

Informe Tarea 10 - Métodos Numéricos: "Espectros y ensanchamiento de líneas de absorción y emisión"

Ignacio Andrés Sánchez Barraza
Rut: 18933808-2

December 2, 2015

1 Introducción

- En el campo de la astronomía es bastante usual utilizar espectros para determinar la composición de la fuente de luz que se está observando a varios miles de kilómetros de distancia o a unos pocos en la atmósfera terrestre. Estos espectros corresponden a emisiones y absorciones de fotones (luz) por parte de distintas especies atómicas.
- Estos espectros a menudo presentan varias líneas de absorción y emisión, las primeras debido a la emisión de luz por parte del átomo cuando un electrón pasa de un nivel de energía más alto a uno de menor energía emitiendo un fotón (luz) en distintas longitudes de onda. Las segundas corresponden a líneas debido a que la luz incidente sobre el átomo posee la energía suficiente para excitar los electrones del mismo con lo cual el átomo absorbe los fotones, lo que provoca que en un gráfico de flujo vs longitud de onda, se vean líneas en ciertas longitudes.
- Generalmente estas líneas de emisión y absorción son casi infinitamente delgadas (a pesar de que hay un ancho mínimo que proviene del principio de incertidumbre que es bastante pequeño) por lo que para poder ensanchar dichas líneas para su estudio se usan distintos mecanismos de "ensanchamiento". En este informe se analizarán dos tipos de mecanismos, uno de tipo gaussiano y otro lorentziano, usando los módulos *scipy.stats* y *scipy.optimize* de la librería *scipy* para poder modelar el espectro mediante curvas conocidas y analizar cual de los dos mecanismos es mejor en cuanto a modelar un espectro determinado.

2 Procedimiento

- Para proceder primero se deben obtener los datos de una muestra aleatoria entregada por el archivo *espectro.dat* que contiene los flujos y sus longitudes de onda asociadas.
- El problema pide encontrar un modelo tal que este formado por una recta $Ax + B$ con parámetros A y B desconocidos y una curva gaussiana con amplitud C , esperanza μ y varianza σ^2 desconocidas también, tal que el modelo sea la resta entre ambas curvas.
- Para poder realizar esto se hace un *polyfit* de los datos del archivo nombrado anteriormente para obtener una aproximación lineal de los mismos, es decir, se obtienen los parámetros A y B de la recta. Con esto ahora solo basta definir la función gaussiana y encontrar sus parámetros. Primero, como el estimador de la esperanza, en el estudio de probabilidades, es el promedio, se tiene que $\mu = \bar{\lambda}$ (con λ la longitud de onda) y para la varianza se tiene que el estimador corresponde a la desviación estándar al cuadrado, por lo que $\sigma^2 = \frac{\sum_i^2 (x_i - \bar{x})}{n}$ (con σ la desviación estándar). Con ello sólo basta determinar la amplitud de la curva gaussiana a usar como modelo y para ello se toma el valor mas pequeño del espectro siendo en módulo la amplitud máxima de la curva.
- Hecho esto se define el modelo 1 como *Modelo Gaussiano* = $Ax + B - \text{scipy.stats.norm}(loc = \mu, scale = \sigma).pdf(x)$, siendo la función con el módulo *scipy.stat.norm* la función que describe una curva gaussiana. Con esto se obtiene el modelo 1 pedido en el problema.

- Ahora para el siguiente problema se pide realizar un procedimiento análogo pero con un perfil Lorentziano en vez de uno gaussiano. Con esto entonces se procede a usar los mismos parámetros usados en el modelo anterior y utilizar la función definida por el módulo `scipy.stats.cauchy(loc = mu, scale = sigma).pdf(x)` que modelará la curva Lorentziana y con ello se obtiene el modelo 2 de la forma *Modelo Lorentziano* = $Ax - B - \text{scipy.stats.cauchy}(loc = mu, scale = sigma).pdf(x)$.
- Con estos modelos realizados ahora se procede a obtener una curva que minimice una función χ^2 que corresponde a la distribución de los datos del archivo que se está usando. Esto es, minimizar la función $\chi^2 = \sum_i^n (y_i - f_a(x_i))^2$ con f_a las funciones que describen la curva gaussiana y el perfil Lorentziano para $a = 1$ y $a = 2$ respectivamente. Minimizar esta expresión se logra a través del módulo `optimize.curve_fit` de la librería `scipy` que recibe una función modelo y dos arreglos de datos además de parámetros opcionales para obtener la curva que minimiza la expresión anterior y con los parámetros que cumplen dicha aseveración (que no necesariamente son los mismo que se calcularon, pero estos últimos deben ser cercanos a lo esperado para que el algoritmo `scipy.optimize.curve_fit` converja).
- Realizado el proceder anterior se crean los gráficos pertinentes usando el modelo 1 y 2 pero con los parámetros obtenidos ahora con el algoritmo `scipy.optimize.curve_fit`.
- Para obtener que modelo es mejor para resolver el problema se usará la prueba de Kolmogorov-Smirnov, que está implementada en el módulo `scipy.stats` y que entrega los valores de los estadísticos D_n y sus niveles de confianza asociados a cada modelo. Con esto se podrá ver que modelo aceptar sobre el otro.

3 Resultados

- Del proceder anterior se obtienen los siguientes resultados:

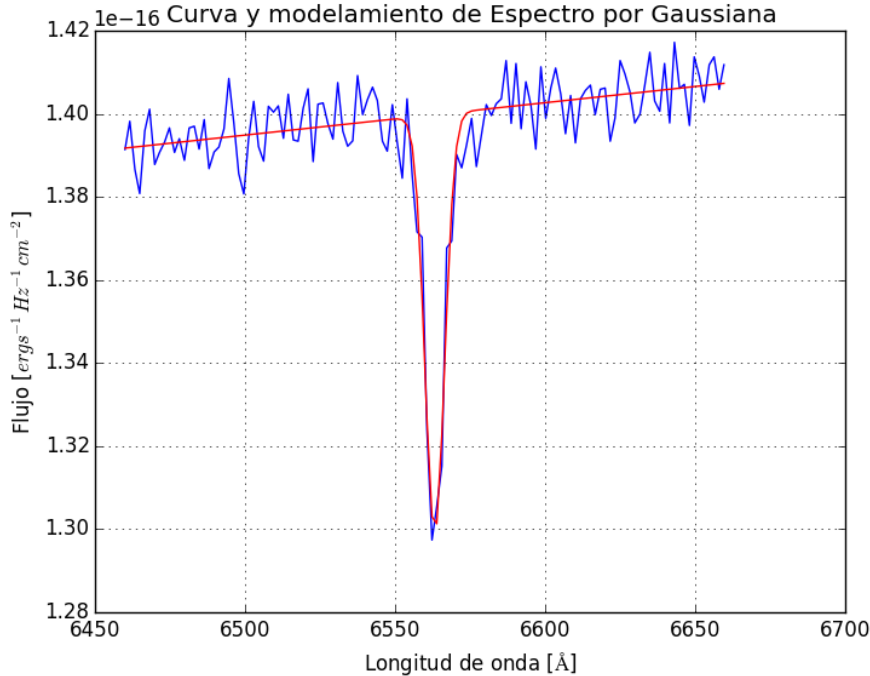


Figure 1: Grafico del modelamiento del espectro mediante el modelo 1, es decir, una recta y una curva gaussiana. En azul se observa el espectro obtenido a partir de los datos y en rojo el modelo Gaussiano asociado.

- Para este modelo 1 se obtuvieron los siguientes parámetros:

Parámetros	Valores
A	7.8025×10^{-21}
B	8.8769×10^{-17}
C	8.2225×10^{-17}
μ	6563.2233 [Å]
σ	3.2580 [$\text{ergs}^{-1} \text{H}_z^{-1} \text{cm}^{-2}$]
χ^2	$5.20410522692 \times 10^{-35}$ [$\text{ergs}^{-1} \text{H}_z^{-1} \text{cm}^{-2}$]
D_n	0.164704918033
Nivel de confianza	0.00232299099583

Table 1: Tabla con los mejores parámetros para el modelo Gaussiano.

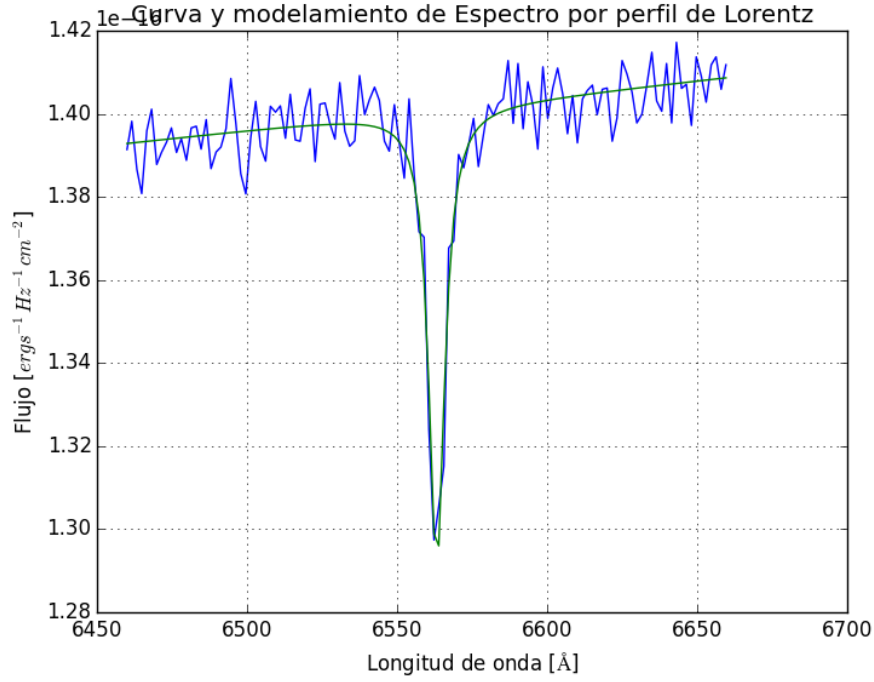


Figure 2: Grafico del modelamiento del espectro mediante el modelo 2, es decir, una recta y un perfil Lorentziano. En azul se observa el espectro obtenido a partir de los datos y en verde el modelo Lorentziano asociado.

- Para este modelo 2 se obtuvieron los siguientes parámetros:

Parámetros	Valores
A	7.9231×10^{-21}
B	8.8112×10^{-17}
C	1.1140×10^{-16}
μ	6563.1999 [Å]
σ	3.2192 [$\text{ergs}^{-1} \text{H}_z^{-1} \text{cm}^{-2}$]
χ^2	$5.00563012014 \times 10^{-35}$ [$\text{ergs}^{-1} \text{H}_z^{-1} \text{cm}^{-2}$]
D_n	0.165672131148
Nivel de confianza	0.00214557056457

Table 2: Tabla con los mejores parámetros para el modelo Lorentziano.

- Ahora juntando ambos gráficos para poder concluir:

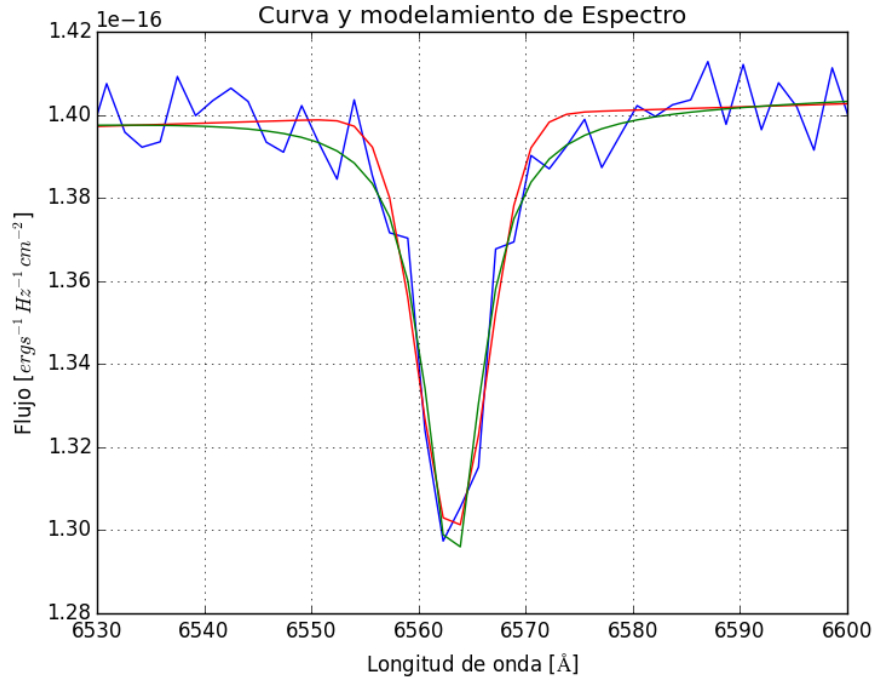


Figure 3: Grafico del modelamiento del espectro mediante el modelo 1 y 2. En azul se observa el espectro obtenido a partir de los datos, en rojo el modelo gaussiano y en verde el modelo Lorentziano, asociados, en un rango de longitudes de onda de 6530 – 6600 [Å].

4 Conclusiones

- Como primera conclusión se puede decir que ambos modelos ajustan de buena manera el espectro continuo ruidoso y la línea de absorción en conjunto que se observa a simple vista, pero el test de K-S da muestra de que este modelo no es lo bastante bueno como para poder tomarlo como buena modelación del espectro. Esto no por el hecho de que se los modelos estén incorrectos en su proceder, sino en el ruido del continuo asociado al espectro.
- A pesar de los bajos niveles de confianza de ambos modelos, se puede ver que a pesar del ruido modelan satisfactoriamente lo que se esperaría al graficar los datos del espectro por sí solos.
- Como conclusión final cabe destacar que en el campo de la espectroscopía estos ruidos son caracterizados y retirados de las mediciones para poder obtener resultados cercanos a la realidad en cuanto a mediciones precisas, debido a que el ruido en estos espectros se debe en mayor parte a ruido de instrumentos o bien a ruido obtenido debido a contaminación de distintas especies atómicas en una misma muestra, como es el caso de observar una estrella a través de la atmósfera terrestre y que los componentes propios de la misma interfieran con las líneas de absorción y emisión, que se verían sin esos obstáculos, en la superficie de las estrellas.