

Métodos numéricos para la ciencia e Ingeniería:

Informe Tarea 10

José Guillermo Araya

1 de diciembre de 2015

1. Pregunta 1

1.1. Introducción

a 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 esta pregunta es encontrar el set de parámetros que minimicen el error al modelar una línea de absorción a partir de los datos entregados, para dos modelos, el primero que consiste en una recta más una gaussiana y otro compuesto de una recta y un perfil de lorentz.

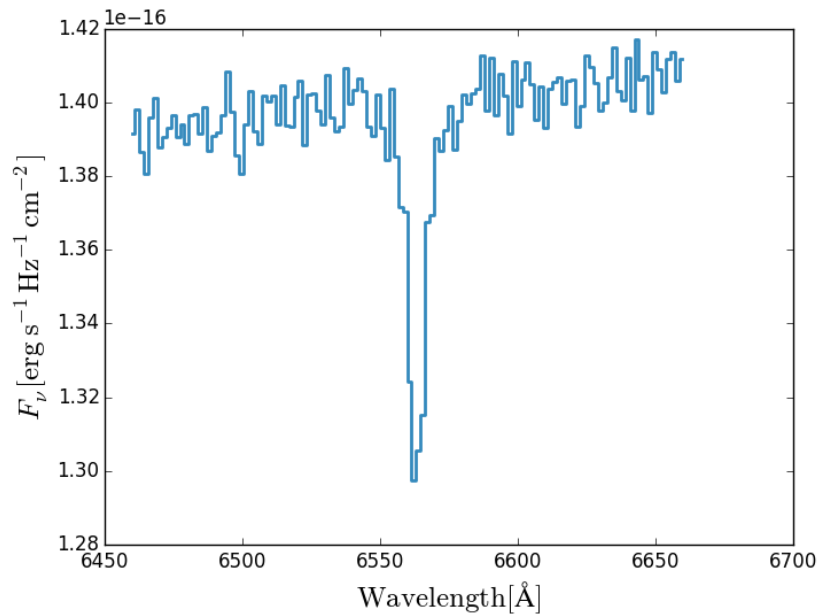


Figura 1: gráfico de los datos de espectro.dat

1.2. Procedimiento

Para encontrar los parámetros óptimos para cada modelo, en primer lugar se crea un método que retorna la forma de la función modelo, este método recibe el x donde va evaluada la función y los parámetros de esta. por ejemplo para el caso gaussiano:

`modelo(x, m, n, A, μ , σ): n + m * x + A * norm(loc= μ , scale= σ).pdf(x)`

También es necesario encontrar valores aproximados para la pendiente, la amplitud, etc. Como no se pide estrictamente un valor preciso, calcularemos los parámetros iniciales como sigue:

- Pendiente de la recta: $\frac{(y_{fin}-y_{in})}{(x_{fin}-x_{in})}$ donde se ocupan los valores de los extremos de la muestra.
- coef de posición : 1 por simplicidad (suficientemente cerca de 0)
- Amplitud : 1e-16 (escala del plot)
- Centro : 6550 (valor estimado del plot)
- Varianza : 10 (estimación desde el plot)

con estos parámetros podemos utilizar la función `curve_fit` de `scipy` obteniendo los parámetros óptimos. Con estos parámetros podemos generar un set de datos para graficar, simplemente usando un arreglo de valores x y luego evaluarlos en la función modelo con los parámetros obtenidos.

Para obtener el valor de chi cuadrado del modelo óptimo se crea una función que recibe los datos desde el archivo, el modelo a evaluar y los parámetros óptimos. crea un arreglo de valores z^a partir de los valores x del archivo evaluando en la función modelo con los parámetros óptimos, finalmente se calcula:

$$\chi^2 = \sum (y_{datos}^i - y_{modelo}^i)^2$$

1.3. Resultados

De ocupar la función `curve_fit` para ambos modelos se obtienen los siguientes parámetros óptimos:

Modelo	Pendiente	Coef de posición	Amplitud	Centro	Varianza	χ^2
Lorentz	7.92e-21	8.81e-17	1.11e-16	6563.2	3.22	5.01e-35
Gauss	7.8e-21	8.87e-17	8.22e-17	6563.22	3.26	5.20e-35

Cuadro 1: Parámetros óptimos y valor de χ^2

Graficando ambos modelos con los parámetros óptimos obtenidos se tiene:

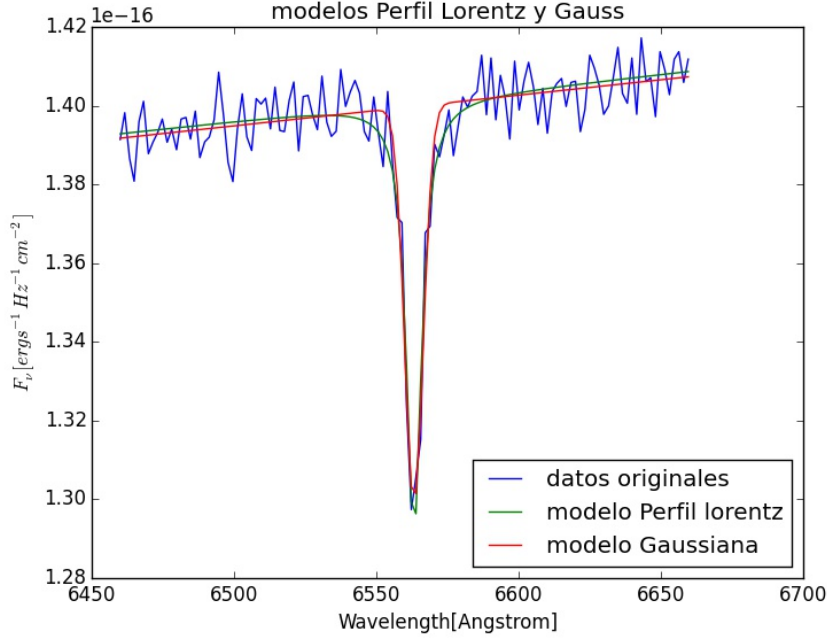


Figura 2: plot de ambos modelos y los datos del archivo

1.4. Conclusiones

Ambas modelos aproximan medianamente bien los datos del archivo, en especial la línea de absorción. con diferencias mínimas entre ellos, el modelo con gaussiana es menos angosto para valores menores de F_ν , pero más angosto para valores mayores, al contrario del modelo con perfil de Lorentz.

El valor de χ^2 es menor en el modelo con perfil de Lorentz que en el de gauss, lo que no es suficiente para determinar si es un mejor modelo (los errores no son gaussianos), esto se verá en la pregunta 2.

Ambas funciones aproximan de manera insatisfactoria la parte de la recta”, en gran parte por los errores asociados en los datos que oscilan mucho entorno a la recta.

2. Pregunta 2

2.1. Introducción

Esta parte de la tarea consiste en determinar cuál de los dos modelos es mejor utilizando un test de Kolmogorov-Smirnov.

2.2. Procedimiento

Para realizar el test K-S, se debe en primera instancia construir la función probabilidad acumulada para ambos modelos, para esto se genera un set de datos x entre x_{min} y x_{max} , luego el set se evalúa en el modelo y se ordena

con ".sort", paralelamente se ordenan los valores τ de los datos. Con los datos ordenados se efectúa la suma de los τ hasta cada valor x , obteniendo la función que se quería.

Finalmente se utiliza la función "kstest" de scipy para obtener el " $D_n\tau$ " el nivel de confianza para cada modelo.

2.3. Resultados

graficando la función probabilidad acumulada para ambos modelos y para los datos se obtiene:

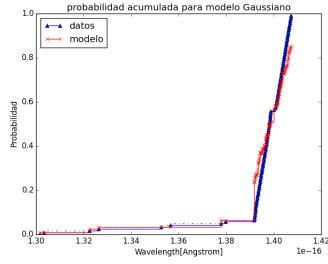


Figura 3: función distribución acumulada para el modelo Gaussiano

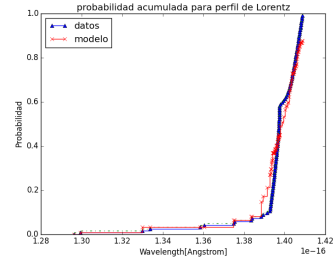


Figura 4: función distribución acumulada para el modelo de Lorentz

Los resultados del test K-S son:

Modelo	D_n	Confianza
Lorentz	0.164	0.0025
Gauss	0.172	0.0013

Cuadro 2: Resultados del test K-S

2.4. Conclusiones

Podemos concluir que ambos modelos son comparables en lo malo de su aproximación, de acuerdo a las bajas confianzas que se obtienen del test, sin embargo, el modelo de la recta con el perfil de Lorentz tiene un valor mayor en el nivel de confianza, por lo que podemos decir que el modelo de Lorentz es menos malo que la recta y la Gaussiana. Por lo tanto el proceso físico que modelamos es más probable que venga de aquel descrito por el perfil de Lorentz.

Sería interesante observar que tanto daña el nivel de confianza los tramos de la recta (ya que son donde los datos se alejan más del modelo), queda propuesto, analizar solo valores cercanos a la línea de absorción donde ambos modelos parecieran aproximar más cercanamente los datos.