



SOFTWARE DE OBSERVACIONES SINTÉTICAS
MÓDULO DE ESPECTROMETRÍA

Instrucciones de uso del módulo espectrométrico interactivo de sos

Marcial Becerril Tapia

March 26, 2021

1 Introducción

En este trabajo se describen las herramientas e instrucciones para la operación y uso del módulo espectrométrico interactivo del Software de Observaciones Sintéticas (SOS).

El análisis de cualquier espectro de emisión o absorción mediante este módulo se realiza en tres etapas:

1. **Sustracción de línea base.** Consiste en la identificación y remoción de la línea base del espectro. Dependiendo del fenómeno físico que origina el espectro, las propiedades de la línea base pueden cambiar, por ello el módulo ofrece diversas opciones de ajuste.
2. **Ajuste de líneas.** A partir de un espectro sin línea base, se ajustan las líneas presentes utilizando funciones estándar de Gauss y/o Lorentz, según el criterio del usuario. El programa permite al usuario ajustar tantas líneas como necesite, aunque debe tomarse en cuenta que entre mayor sea la cantidad de líneas, mayor será el tiempo de cómputo.
3. **Párametros generales de las líneas.** Para concluir el análisis, el programa calcula, presenta y guarda los parámetros básicos de cada una de las líneas ajustadas: amplitud, posición, ancho y área bajo la curva.

En las próximas secciones, describimos el procedimiento a detalle de cada uno de estos puntos de la mano del código y las ventanas que se despliegan en cada uno de ellos.

2 **Á**lisis de líneas espectrales

Aquí describimos paso a paso el análisis de un espectro utilizando el módulo **specs** de la paquetería **sos**. Para ilustrar el procedimiento emplearemos el espectro **MYS1192.csv**, disponible en la carpeta `/sos/data_specs/` dentro del repositorio GitHub de **sos**¹.

Todo el procedimiento que presentaremos a continuación está incluido en el script **spectra_example.py**, en el mismo repositorio.

2.1 Carga del espectro

Iniciamos importando la paquetería de **sos** e instanciando la clase **specs** al objeto **sp** (de *spectrum*)², indicando la ruta del espectro a analizar³, como se muestra a continuación:

```
1 # Import the SOS library
2 import sos
3
4 # Define the spectrum path, as csv file
5 path = "./dataspecs/MYS1192.csv"
6
7 # Create the spectrum object, calling the spectrum module from sos
8 sp = sos.specs(path)
```

Si la carga fue exitosa, el programa desplegará el mensaje **Spectra file read!**, en caso contrario, mostrará un mensaje de error indicando la posible causa.

Podemos visualizar el espectro recién cargado utilizando el método **plot_spectra** (ver Figura 2.1) como:

```
1 # Plot the loaded spectra
2 sp.plot_spectra()
```

2.2 Sustracción de línea base

El primer paso para el análisis de líneas en un espectro consiste en la sustracción de la línea base que lo permea. La forma y origen de esta componente depende de una gran cantidad de factores asociados a la naturaleza del fenómeno que produce el espec-

¹<https://github.com/MarcialX/sos/>

²Cabe aclarar que puede asignarse el nombre que se desee al objeto, siempre y cuando no se utilicen palabras reservadas de Python.

³Por el momento **sos** sólo admite espectros en formato **.csv**, versiones futuras incluirán otra clase de formatos, como **.fits** o **.txt**.

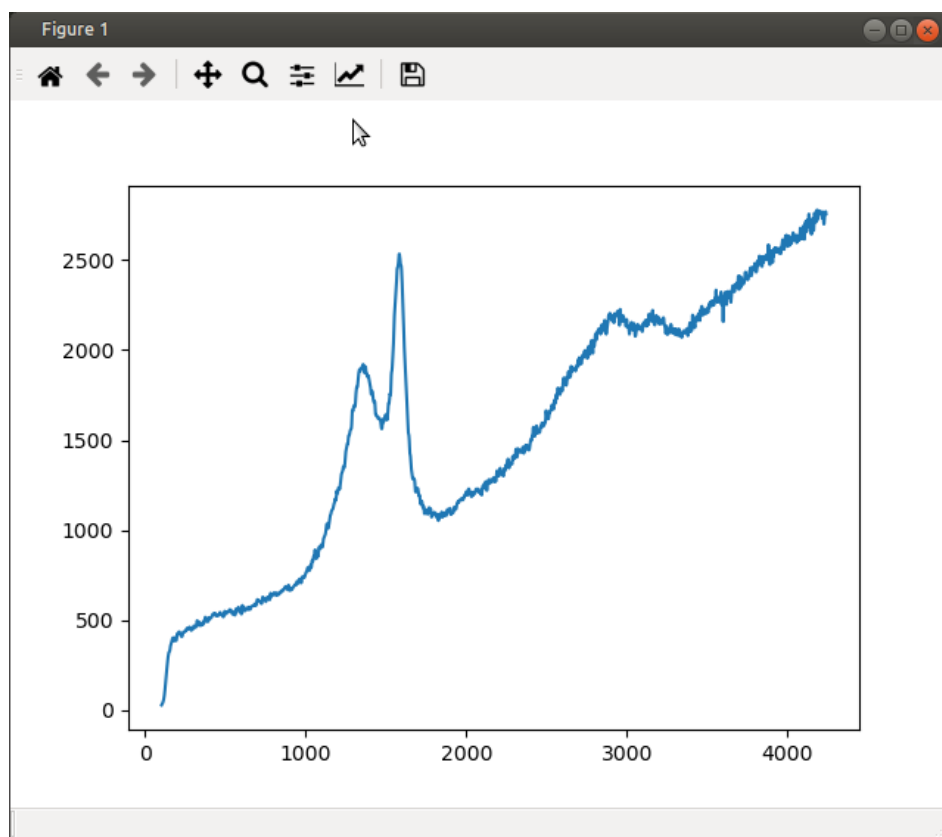


Figure 2.1: Visualización del espectro utilizando el método `plot_spectra`.

tro, las condiciones del experimento y los instrumentos que lo miden⁴; su análisis es responsabilidad directa del usuario.


Para iniciar la sustracción, ejecutamos el método `subtract_baseline` del objeto `sp`:

```
1 # Subtracting baseline [Interactive mode]
2 sp.subtract_baseline()
```

Esta instrucción desplegará la ventana interactiva **Baseline Analysis** de la Figura 2.2, a través de la cual parametrizaremos y removeremos la línea base del espectro.






Baseline Analysis posee un conjunto de herramientas, que conforme a sus funciones, clasificamos en:


1. **Herramientas de Selección.** Definen la forma mediante la cual seleccionaremos puntos o regiones del espectro que constituyan la línea base (según el criterio del usuario). El programa ofrece dos formas de selección:

- a)  **Por puntos.** Selecciona los puntos del espectro más próximos en la

⁴Es posible que el espectro incluso no presente línea base, ya sea por su naturaleza o porque previamente ya ha sido sustraído, en cuyo caso este paso puede omitirse.

dirección x, al sitio del gráfico donde hagamos clic.

- b)  **Por regiones.** Selecciona los límites de una región del espectro que se excluirán para realizar la parametrización de la línea base. Si se utiliza esta herramienta, deben escogerse todos los límites donde se localizen líneas (tanto de emisión como de absorción) para una mejor identificación de la línea base.
2.  **Activar interacción.** Habilita/deshabilita la selección de puntos o regiones del espectro en el gráfico. Cuando la función esta activa, podemos elegir puntos o regiones según la herramienta de selección, haciendo clic izquierdo en la región del gráfico. Si por el contrario buscamos eliminar puntos o regiones, utilice clic derecho sobre el sitio de interés.
3. **Métodos de ajuste.** Partiendo de los segmentos seleccionados del espectro (puntos o regiones según la herramienta empleada) estimamos la línea base conforme a alguno de los siguientes métodos de ajuste:
 - a)  **Lineal.** Regresión lineal utilizando mínimos cuadrados no lineales.
 - b)  **Polinomio de grado $2 \leq n \leq 10$.** Ajuste de un polinomio de hasta grado 10 mediante mínimos cuadrados no lineales.
 - c)  **BLS Suavizado asimétrico de mínimos cuadrados.** Implementa el algoritmo desarrollado por P. Eilers and H. Boelens en 2005[1] para extraer línea base de espectros. Utiliza tres parámetros definidos por el usuario: p para asimetría, λ para suavizado y n para el número de iteraciones. Para espectros de emisión con multiples líneas, típicamente $0.001 \leq p \leq 0.1$ y $102 \leq \lambda \leq 110$, aunque puede haber excepciones. Una inspección visual es suficiente para evaluar la elección de parámetros.

Se recomienda su uso para espectros con líneas (emisión o absorción) cuyos anchos sean significativamente más pequeños que el tamaño total del espectro.
4.  **Limpiar gráfico.** Remueve cualquier modificación al gráfico desplegando el espectro original. Esta función también elimina de la memoria cualquier ajuste previo. Úsese antes de iniciar cualquier selección y ajuste, a excepción de la primera.
5. **Funciones aceptar/aplicar/cancelar** Para realizar el ajuste de la línea base y mostrarla en el gráfico, seleccione **Apply**.

Accept realiza el ajuste de la línea base, guarda los cambios y cierra la ventana.

Cancel cancela los cambios y cierra la ventana.

2.2.1 Instrucciones

Para la identificación, ajuste y sustracción de la línea base de un espectro utilizando la ventana interactiva **Baseline Analysis** de **sos**, deben seguirse los siguientes pasos (ver Figura 2.3):

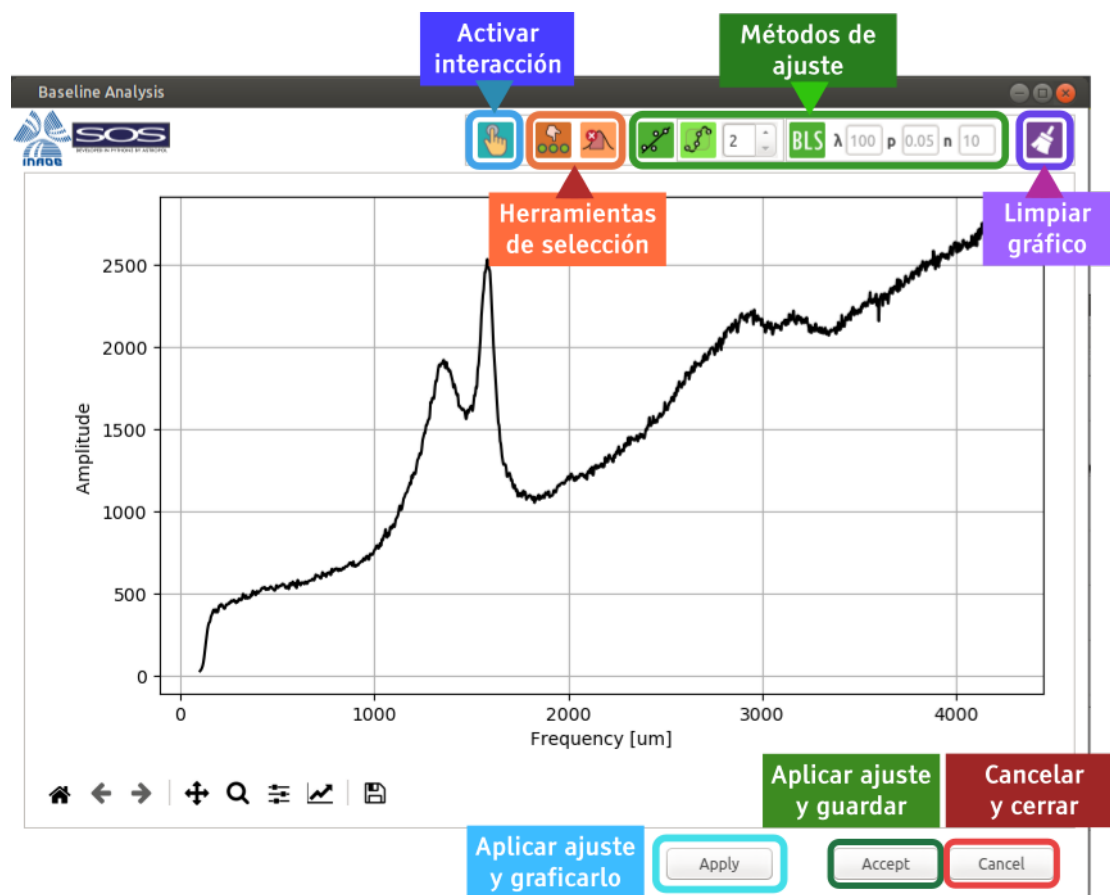


Figure 2.2: Ventana **Baseline Analysis** para la identificación y sustracción de la línea de base de un espectro. Los recuadros indican la clasificación de sus herramientas.

1. Elegimos el modo de selección: por puntos o regiones.
2. Habilitamos la interacción con el gráfico.
3. Dependiendo el criterio de selección, elegimos los puntos de la línea base, o las regiones de líneas espectrales; haciendo clic izquierdo en el gráfico. Si ocurren errores en la selección, recuerde que pueden eliminarse uno a uno haciendo clic derecho sobre ellos, o bien haciendo clic en **Limpiar gráfico**, aunque éste último eliminará todo rastro de selección.
4. Seleccionamos alguno de los métodos de ajuste disponibles definiendo sus parámetros particulares (en caso de requerirlos).
5. Aplicamos el ajuste haciendo clic sobre el botón **Apply**. El programa mostrará un gráfico similar al de la Figura 2.4: una línea discontinua cyan ilustra el ajuste

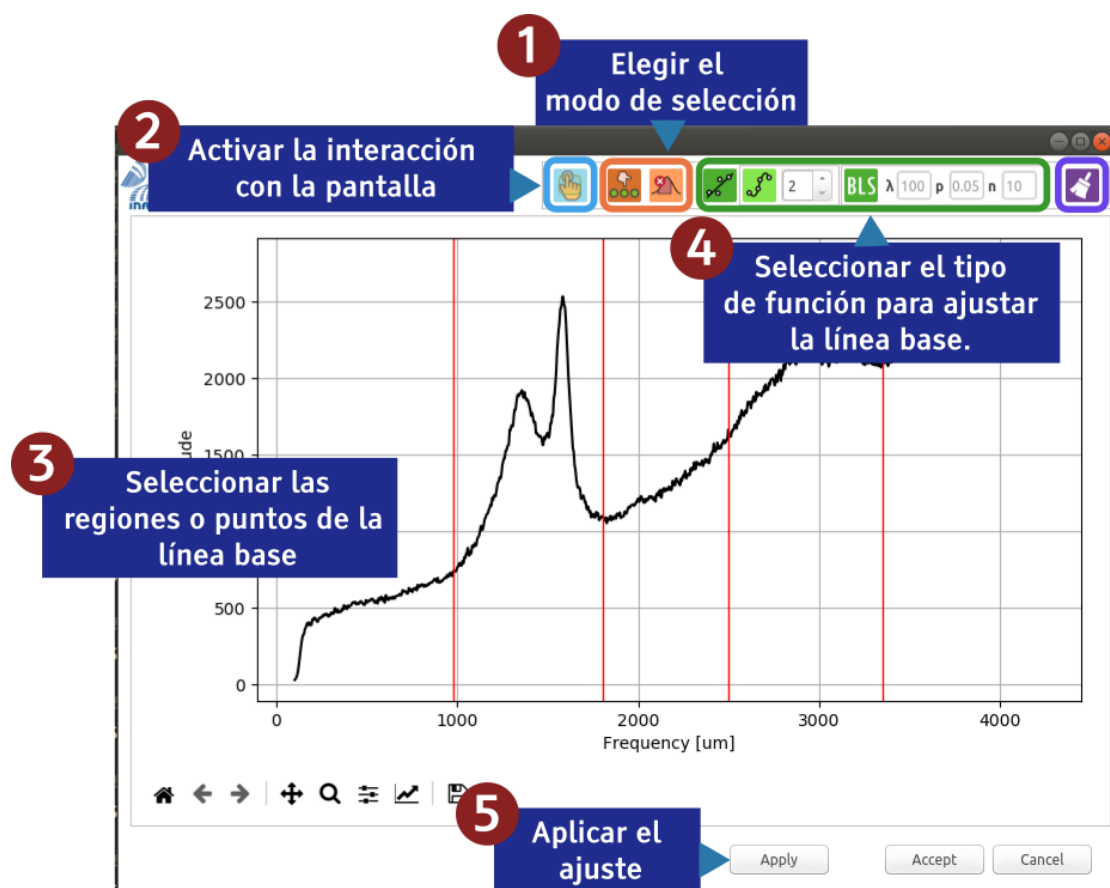


Figure 2.3: Pasos para la identificación, ajuste y sustracción de la línea base de un espectro a través de la herramienta **Baseline Analysis** de **sos**.

de la línea base, en negro el espectro original, y en rojo el espectro sin línea base o corregido.

El procedimiento anterior puede aplicarse tantas veces como sea necesario, cambiando los modos de selección, los puntos o regiones elegidos, o el método de ajuste y sus parámetros, hasta que los resultados sean satisfactorios; de modo que podamos guardarlos y finalizar el proceso haciendo clic en **Aceptar**.

2.3 Ajuste de la líneas espectrales

El segundo paso consiste en identificar, ajustar y obtener los parámetros principales de las líneas (emisión o absorción) del espectro. Nuevamente, dependiendo de la naturaleza del fenómeno que origina el espectro, la forma de las líneas espectrales poseerán determinadas características. Queda a consideración del usuario determinar la función que mejor le convenga.

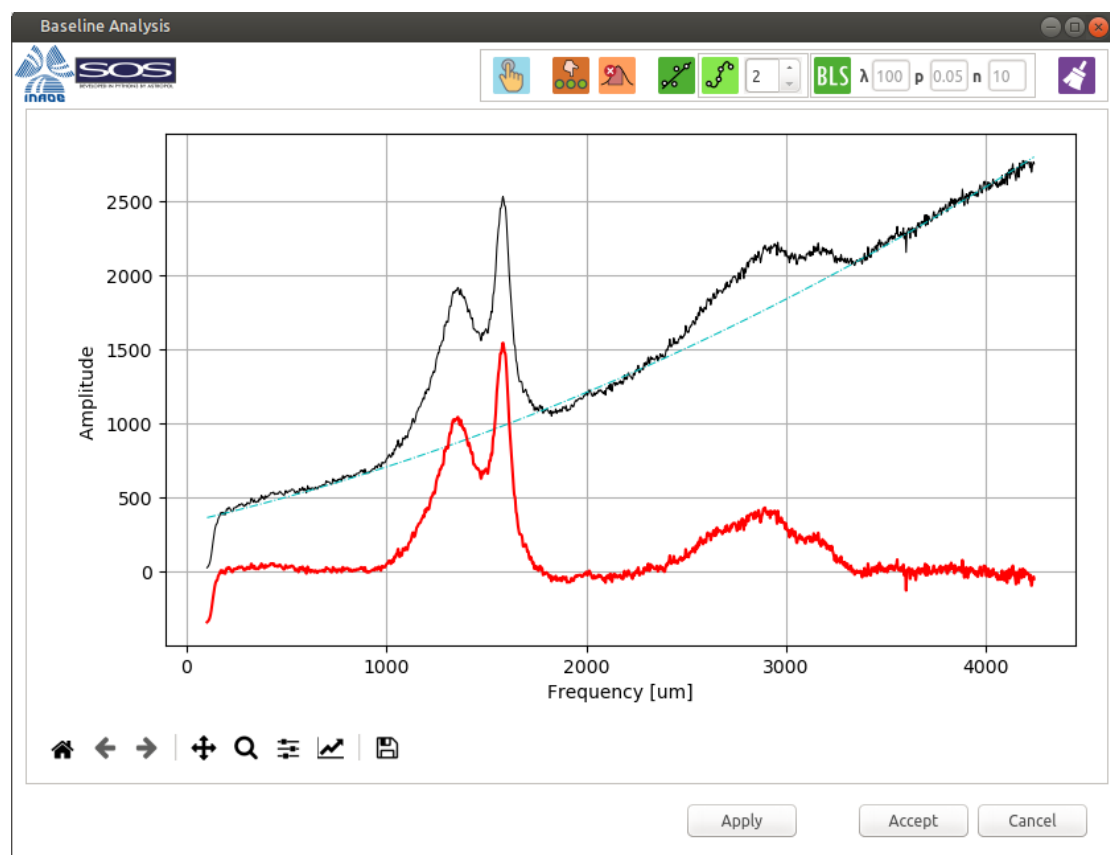


Figure 2.4: Resultado del ajuste (cyan) y sustracción de la línea base del espectro (rojo).


Para realizar el ajuste de líneas de un espectro utilizamos el método `fit_spectra` de `sp`. La función requiere que indiquemos un arreglo de datos correspondiente al espectro; sin embargo, si no especificamos alguno se tomará por default el arreglo de datos con la línea base corregida extraída en el paso anterior.

Continuando con el ejemplo, debido a que ya fue extraída la línea base, no agregaremos ningún argumento al método, quedando como sigue:

```
1 # Fitting the available lines in the spectra free of baseline
2 sp.fit_spectra()
```

mostrando la ventana **Line Fit Analysis** de la Figura 2.5, mediante la cual identificaremos posibles líneas y extraeremos sus principales parámetros.

El programa posee varias herramientas auxiliares para la búsqueda y parametrización de líneas espectrales. Estas se clasifican como:


1.  **Activar interacción.** Habilita/deshabilita la selección de puntos en el gráfico. Cuando la función esta activa, podemos elegir los puntos del gráfico haciendo clic izquierdo, donde aproximadamente se localice una línea. Para eliminar puntos simplemente hacemos clic derecho sobre él.

2. **Tipo de línea.** Define la función de ajuste de líneas espectrales. El programa define dos funciones:

- a)  **Gaussiana.** Función normal de la forma:

$$f(x) = Ae^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$$



donde A es la amplitud de la línea, μ es su posición central y σ define el ancho de la línea.

- b)  **Lorentziana.** Función de la forma:

$$f(x) = A \left(\frac{w}{4(x - \mu)^2 + w^2} \right)$$

donde A es la amplitud de la línea, μ es su posición central y w el ancho de la línea.

La función seleccionada/activa se indica con un círculo rojo sobre el ícono, la no activa con un círculo azul.

3.  **Ajuste automático.** Realiza una búsqueda automática de líneas de emisión o absorción en el espectro (según los parámetros p y d), y las ajusta con la función (Gaussiana o Lorentziana) que minimice el error. **Esta función esta en construcción y por lo tanto no es funcional por el momento.**
4.  **Limpiar gráfico.** Remueve cualquier modificación al gráfico desplegando el espectro original. Esta función también elimina de la memoria cualquier ajuste de líneas previo, aunque mantiene los datos del último ajuste en la tabla.
5. **Funciones aceptar/aplicar/cancelar.**

Apply realiza el ajuste de la líneas seleccionadas y muestra los resultados en la tabla superior junto con los parámetros principales.

Accept realiza el mismo procedimiento de **Apply**, pero además guarda los cambios y cierra la ventana.

Cancel cancela los cambios y cierra la ventana.

2.3.1 Instrucciones

Para realizar el ajuste de funciones matemáticas a las líneas del espectro, utilizando el programa de **Line Fit Analysis**, seguimos los siguientes pasos (ver Figura 2.6):

1. Se elige el tipo de función de ajuste: Gaussiana o Lorentziana.
2. Activamos la interacción con el gráfico.

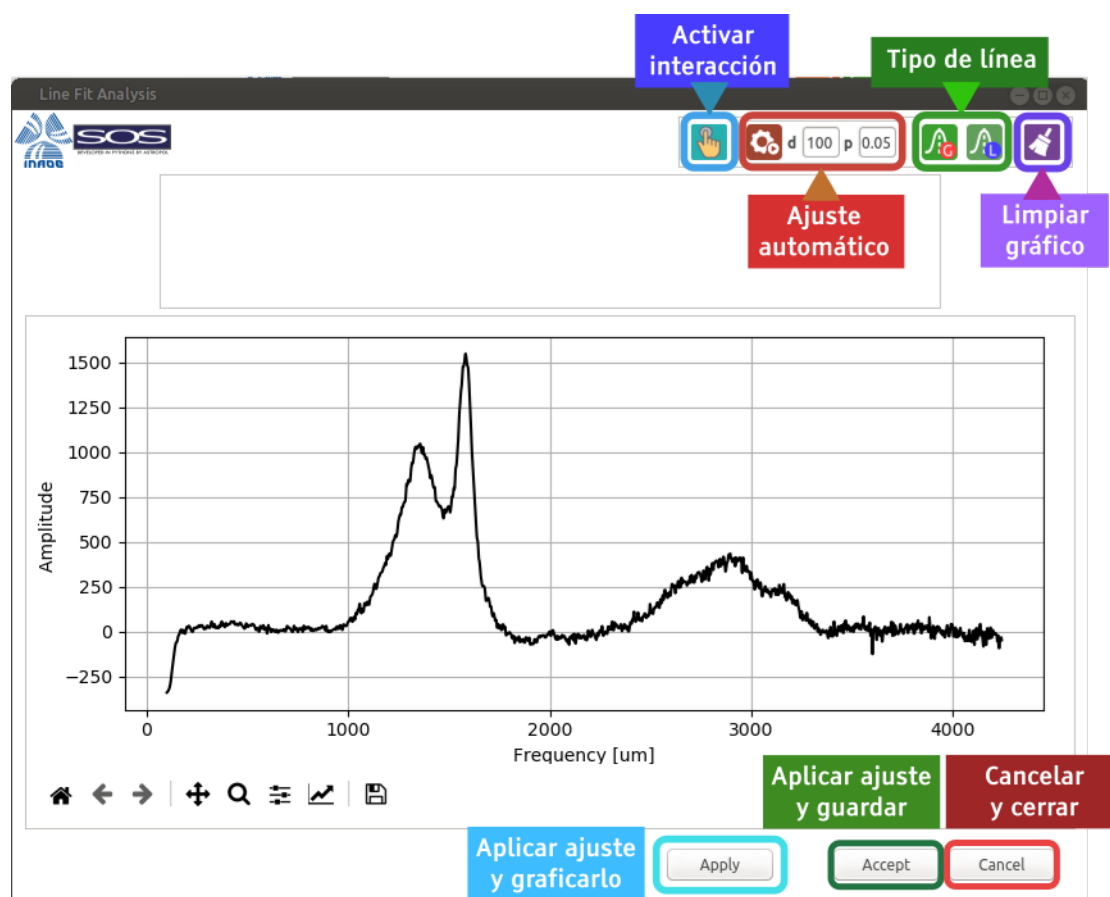


Figure 2.5: Programa **Fit Line Analysis** para el ajuste de líneas espectrales. Los recuadros indican la clasificación de sus herramientas.

3. Seleccionamos las posiciones aproximadas de las líneas. El programa automáticamente realizará el ajuste minimizando el error, por ello no es necesaria precisión absoluta al momento de seleccionar líneas; sin embargo, esta asignación inicial se utiliza como semilla para la optimización del ajuste, por lo que su correcta aplicación se traduce en la reducción de tiempos y en una mayor precisión.

Pueden seleccionarse tantas líneas como sean necesarias.

4. Realizamos el ajuste haciendo clic en **Apply**. Sobre el gráfico, junto con el espectro original, el programa dibujará las curvas ajustadas de las líneas, asignándoles un color único a cada una de ellas. Además, una línea roja mostrará la suma de todas las líneas individuales; si el ajuste es bueno esta curva será similar al espectro original en negro.

Los parámetros de las funciones de ajuste de cada línea se muestran en la tabla superior: amplitud, posición, ancho de línea, área bajo la curva y el tipo de función empleado.



Figure 2.6: Procedimiento para la selección y ajuste de líneas del espectro utilizando el programa **Line Fit Analysis** de **sos**.

Si el ajuste es satisfactorio, hacemos clic en **Accept** para guardar los cambios y cerrar la ventana. En caso contrario, podemos agregar más líneas, o limpiar la selección y repetir el procedimiento, utilizando otra clase de función de ajuste, o seleccionando otros sitios de la curva.

La Figura 2.7 ejemplifica el resultado de ajustar tres líneas gaussianas al espectro de ejemplo. Aunque el ajuste parece adecuado, podrían agregarse más líneas en otras regiones para acercarse más al espectro original, esto queda a criterio del usuario.

2.4 Visualización de parámetros generales y almacenamiento.

Podemos observar los resultados del ajuste utilizando la siguiente instrucción en Python:

```
1 # Show the results
2 sp.summary()
```

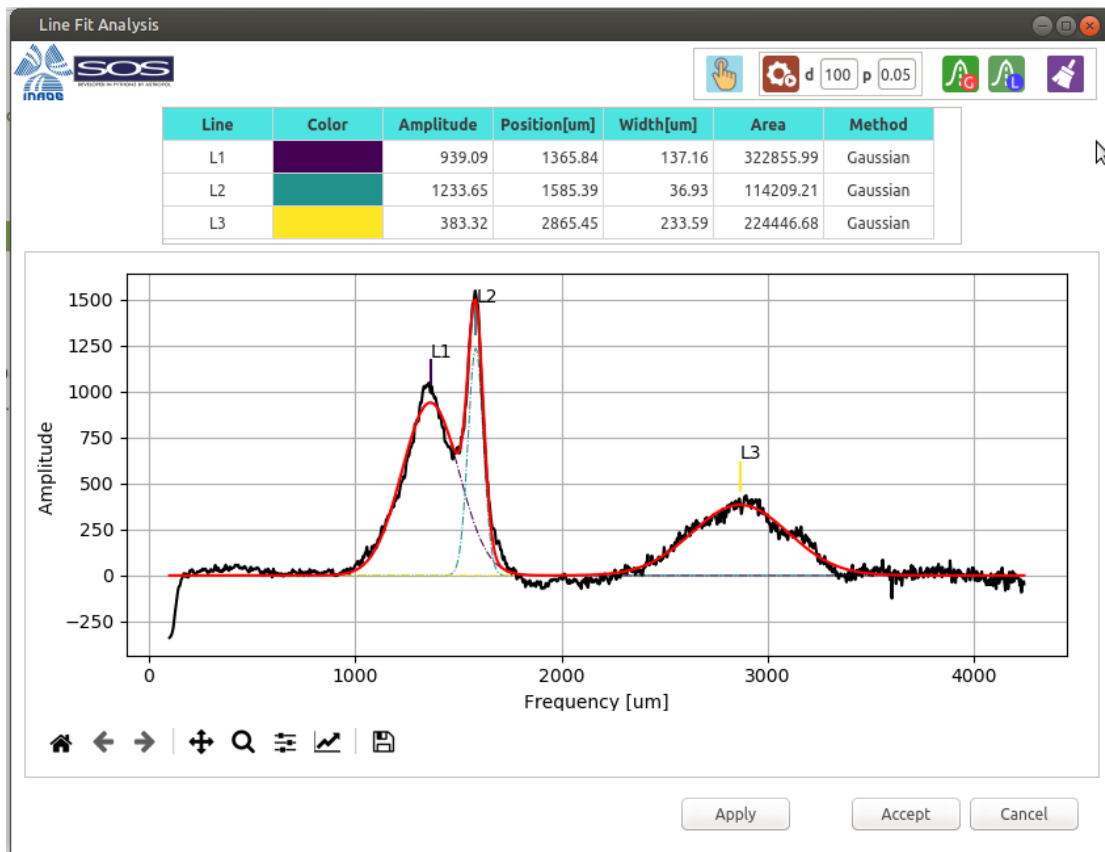


Figure 2.7: Ajuste de líneas espectrales con **Line Fit Analysis**. Los parámetros de cada línea se presentan en la tabla superior.

mostrando para cada línea los valores de sus parámetros principales: método, amplitud, posición, ancho de línea y área bajo la curva.

Finalmente, podemos guardar los resultados como un archivo de texto **.txt** mediante:

```
1 # Create reports
2 sp.generate_report()
```

Este archivo presenta la información de cada línea por renglón, mientras que las columnas, separadas por tabulación, indican cada uno de sus parámetros.

Si no se especifica un nombre de archivo como argumento en la función, por default este adopta la siguiente configuración: **Nombre del espectro + _fit_report.txt**, y se almacena en la propia carpeta de **sos**.

Referencias

1. Eilers P. & Boelens H., *Baseline Correction with Asymmetric Least Squares Smoothing*, 2005.