

Métodos Numéricos para la Ciencia e Ingeniería:

Informe Tarea n° 10

María Constanza Flores V.

1 de diciembre de 2015

1. Introducción

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

El objetivo de la presente tarea es modelar las líneas de absorción y el continuo de un segmento del espectro de una fuente.

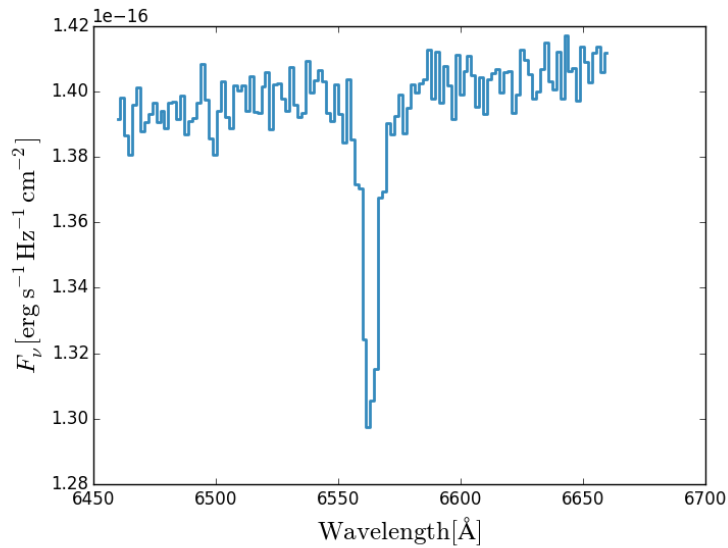


Figura 1: Segmento del espectro, graficado con datos del archivo `espectro.dat`

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

- **Modelo 1:** Se modela la línea como si tuviese forma Gaussiana. El modelo completo corresponde al de una línea recta menos la función Gaussiana. En total se deben modelar 5 parámetros: 2 para la recta (pendiente y coeficiente de posición), y 3 para la función Gaussiana (amplitud, centro y varianza).
- **Modelo 2:** El modelo es el de una línea recta menos un perfil de Lorentz. En total se deben modelar 5 parámetros: 2 para la recta (pendiente y coeficiente de posición), y 3 para el perfil de Lorentz (amplitud, centro y varianza).

En particular, se pide un gráfico que muestre el espectro observado con los mejores fits obtenidos con cada uno de los modelos (gaussiano vs. lorentziano). Y también una tabla con los mejores parámetros de cada modelo (con sus unidades correspondientes) y el valor de χ^2 .

También se busca determinar cuál de los dos modelos anteriores representa mejor a los datos. Para ello se utiliza un test de Kolmogorov-Smirnov para determinar la probabilidad asociada a la hipótesis nula de cada modelo. Dicho test es utilizado para determinar: a) si los modelos son aceptables, y b) cuál modelo es mejor de acuerdo a este test.

2. Procedimiento

En primer lugar, para poder obtener valores , se utiliza la Se utiliza la funcion `curve_fit` de la librería `scipy.optimize` para poder minimizar el valor de χ^2 , y así poder obtener el valores óptimos para los 5 parámetros antes mencionados que definen a cada modelo (pendiente, coeficiente de posición, amplitud, centro y varianza).

Para poder realizar lo anterior, es necesario definirse un set de parámetros iniciales como *adivinanza*, los cuales deben intentar ser cercanos a los parámetros del modelo, debido a que el algoritmo utilizado para minimizar χ^2 es muy sensible a dichos valores iniciales.

Es por ello que para estimar los valores de los parámetros de la recta, se procede a realizar una aproximación lineal con la función `numpy.polyfit`, como se muestra en la Figura 2. Por otro lado, los valores de los parámetros de las funciones Gaussianas y del perfil de Lorentz se estiman a partir de los datos del gráfico (Figura 1).

Los valores utilizados se resumen a continuación:

- Pendiente: $7.38\text{e-}21$ [$\text{erg s}^{-1}\text{Hz}^{-1}\text{cm}^{-2}\text{\AA}^{-1}$]
- Coeficiente de posición: $9.10\text{e-}17$ [$\text{erg s}^{-1}\text{Hz}^{-1}\text{cm}^{-2}$]
- Amplitud: $0.1\text{e-}16$ [$\text{erg s}^{-1}\text{Hz}^{-1}\text{cm}^{-2}\text{\AA}$]
- Centro: 6570 [\AA]
- Varianza: 1 [\AA]

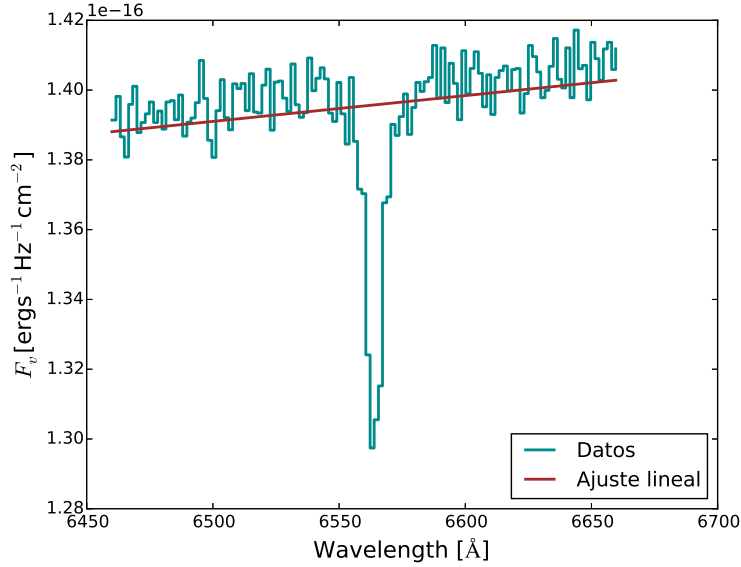


Figura 2: Datos y ajuste lineal realizado para obtener los parámetros de la recta

Luego, para poder obtener el valor de χ^2 para cada uno de los modelos, se crea una función que recibe los datos del archivo, los parámetros óptimos calculados con `curve_fit` para cierto modelo, y la función de dicho modelo, y se retorna el siguiente valor:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^N (y_i - f(x_i, \vec{a}))^2 \quad (1)$$

En donde y_i representa a los valores de F_ν entregado en los datos, x_i los valores de la longitud de onda también entregados en los datos, y $f(x_i, \vec{a})$ los valores de F_ν obtenidos a partir del modelo impuesto y \vec{a} sus parámetros óptimos.

Finalmente, el test de Kolmogorov-Smirnov es utilizado para obtener el máximo valor de D_n , o la máxima distancia vertical entre la función distribución del modelo y la función distribución de los datos. Para la

realización del test, se utiliza la función `kstest` de la librería `scipy.stats`, la cual entrega el valor D_n buscado, y el nivel de confianza asociado. Con ambos datos se puede estimar si los modelos representan de buena forma a los datos o no.

3. Resultados

Al graficar ambos modelos con sus respectivos parámetros óptimos, se obtiene:

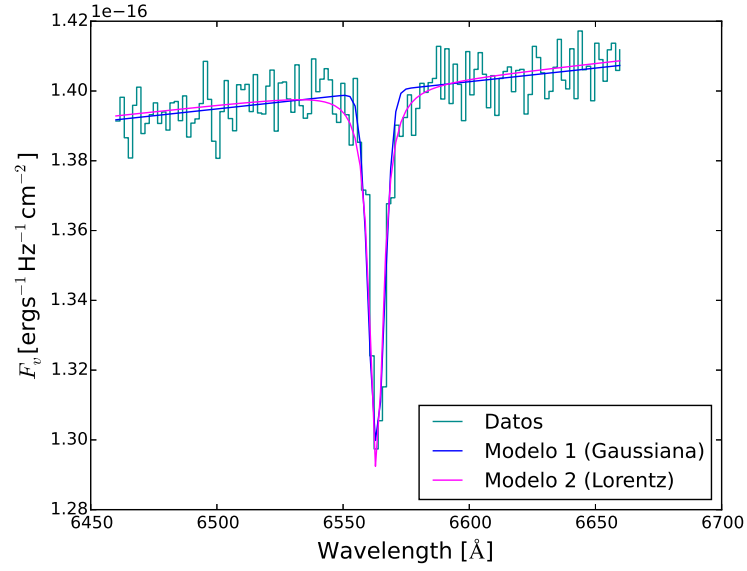


Figura 3: Mejores Fits para cada modelo, y datos

Los datos obtenidos para cada modelo se muestran a continuación:

Cuadro 1: Resultado de los ajustes para los modelos gaussiano y lorentziano

	Modelo 1	Modelo 2
Pendiente [$\text{erg s}^{-1}\text{Hz}^{-1}\text{cm}^{-2}\text{\AA}^{-1}$]	7.80e-21	7.92e-21
Coeficiente de posición [$\text{erg s}^{-1}\text{Hz}^{-1}\text{cm}^{-2}$]	8.88e-17	8.81e-17
Amplitud [$\text{erg s}^{-1}\text{Hz}^{-1}\text{cm}^{-2}\text{\AA}$]	8.22e-17	1.11e-16
Centro [\AA]	6563.22	6563.20
Varianza [\AA]	3.25	3.21
χ^2 [$\text{erg}^2 \text{s}^{-2}\text{Hz}^{-2}\text{cm}^{-4}$]	5.20e-35	5.00e-35
D_n	0.17	0.16
Nivel de confianza	0.0018	0.0032

4. Conclusiones

Al realizar los ajustes de cada uno de los modelos, en la Figura 3 se puede ver que éstos siguen en general la forma de la función que tienen los datos. También, del Cuadro 1 puede concluirse que los valores de los parámetros para ambos modelos son similares, exceptuando el valor de la amplitud, la cual difiere en orden de magnitud, siendo mayor para el modelo Gaussiano.

Pero el hecho de que los ajustes se parezcan a los datos no dice si el modelo es bueno o malo. Para poder determinar aquello, se pueden observar los valores de D_n y los niveles de confianza obtenidos para cada modelo: debido a lo bajo que son los valores de D_n para ambos modelos, es posible estimar que los modelos en general no son aceptables (también esto es posible de concluir debido al bajo nivel de confianza obtenido). Por otro lado, debido a que el D_n obtenido del modelo gaussiano es mayor que el D_n del modelo lorentziano, se podría decir que el primer modelo es *mejor*.