Tarea 10 - Métodos Numéricos

Luz Agüero Contreras 18.355.502-2 Profesor: Valentino Gonzales Auxiliar: Felipe Pesce

Diciembre 2015

1 Introducción

Se facilitó un conjunto de datos de un espectro, que se compone de longitud de onda [Angstrom] y flujo por unidad de frecuencia $[\frac{erg}{s\cdot Hz\cdot cm^2}]$:

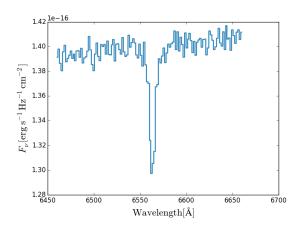


Figure 1: Espectro generado a partir del archivo espectro.dat

Se pidió modelar el contínuo y la línea de absorción utilizando 2 mecanismos de ensanchamiento, los cuales se modelan de la siguiente forma:

1. Forma Gaussiana:

$$ax + b - \frac{A}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \tag{1}$$

2. Perfil de Lorentz:

$$ax + b - \frac{A}{\pi\sigma(1 + (\frac{x-\mu}{2})^2)}$$
 (2)

En una segunda parte, para determinar si los mecanismos son fiables o no y , además, saber cual es el mejor, se pidió realizar el Test de "Kolmogorov-Smirnov", el cual se encuentra en la libreria scipy.stats.

2 Procedimiento

Para implementar las ecuaciones (1) y (2), se crearon funciones que recibieran un conjunto de semillas (seeds) de la forma $[x,a,b,A,\mu,\sigma]$ y retornaran el modelo correspondiente. Además se crearon funciones que calcularan los parametros más optimos por medio de la función curve_fit de la librería scipy.optimize y retornaran el valor χ^2 correspondiente a cada modelo.

Se definieron distintas funciones para la comparación final, se buscaron los residuos correspondientes a cada modelo, para posteriormente minimizarlos por medio de la función leastsq de la librería scipy.optimize. Finalmente se definió una función para el test K-S que retornara el nivel de confianza para cada modelo.

Para determinar la adivinanza inicial (parametro "seeds") se impusieron a partir del gráfico, partiendo por la amplitud que es del orden de $A=1\cdot 10^{-17}$, del ajuste lineal se determina a y b, μ es el promedio y σ es la desviación estandar, ambos del arreglo de longitud de onda.

3 Resultados

Se presentan los resultados del programa:

Parametro	Valor
a	$8.87694 \cdot 10^{-17}$
b	$7.80260 \cdot 10^{-21}$
A	$8.22264 \cdot 10^{-17}$
μ	6563.22331
σ	3.25812
χ^2	$5.20411 \cdot 10^{-35}$
Nivel Confianza	0.00232

Table 1: Parametros calculados para el ajuste Gaussiano

Parametro	Valor
a	$8.81126 \cdot 10^{-17}$
b	$7.92311 \cdot 10^{-21}$
A	$1.11401 \cdot 10^{-16}$
μ	6563.19998
σ	3.21925
χ^2	$5.00563 \cdot 10^{-35}$
Nivel Confianza	0.00215

Table 2: Parametros calculados para el ajuste Lorentziano

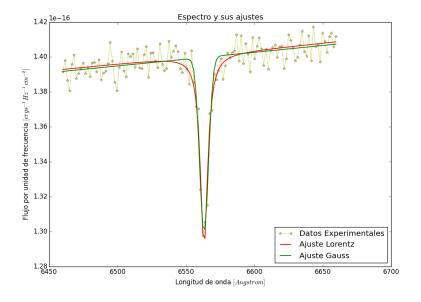


Figure 2: Gráfico Espectro, comparación del ajuste Gaussiano vs Lorentziano

4 Conclusiones

De la tabla 1 y tabla 2 se puede notar que no hay diferencias significativas entre los χ^2 de cada modelo, lo cual no ayuda a determinar qué modelo representa mejor la muestra de datos. Ahora, mirando la figura 2, a primera vista se podría concluir que ambos modelos tienen una concordancia con respecto a la tendencia de la muestra, pero mirando más en detalle se puede notar que el ajuste del perfil de Lorentz tiene una forma más suave y levemente más congruente con los datos experimentales. Por otro lado, el nivel de confianza arrojado por el test K-S, para ambos mecanismos, es muy bajo, por lo que se concluye finalmente que ninguno es realmente óptimo, (pero el menos malo, es el de gauss :)) . Quizas lo que produce este mal resultado, se deba a la variedad o ruido que se encuentra en el "continuo", ya que son muchos puntos fuera (y lejos) de la recta, mientras que en la linea de absorción la mayoria se pueden fitear fácilmente.