Métodos Numéricos para la Ciencia y la Ingeniería

Camila Castillo Pinto. RUT 18.889.762-2

01 de Diciembre, 2015.

1 Introducción Parte 1

En esta parte se pedía modelar simultáneamente el contínuo y la línea de absorción, cuyos datos se encuentran en el archivo *espectro.dat*. El espectro se muestra en la figura 1.

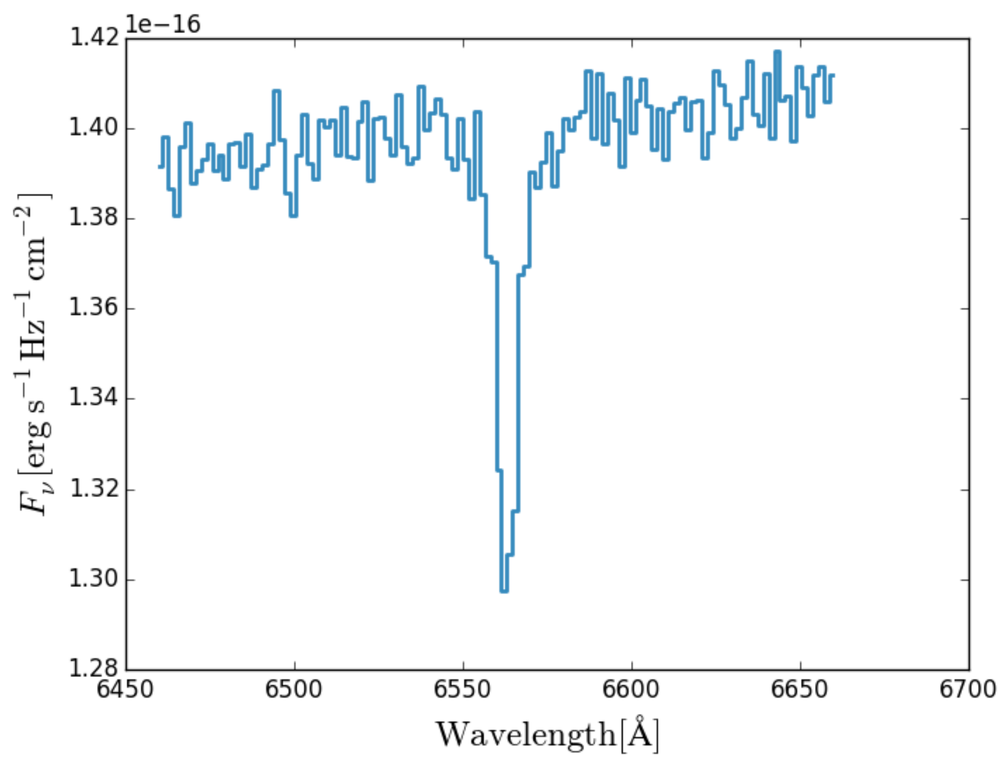

Figure 1: Gráfico de flujo de frecuencia f_ν versus la longitud de onda. Datos experimentales.

Las líneas de absorción son casi infinitamente delgadas, sin embargo, las observaciones siempre muestran líneas mucho más anchas. Luego, se pedía modelar la línea asumiendo los dos mecanismos de ensanchamiento ms típicos:

1. **Modelar la línea como una Gaussiana:** el modelo completo será el de una línea recta $y = a \cdot x + b$, menos una función gaussiana con 3 parámetros: amplitud A_{gauss}, centro μ_{gauss} y varianza σ_{gauss}.
2. **Modelar la línea como un perfil de Lorentz:** el modelo será el de una línea recta, pero esta vez menos un perfil de Lorentz que tiene 3 parámetros: amplitud $A_{lorentz}$, centro $\mu_{lorentz}$ y varianza $\sigma_{lorentz}$.

1.1 Procedimiento

En primer lugar, se cargaron los datos desde el archivo *espectro.dat*. Luego se buscó los parámetros que minimizaban la función resta entre los datos experimentales y la función modelo previamente definida, para lo cual se utilizó el comando *curve_fit*, y se le entregó una adivinanza:

$$(a, b, A, \mu, \sigma_{)} = (0, 1.39 \cdot 10^{-16}, 0.1 \cdot 10^{-16}, 6560, 10) \tag{1}$$

Se utilizó la misma adivinanza para ambos modelamientos (Gauss y Lorentz). Esta adivinanza se escogió observando la figura 1 que muestra los datos experimentales y estimando los distintos valores, por ejemplo para estimar a y b fue necesario imaginar una recta que pasara cerca de los datos experimentales; mientras que para estimar A, μ y σ fue necesario observar el punto más bajo que muestra la figura 1, dónde está centrada y entre qué valores se encuentra la dispersión de los datos, respectivamente.

La función modelo para el caso 1 correspondía a la función resta entre una línea recta y una gaussiana. Y para el caso 2 correspondía a la función resta entre una línea recta y un perfil de Lorentz.

Curve_fit devuelve los parámetros que minimizan y se ajustan mejor a los datos, tanto para la recta como para la función gaussiana o perfil de Lorentz (para modelo 1 y 2, respectivamente).

Para calcular el valor de χ^2 se tomaron los datos experimentales, luego se evaluó la función modelo en los datos correspondientes al eje x (longitud de onda) y con los parámetros óptimos encontrados. Después se calculó el cuadrado de la resta entre la función modelo evaluada (como se mencionó anteriormente) y los datos experimentales correspondientes al eje y (flujo de frecuencia), lo cual nos entrega un vector con valores para cada cuadrado de la resta. El valor de χ^2 queda determinado finalmente como la suma de todos los valores del vector.

Finalmente se plotearon los datos experimentales y el modelo de la línea usando la función gaussiana y la función del perfil de Lorentz.

1.2 Resultados y Análisis

El gráfico de la figura 2 presenta los datos experimentales y el modelo obtenido para la función gaussiana y para la función del perfil de Lorentz.

Los parámetros que se obtuvieron, tras minimizar la función resta entre la recta y la gaussiana, o entre la recta y el perfil de Lorentz, se muestran en la Tabla 1.

Finalmente el valor obtenido para χ^2 fue de:

$$\chi^2_{gauss} = 5.204 \cdot 10^{-35} \tag{2}$$

$$\chi^2_{lorentz} = 5.005 \cdot 10^{-35} \tag{3}$$

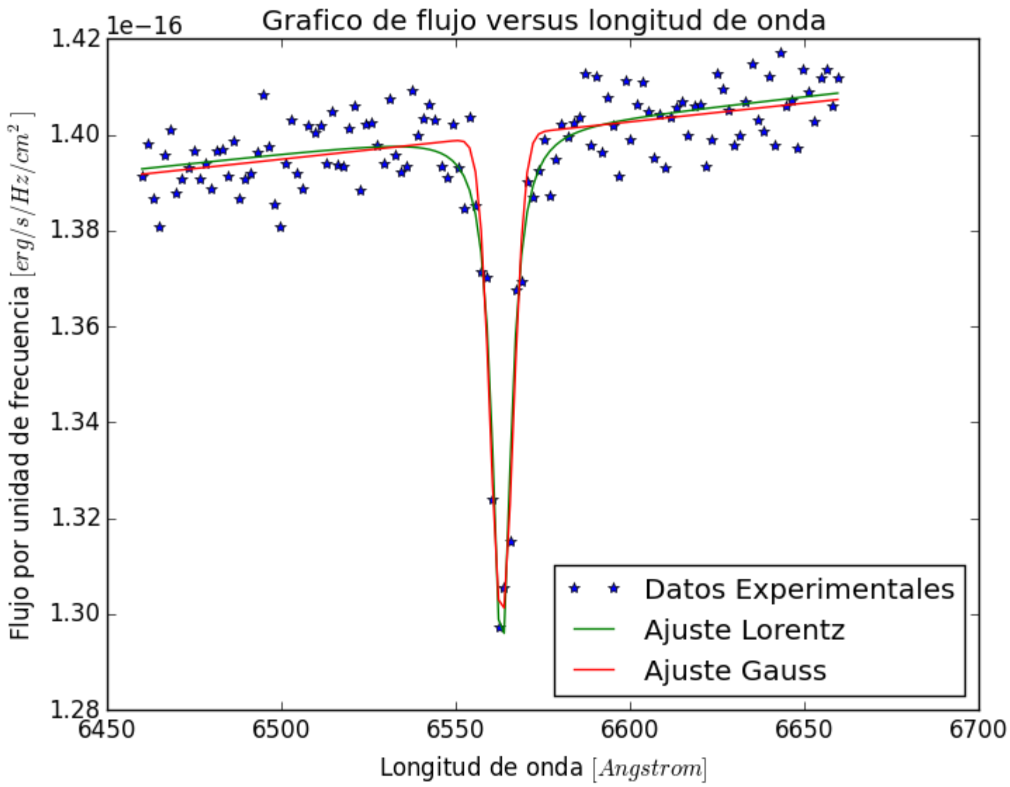

Figure 2: Gráfico de flujo de frecuencia f_ν versus la longitud de onda.

Table 1: Valores obtenidos para los parámetros a, b, A, μ, σ, con el modelo de la función gaussiana y con el modelo del perfil de Lorentz.

Modelo	$a[erg/s/Hz/cm^2/\mathring{A}]$	$b[erg/s/Hz/cm^2]$	$A[erg/s/Hz/cm^2]$	$\mu[\mathring{A}]$	$\sigma[\mathring{A}]$
Gauss	$7.802 \cdot 10^{-21}$	$8.876 \cdot 10^{-17}$	$8.222 \cdot 10^{-17}$	$6.563 \cdot 10^3$	3.258
Perfil de Lorentz	$7.923 \cdot 10^{-21}$	$8.811 \cdot 10^{-17}$	$1.114 \cdot 10^{-16}$	$6.563 \cdot 10^3$	3.219

2 Introducción Parte 2

En esta parte se pedía determinar cuál de los dos modelos anteriores representa mejor a los datos. Para ello se pedía utilizar el test de Kolmogorov-Smirnov (que no depende de los errores) para determinar: *a*) si los modelos son aceptables, y *b*) cuál modelo es mejor de acuerdo a este test.

2.1 Procedimiento

Se utilizó el comando *kstest* de Python, para calcular los valores de D_n para cada uno de los métodos y su nivel de confianza. Luego se calculó el D_α que corresponde a un valor crítico con el cual se compara los valores de D_n obtenidos. Si D_n es menor o igual a D_α entonces el modelo es un buen ajuste a los datos experimentales; en caso contrario, el modelo se rechaza.

En este caso se utilizó $\alpha = 0.05$ para calcular el D_α.

Además se construyeron funciones de probabilidad acumulada para cada método, la cual fue graficada y sirvió también para calcular los D_n.

2.2 Resultados y Análisis

Se calcularon los valores de D_n para cada método: Gauss y Lorentz; y los resultados, junto con sus niveles de confianza, fueron los siguientes (respectivamente):

$$D_n = 0.1647 \tag{4}$$

Nivel de confianza Gauss= 0.0023

$$D_n = 0.1656 \tag{5}$$

Nivel de confianza Lorentz = 0.0021

Además se calculó el valor de D_α, que corresponde al valor de D_n crítico, para el cual se rechaza o se acepta la hipótesis.

$$D_\alpha = 0.1229 \tag{6}$$

Se observa que los valores encontrados para D_n para cada método son mayores que el D_α.

En la figura 3 se presentan los gráficos de la probabilidad acumulada para cada caso.

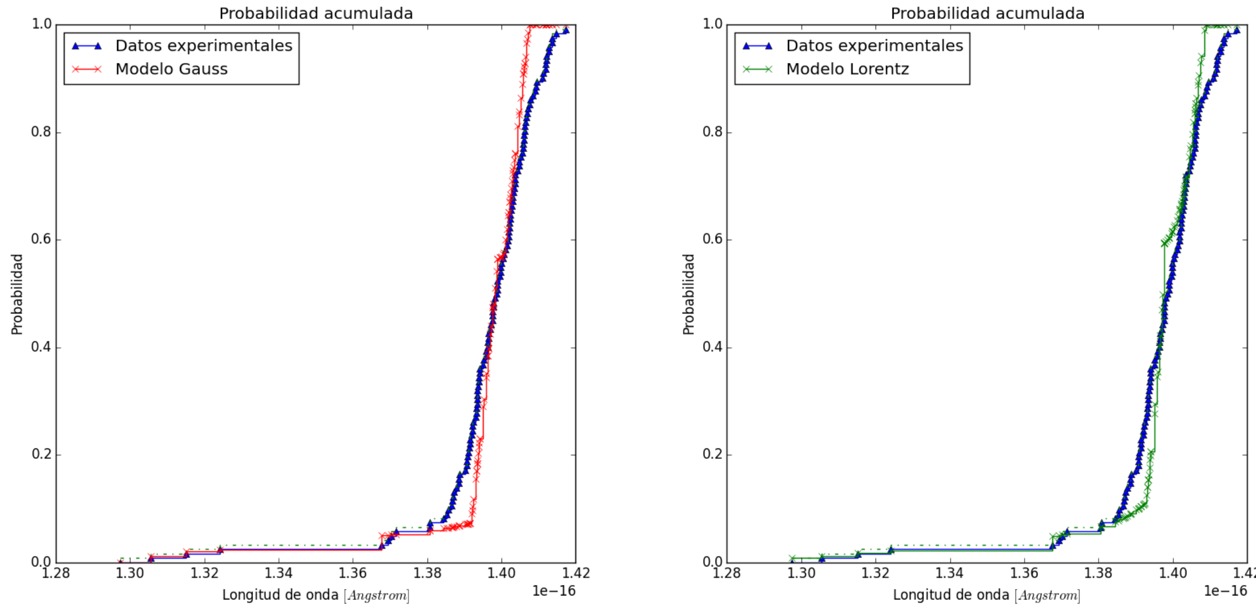

Figure 3: Probabilidad acumulada para el caso de Gauss y de Lorentz.

3 Conclusiones

De la parte 1 se concluye que los parámetros encontrados para cada mecanismo se ajustan, a priori, a la forma que presentan los datos experimentales (ver figura 2). Se comprueba que la adivinanza inicial es cercana a los parámetros óptimos obtenidos. Los resultados obtenidos para los parámetros según el modelo de Gauss y el modelo de Lorentz no difieren en gran medida entre un modelo y el otro. Los valores de χ^2 para ambos modelos son parecidos y aproximadamente toman el valor de cero, lo cual era lo esperado ya que este valor corresponde a la función que se desea **minimizar** evaluada en los parámetros óptimos encontrados y en los datos experimentales.

De la parte 2 se concluye que bajo el test de Kolmogorov-Smirnov, ninguno de los dos modelos se ajusta bien a los datos experimentales, bajo el D_α crítico que se encontró para este caso, ya que para ambos modelos el D_n calculado era mayor que el D_α. Luego los modelos son rechazados. Además es importante notar que los niveles de confianza para cada modelo son bastante malos, por lo que tampoco se pueden considerar un buen ajuste.