo que erra es ΔE , no predice la forma de doble pico. Eso sí, las curvas siguen siendo picos bastante estrechos.

Para κ grande, las Lorentzianas son más anchas, tenemos más fanos y dobles picos. Y como siempre, las resonancias son muy susceptibles a los pequeños fallos.

07/03/2024: Fijamos γ

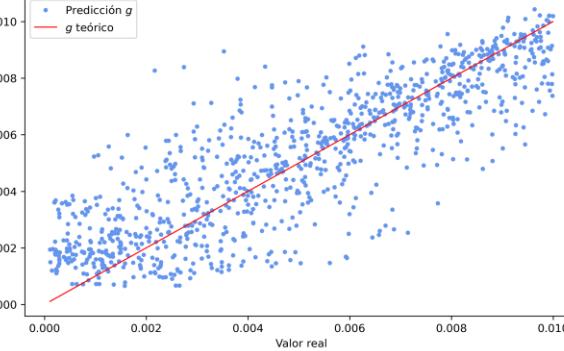
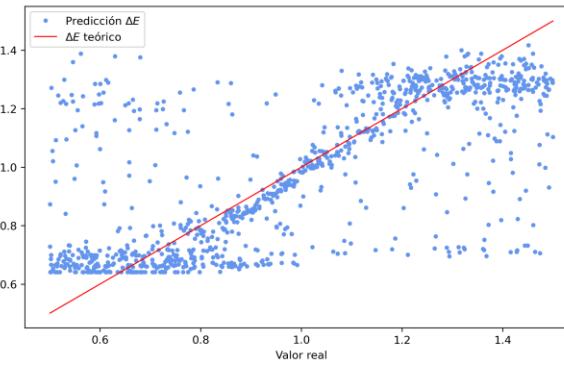
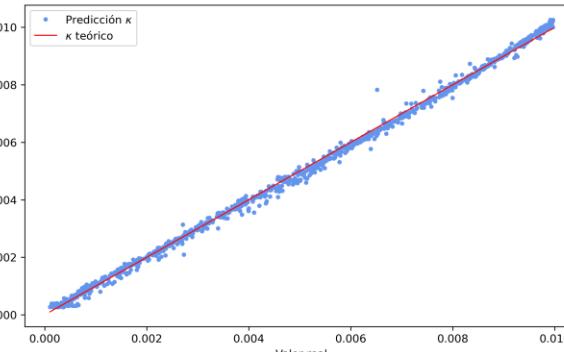
$$\gamma = 2e-4$$

Comparación entre valor real y la predicción



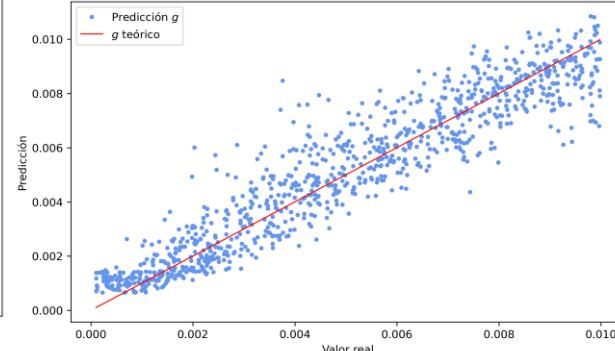
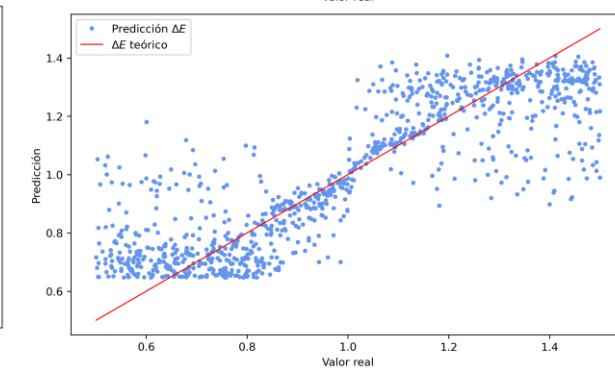
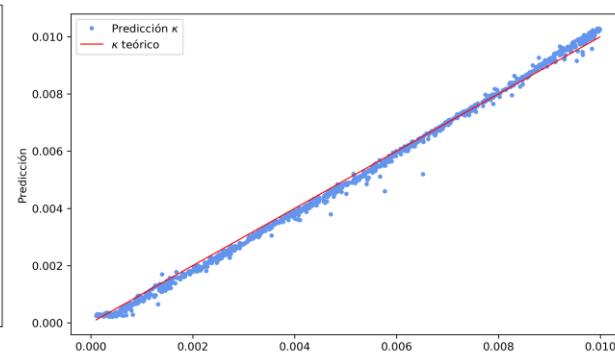
$$\gamma = 1e-3$$

Comparación entre valor real y la predicción



$$\gamma = 7e-3$$

Comparación entre valor real y la predicción

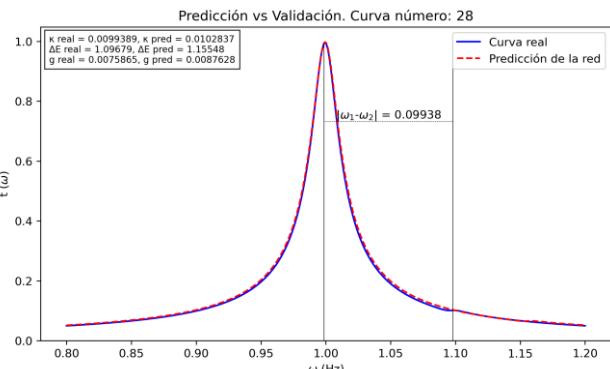
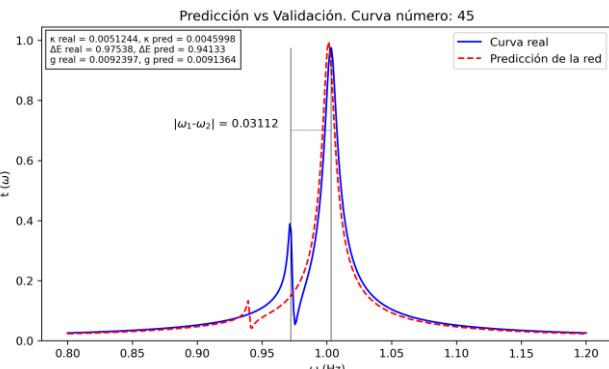
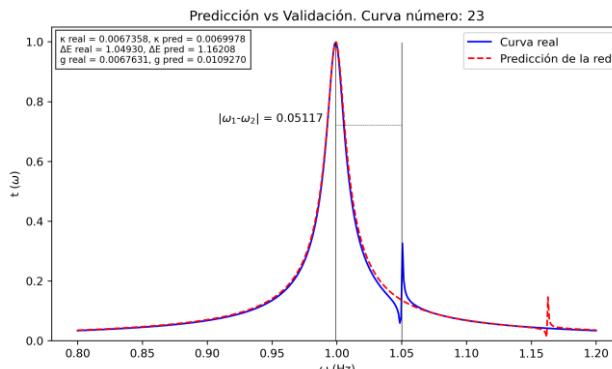
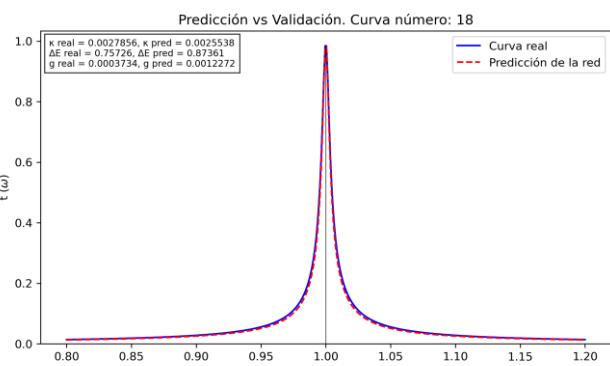
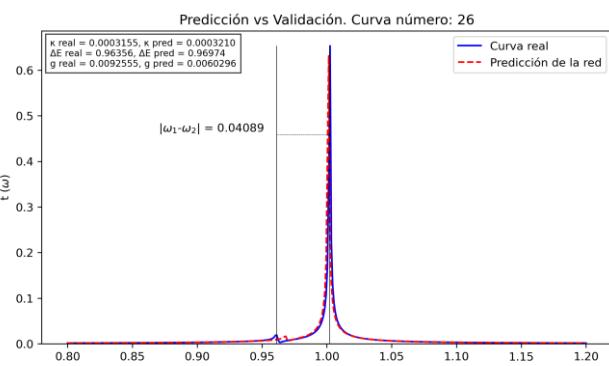
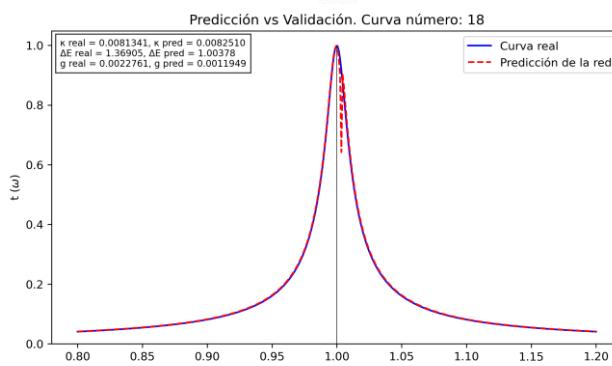
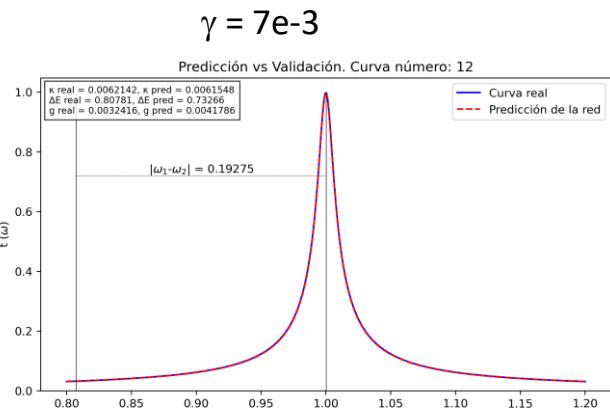
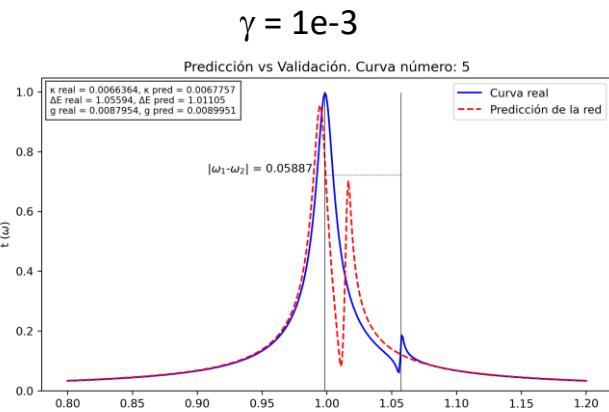
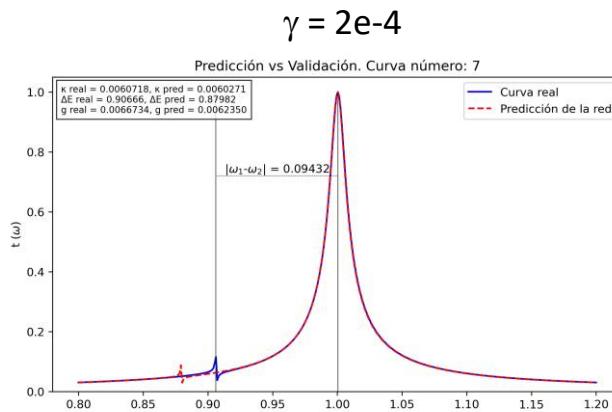


En el γ pequeño, ΔE mantiene su predicción en forma de escalón, g se ha dispersado un poco, pero está bastante bien.

Para γ mediano, se reducen el número de puntos haciendo escalón, pero los pocos que quedan, se desvían más que antes. Y g sigue igual.

Y para γ grande, mejora algo el escalón, pero nada muy destacable. g sí que se acota más y es más precisa su predicción.

07/03/2024: Fijamos γ



En el γ pequeño, ΔE falla bastante y se ve en seguida en qué curvas lo ha hecho (ya sea resonancia o no). En general, ha fallado muchas curvas. No se aprecian dobles picos, pero sí deformaciones y fanos.

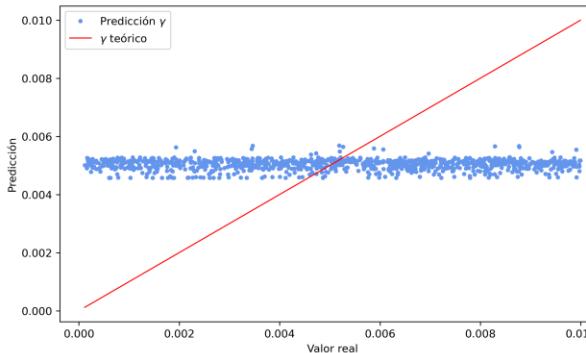
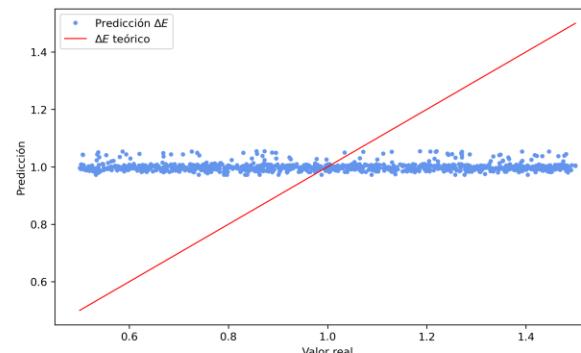
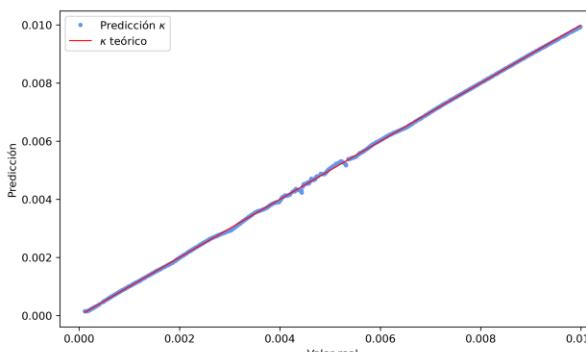
Para γ mediano, sigue fallando mucho en ΔE , y hay más dobles picos y "fanos", lo que genera curvas bastante feas, ya que ligeros fallos son muy perceptibles en resonancia. Y no se aprecian mejoras en las predicciones, respecto a γ pequeña.

Y para γ grande, desaparecen los dobles picos y "fanos", quedando únicamente algunas curvas asimétricas o deformadas, que apenas dan error en las predicciones. Aunque a nivel de parámetros parece no haber mucha mejoría, visualmente se predicen mejor las curvas, ya que donde para errores que en los otros casos deformaría la curva, en este caso no se aprecia apenas.

07/03/2024: Fijamos g

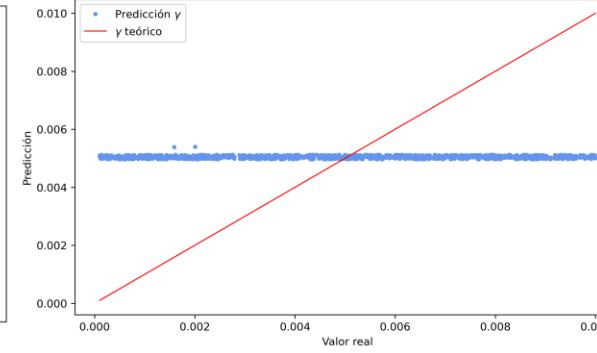
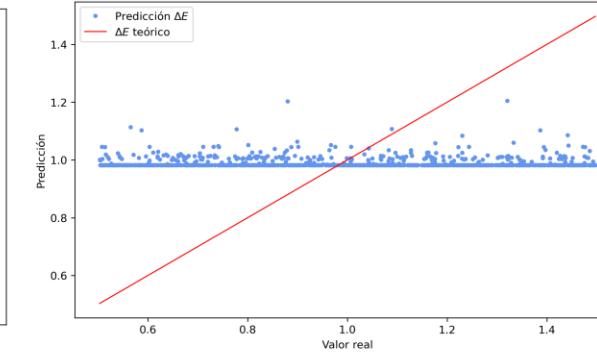
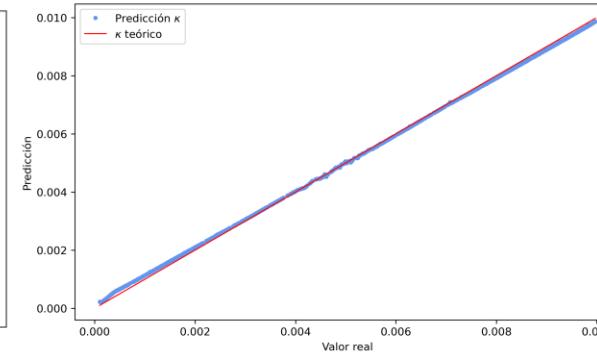
$g = 2e-4$

Comparación entre valor real y la predicción



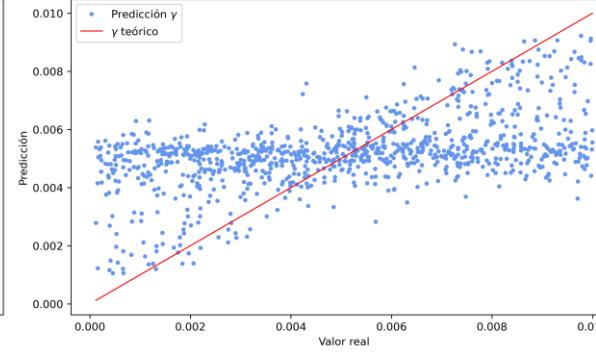
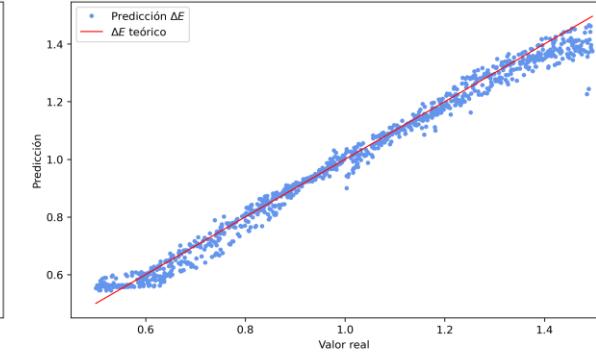
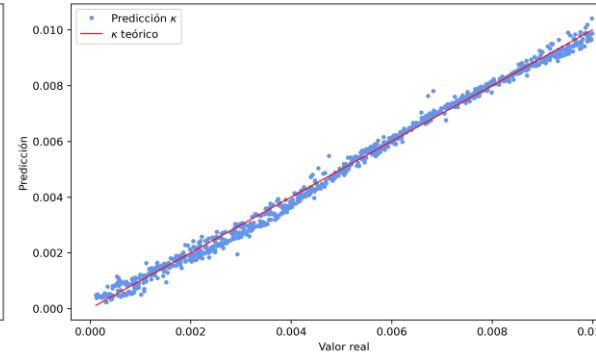
$g = 1e-3$

Comparación entre valor real y la predicción



$g = 7e-3$

Comparación entre valor real y la predicción



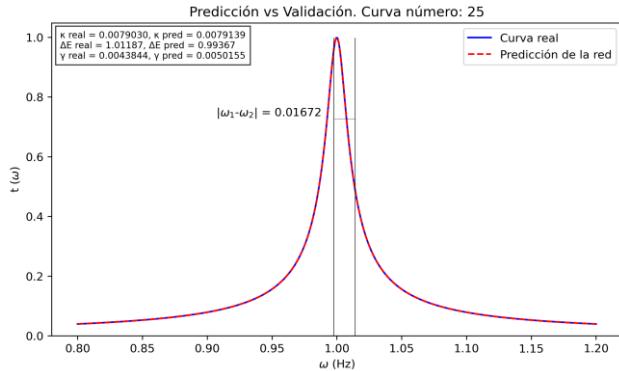
Para g pequeño es totalmente incapaz de predecir ΔE y γ .

En g mediano, la situación es análoga a g pequeño.

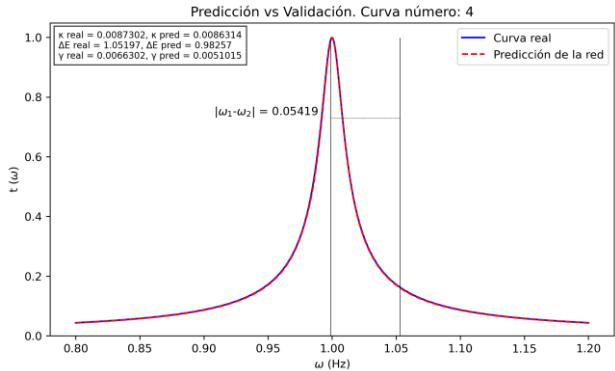
Con g grande se pierde algo de precisión en k , pero pasamos a predecir perfectamente ΔE , y aunque malamente, se intenta hacer algo con γ .

07/03/2024: Fijamos g

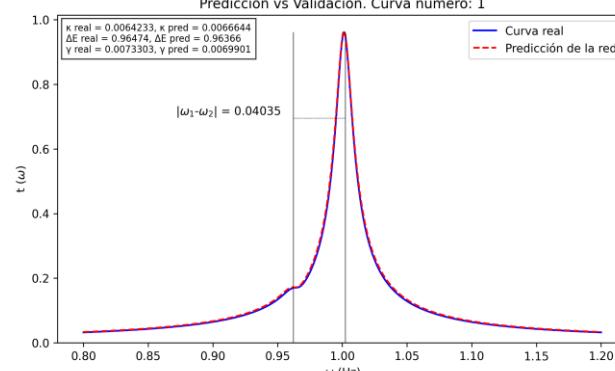
$g = 2e-4$



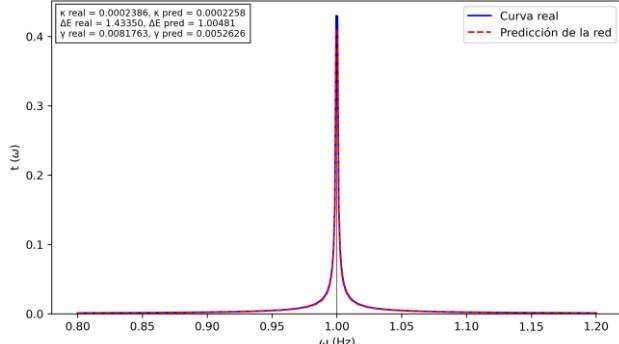
$g = 1e-3$



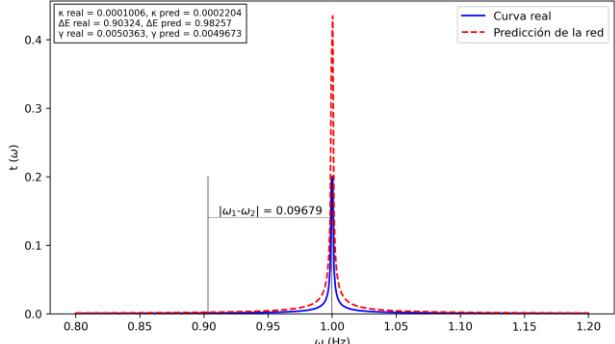
$g = 7e-3$



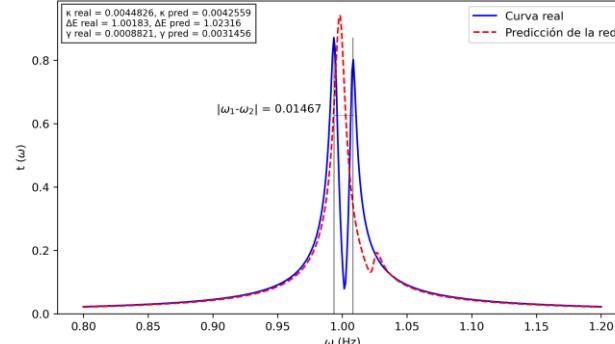
Predicción vs Validación. Curva número: 26



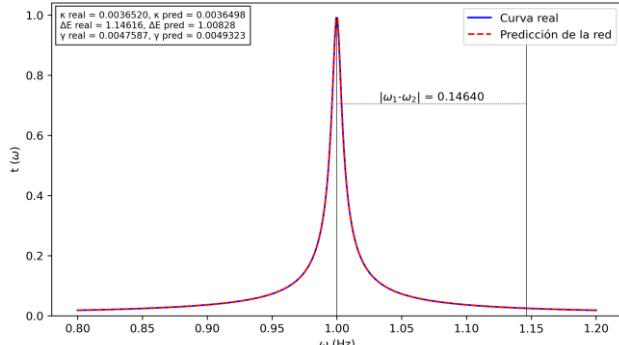
Predicción vs Validación. Curva número: 13



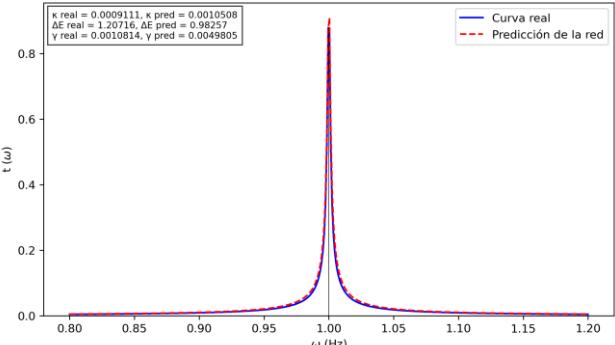
Predicción vs Validación. Curva número: 21



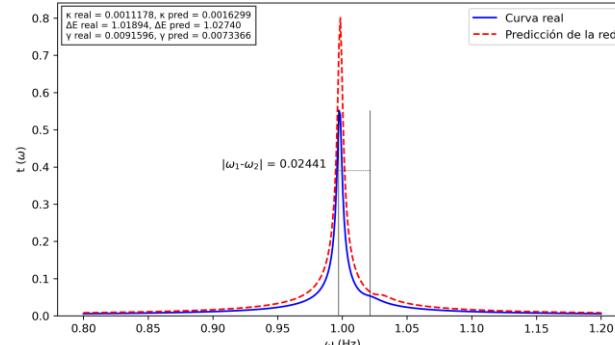
Predicción vs Validación. Curva número: 95



Predicción vs Validación. Curva número: 23



Predicción vs Validación. Curva número: 23



Para g pequeño, a pesar de una nula predicción de ΔE y γ , las curvas son todas muy precisas. Se tratan de Lorentzianas de todo tipo de amplitudes, las únicas que dan algún problema para predecir son las de κ pequeño, que un pequeño fallo las desvía mucho en altura.

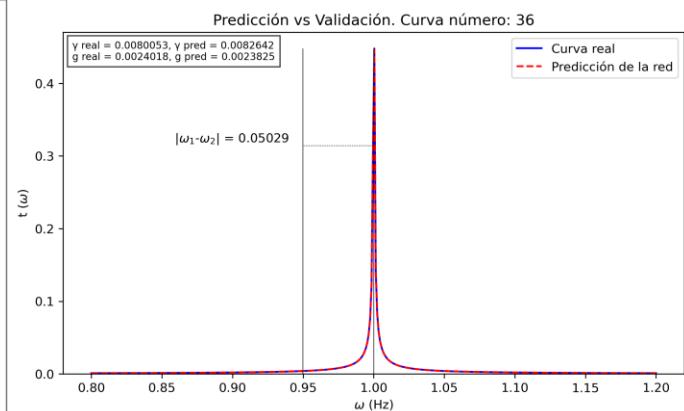
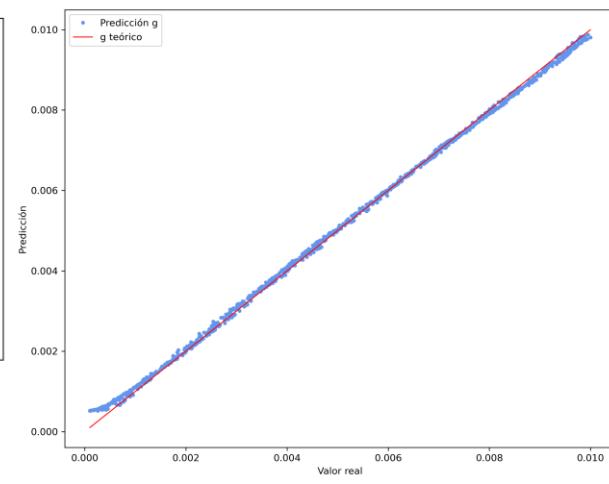
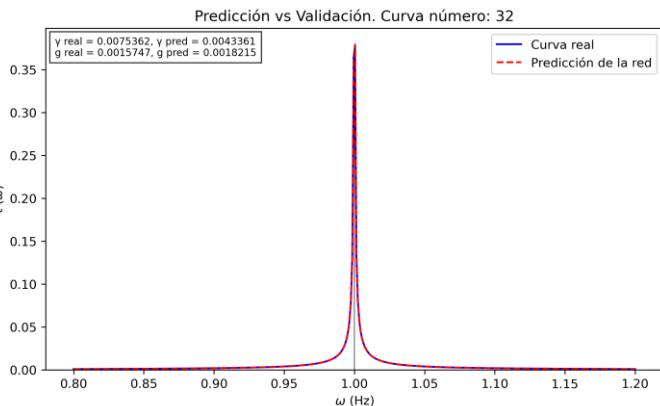
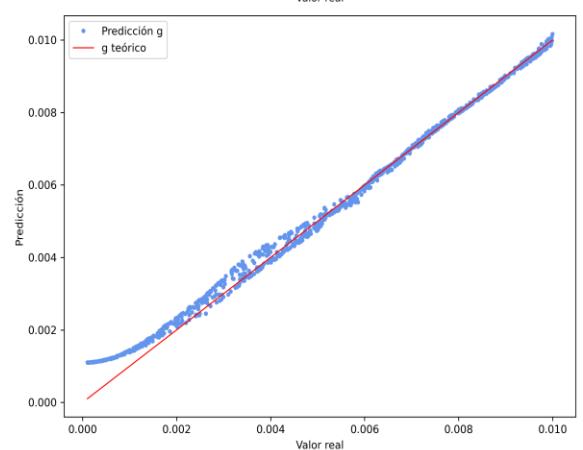
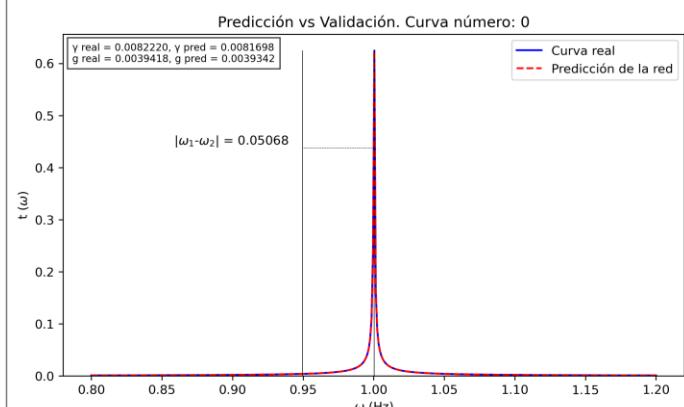
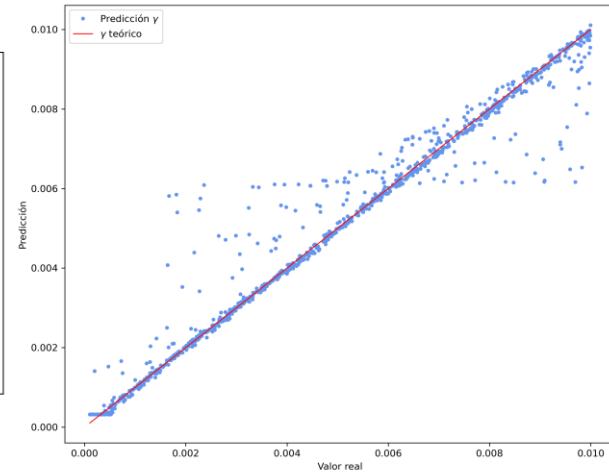
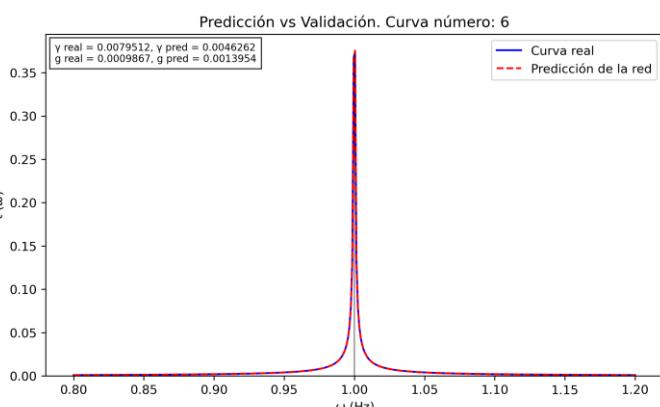
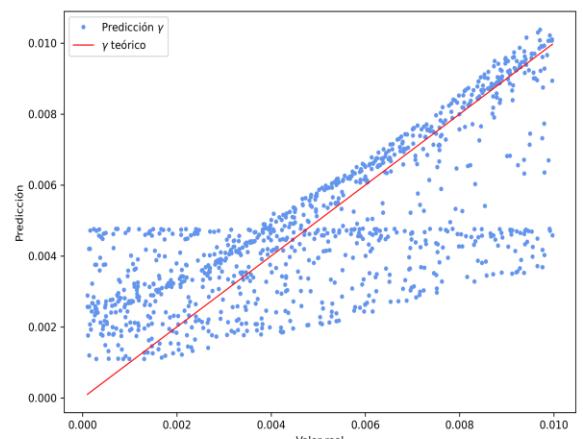
En g mediano, la situación es análoga a g pequeño.

Con g grande, aunque en parámetros mejore mucho, empezamos a tener curvas con deformaciones, fanos y dobles picos; lo que nos lleva al error de siempre cuando hay ligeros fallos de ΔE en zona de resonancia, ya que los fallos en γ apenas son perceptibles.

08/03/2024: Fijamos κ y ΔE

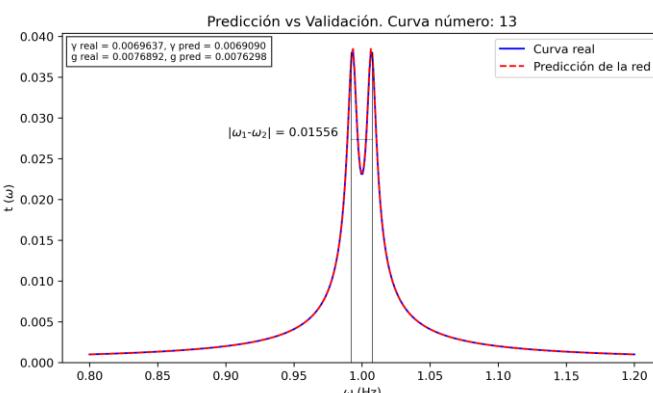
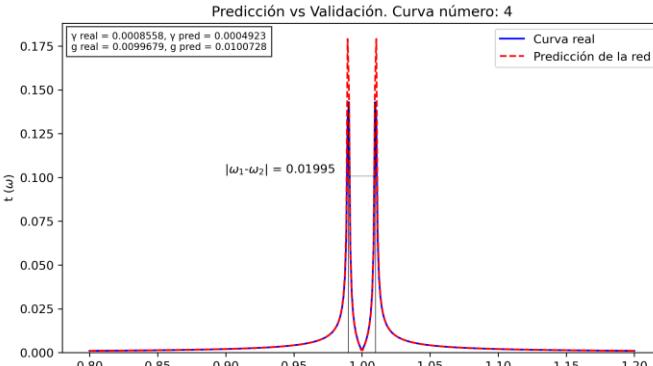
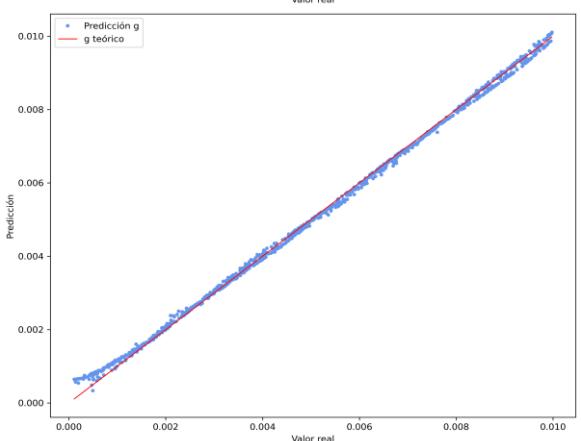
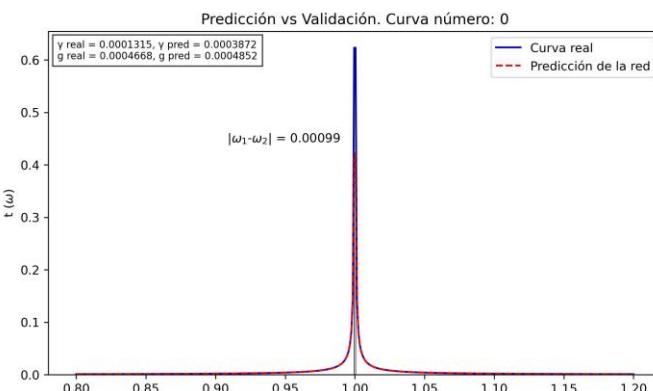
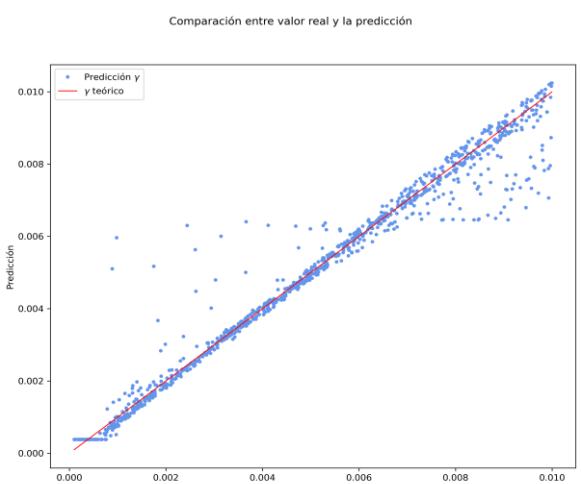
$\kappa=2e-4, \Delta E=0.75$

Comparación entre valor real y la predicción

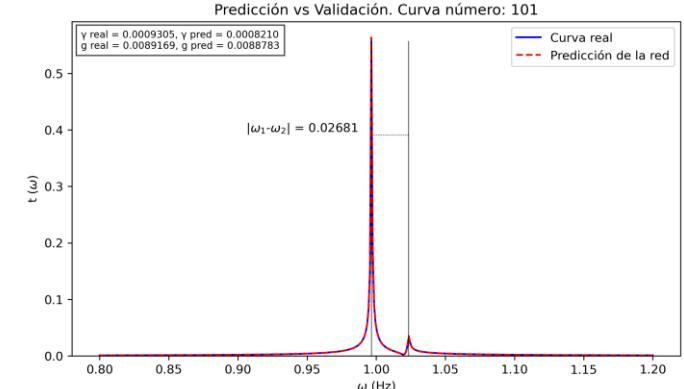
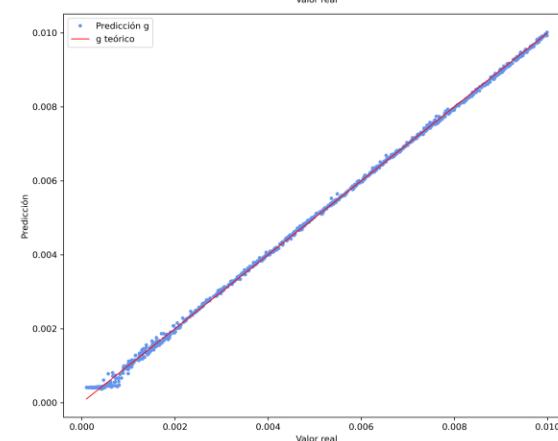
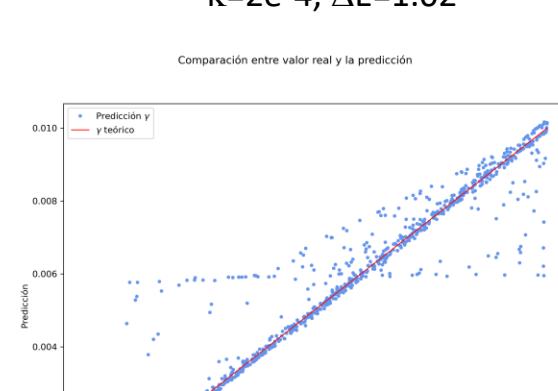
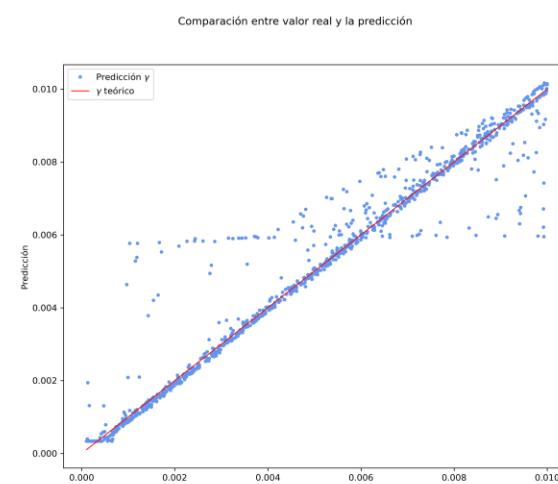


08/03/2024: Fijamos κ y ΔE

$\kappa=2e-4, \Delta E=1.0$



$\kappa=2e-4, \Delta E=1.02$

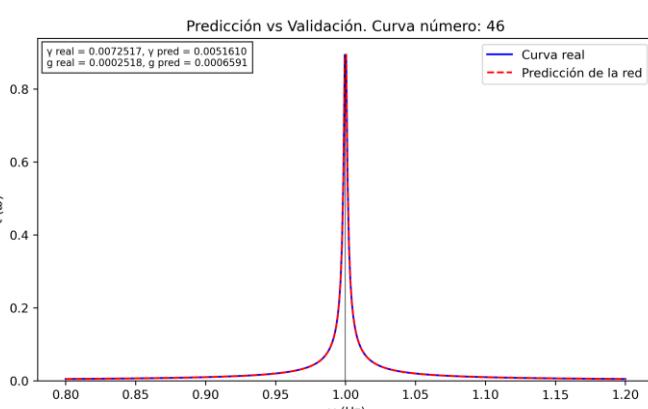
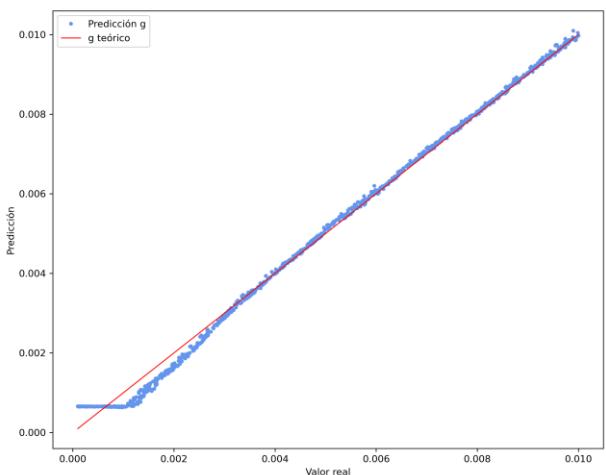
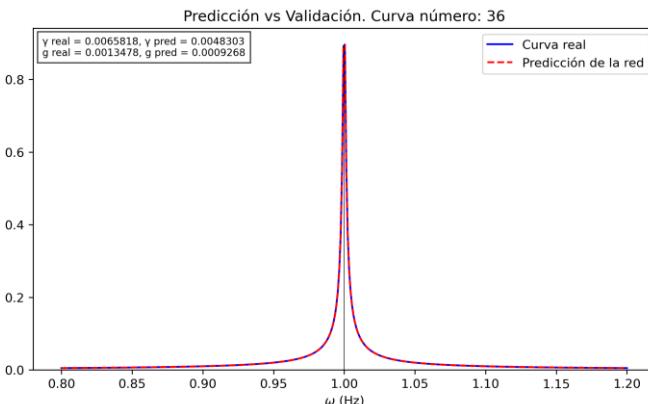
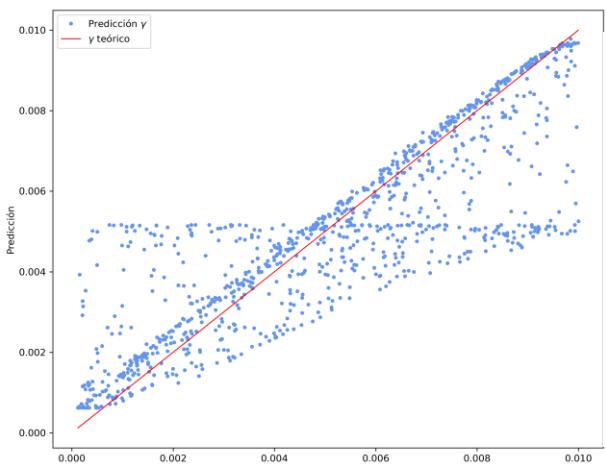


κ pequeño, fuera de resonancia se predice mal γ , pero como en las curvas solo tenemos Lorentzianas de poca amplitud, no hay fallos en la forma de la curva. En la resonancia, es casi perfecta la predicción de γ , y sí tenemos dobles picos, pero en cuanto nos salimos un poco ya desaparecen, las predicciones son muy buenas, pero hay algún γ mal predicho el cual puede desviarnos un poco la predicción.

09/03/2024: Fijamos κ y ΔE

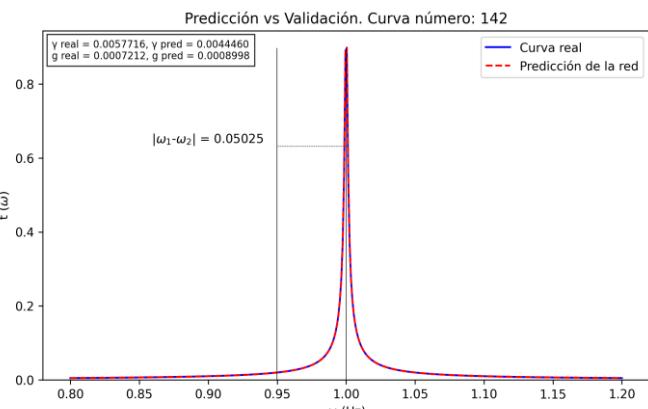
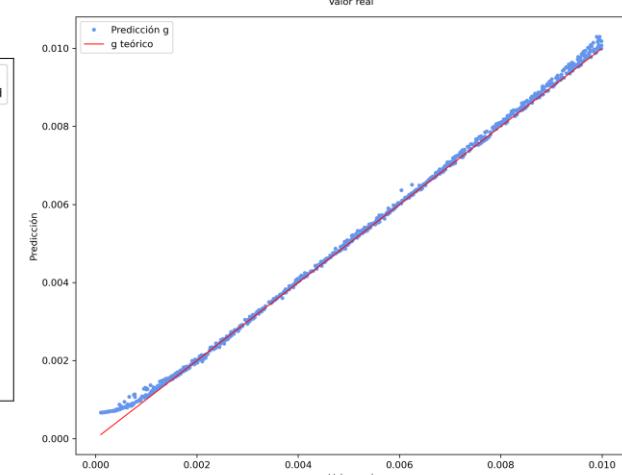
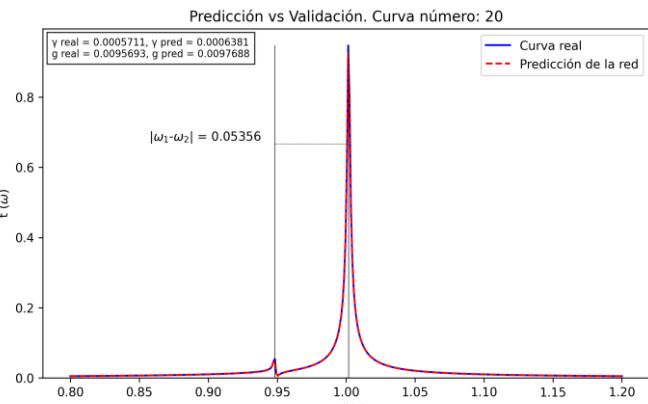
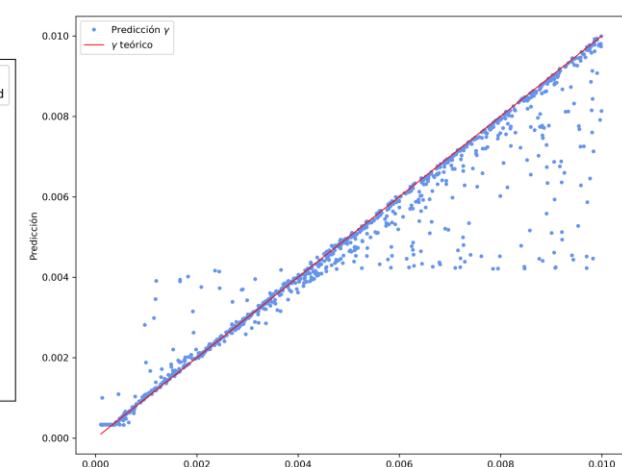
$\kappa=1e-3, \Delta E=0.75$

Comparación entre valor real y la predicción



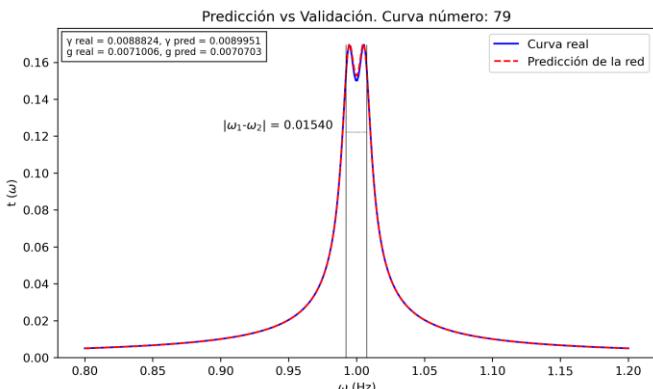
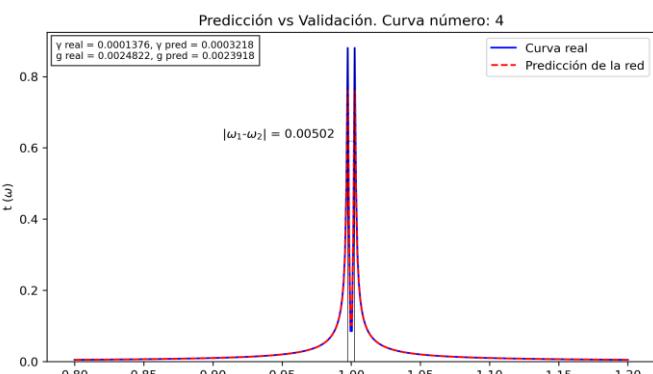
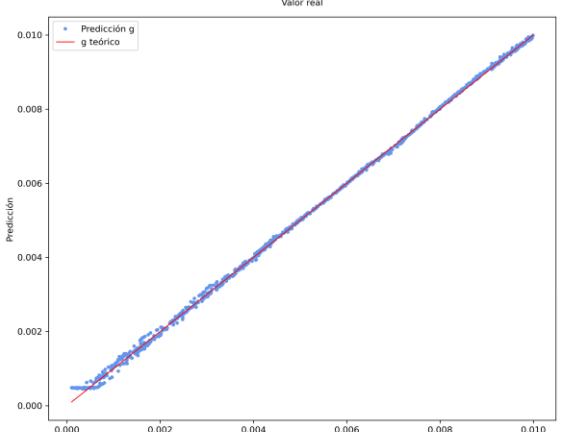
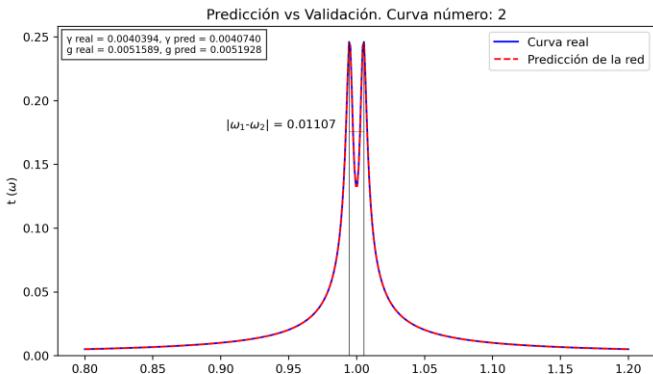
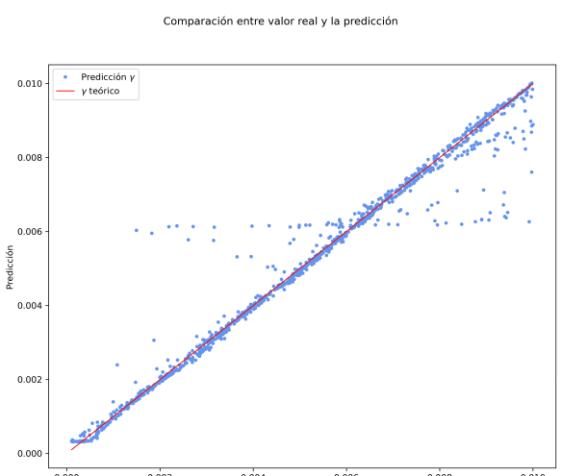
$\kappa=1e-3, \Delta E=0.95$

Comparación entre valor real y la predicción

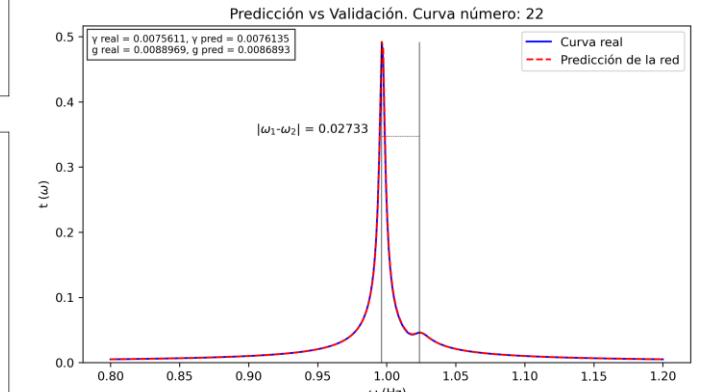
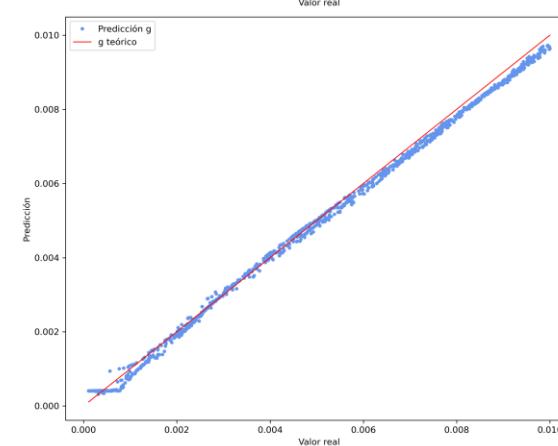
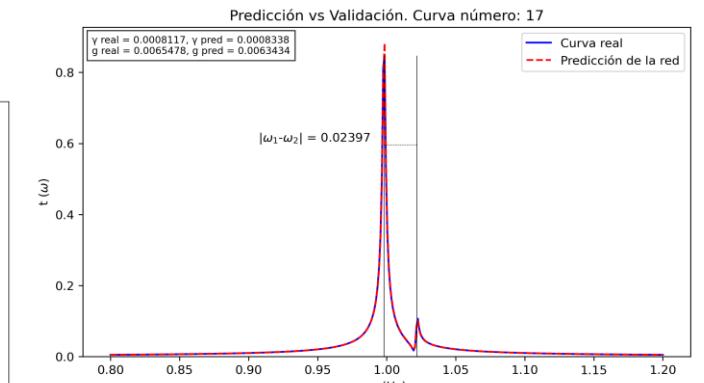
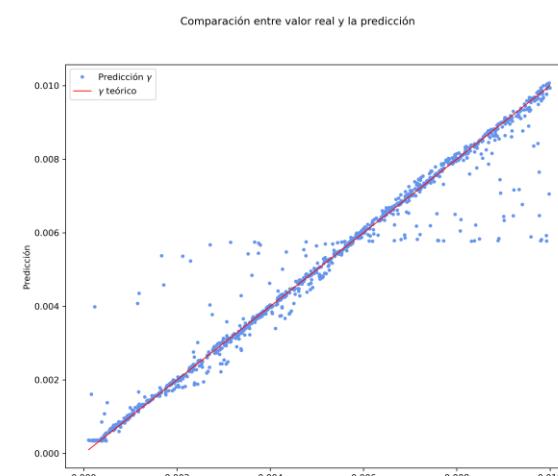


09/03/2024: Fijamos κ y ΔE

$\kappa=1e-3, \Delta E=1.0$



$\kappa=1e-3, \Delta E=1.02$

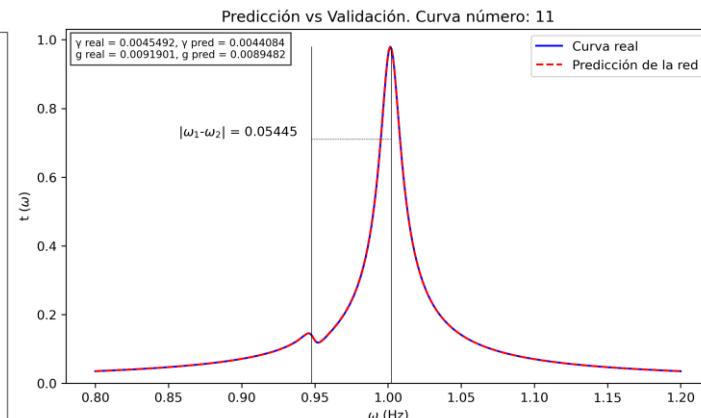
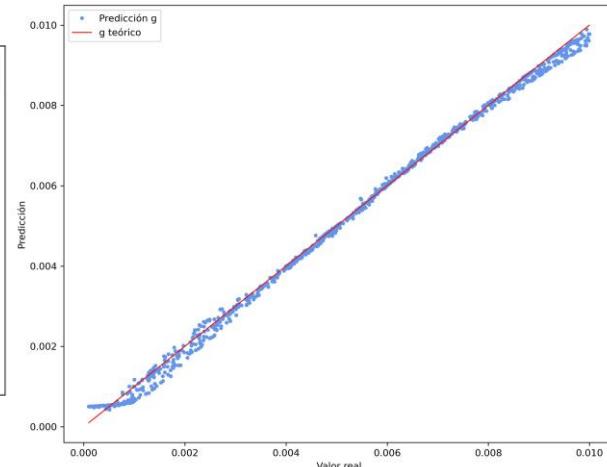
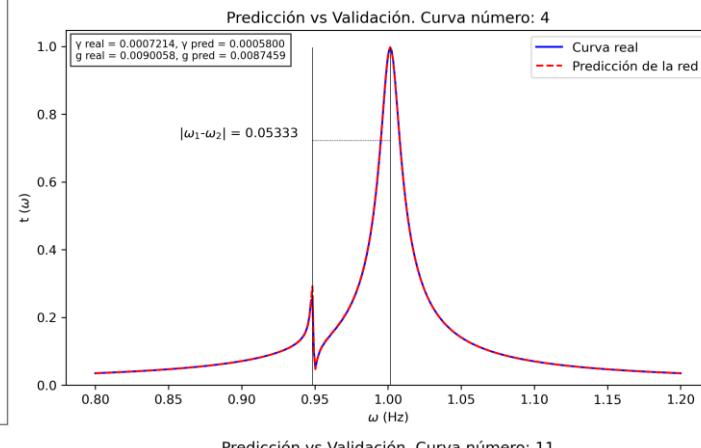
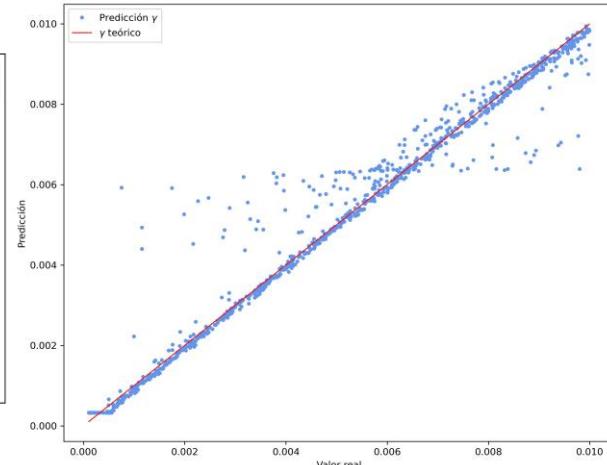
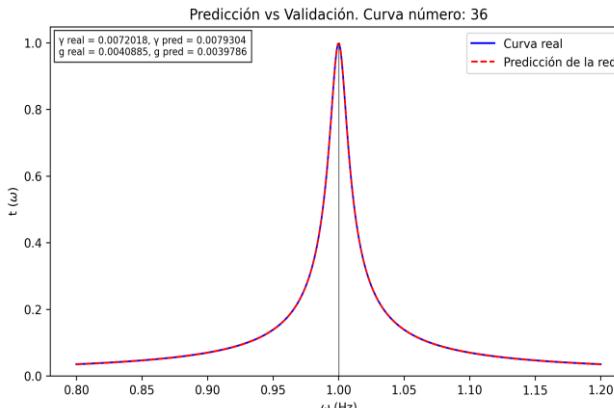
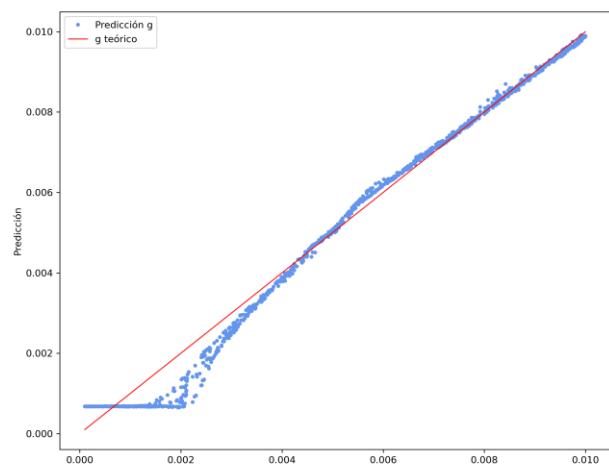
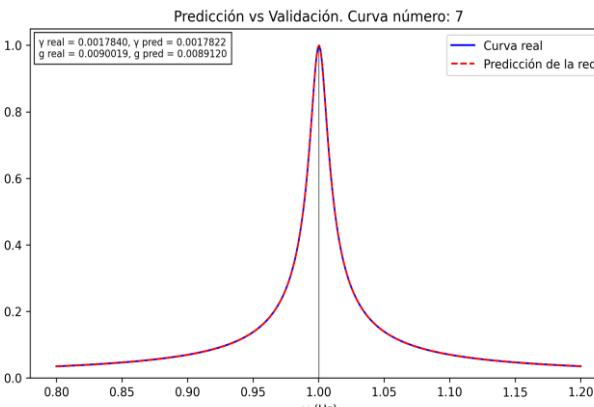
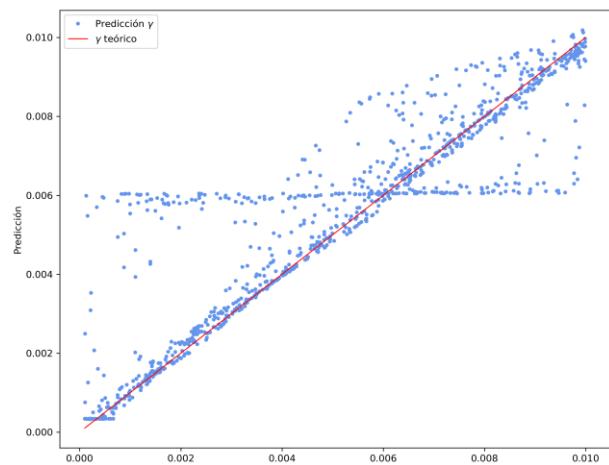


κ mediano, mejora las predicciones de γ , pero sigue teniendo una línea recta sin predecir. En curvas, el comportamiento es similar a κ pequeño, pero con curvas de mayor amplitud, y los fanos y deformaciones aparecen un poco más alejados de la resonancia. Las curvas tienen todas predicciones perfectas, o casi perfectas.

09/03/2024: Fijamos κ y ΔE

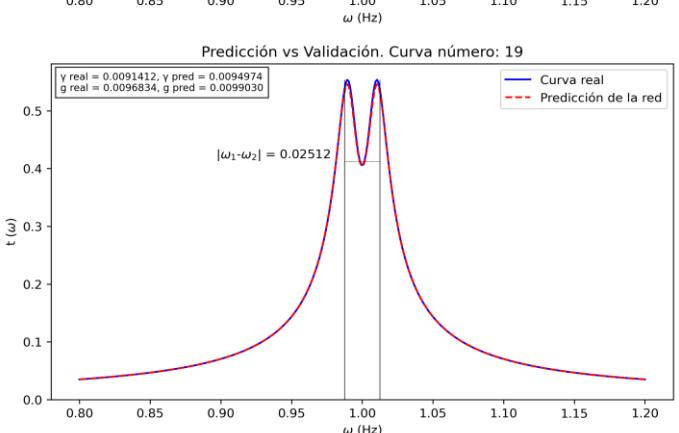
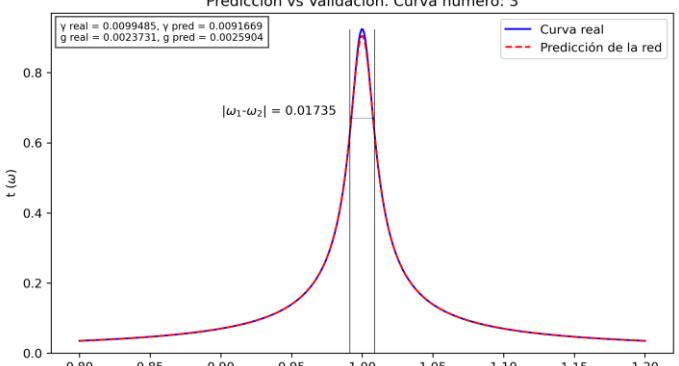
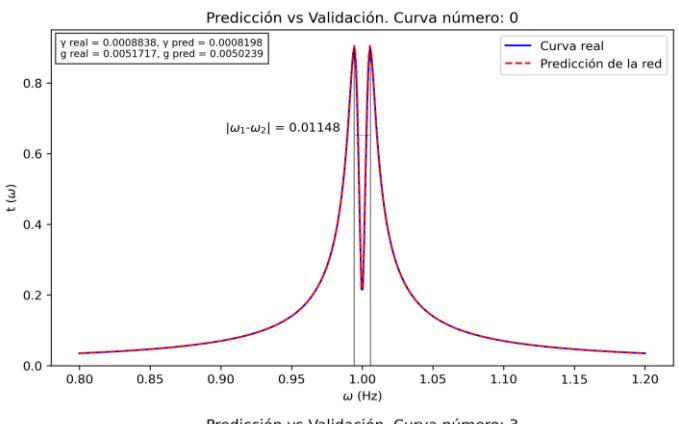
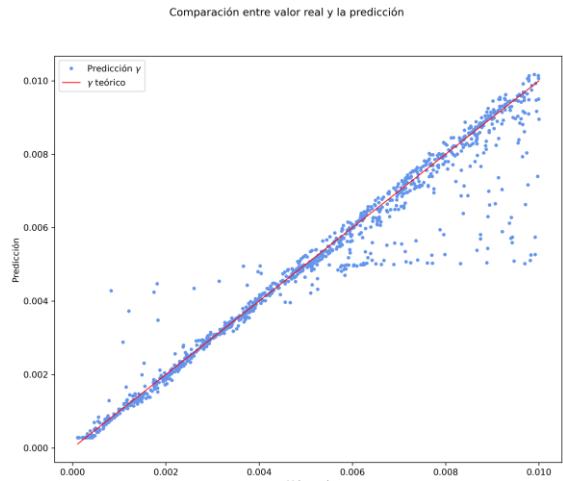
$\kappa=7e-3, \Delta E=0.75$

Comparación entre valor real y la predicción

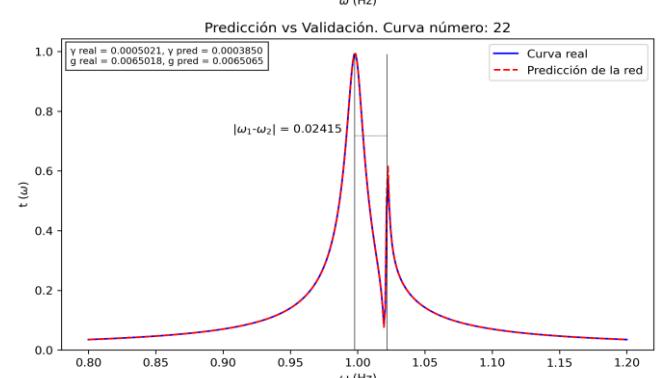
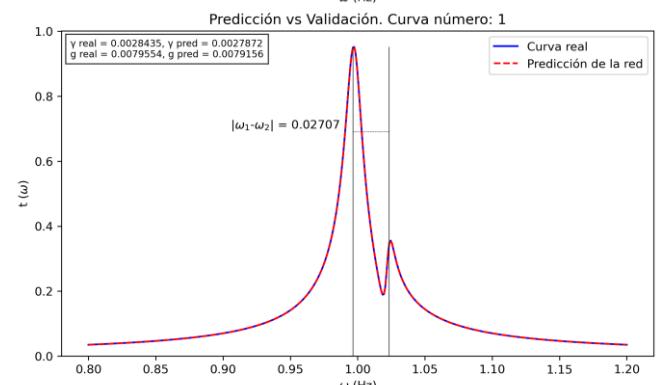
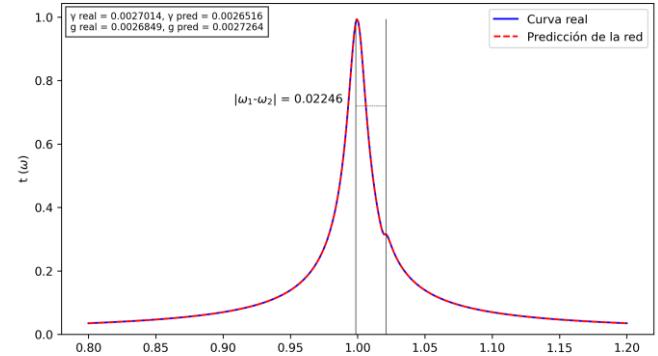
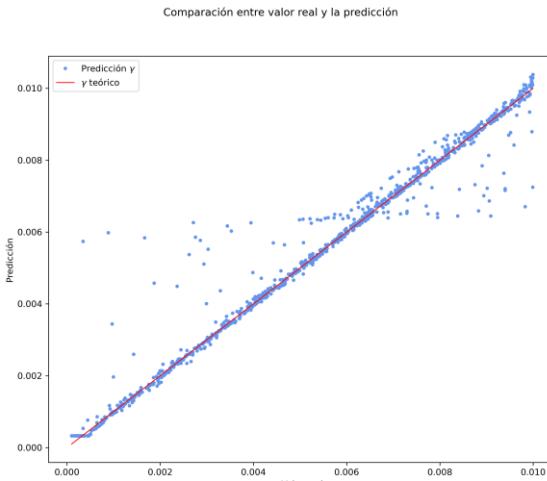


09/03/2024: Fijamos κ y ΔE

$\kappa=7e-3$, $\Delta E=1.0$



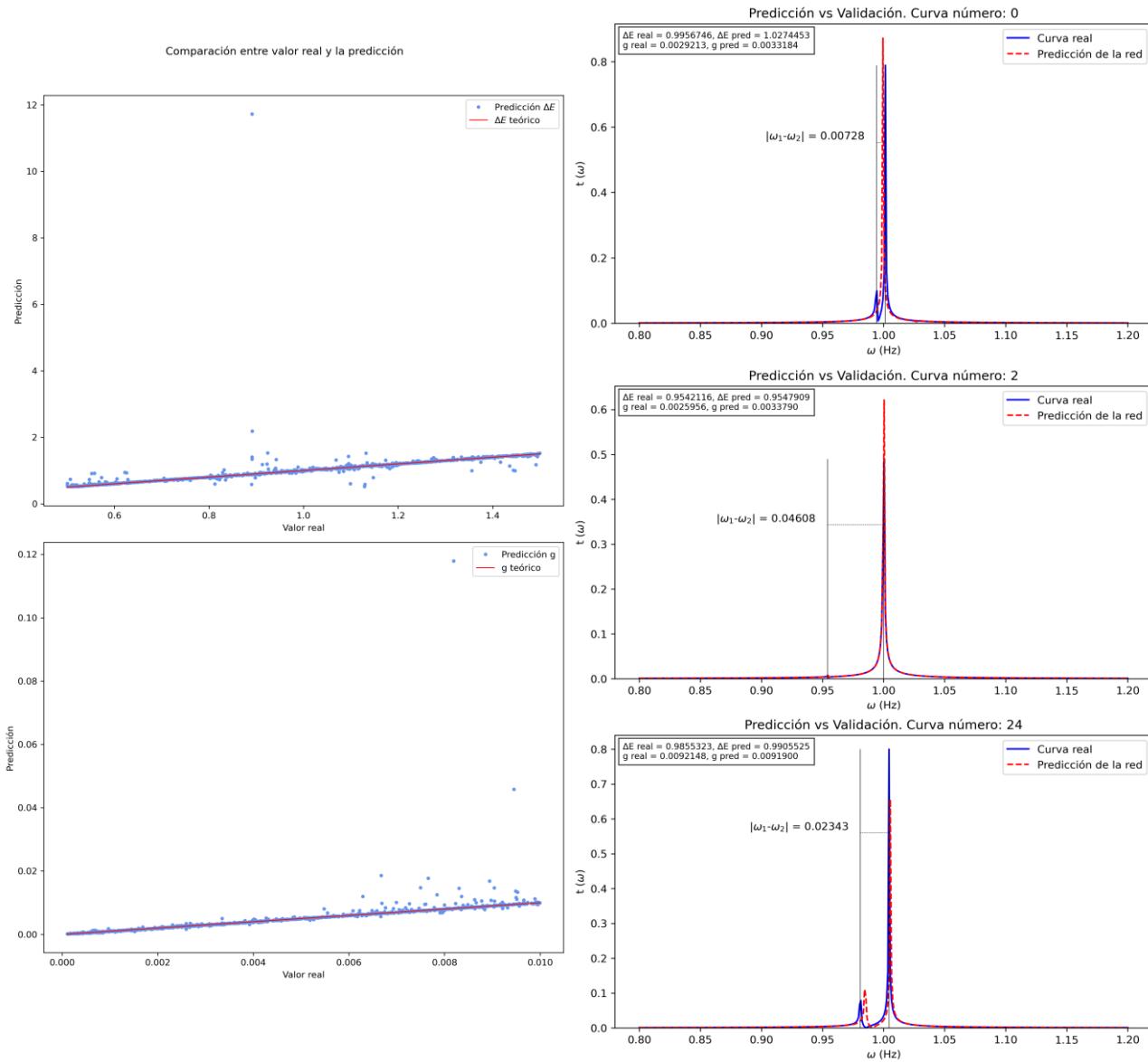
$\kappa=7e-3$, $\Delta E=1.02$



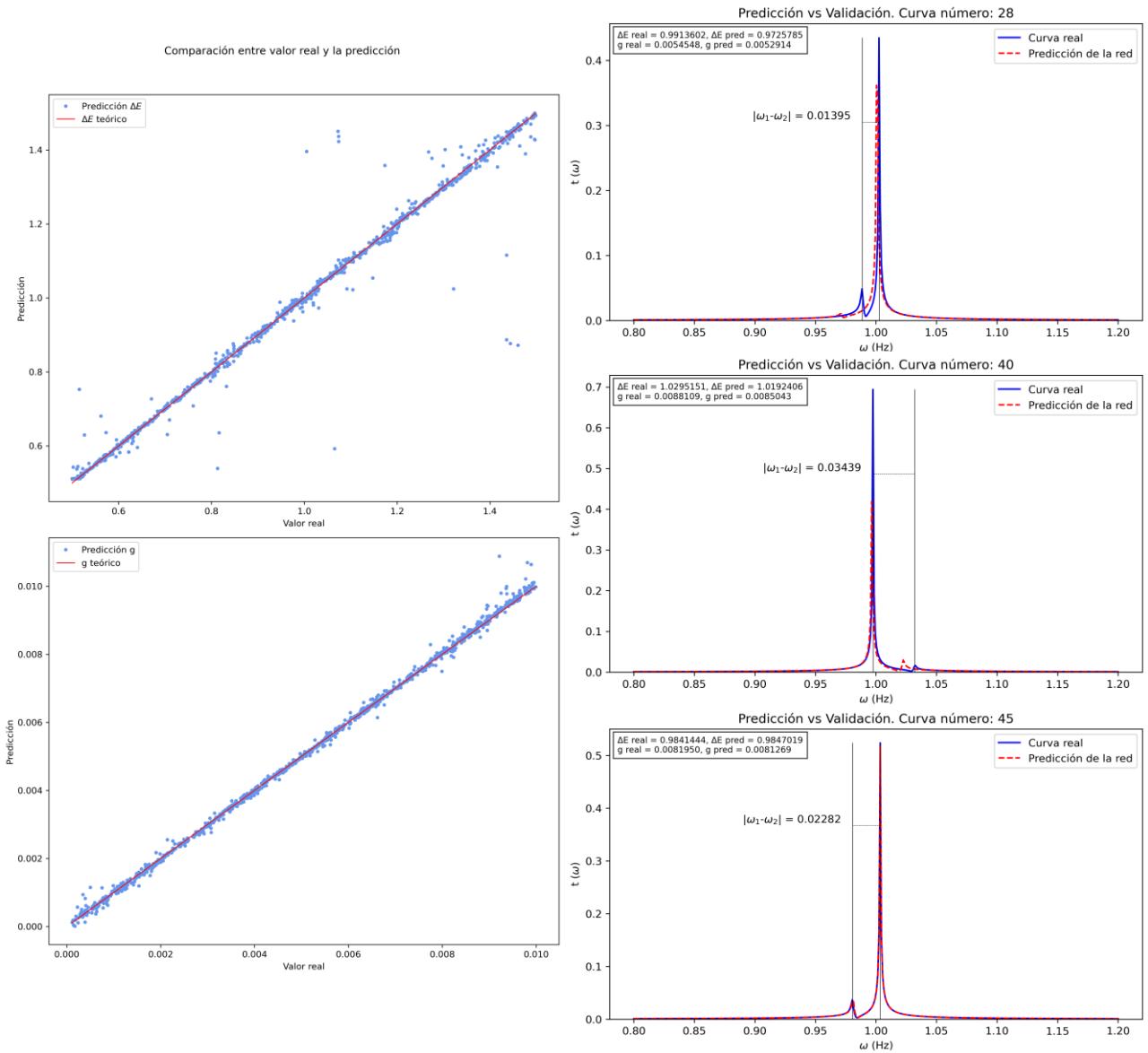
κ grande fuera de resonancia, muestra una única Lorentziana (más amplia que antes), ya que el dominio de κ impide a los otros parámetros intervenir en la forma de la curva, además, las g pequeñas tiene problemas para predecirlas. El rango de ΔE en el que aparecen las deformaciones se amplía. En resonancia, cuando g es muy grande, no tenemos doble pico, a pesar de que las soluciones de ω sí lo muestren. De todas formas, las curvas se predicen perfectas.

12/03/2024: Fijamos κ y γ

$\kappa=2\text{e-}4$, $\gamma=2\text{e-}4$



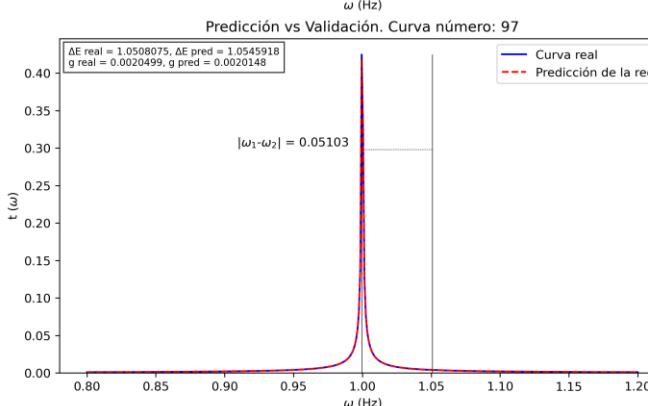
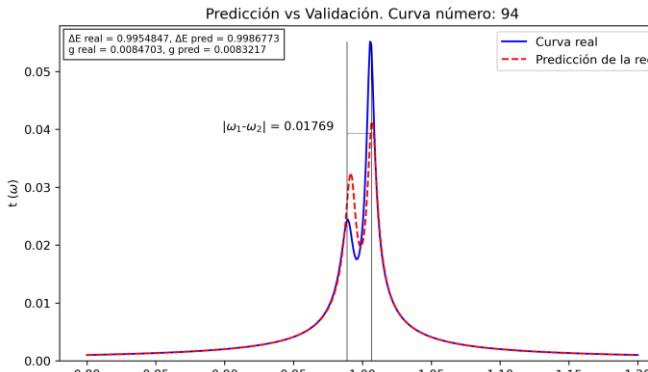
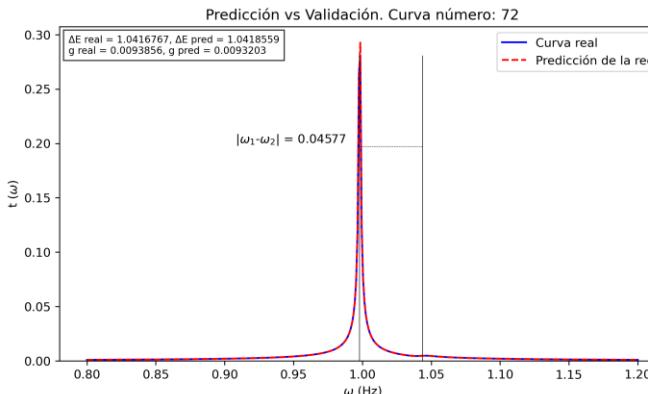
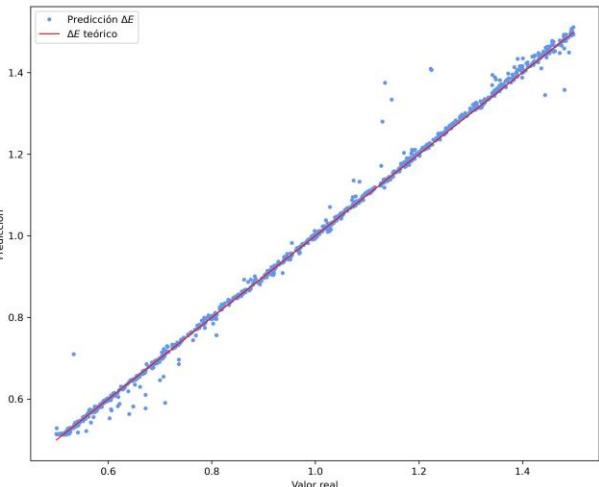
$\kappa=2\text{e-}4$, $\gamma=1\text{e-}3$



12/03/2024: Fijamos κ y γ

$\kappa=2\text{e-}4$, $\gamma=7\text{e-}3$

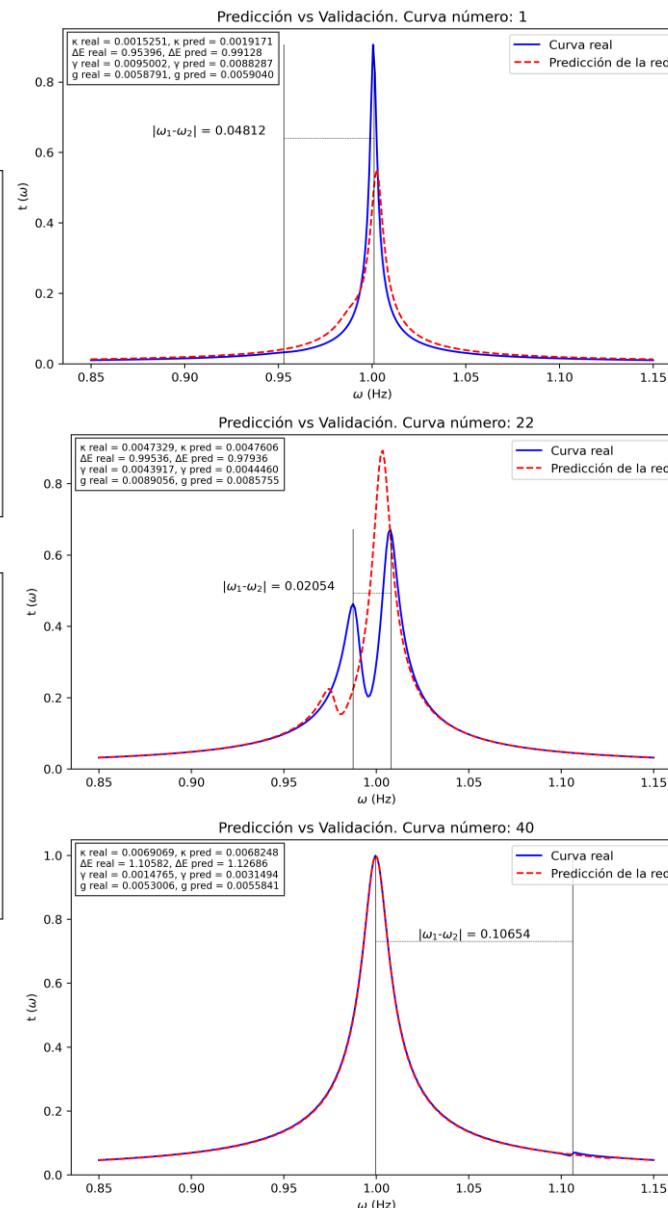
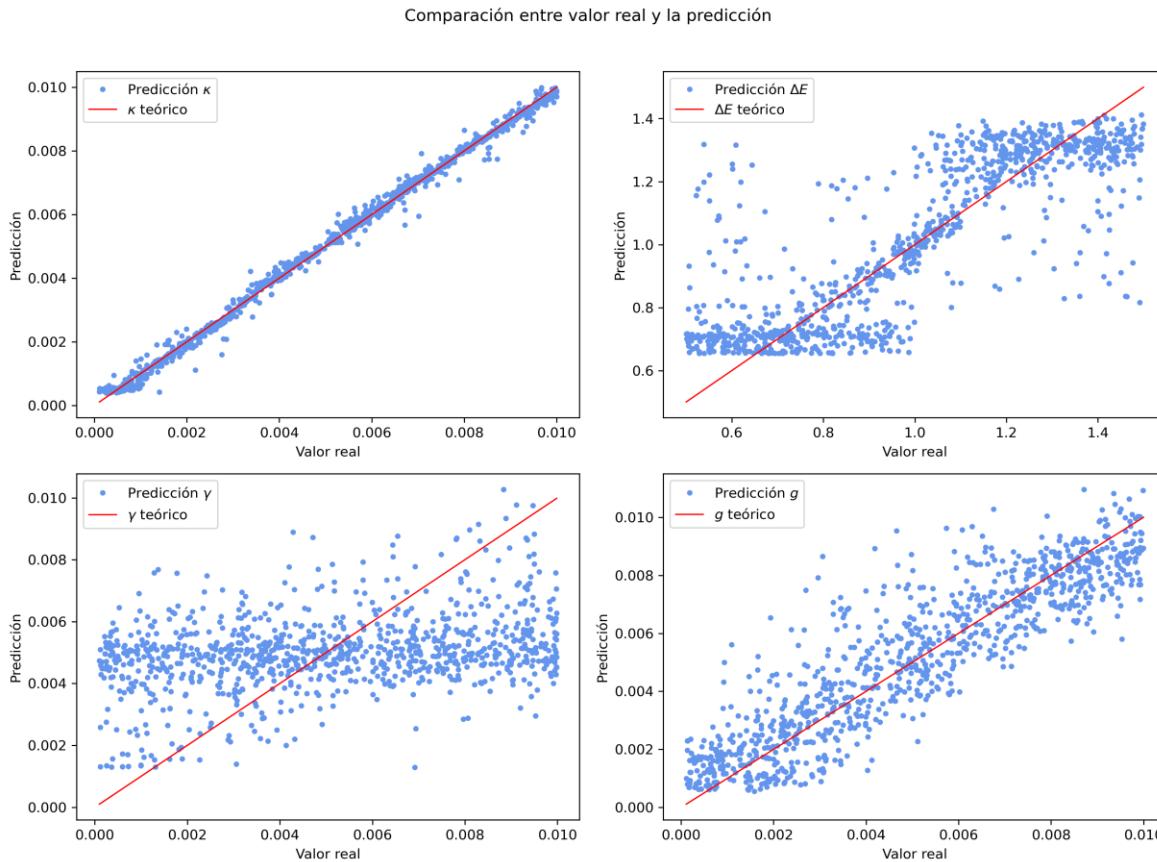
Comparación entre valor real y la predicción



15/03/2024:

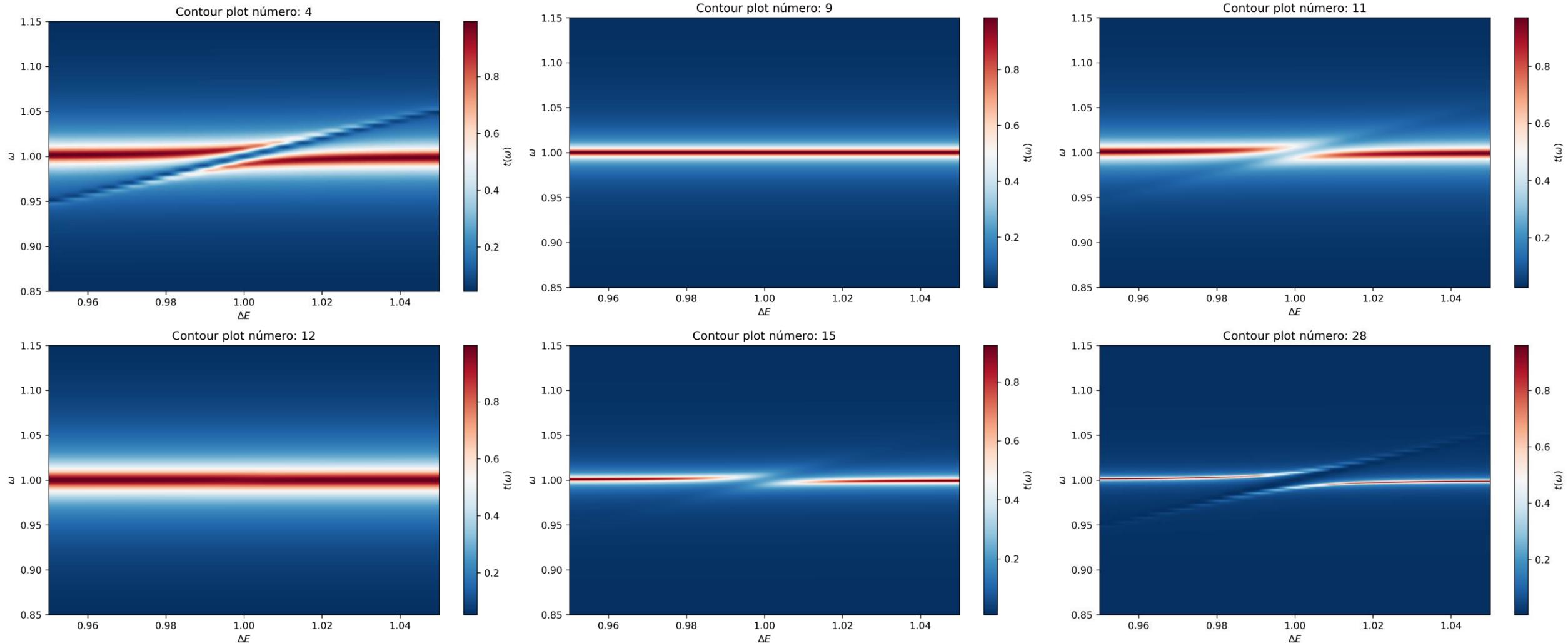
A partir de ahora vamos a reducir la cantidad de ω , teniendo 300 valores en un rango de 0.85 a 1.15

15/03/2024: Acortar ω



Obviamente no ha cambiado nada,
simplemente se ha recortado el número de
valores de ω

15/03/2024: Hacemos un *contour plot* para cada combinación (añadimos uno para después de entrenar también, y podemos comparar)



Se usan 21 valores de ΔE entre 0.95 y 1.05

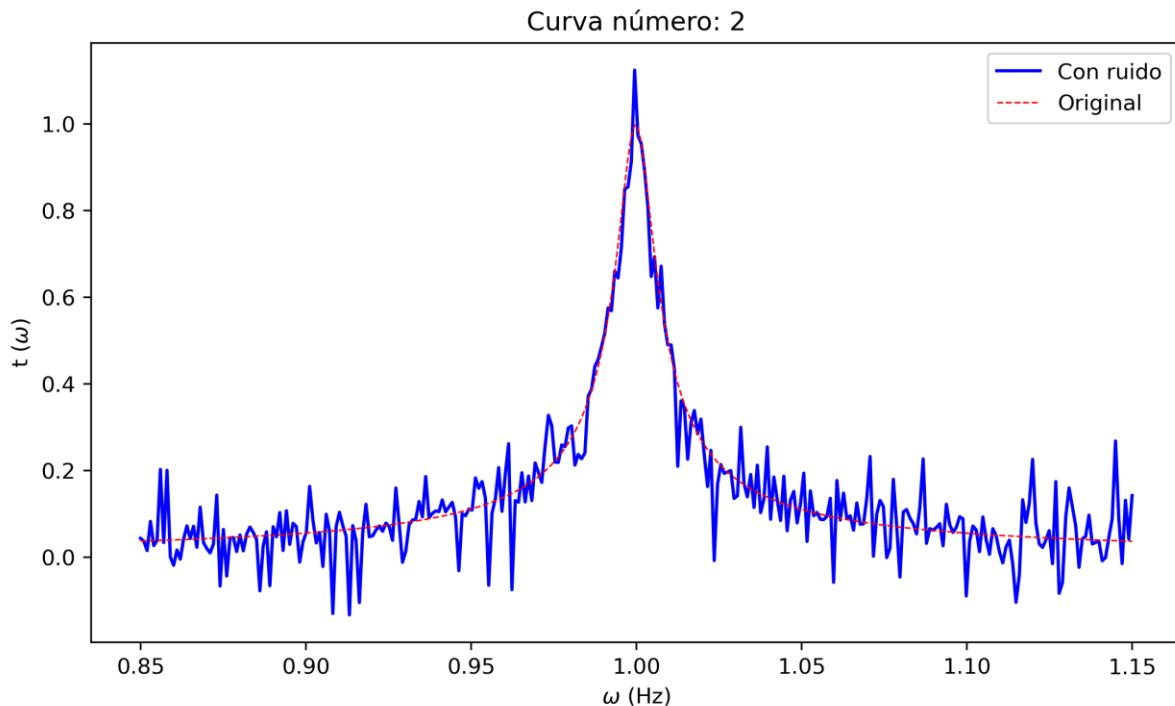
No se parecen a las formas del paper que me mostraste. Supongo que no entendí bien lo que dibujar, pero es cambiar dos cosas en el código

16/03/2024:

Añadimos ruido Gaussiano a nuestras curvas.

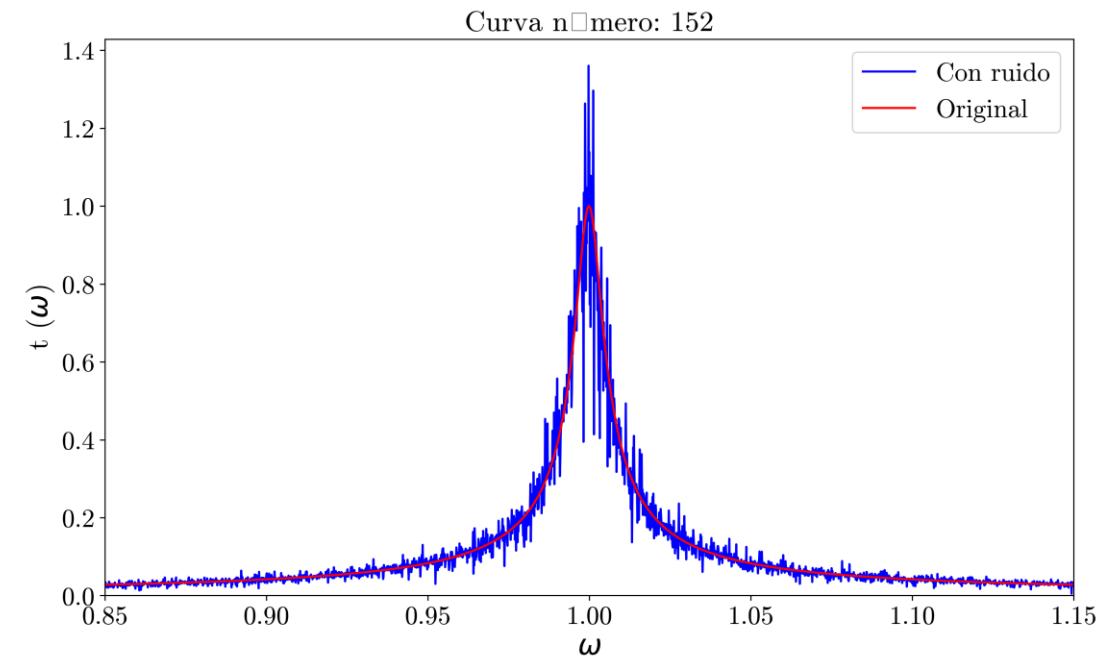
19/03/2024: Distintas pruebas para añadir el ruido

1. Para cada valor $t(\omega)$ se le añade un número gaussiano centrado en 0 con un σ aleatorio entre 0 y 0.1



Demasiado ruido en los bordes y poco en la zona central del pico. Aunque reduzcamos el σ a 0.05 u otro valor, se reduce el ruido del borde, pero también el del centro, y no nos interesa

2. Para cada valor $t(\omega)$ se le añade un número gaussiano centrado en 0 con un σ aleatorio entre 0 y el 25% del valor de ese $t(\omega)$

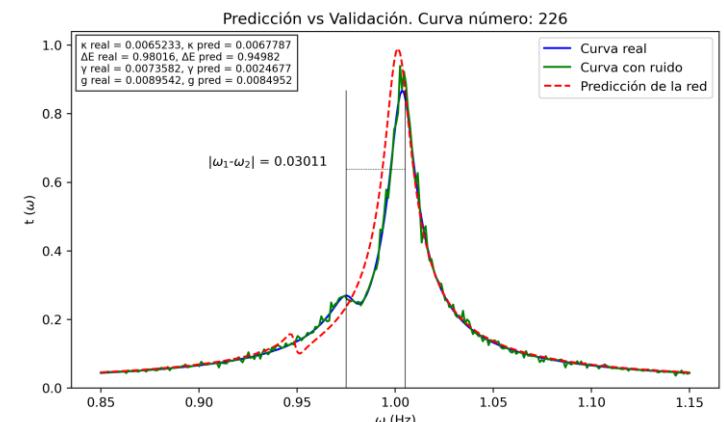
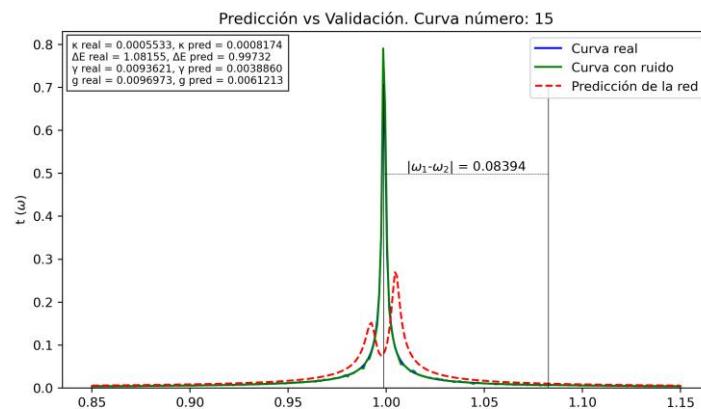
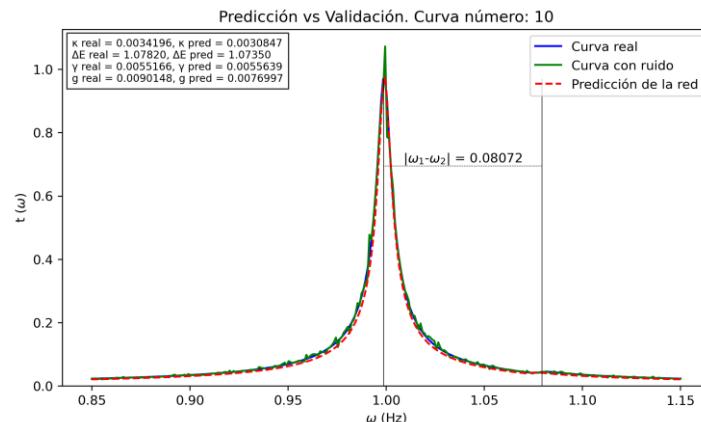
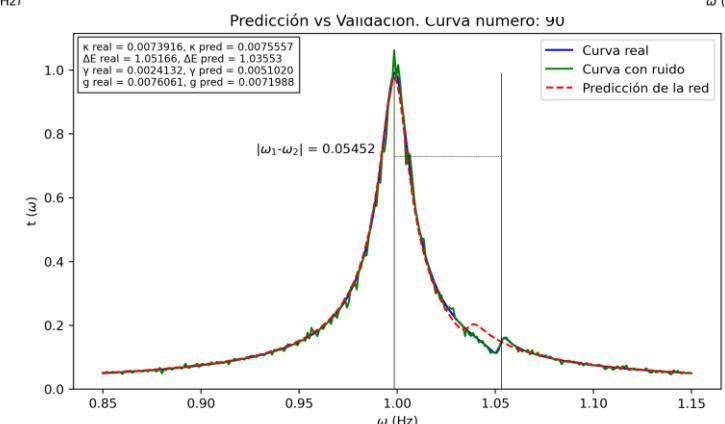
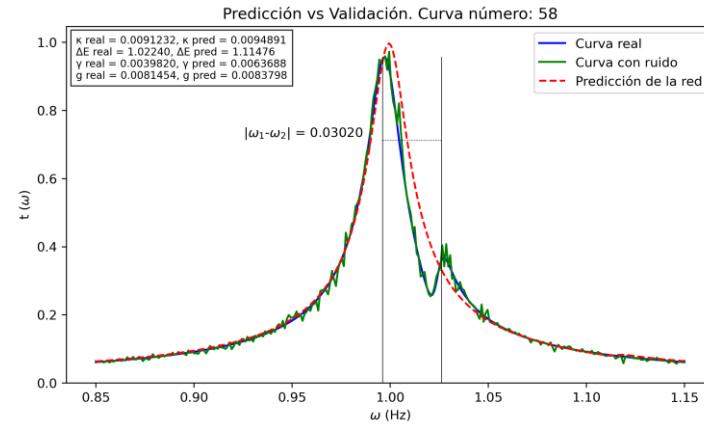
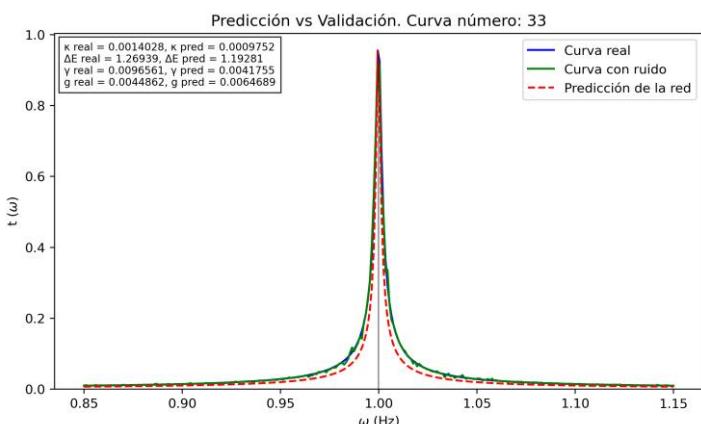
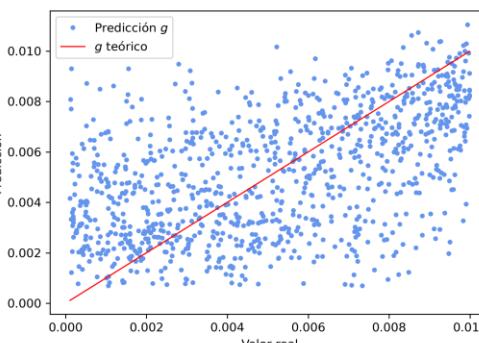
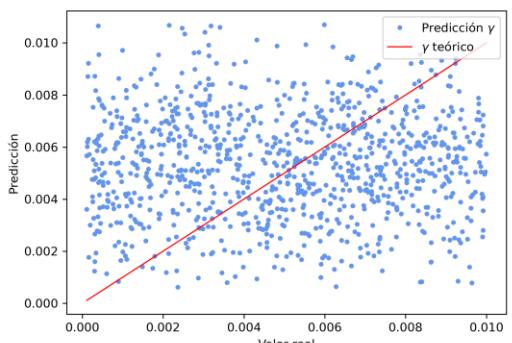
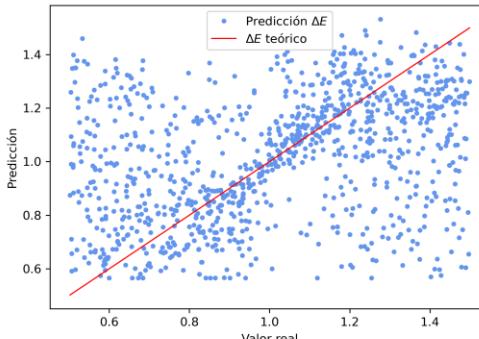
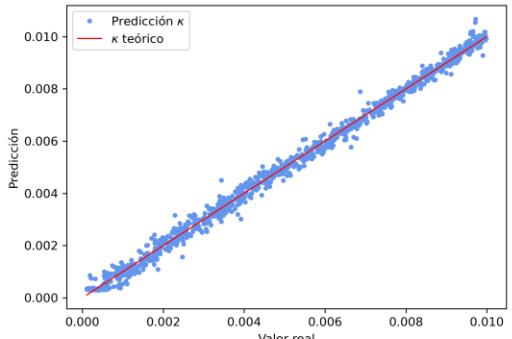


Distribución del ruido bastante adecuada y consistente. Podemos jugar con el ruido variando el % del valor que se puede añadir.

Nos quedamos con este

19/03/2024: Primeras pruebas

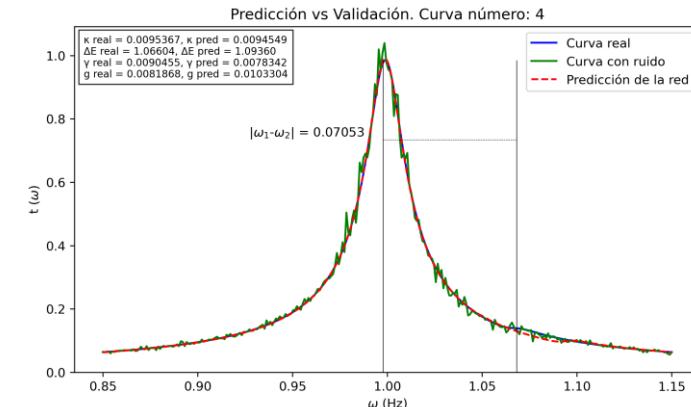
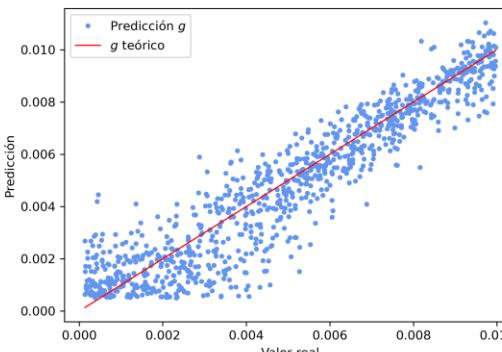
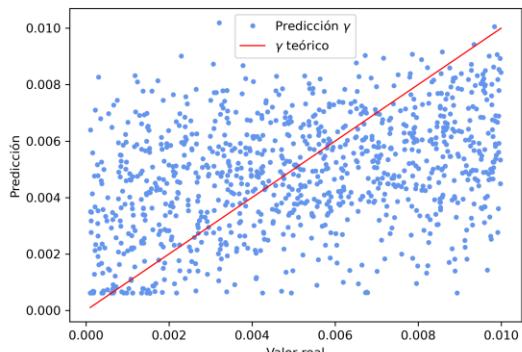
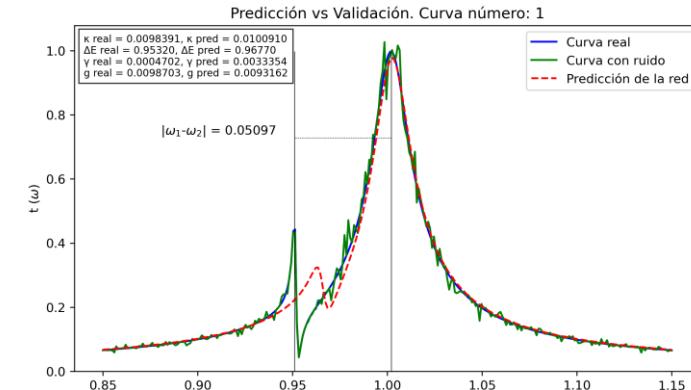
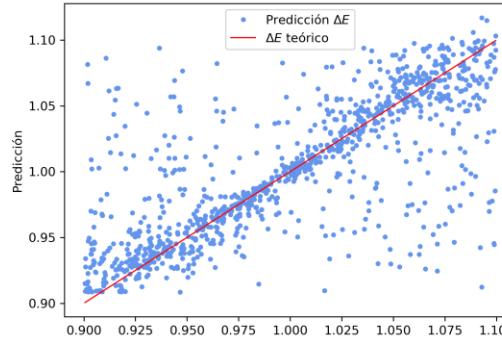
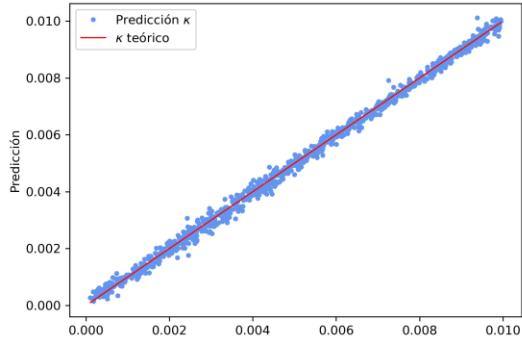
Comparación entre valor real y la predicción



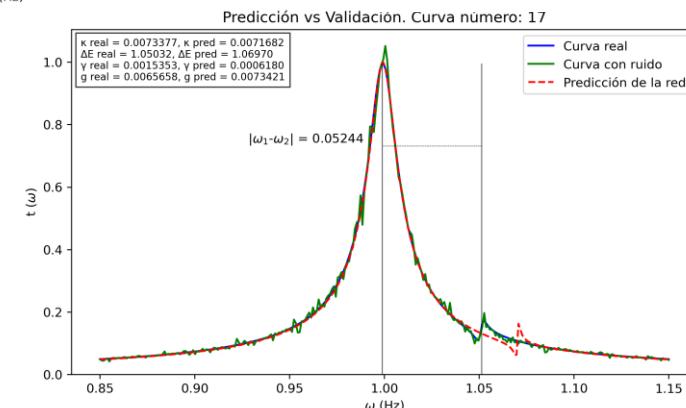
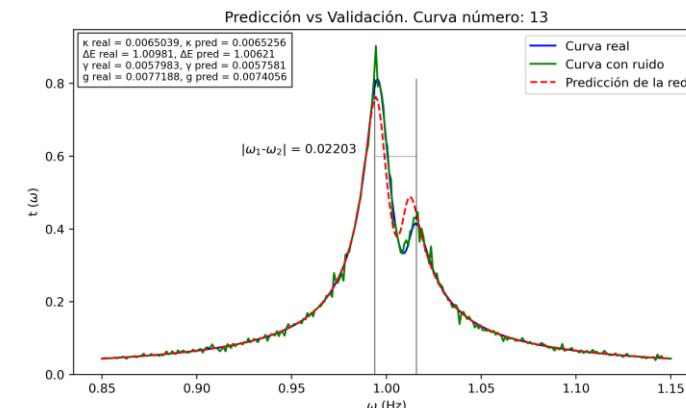
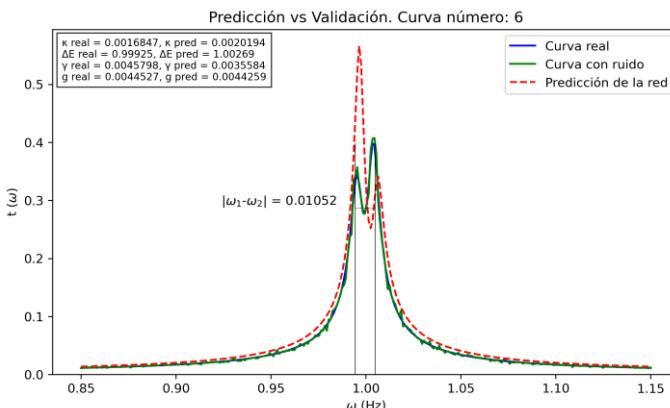
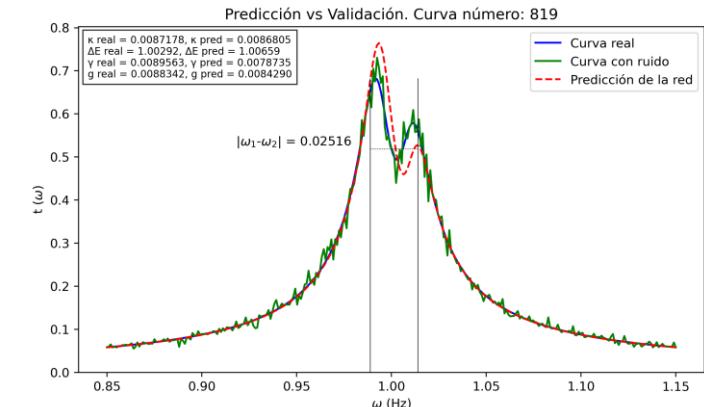
Las predicciones de parámetros son bastante horrorosas (excepto κ). A nivel de curvas, las Lorentzianas suelen ser bien predichas, por mucho que falle en g y/o g , y los fallos en ΔE fuera de resonancia rara vez afectan. Pero en zona de resonancia, con la aparición de fanos y dobles picos, se vuelve bastante loca y no predice bien.

28/03/2024: Acortamos ΔE al rango 0.9-1.1

Comparación entre valor real y la predicción

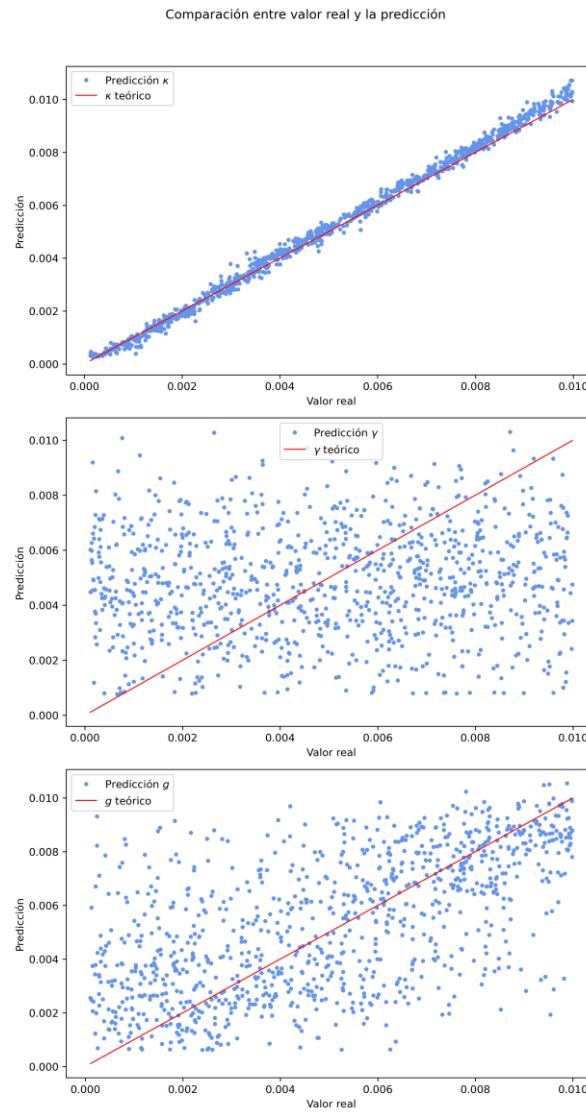


Se mejora la precisión de ΔE (como cuando no teníamos ruido), pero las curvas siguen siendo muy susceptibles a los pequeños errores en ΔE por estar en zona de resonancia, y en caso de acertar DE, los fallos en γ y g , son más significativos. De todas formas, no es muy impreciso en las curvas.

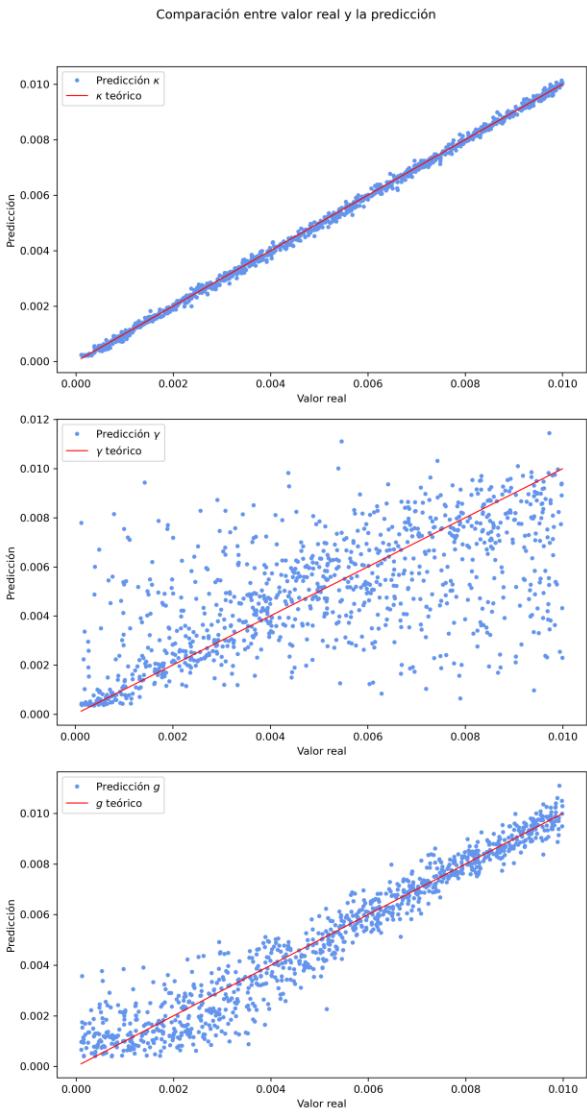


14/03/2024: Fijamos ΔE

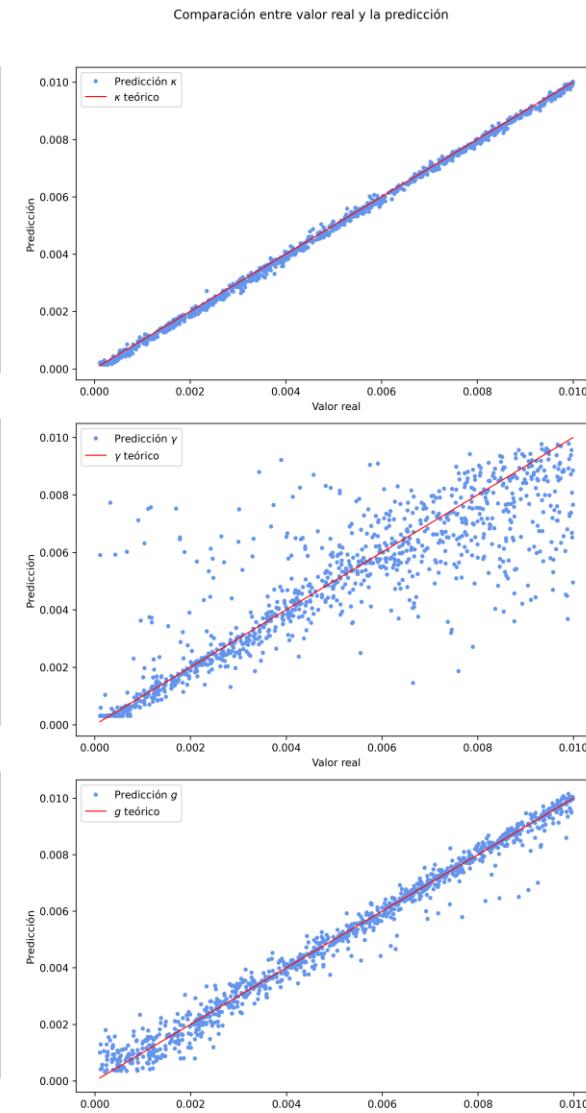
$$\Delta E = 0.75$$



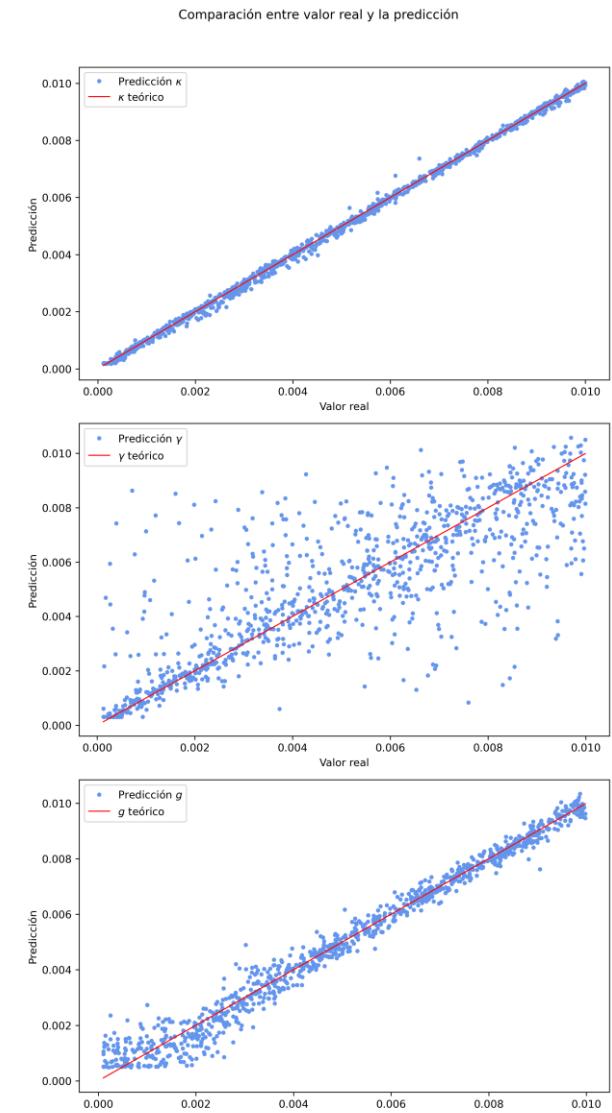
$$\Delta E = 0.95$$



$$\Delta E = 1.0$$

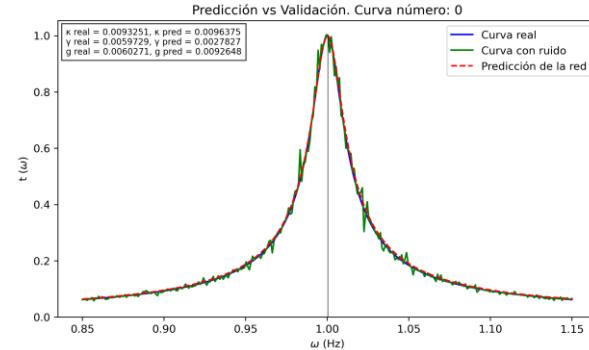


$$\Delta E = 1.02$$

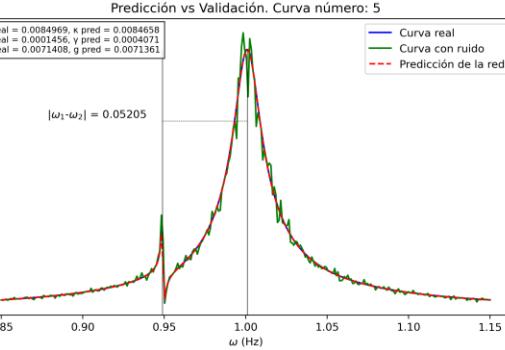


14/03/2024: Fijamos ΔE

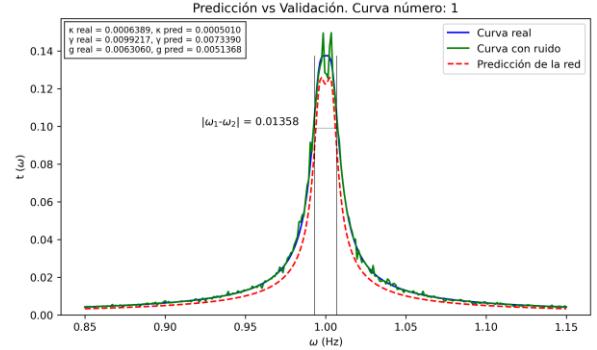
$\Delta E = 0.75$



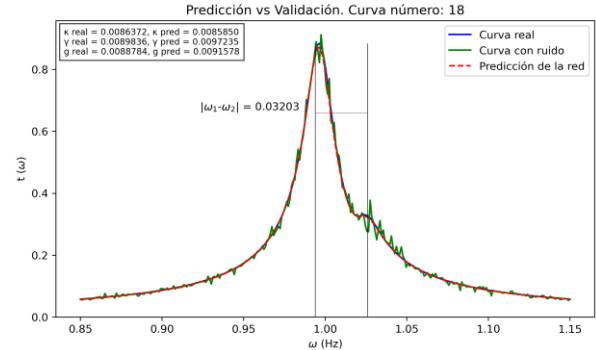
$\Delta E = 0.95$



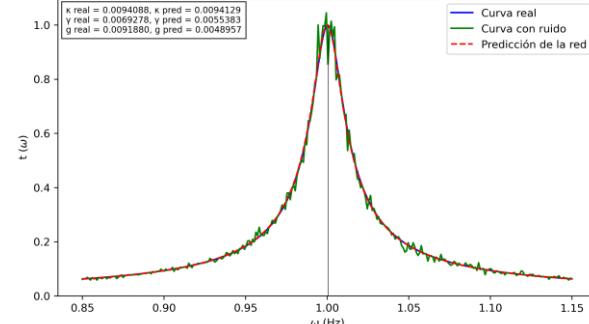
$\Delta E = 1.0$



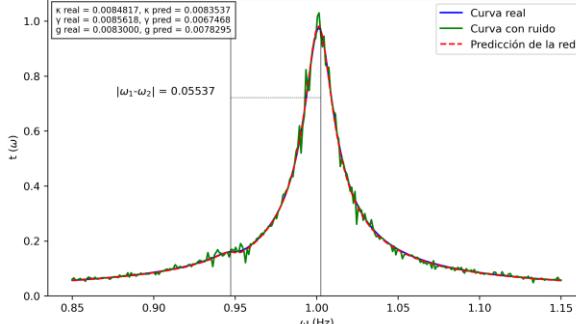
$\Delta E = 1.02$



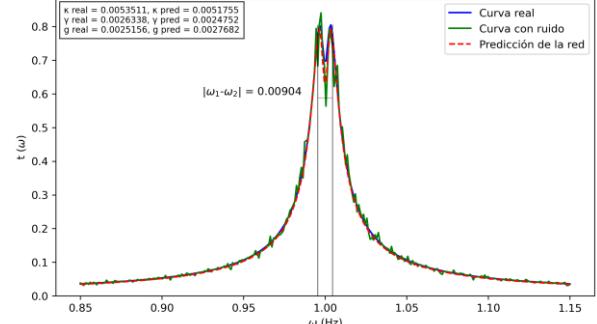
Predicción vs Validación. Curva número: 12



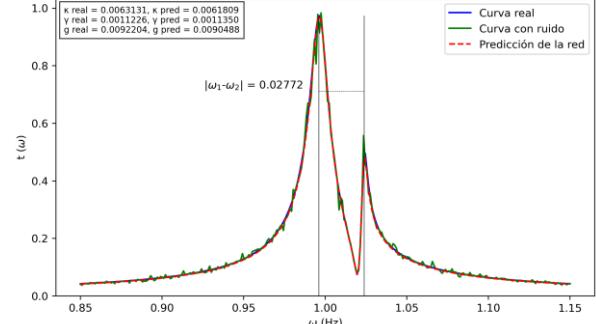
Predicción vs Validación. Curva número: 347



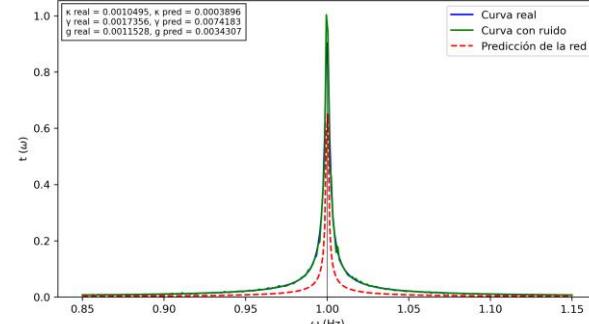
Predicción vs Validación. Curva número: 19



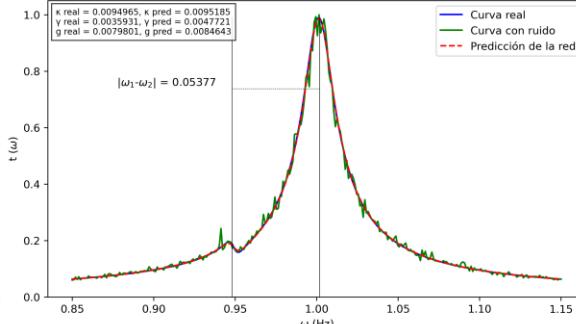
Predicción vs Validación. Curva número: 514



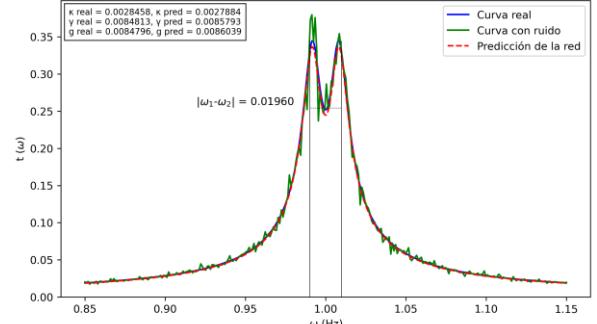
Predicción vs Validación. Curva número: 45



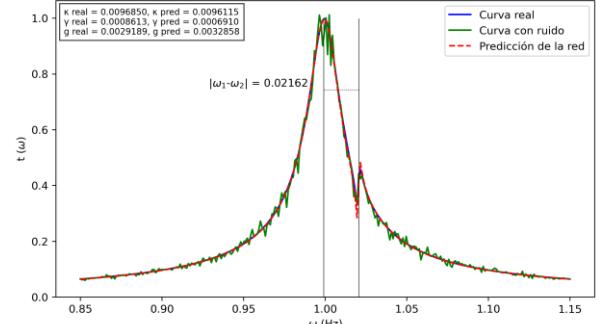
Predicción vs Validación. Curva número: 366



Predicción vs Validación. Curva número: 55



Predicción vs Validación. Curva número: 581



14/03/2024: Fijamos ΔE

Con esta cantidad de ruido, las curvas en resonancia y cercanías se predicen perfectamente. Además, en estas inmediaciones, g se predice de manera casi perfecta. Una vez alejados de resonancia g deja de ser predicho, pero porque no afecta a las curvas, al ser un parámetro que aporta poco valor. Como siempre, γ no se deja predecir, aunque en resonancia tiene un poco de intención de predecir.

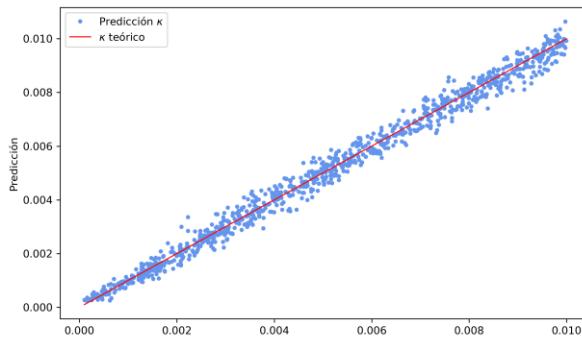
Como siempre, los valores de κ pequeños pueden suscitar problemas.

Volvamos a realizar las pruebas, solo para valores de ΔE entre 0.95 y 1.03, pero con el ruido más grande (pasamos de un 10% del valor, hasta un 50%)

17/03/2024: Fijamos ΔE , con más ruido

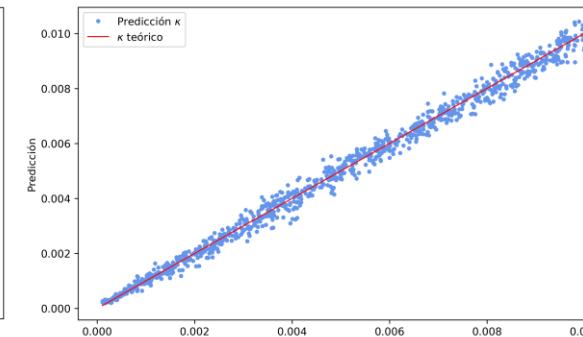
$\Delta E = 0.95$

Comparación entre valor real y la predicción



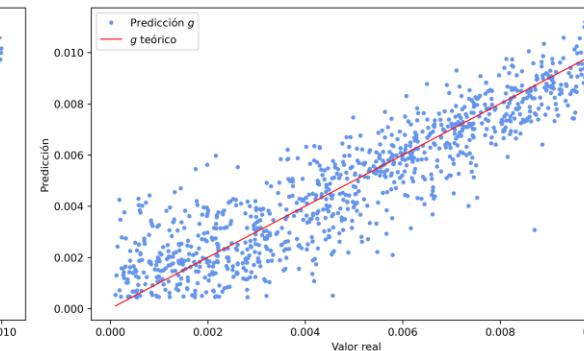
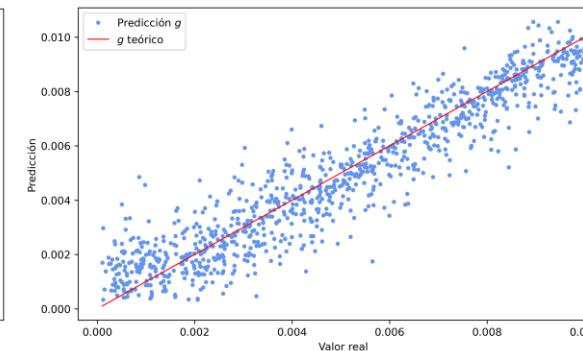
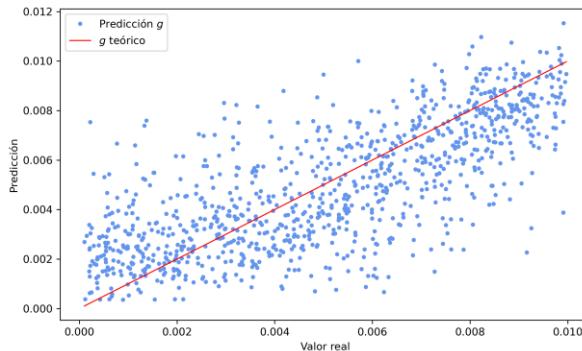
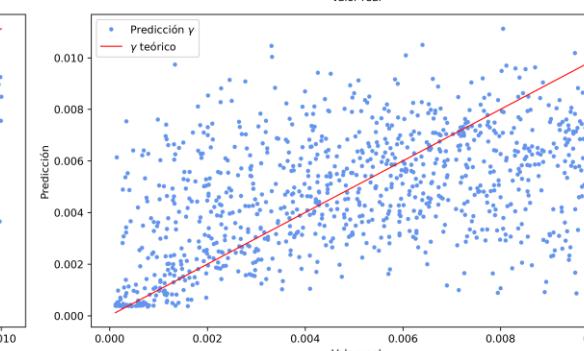
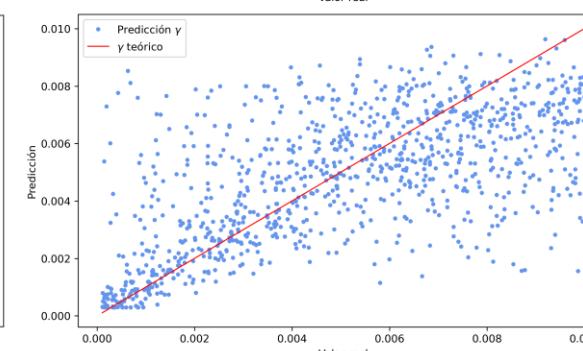
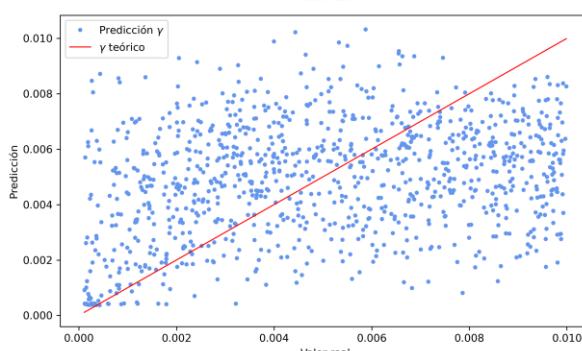
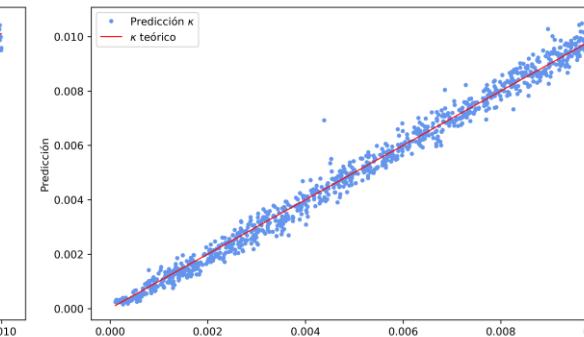
$\Delta E = 1.0$

Comparación entre valor real y la predicción



$\Delta E = 1.02$

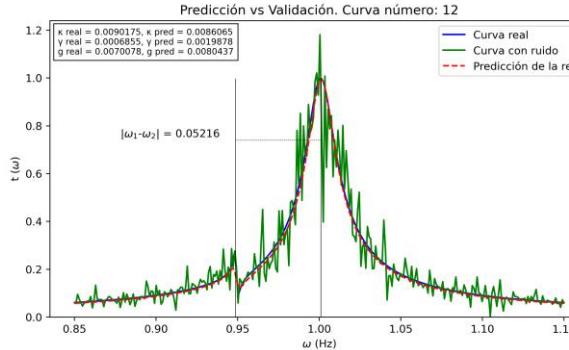
Comparación entre valor real y la predicción



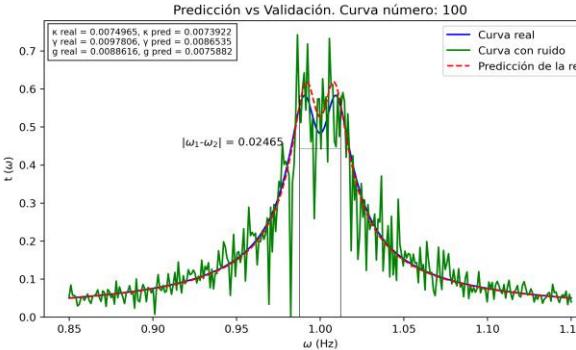
17/03/2024: Fijamos ΔE , con más ruido

Como cabía esperar, la red tiene más errores en sus predicciones al tener un ruido tan elevado. Pero las curvas son bastante buenas, aunque en $\Delta E=1$, falla bastantes veces la altura del doble pico

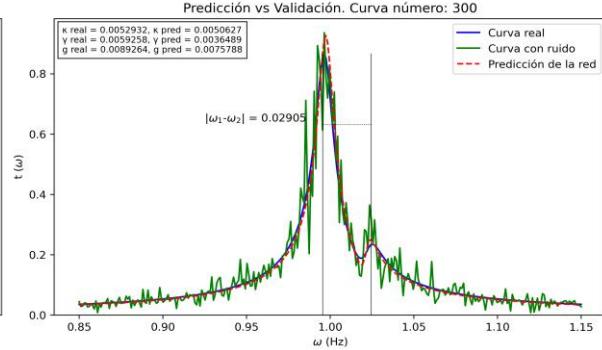
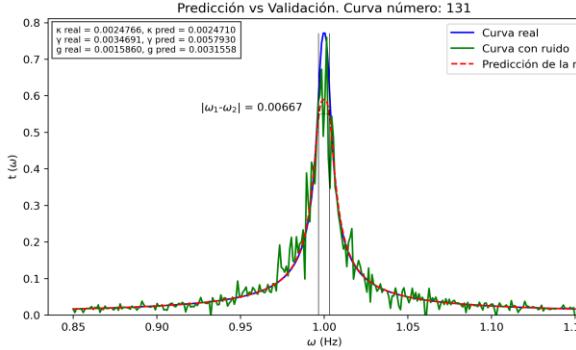
$\Delta E = 0.95$



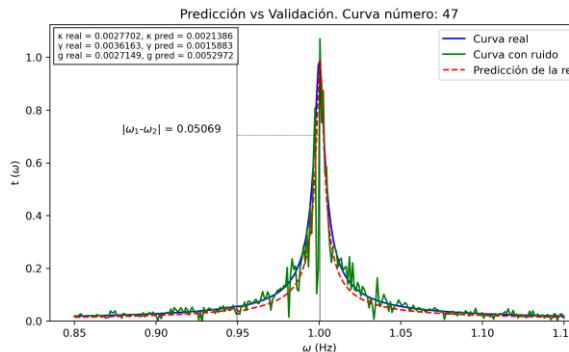
$\Delta E = 1.0$



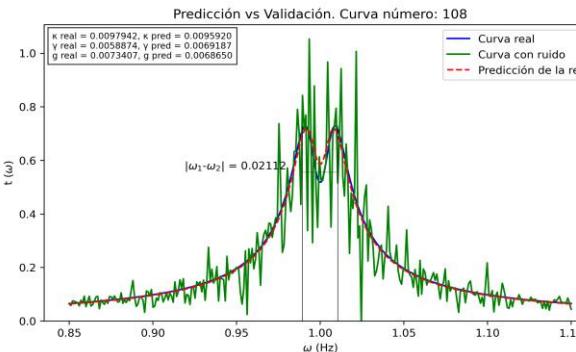
$\Delta E = 1.02$



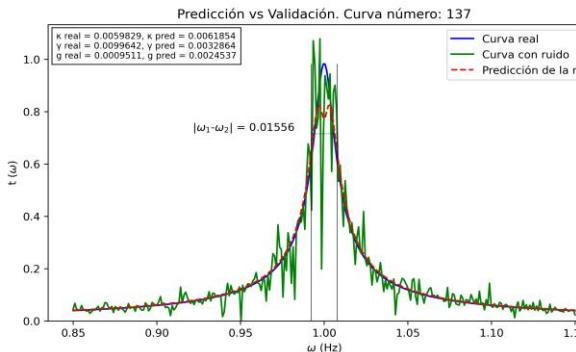
Predicción vs Validación. Curva número: 47



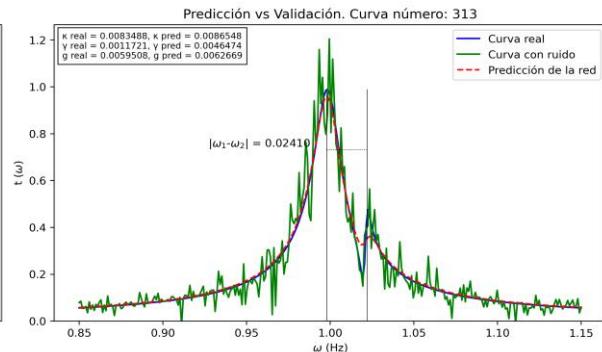
Predicción vs Validación. Curva número: 108



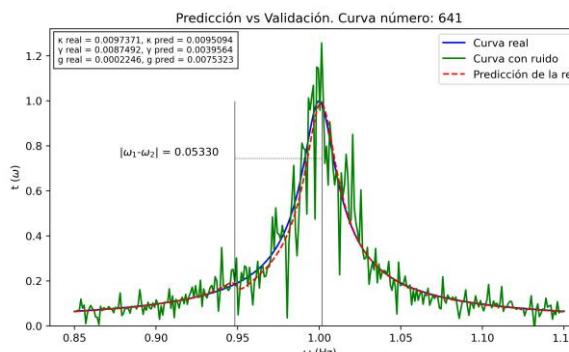
Predicción vs Validación. Curva número: 137



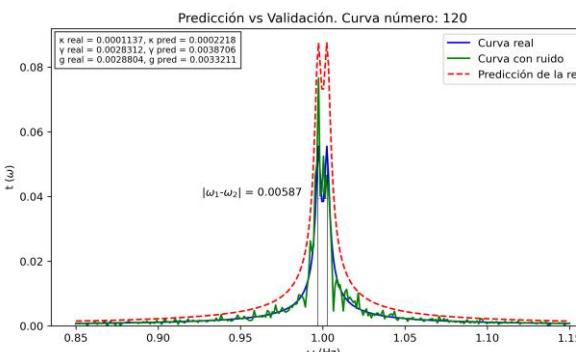
Predicción vs Validación. Curva número: 313



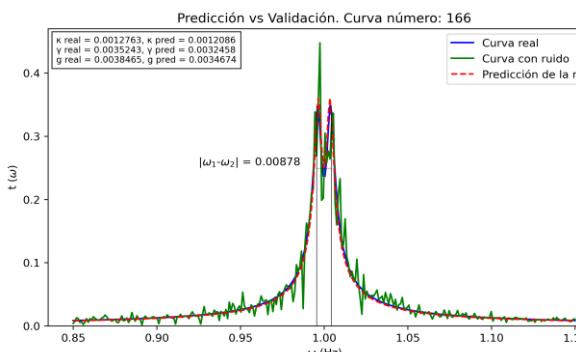
Predicción vs Validación. Curva número: 641



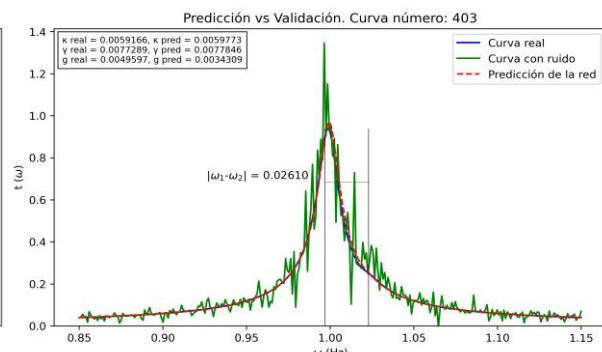
Predicción vs Validación. Curva número: 120



Predicción vs Validación. Curva número: 166



Predicción vs Validación. Curva número: 403



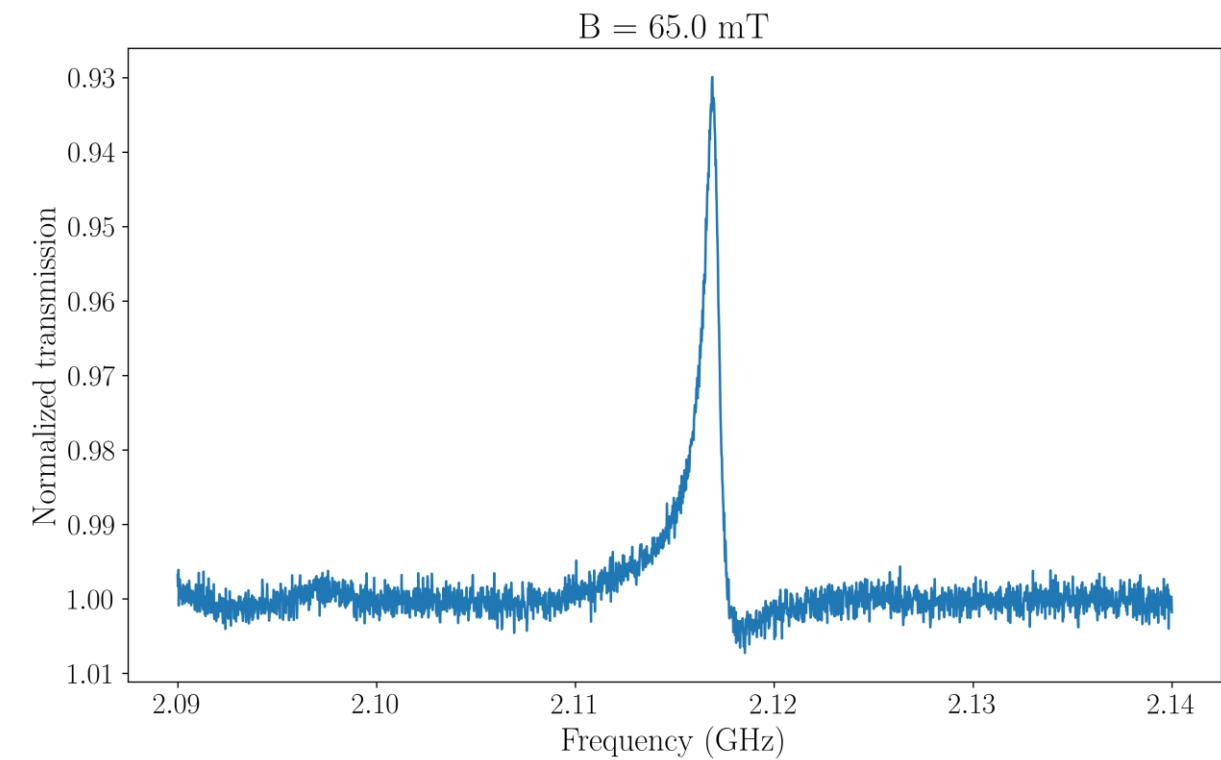
He hecho un estudio de hiperparámetros muy completo. Red final:

- ω entre 0.85 y 1.15, con 300 puntos
- Ndata = 10000
- 5 capas ocultas: (256, 128, 64, 32, 16)
- Batch size = 250
- Epochs = 1000

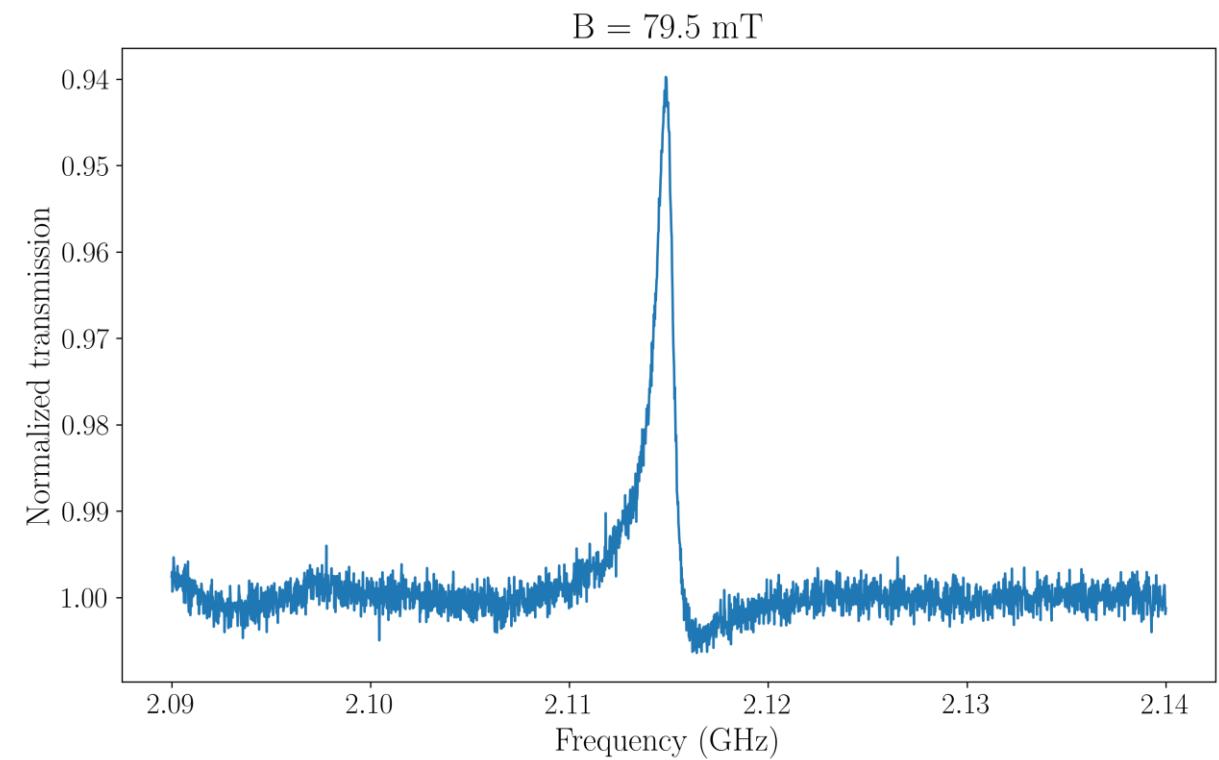
20/05/2024: Datos experimentales

Los datos que hemos recibido presentan 41 curvas distintas (41 valores del campo magnético), y cada una con 2500 cortes en frecuencia

Antes de resonancia

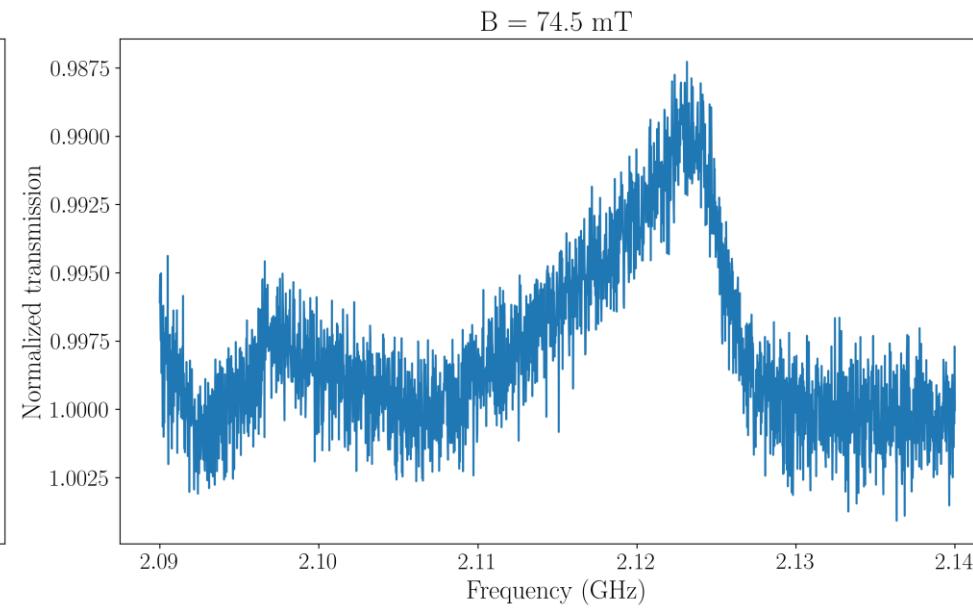
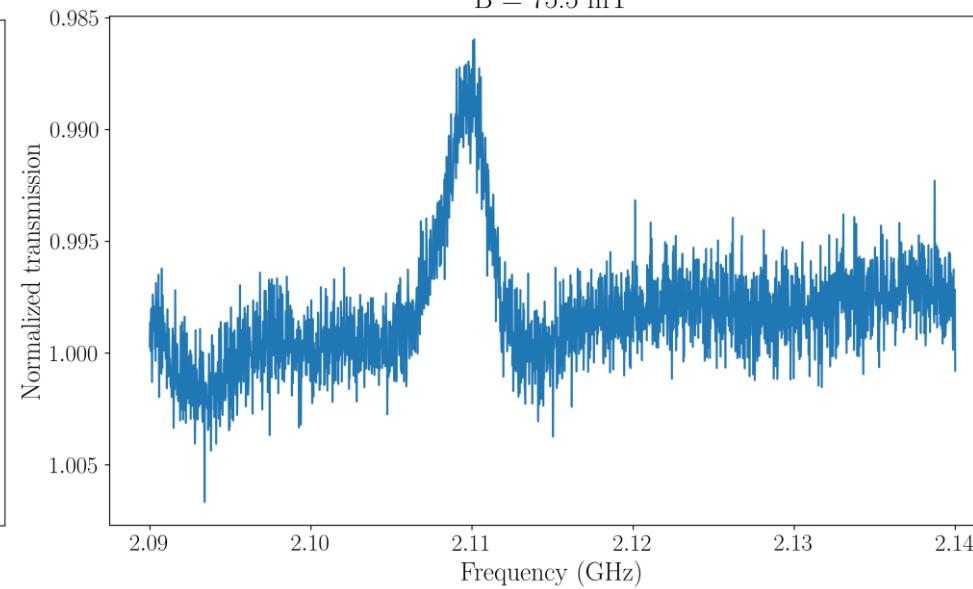
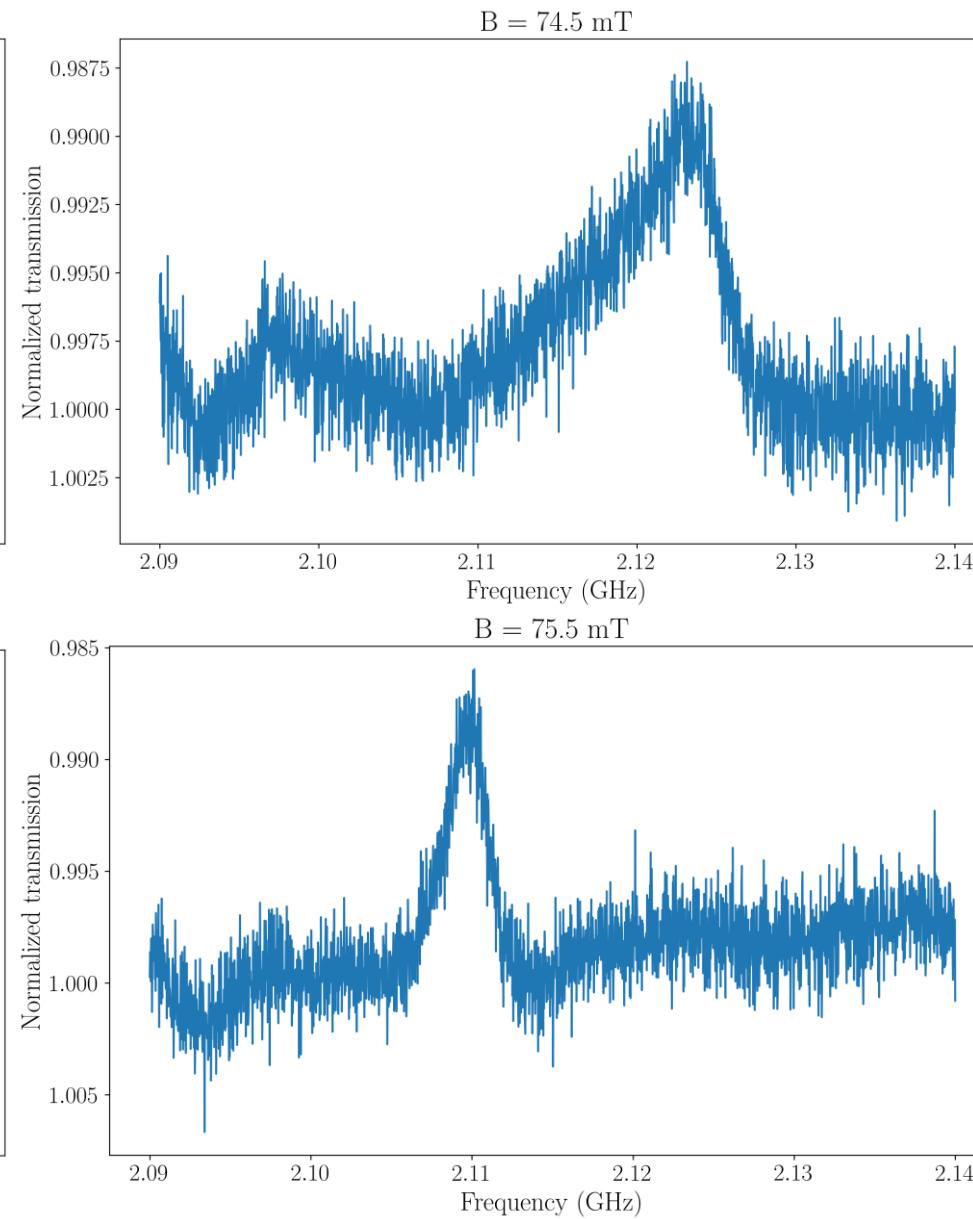
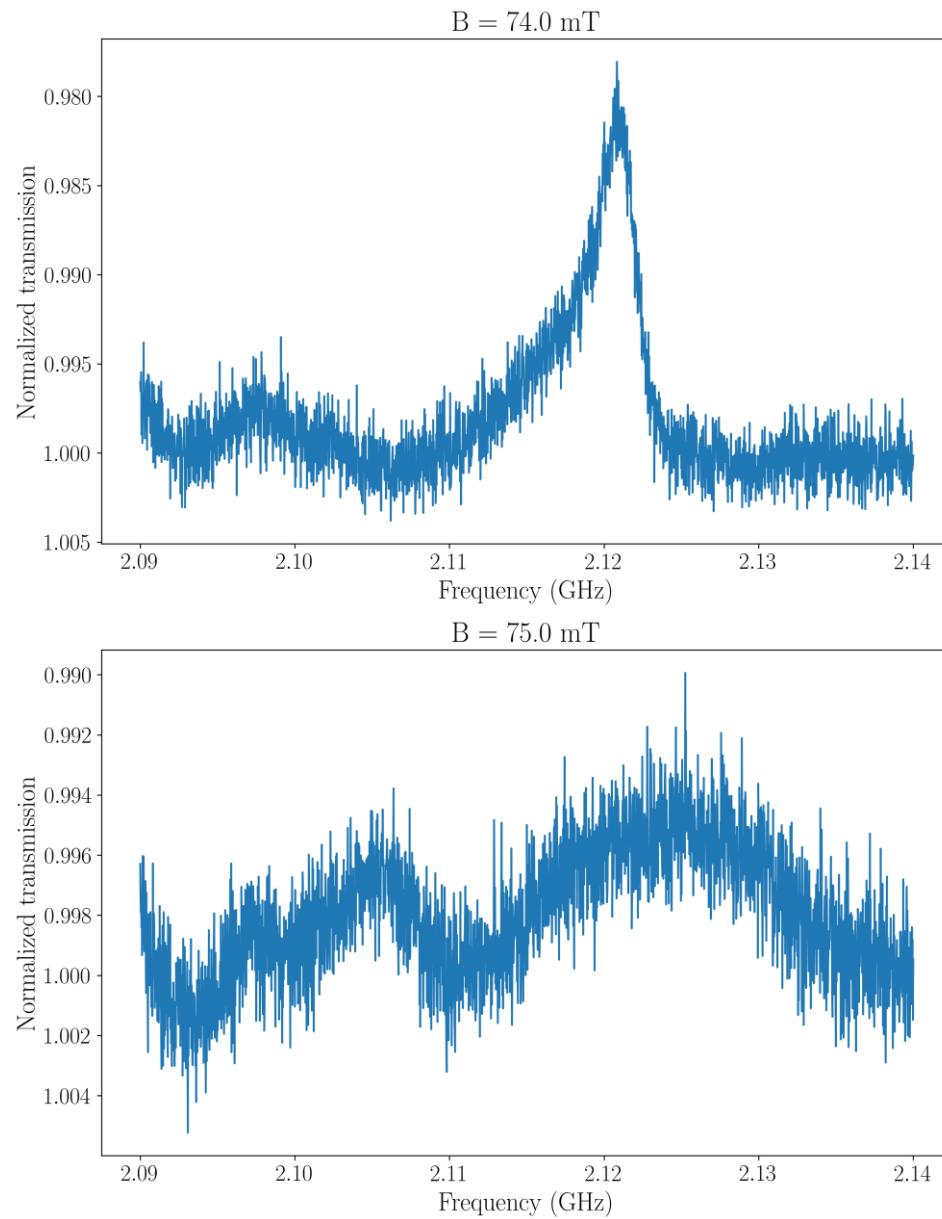


Después de resonancia



20/05/2024: Datos experimentales

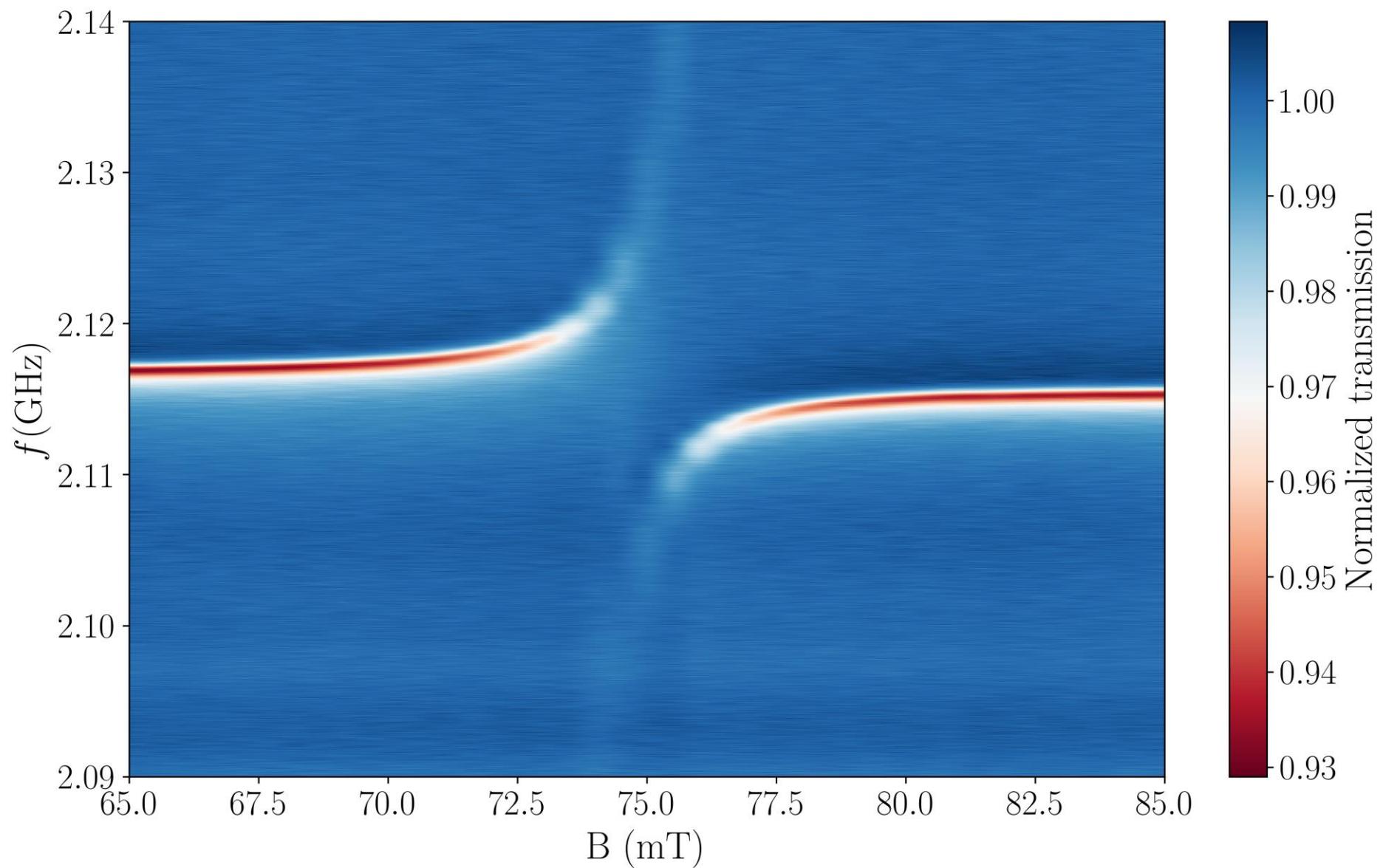
Región de resonancia



No veo el parecido con el tipo de curvas que hemos estado entrenando en nuestra red. Además, nosotros usamos 300 ω , pensando que habría pocas y resulta que hay 2500

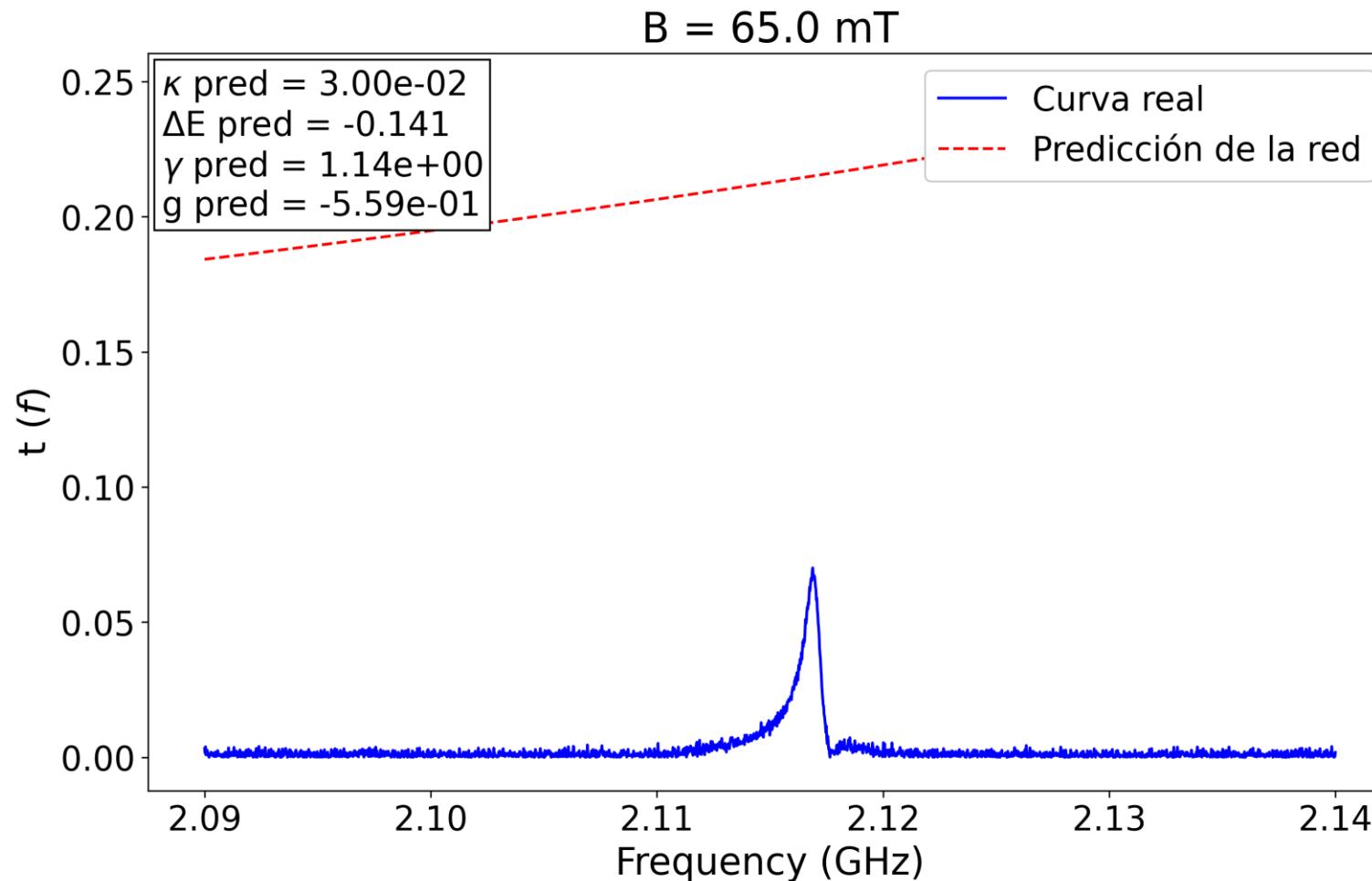
20/05/2024: Datos experimentales

Contour plot



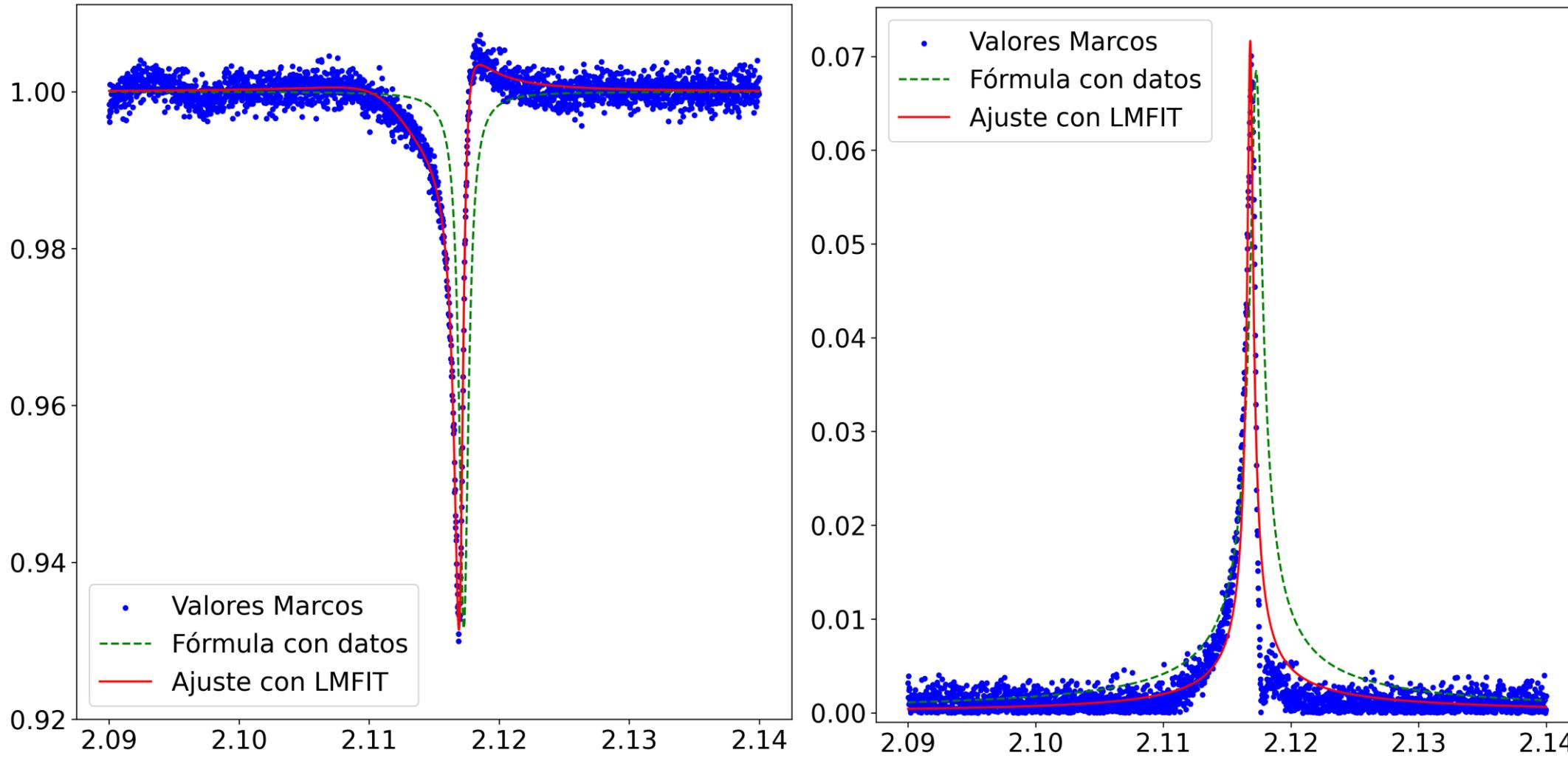
25/05/2024: Intentamos ajustar los datos experimentales

La red no ajusta para nada bien, seguramente se debe a que en $t(\omega)$ no tenemos κ_c en el numerador sino κ , donde κ_c es el acoplamiento del resonador y κ las pérdidas totales del fotón



25/05/2024: Intentamos ajustar los datos experimentales

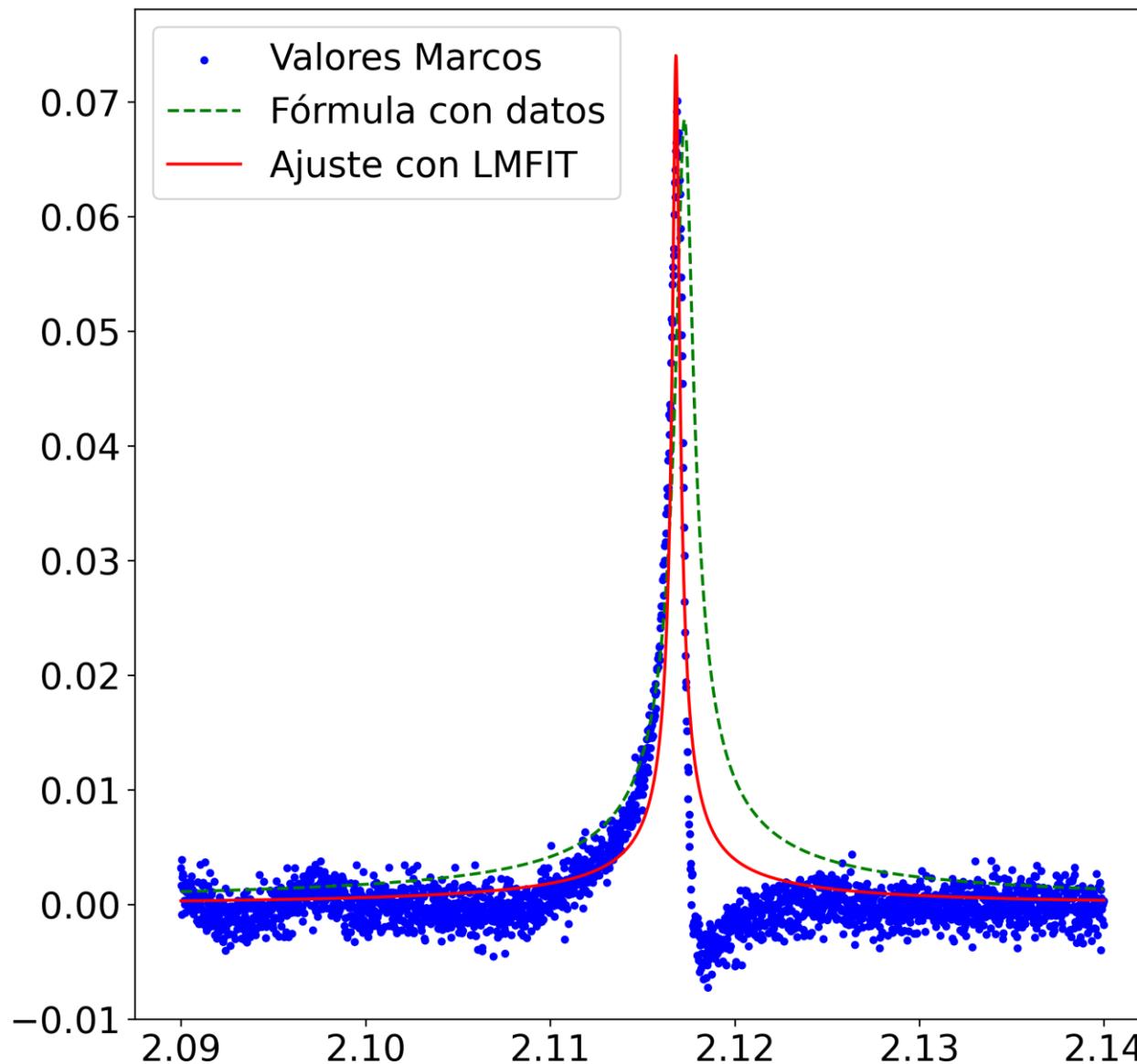
Voy a dibujar los datos y realizo un ajuste con una librería de Python, y luego dibujo la función con los supuestos valores de solución de la tesis. Lo voy a hacer tanto para S_{21} como para S_{11} (siendo este como nuestro $t(\omega)$, pero usando el κ_c , es decir $|S_{21}-1|$)



Vemos que, además de perder valores al aplicar el valor absoluto, estamos perdiendo eficiencia del ajuste.

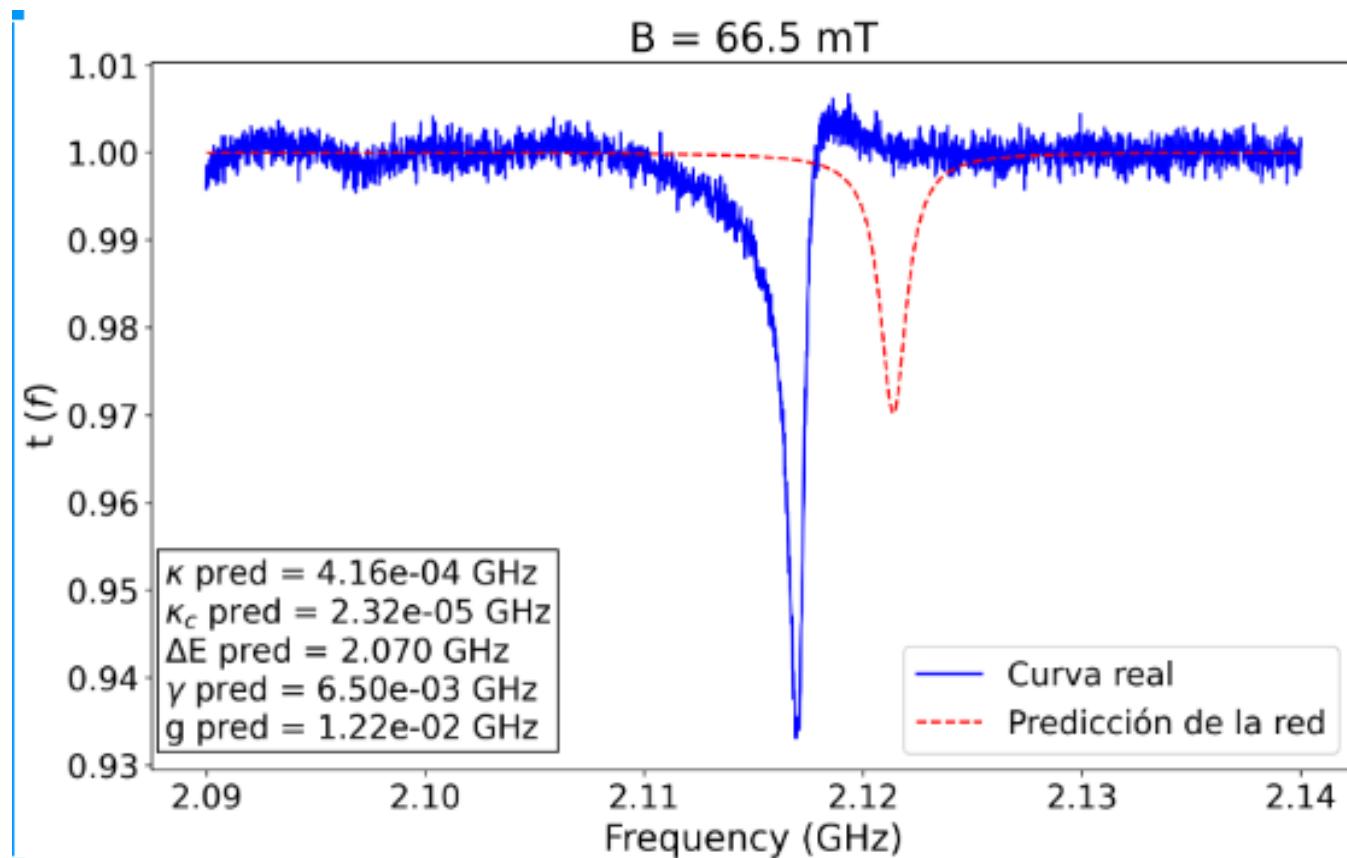
Si encima vemos los valores que devuelve el ajuste de LMFIT, en ninguno de los dos casos devuelve los supuestos valores teóricos obtenidos por Marcos en la tesis, y en ambos, devuelve algún valor negativo para algún parámetro

25/05/2024: Intentamos ajustar los datos experimentales



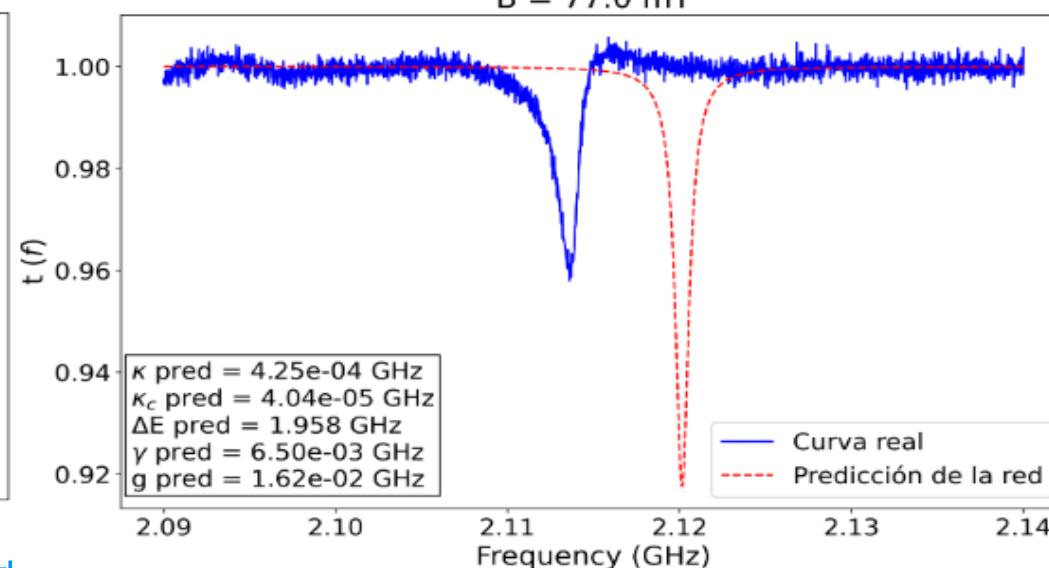
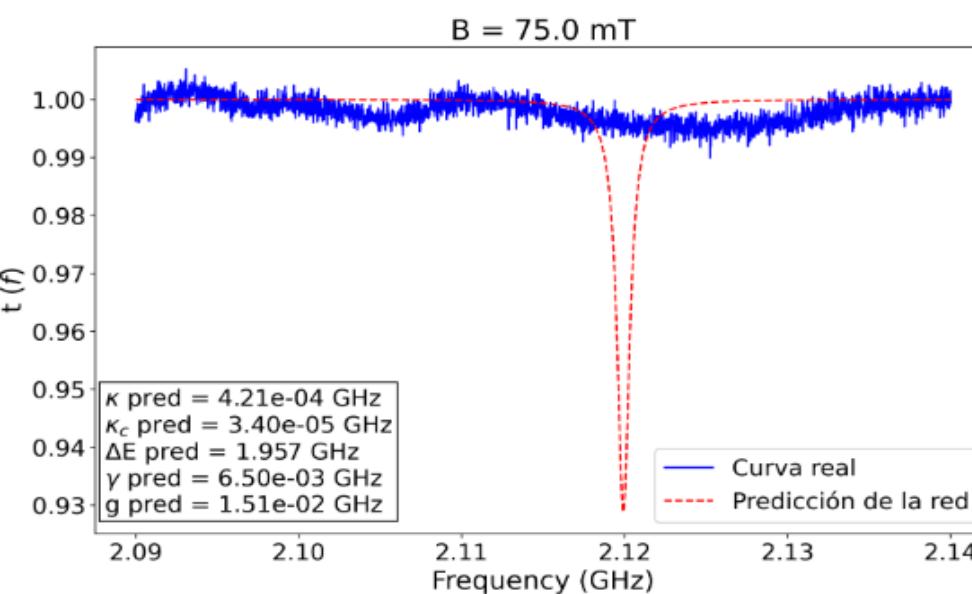
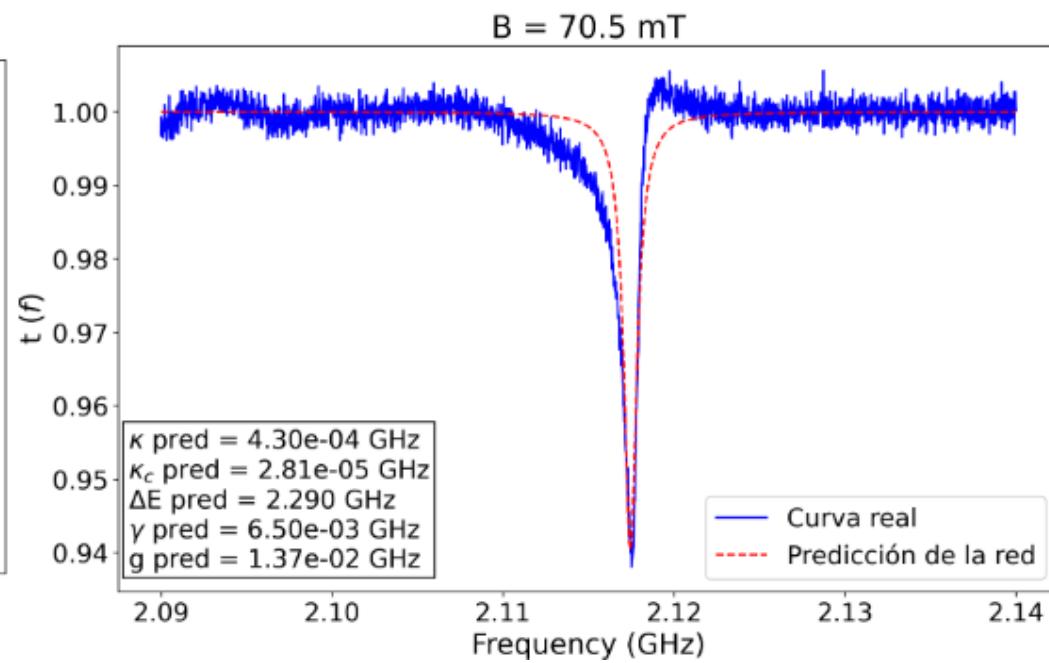
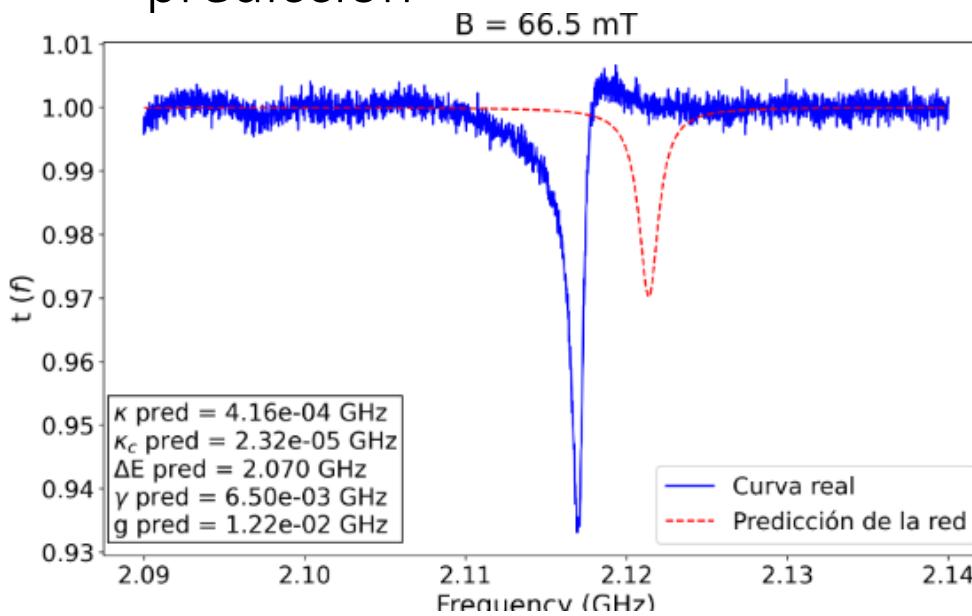
Si solo aplico que, $S_{11} = 1 - S_{21}$, no mejora nada, sigue perdiéndose algo

30/05/2024: Nos faltaba normalizar los datos exp. y luego desnormalizar la predicción



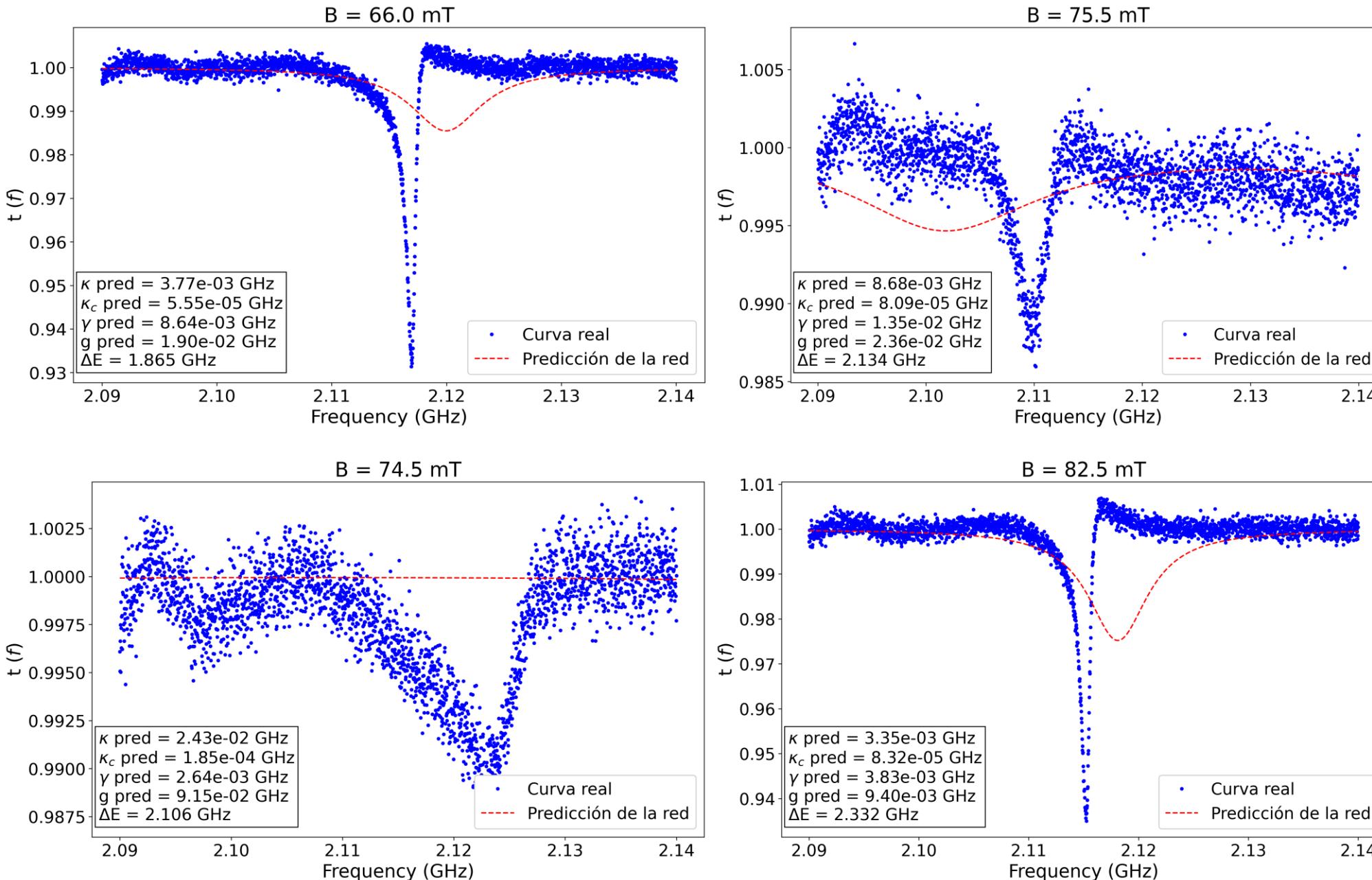
Usamos S_{21} sin κ_c , y la predicción es malísima, porque los rangos de los parámetros de entrenamiento no se asemejan a los reales.

30/05/2024: Nos faltaba normalizar los datos exp. y luego desnormalizar la predicción



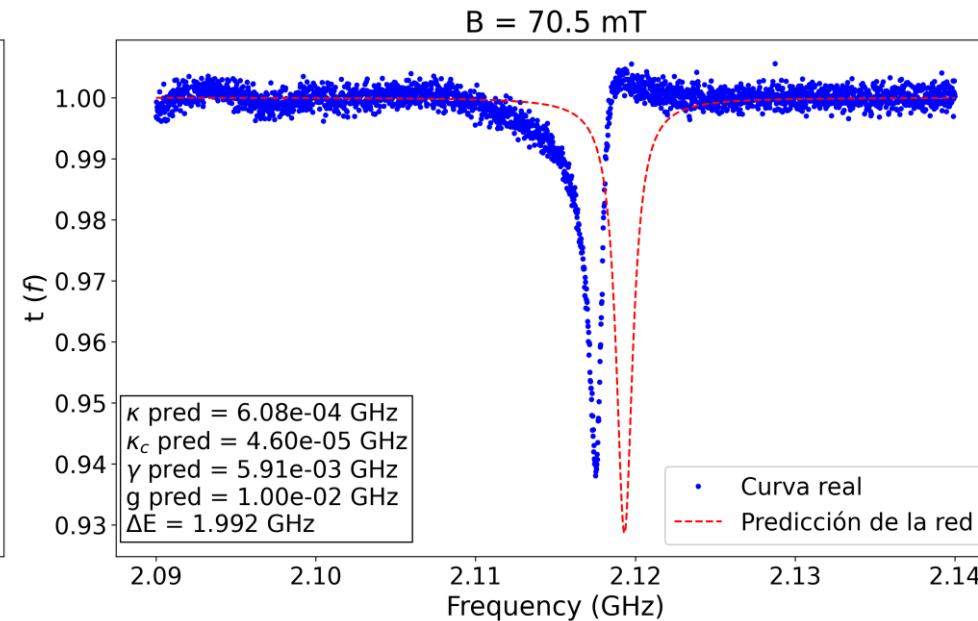
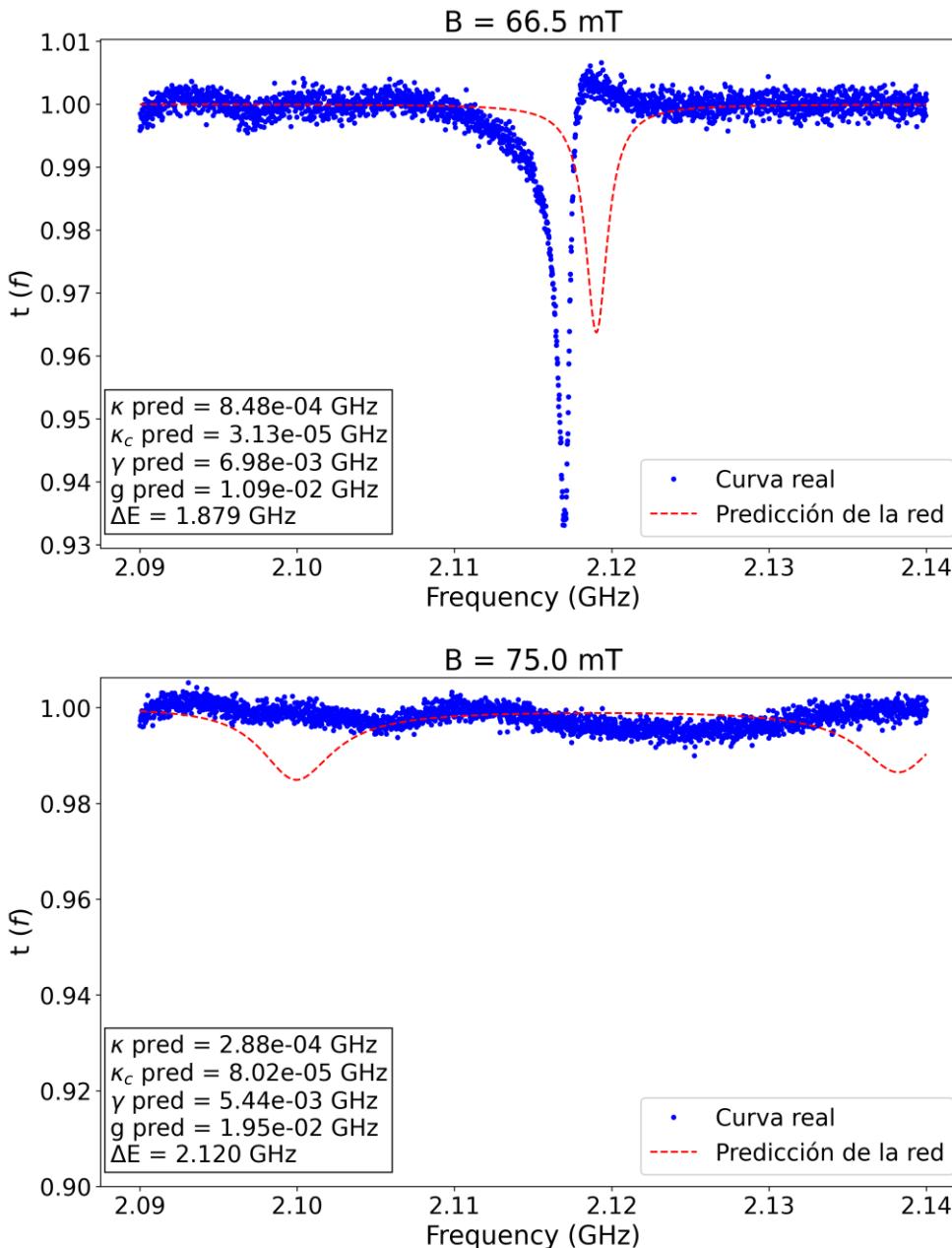
Usamos S21 con κ_c , y la predicción mejora bastante, pero teniendo en cuenta que además he entrenado en las cercanías de los valores obtenidos experimentalmente en la tesis de Marcos para la resonancia, no está nada bien

19/06/2024: Fijamos ΔE (es conocido en los datos por el B)



Hay pocos casos de acople fuerte en el entrenamiento. Además, los rangos de entrenamiento no son muy adecuados. Y encima, el no predecir bien gamma en el entrenamiento no ayuda.

19/06/2024: Fijamos ΔE y acotamos los parámetros de entrenamiento



Mejora un poco, pero no es suficiente

Rangos usados:

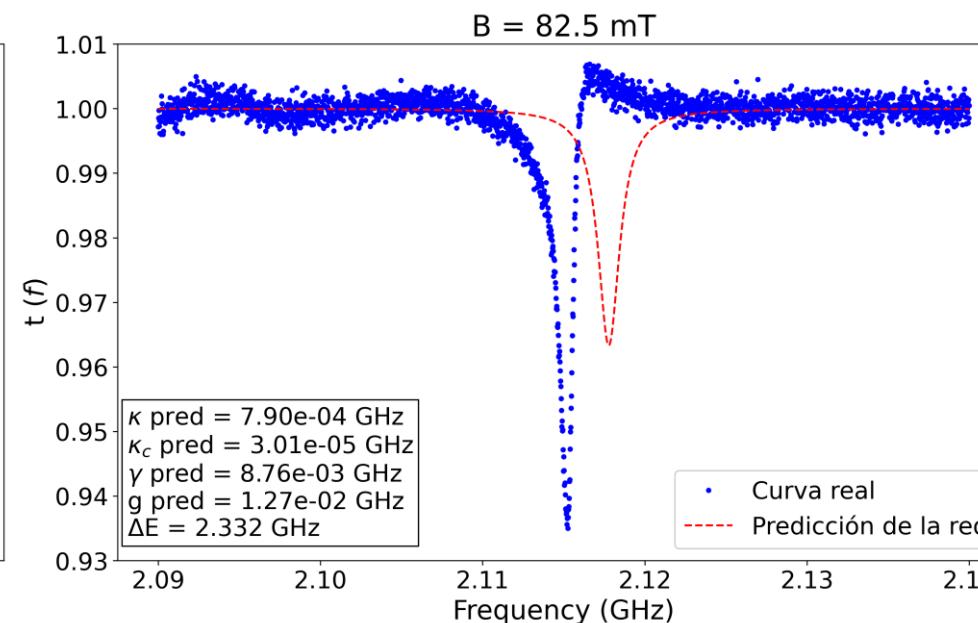
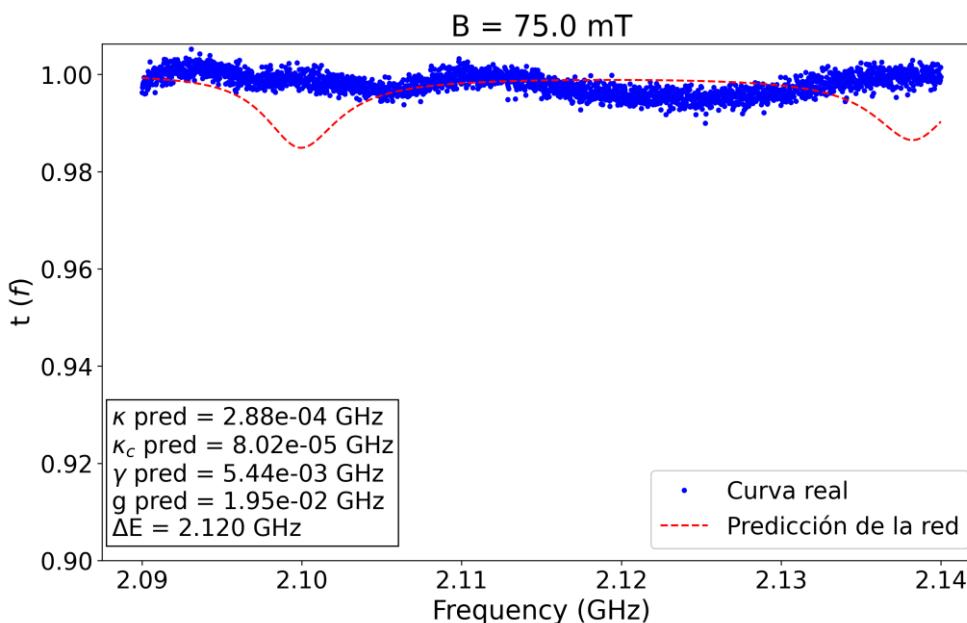
$$\kappa = [1e-4, 1e-3]$$

$$K_c = [1e-5, 1e-4]$$

$$\gamma = [5e-3, 8e-3]$$

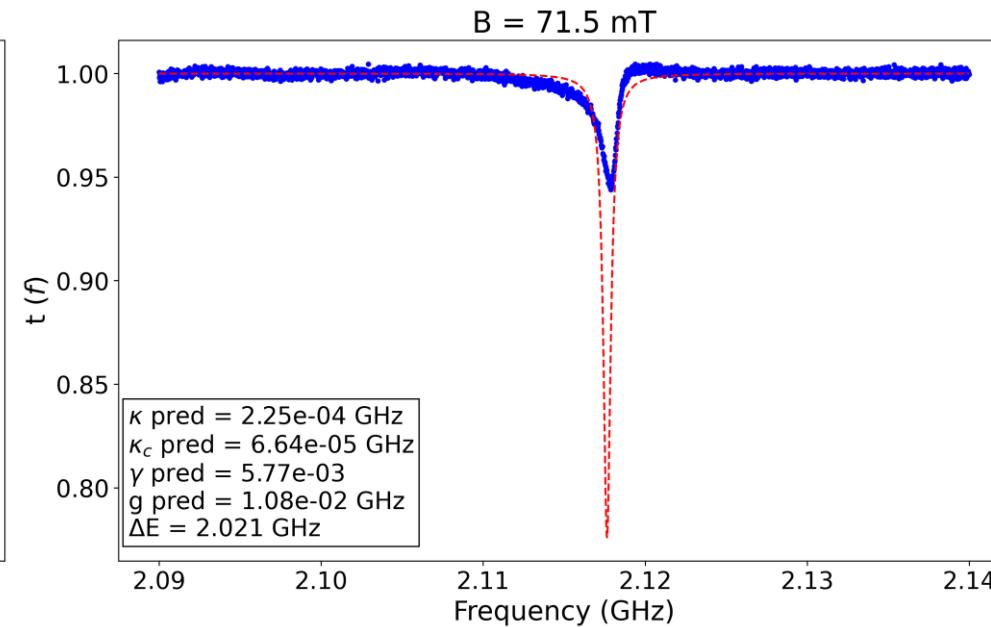
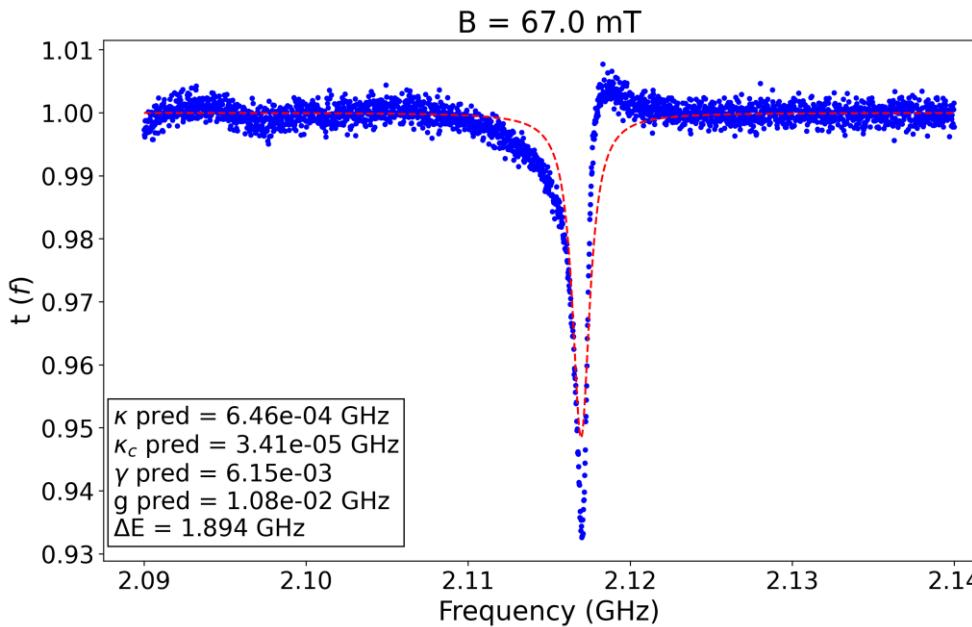
$$g = [1e-2, 1.5e-2]$$

$$\Delta E = [1.8, 2.4] \text{ (dados por } B\text{)}$$

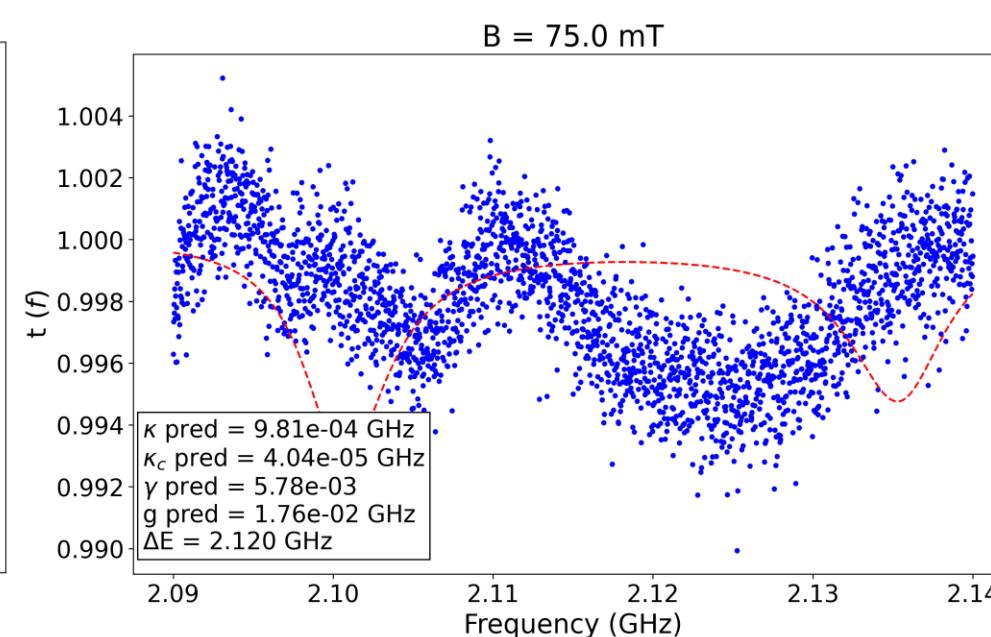
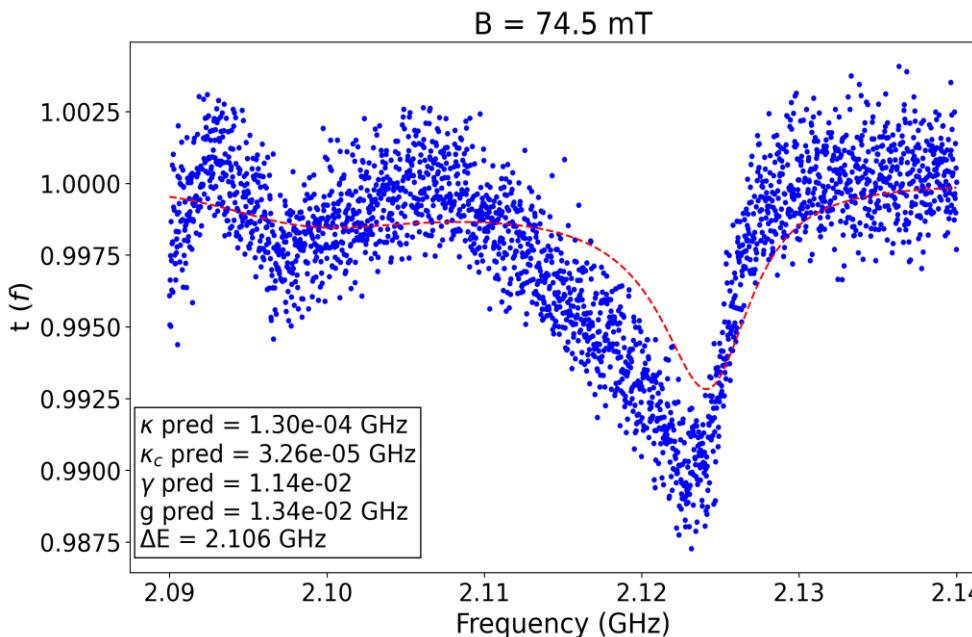


He descubierto que la posición del pico la fallaba porque le estaba dando Ω como la posición del pico de la primera curva (daba 2.1185314 GHz), pero es mejor darle el valor de la resonancia obtenido por Marcos en la tesis (2.116451 GHz)

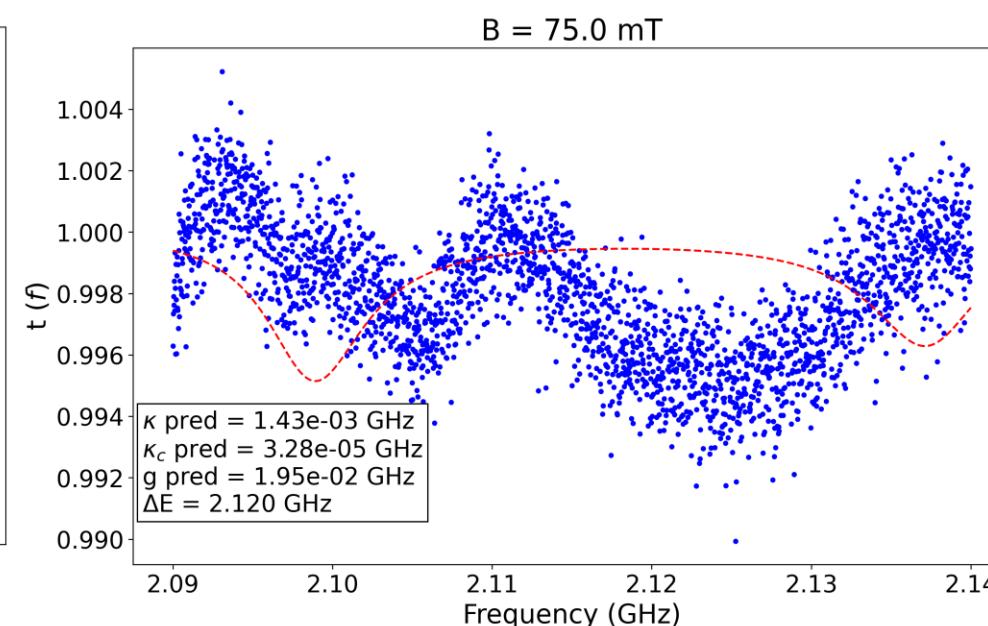
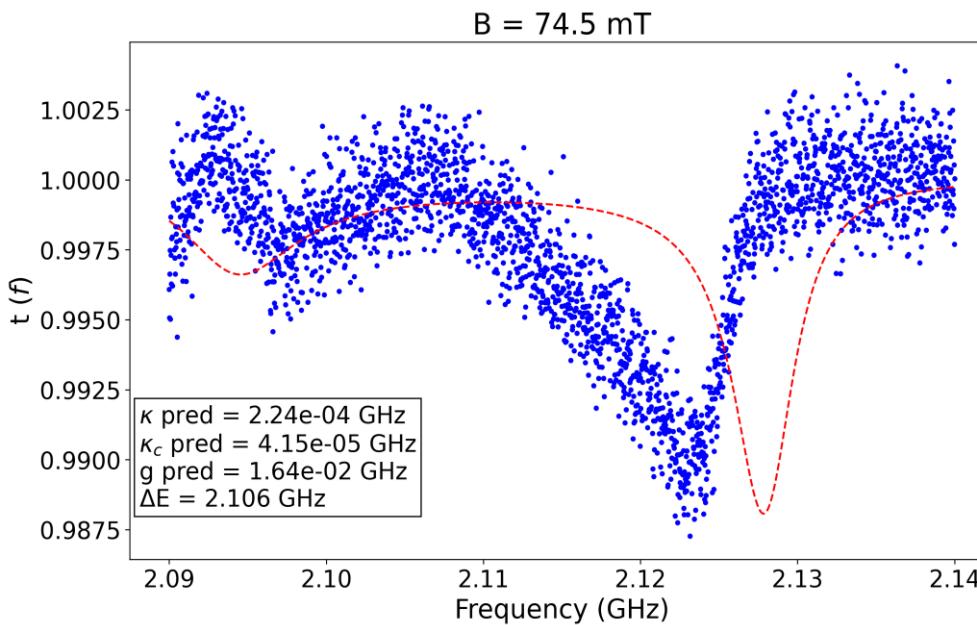
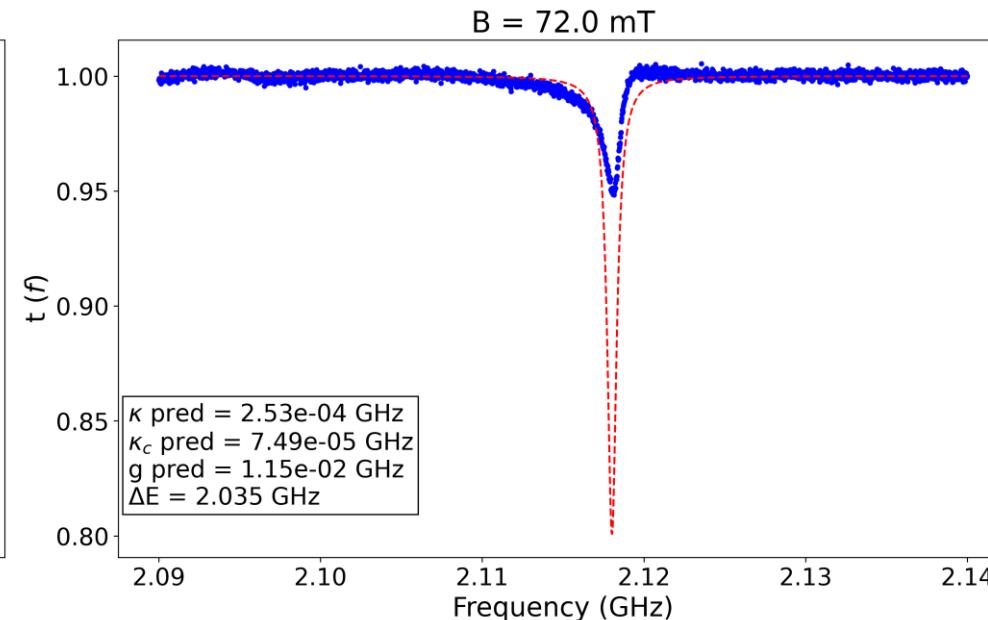
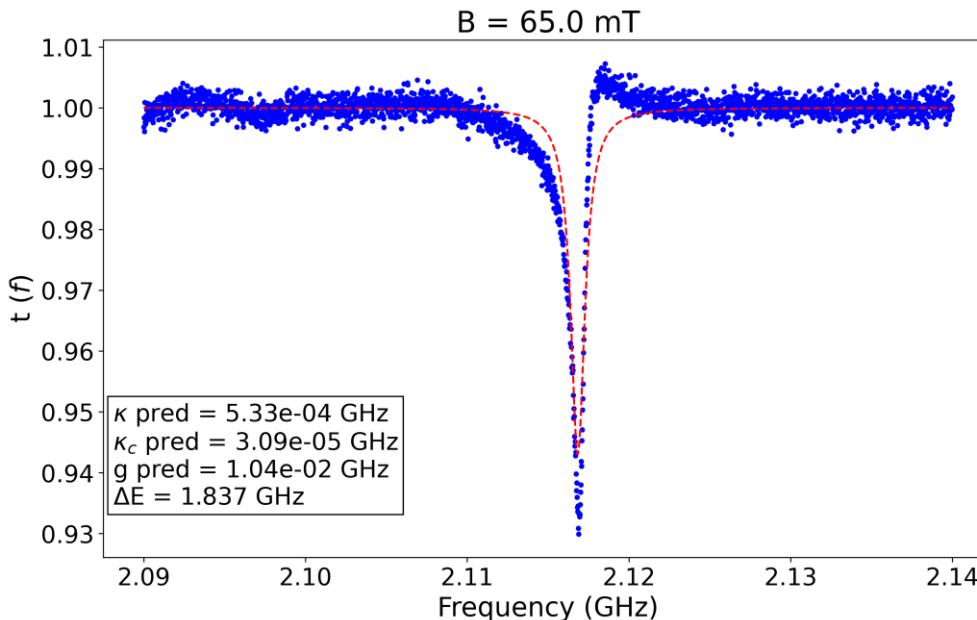
20/06/2024: Fijamos ΔE y acotamos los parámetros de entrenamiento, corrigiendo Ω



Esto es bastante mejor. Pero fijemos gamma

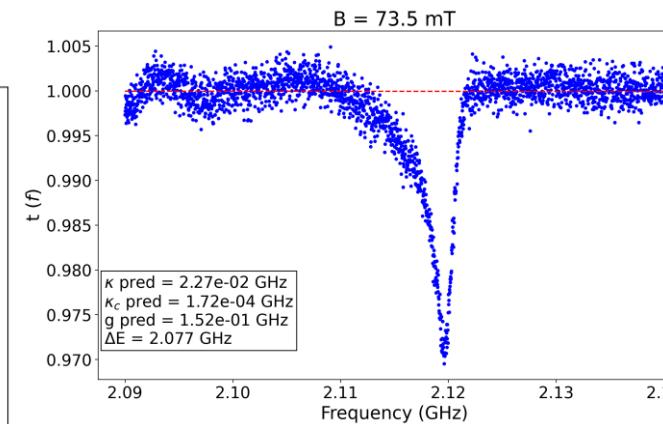
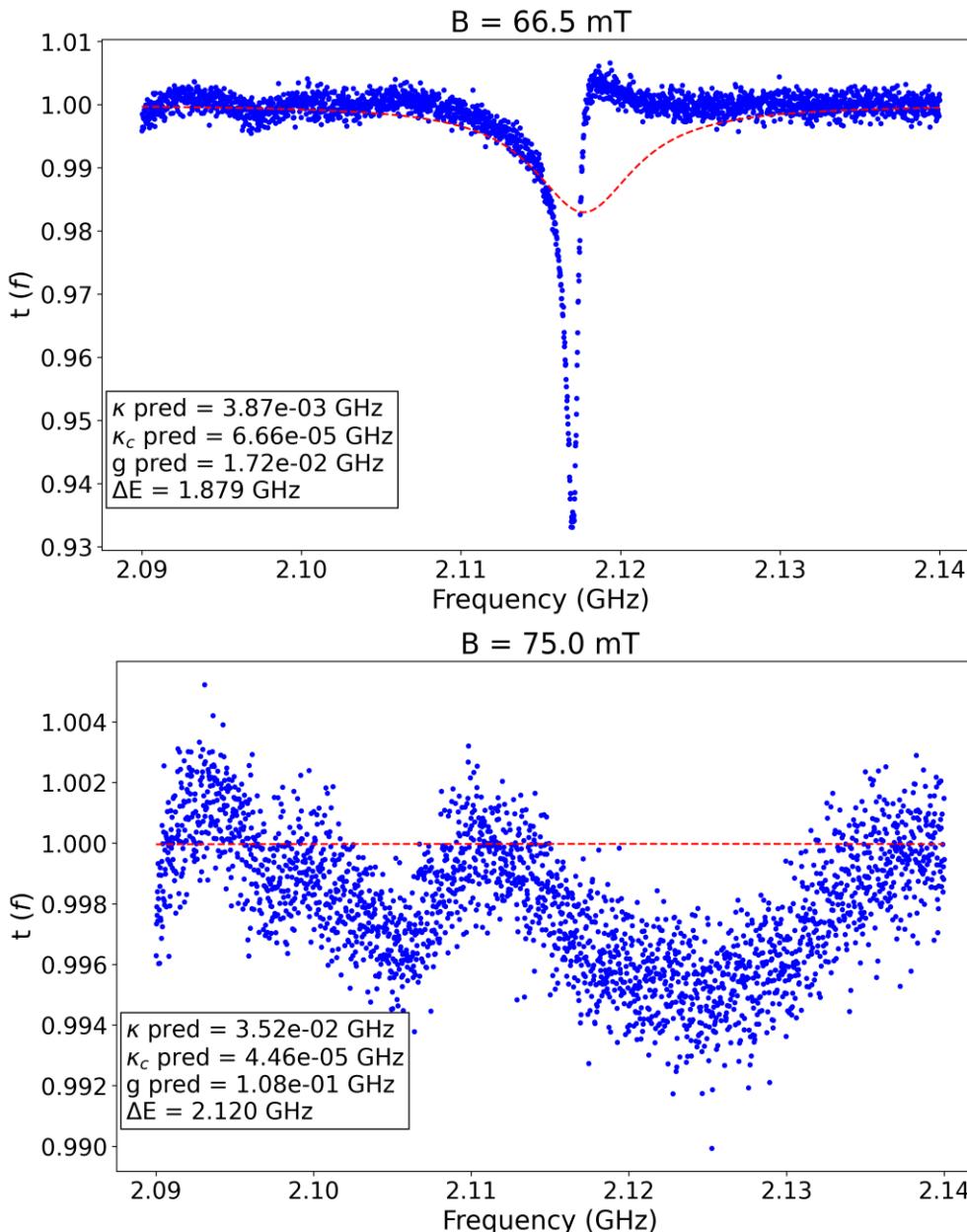


20/06/2024: Fijamos γ , pero tiene distintos valores en el rango de acotamiento

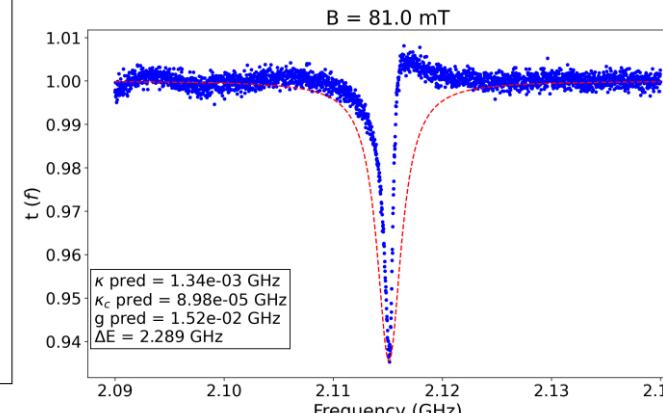
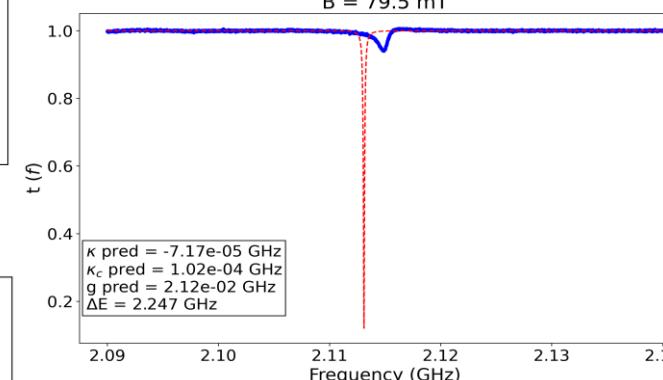
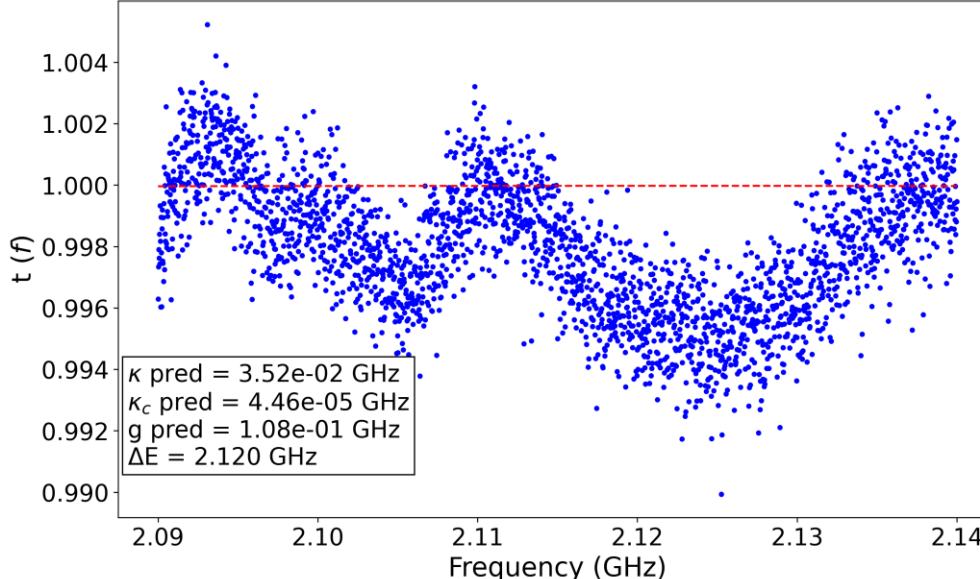


Curiosamente lo ha hecho peor que la anterior.

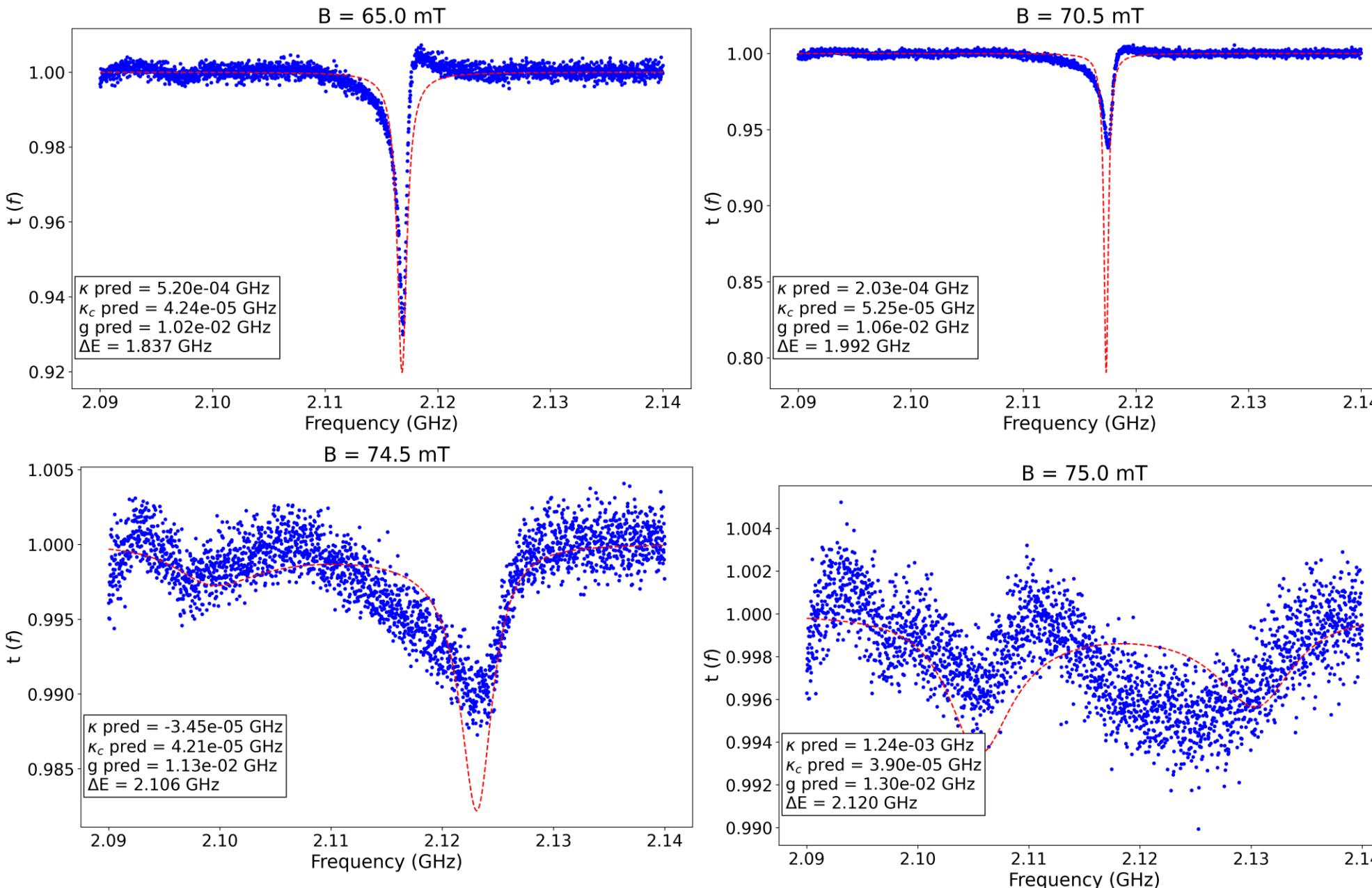
20/06/2024: Fijamos γ , fijamos un único valor (el valor medio de los propuestos antes de acotar, 10^{-3})



Queda claro que hay que acotar

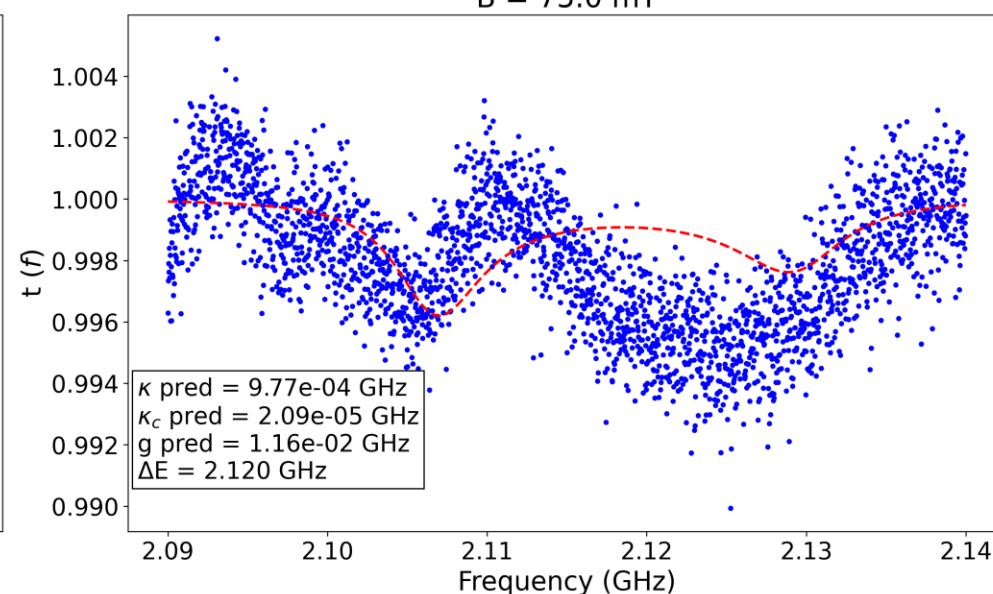
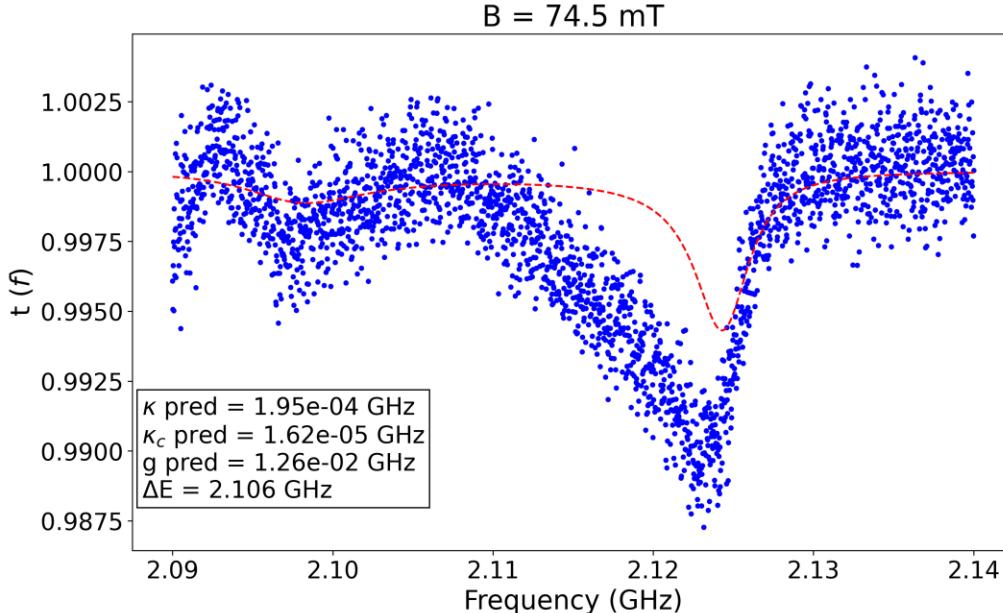
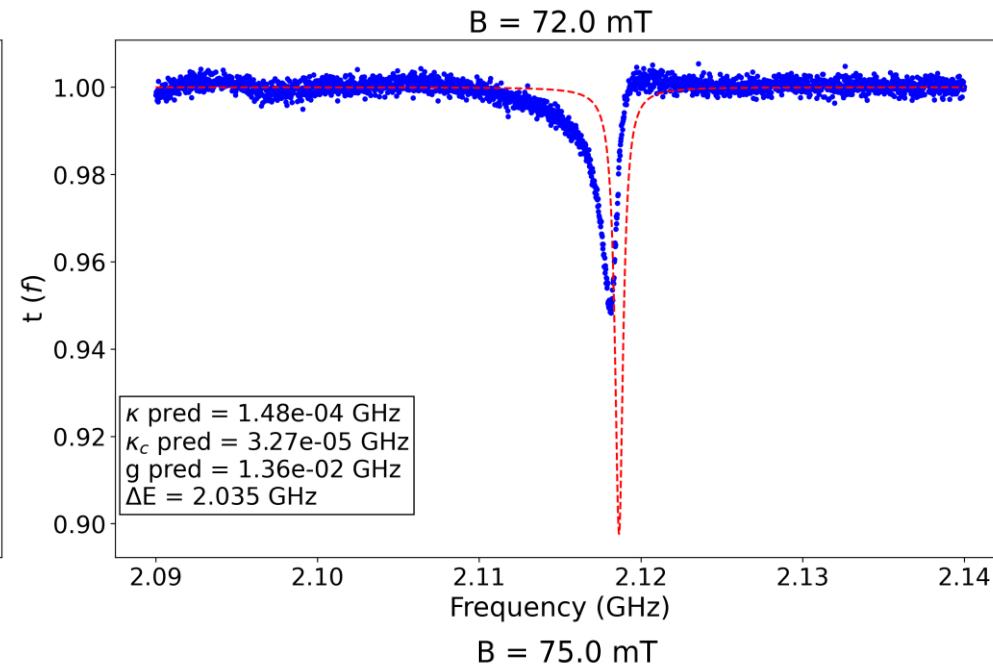
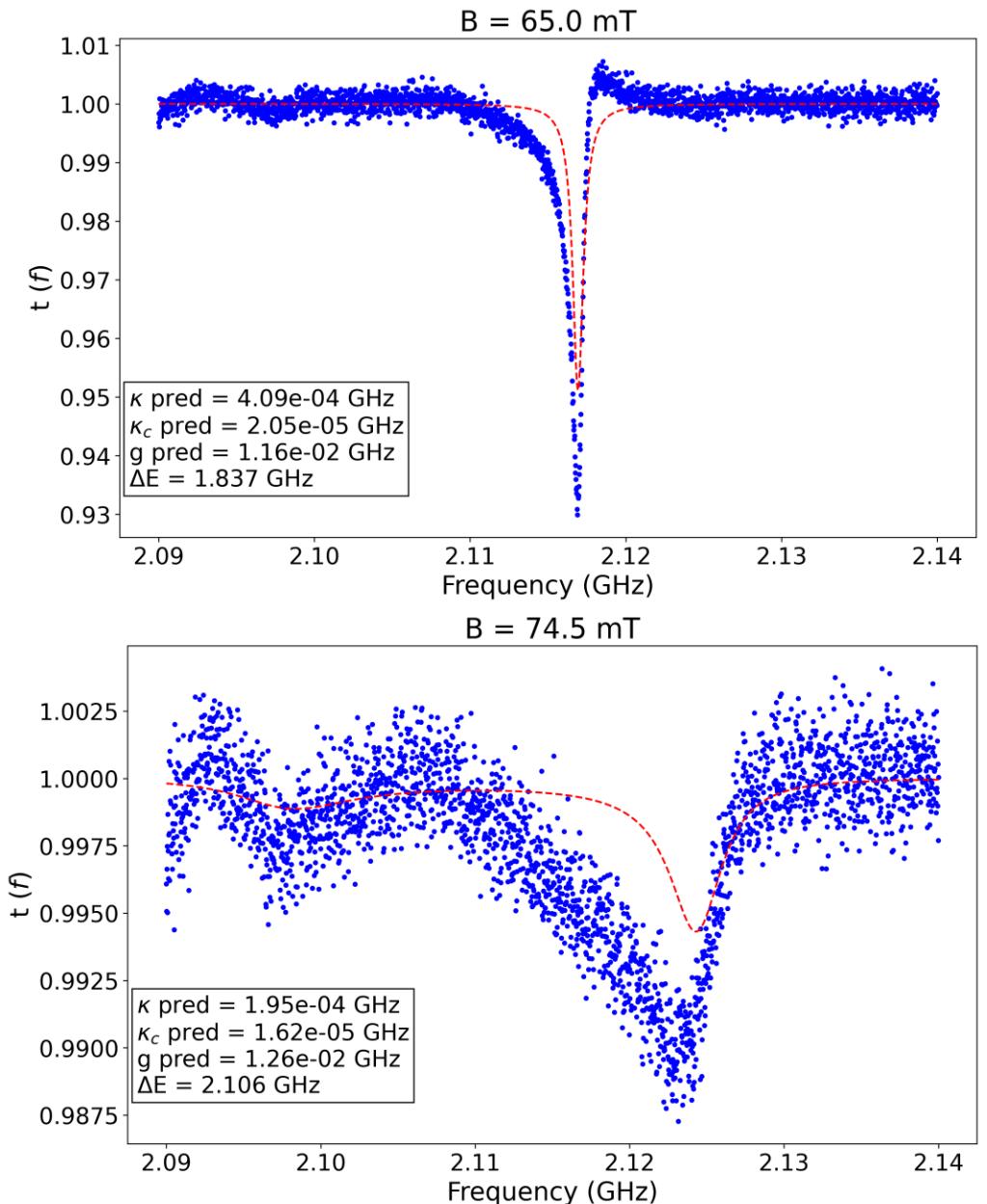


20/06/2024: Fijamos γ (γ con el valor de la tesis, 6.5 MHz)



Está muy bien en líneas generales, pero creo que k y k_c están demasiado abiertos. Y g también está un poco disperso. Vamos a acotarlos un poco más.

20/06/2024: Acotemos k , k_c y g un poco más [2e-4, 6.5e-4], [1.5e-5, 3.5e-5] y [1.15e-2, 1.35e-2]

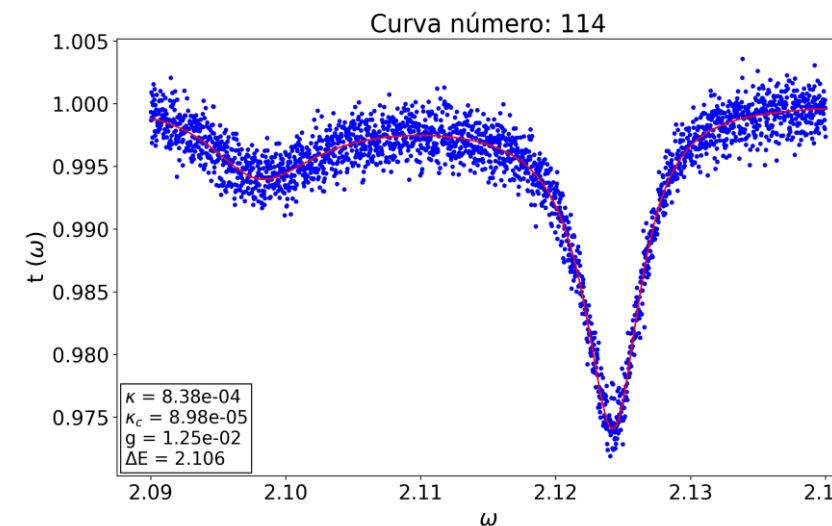
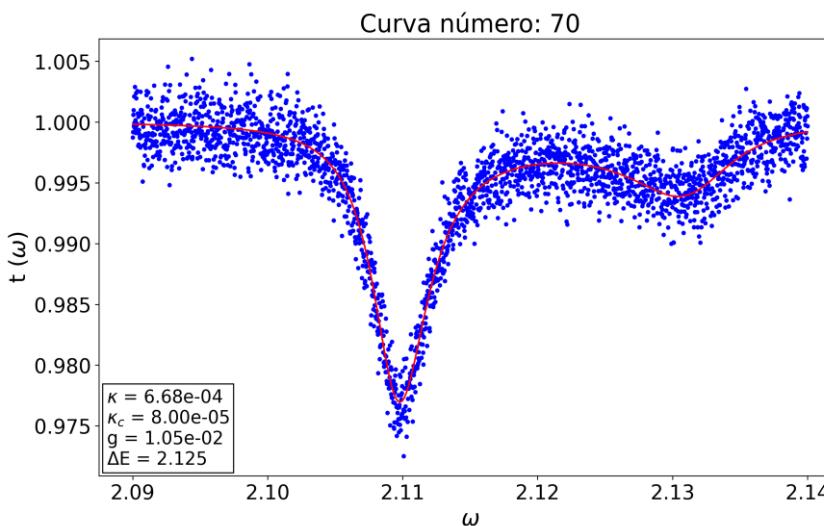
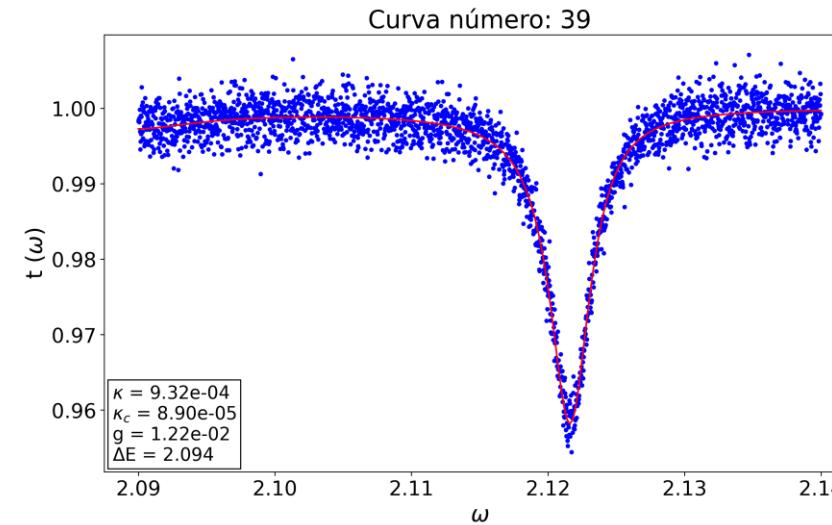
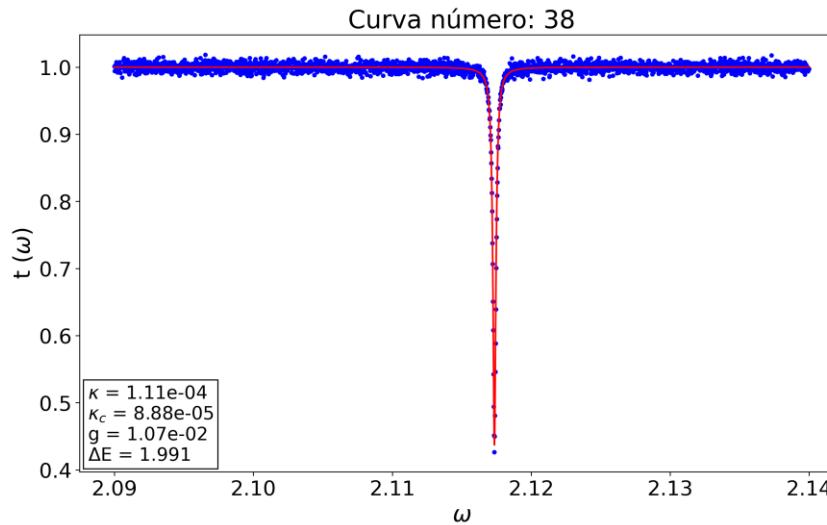


Hemos mejorado bastante poco, por no decir nada. Los fits de la zona cercana a resonancia se parecen mucho a los de Marcos. Así que muy bien.

Siguiente paso, introducir estos cambios (fijar gamma y DE), en el código con ruido.

22/06/2024: Pruebas para añadir el ruido, ya que la función es distinta

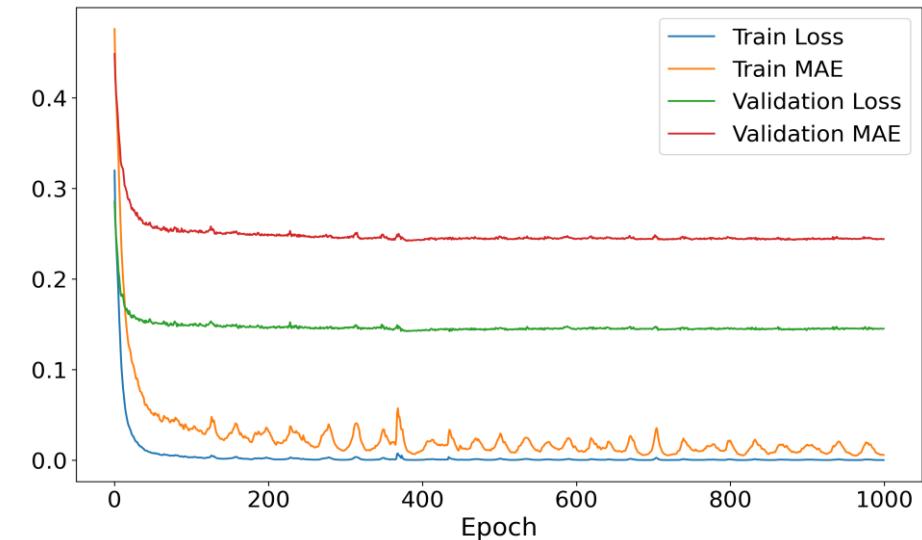
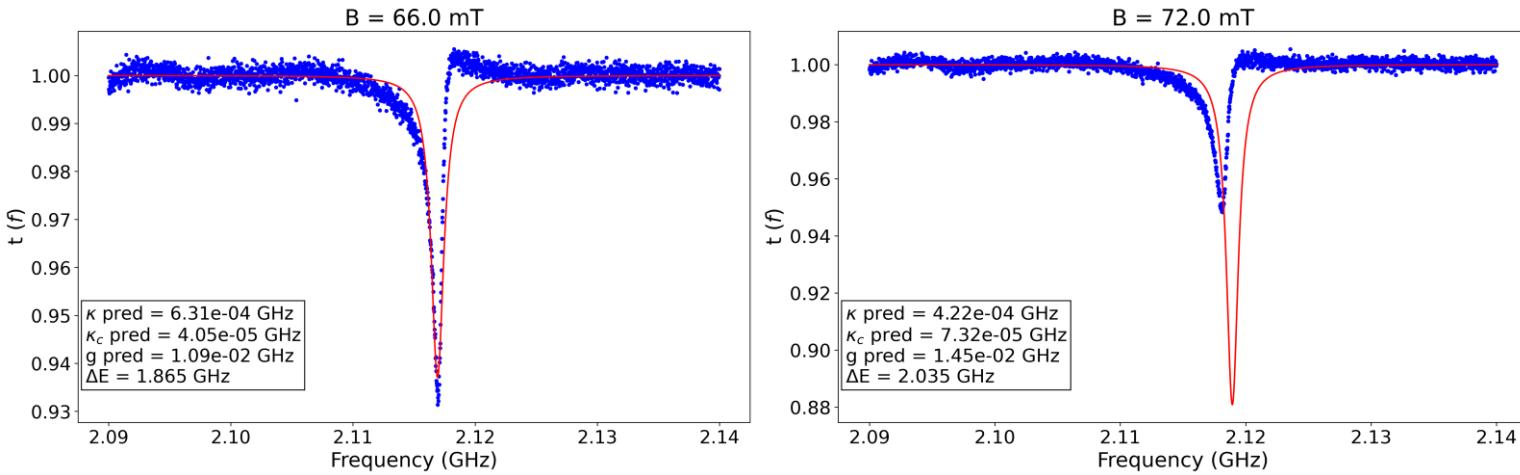
Para cada valor $t(\omega)$ se le añade un número gaussiano centrado en 0 con un σ aleatorio que depende de la posición del mínimo: 7.5 % si es mayor a 0.975, 5% si es mayor a 0.85, y el resto 1%



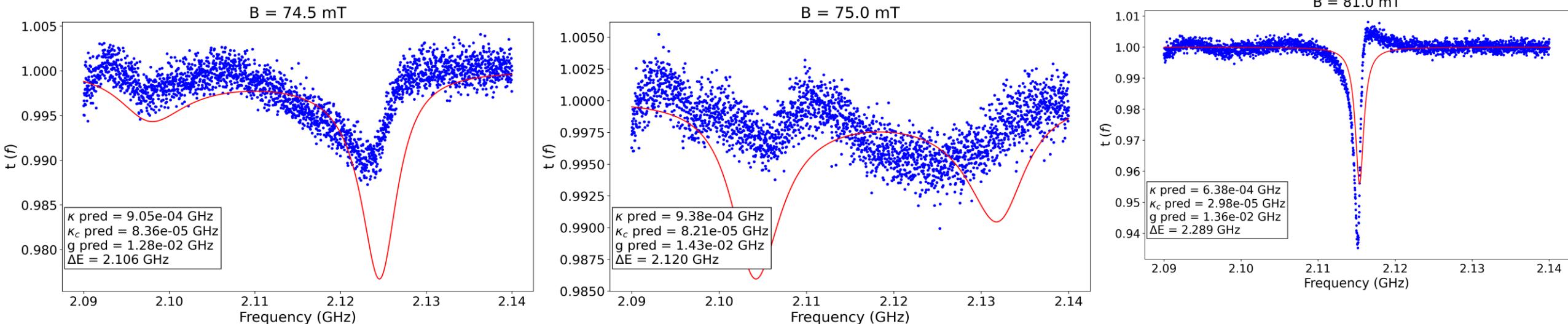
Muy similar a los datos experimentales. Nos quedamos con este

22/06/2024: Fijamos ΔE y γ (fijo), y entrenamos con ruido

Train Loss
 Train MAE
 Validation Loss
 Validation MAE



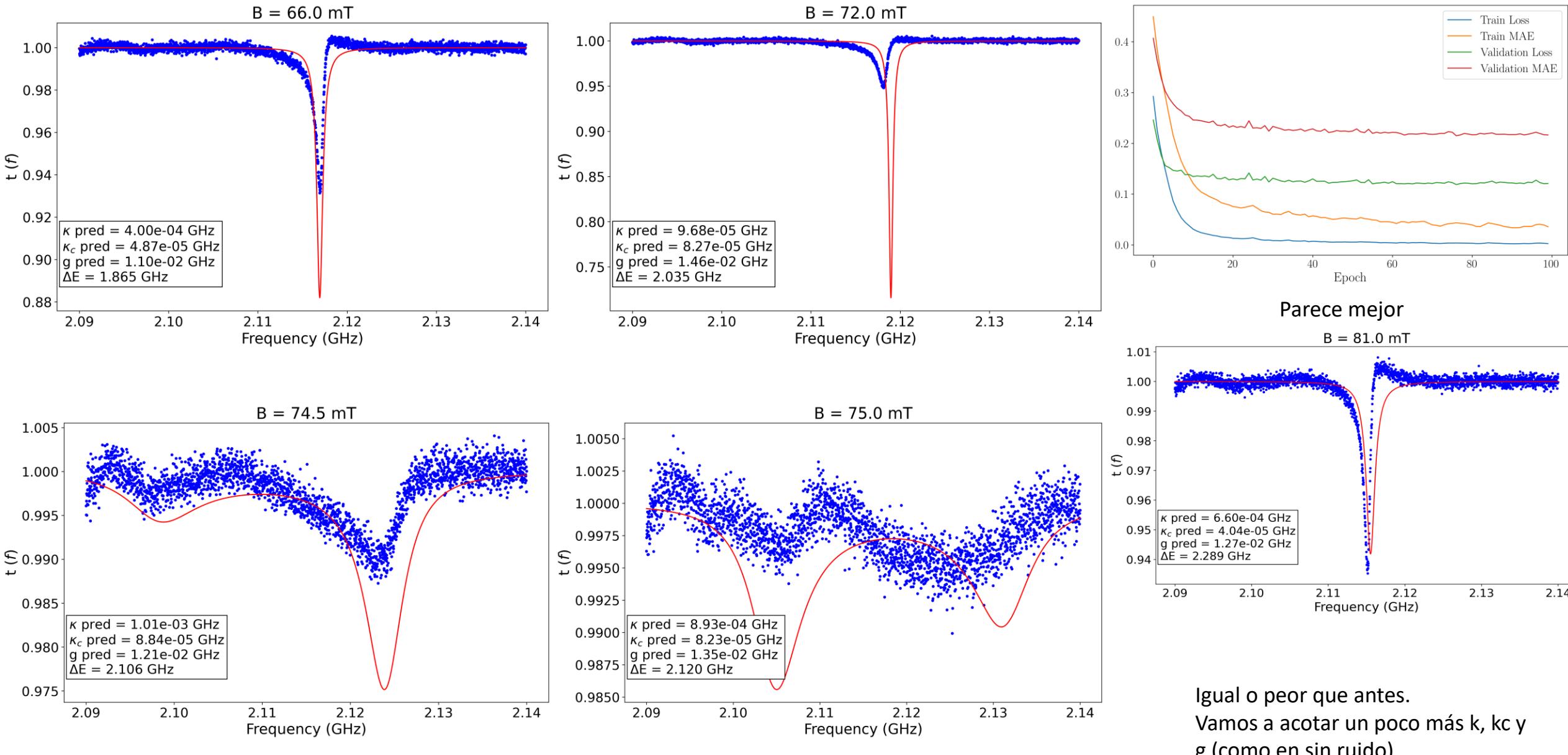
Parece overfitting



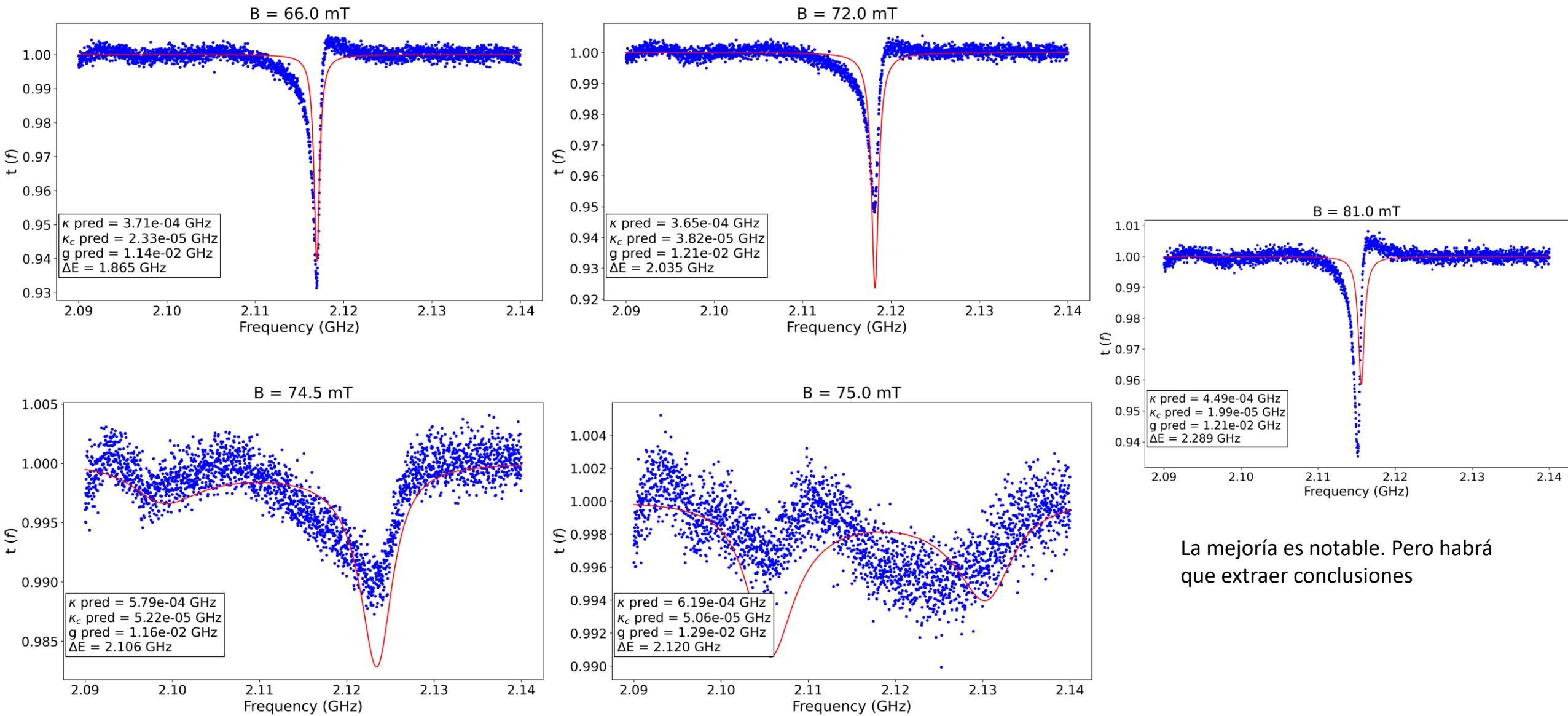
Voy a hacer otro estudio de hiperparámetros. Ya que hemos disminuido la complejidad del problema y tal vez haya algo de overfitting, porque en la gráfica de Loss vs Epochs, decae rápido y luego no mejora.

- ω entre 2.09 y 2.14, con 2500 puntos
- Ndata = 10000
- 5 capas ocultas: (256, 128, 64, 32, 16)
- Batch size = 50
- Epochs = 100

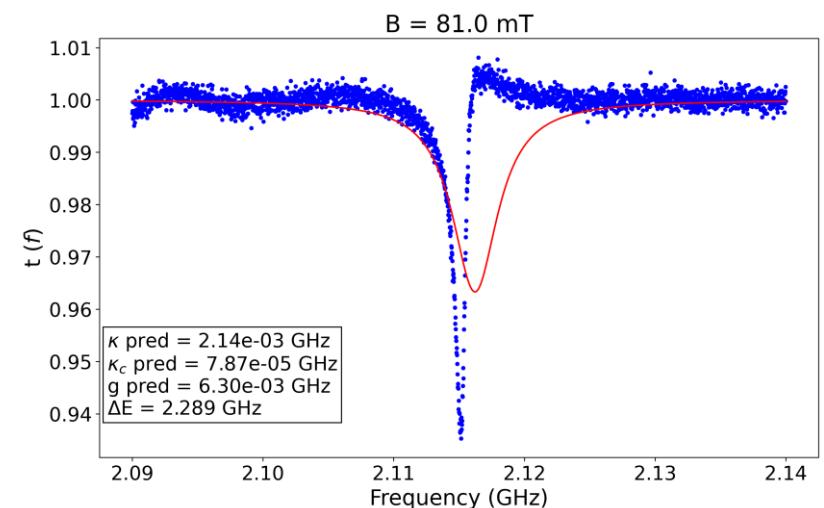
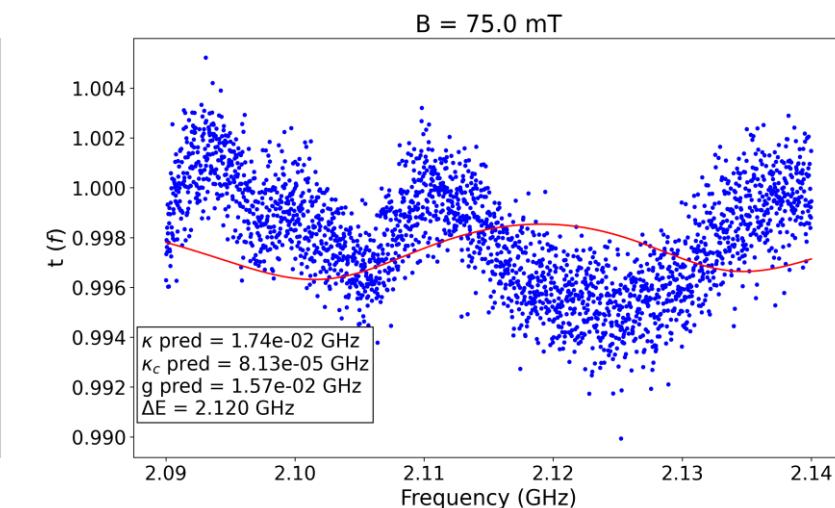
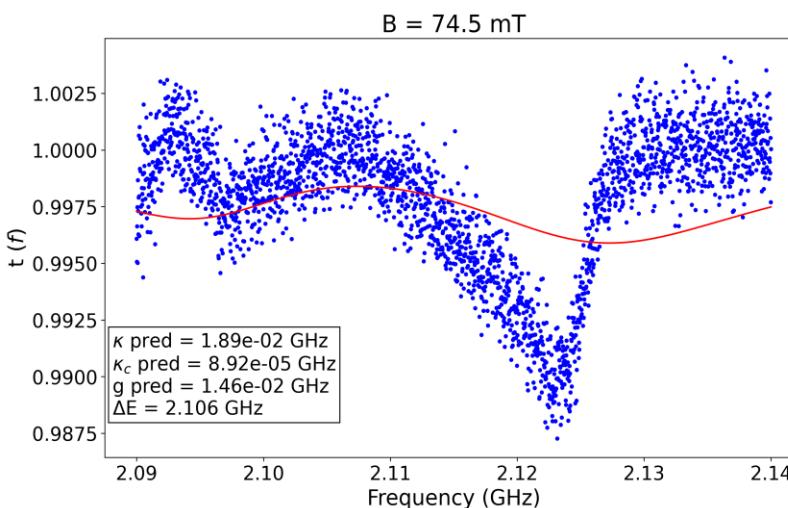
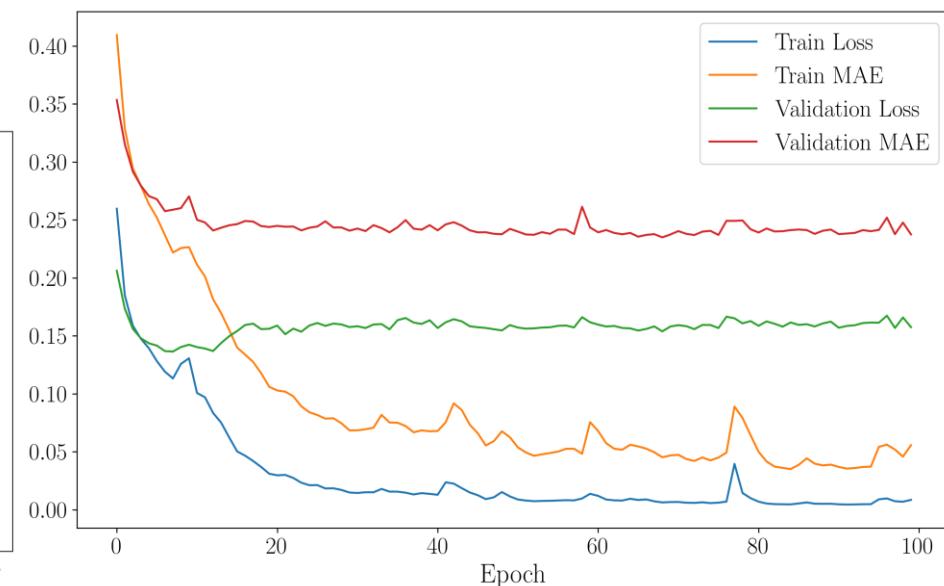
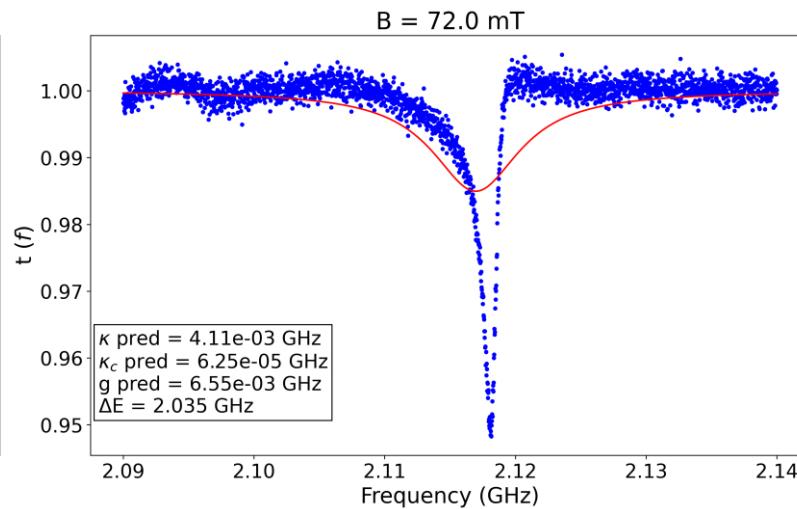
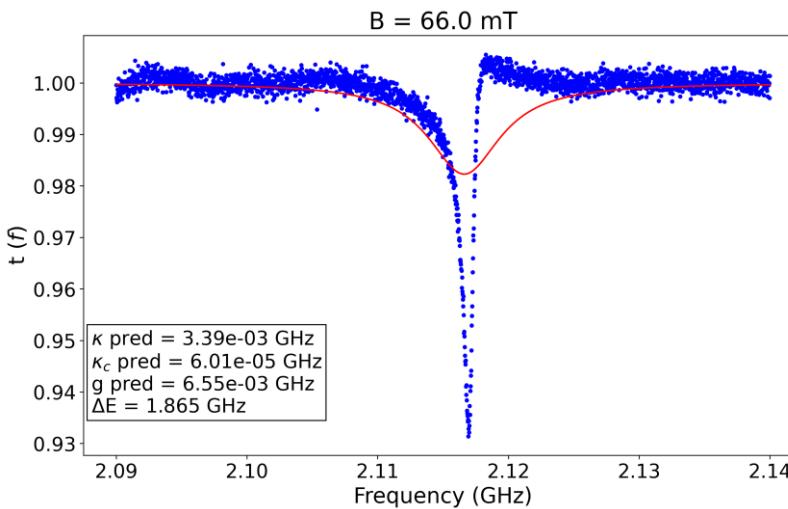
23/06/2024: Fijamos ΔE y γ (fijo), y entrenamos con ruido. Post nuevo estudio



23/06/2024: Fijamos ΔE y γ (fijo), y entrenamos con ruido. Acotado más

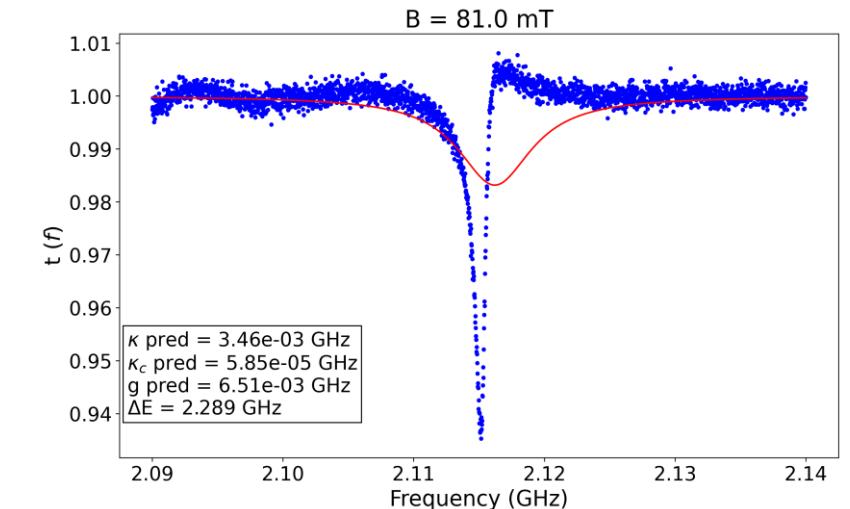
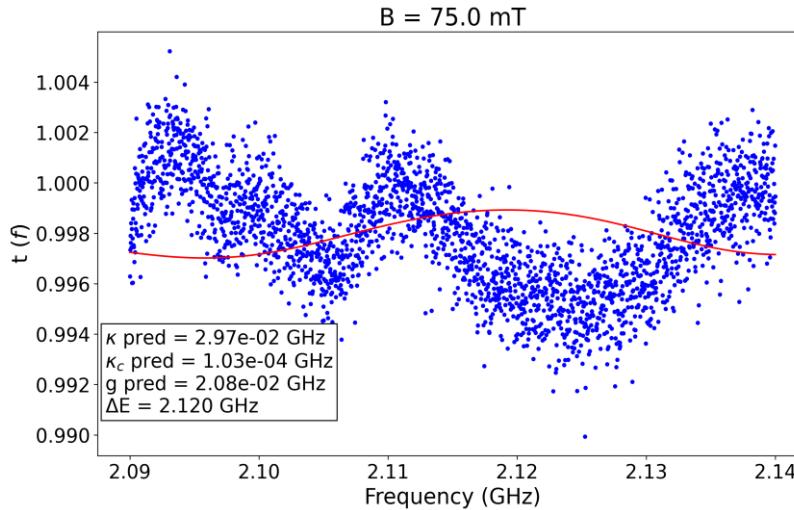
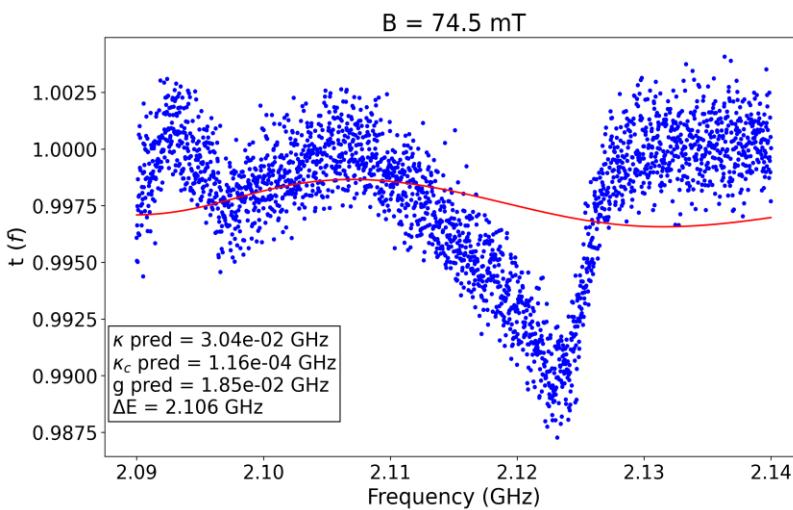
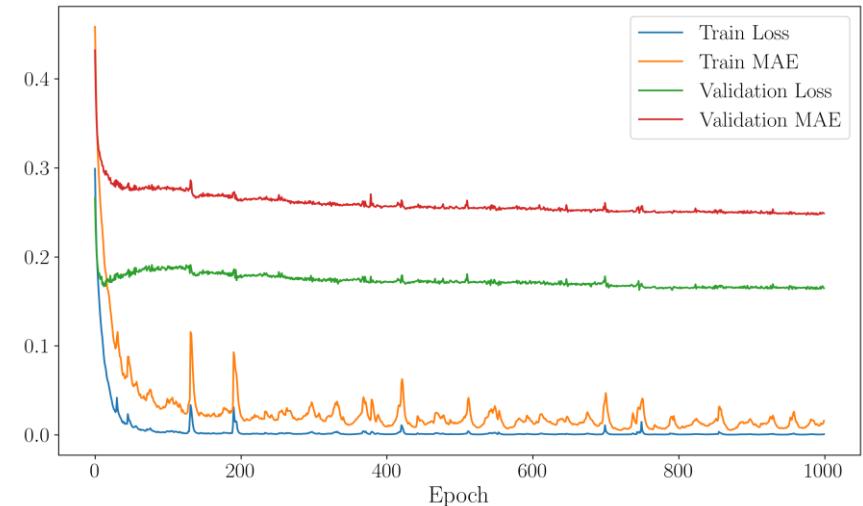
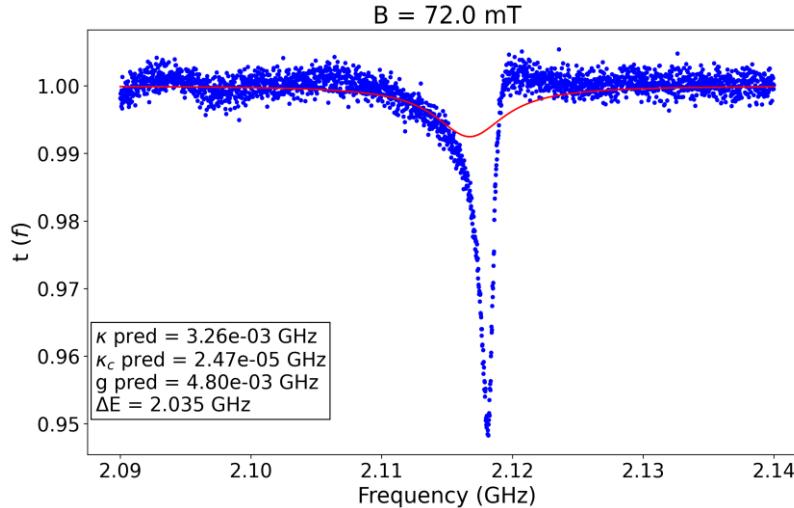
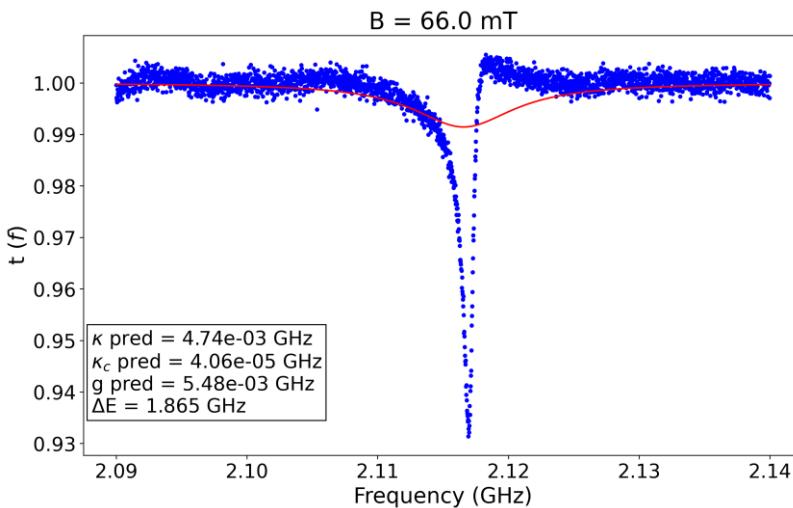


23/06/2024: Fijamos ΔE y γ (fijo), y entrenamos con ruido. Vamos a curiosear el caso general (antes de acotar nada)



Habrá que probar la red original

23/06/2024: Fijamos ΔE y γ (fijo), y entrenamos con ruido. Caso general con red original



Cabía esperar que fuera peor que acotado y que con la red actualizada