

MÉTODOS COMPUTACIONALES 2: TALLER 1

Calentamiento

Por Santiago Henao Castellanos

Este taller tiene como propósito repasar algunos conceptos aprendidos en Métodos Computacionales 1 que serán necesarios para esta segunda parte del curso, y además servir de calentamiento para recordar el uso de Python.

Puede usar cualquier librería que desee.

Los temas específicos son: procesamiento de datos, gráficas, ajustes, interpolación, integrales y optimización.

Datos:

Todos los puntos estarán basados en el siguiente conjunto de datos:

<https://oar.ptb.de/resources/show/10.7795/720.20201118> (también en bloque neón)

Descargue y descomprima el archivo en su carpeta de trabajo. Encontrará tres juegos de espectros de tubos de rayos X con diferente elemento de ánodo — Tungsteno (W), Rodio (Rh) y Molibdeno (Mo) . Estos tubos se utilizan para producir el haz de rayos X que toma la imagen en un mamógrafo.

Para cada elemento, se tienen espectros medidos con diferentes energías en el tubo, que se encuentran indicadas en `kV` (kilovoltios). La primera columna representa la energía (eje x) y la segunda el número de fotones que se midieron a esa energía (eje y).

Los espectros tienen dos características principales: dos o tres picos bastante pronunciados y un continuo de fondo (o “barriga”). El objetivo de este ejercicio es separar las contribuciones de los picos y del continuo, y estudiarlas por separado.

1. Reconocimiento [1pt]

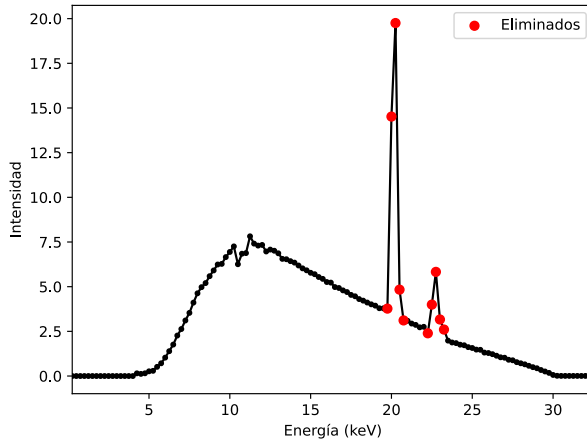
Importe los datos y diseñe una manera de visualizar todas las variables (energía, conteo de fotones, kilovoltaje del tubo y elemento del ánodo) en una gráfica, como si fuera para un artículo científico.

Puede usar cualquier tipo de gráfico. Puede usar color. Puede usar subplots. No tiene que hacer uso de todos los datos, pero se debe poder visualizar el impacto de cada variable. Se calificará creatividad y visibilidad.

Guarde su gráfica con el nombre `1.pdf`. Se recomiendan los parámetros:

```
plt.savefig("1.pdf", bbox_inches="tight", pad_inches=0.1)
```

2. Comportamiento del continuo (Bremsstrahlung) [2.5pt]



2.a. Remover los picos

Cree una copia de los datos originales, y procéselos de tal manera que los puntos correspondientes a los picos queden eliminados.

Haga algunos (dos o tres) subplots con ejemplos distintos de los picos removidos como se muestra en la imagen, pero no necesariamente en el mismo estilo o de la misma forma. Guarde esta gráfica como **2.a.pdf**

2.b. Aproximar el continuo

Con los picos removidos, aproxime la “barriga” de los espectros como mejor se le ocurra; puede usar interpolación, ajustes a alguna función que se le ocurra, o cualquier método de su preferencia.

Como antes, grafique un par de espectros y muestre cómo se ajusta su aproximación continua de la barriga, guarde como **2.b.pdf**

2.c. Analizar el continuo

Con su aproximación, calcule:

- El máximo del continuo (no debe ser un valor del eje y exactamente)
- La energía donde ocurre el máximo (no debe ser un número entero)
- El ancho a media altura del continuo, FWHM (no debe ser un número entero)

Grafique estas tres variables como función del voltaje del tubo, y también grafique el máximo con respecto la energía del máximo. Esto son 4 subplots, donde en cada uno deben estar las tres gráficas de los tres elementos, con leyenda.

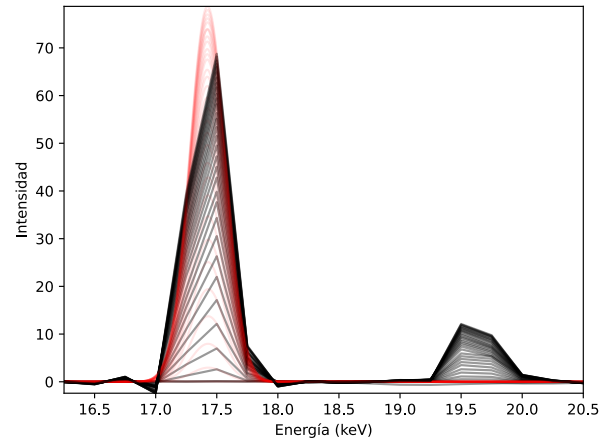
Guarde esta gráfica como **2.c.pdf**

3. Picos (Rayos-X característicos) [2.5pt]

3.a. Aislar los picos

Reste el continuo hallado en el punto anterior al espectro original para obtener, ojalá, sólo los picos.

Grafique sólo los picos de todos los espectros, todos en la misma gráfica, para intentar observar si cambian. Esto para cada elemento, es decir, 3 subplots con título. No queremos ver todo el espectro completo: haga un zoom en el eje x para mostrar sólo las inmediaciones de los picos. Guardar en `3.a.pdf`



3.b. Ajustar

Para el mayor pico de cada espectro, para cada espectro, para cada elemento, ajuste una función. Aquí no se vale interpolar, porque como podrá notar, los picos están mal muestrados, teniendo uno o dos puntos de datos.

Se recomienda un modelo Gaussiano, pero puede usar el que desee, con tal que pueda calcular la altura, el ancho a media altura, y la posición de cada pico.

Grafique la altura del pico y el ancho a media altura en función del voltaje del tubo. Estos dos subplots con los resultados para todos los elementos. Guarde en `3.b.pdf`

(Puede omitir algunos de los espectros iniciales que no presentan picos)

4. Intensidad relativa (bono) [1pt]

Si lee la descripción en la página de los datos, notará que están normalizados, es decir, que su integral da un numero fijo, en este caso 100.

Grafique cómo cambia el porcentaje de área de los picos con respecto al del continuo como función del voltaje del tubo para los diferentes elementos. [4.pdf](#).

Para pensar: ¿qué método cree que usaron para normalizar los datos, Simpson o Trapezoide?