

# Métodos Numéricos para la Ciencia e Ingeniería

## FI3104-1

### Tarea 10

Maximiliano Dirk Vega Aguilera  
18.451.231-9

## 1 Introducción

La tarea 10 consistió en modelar una línea de absorción de un segmento del espectro electromagnético como la resta de una recta que representa el continuo y cierto perfil que representa la curva de absorción. El ajuste a la curva de absorción se realizó con dos modelos de ensanchamiento distintos, un perfil gaussiano y un perfil lorentziano. Finalmente se realizó un test de Kolmogorov-Smirnov para determinar si los modelos son aceptables y cual de los modelos es mejor. Adicionalmente, se debió escribir el programa de forma que cumpliera las reglas de PEP8.

Los átomos y moléculas emiten fotones de distintas energías dependiendo del nivel de energía en el que se encontraba el electrón emisor, si son generadas por salto en los niveles de energía, o la energía liberada en otro proceso, como la fusión. Estas líneas de emisión son en teoría infinitamente delgadas, ensanchadas únicamente por el principio de incertidumbre de Heisenberg. El conjunto las distintas líneas generadas produce un espectro de líneas de emisión, las cuales se ven ensanchadas por el efecto Doppler térmico, el efecto Stark, entre otros. El ensanchamiento provocado por dichos efectos genera un espectro continuo cuya intensidad según longitud de onda depende de la temperatura a la que se encuentra el emisor.

Un electrón en un átomo o molécula puede saltar de un nivel de energía a otro absorbiendo un fotón, si este tiene la energía justa. Cuando un espectro continuo entra en contacto con uno de estos electrones, perderá un fotón que dependerá de la energía que requiera dicho electrón para poder cambiar de nivel de energía, generando una línea de absorción, también infinitamente delgada y ensanchada por el principio de incertidumbre. Si hay varios de estos electrones cuya energía requerida es similar, la línea de absorción se ensanchará por los efectos de ensanchamiento ya mencionados. Luego, el espectro resultante será el correspondiente al continuo con líneas de absorción. En esta tarea se trabajó con la línea de absorción  $H_\alpha$  correspondiente a una longitud de onda de 6563 [Å].

Para modelar el espectro, se aproximó el continuo como una línea recta mientras que la línea de absorción se modeló según un perfil gaussiano y un perfil lorentziano. Luego de obtener los parámetros para ambos modelos, se aplicó el test de Kolmogorov-Smirnov para determinar que tan aceptables son y ver cual es el mejor.

$$y = a + bx - A \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(\frac{-(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (1)$$

$$y = a + bx - A \frac{1}{\pi\sigma} \frac{1}{1 + \frac{(x-\mu)^2}{\sigma^2}} \quad (2)$$

El perfil gaussiano se modeló como una recta menos una gaussiana y el perfil lorentziano como una recta menos una lorentziana, donde los parámetros representan lo mismo en ambos ajustes:  $a$  y  $b$  son los parámetros de la recta, correspondientes al coeficiente de posición y la pendiente respectivamente,  $A$ ,  $\mu$  y  $\sigma$  son los parámetros de los ajustes a la línea de absorción, correspondientes a la amplitud, el centro y la varianza respectivamente.

El test de Kolmogorov-Smirnov permite determinar la bondad de ajuste de dos distribuciones entre sí. Para ello usa la distancia máxima entre la función de distribución acumulada (cdf) del modelo y de los datos y los compara una distancia crítica para cierto nivel de confianza  $\alpha$ . En esta tarea se utilizó un  $\alpha = 5\%$  correspondiente a la probabilidad de rechazar el modelo cuando este es válido, este valor es el aceptado de forma general por la convención.

## 2 Desarrollo

Para el desarrollo de esta tarea se utilizó el lenguaje de programación python y sus paquetes numpy, matplotlib y scipy.

Primero se leyeron los datos y se los asignó a variables. Utilizando la función `curve_fit` de `scipy.optimize` se realizó un primer ajuste sin entregarle punto de partida, dicho ajuste entregó una línea recta. Se tomaron los parámetros de dicha recta como punto de partida para los parámetros de la recta y se estimó los de los perfiles a ojo a partir del gráfico de los datos. Se obtuvo los parámetros con `curve_fit` y se graficó la curva de los ajustes según las ecuaciones (1) y (2), utilizando las funciones de `scipy.stats` `norm` para la gaussiana y `cauchy` para la lorentziana. Se obtuvo el gráfico de la figura 1 y los parámetros de la tabla 1.  $\chi^2$  se obtuvo a partir de la definición que no considera el error:

$$\chi^2 = \sum (y - f(x))^2 \quad (3)$$

En la figura 1 se aprecia la la recta se ajusta más o menos bien al continuo, a pesar de la dispersión de los datos, el ajuste lorentziano tiene una pendiente más suave al inicio de la línea de absorción que el ajuste gaussiano, pero ambos la modelan bastante bien.

Para la segunda parte se calculó la cdf para los datos y para ambos modelos utilizados, estas curvas se pueden apreciar en las figuras 2 y 3. Luego se calculó la distancia máxima ( $D_n$ ) en probabilidad, y se comparó con la distancia  $D_n$  crítica al 5%. Esta distancia crítica se obtuvo a partir del paquete `scipy.stats.kststobign` usando la función de la inversa de la cdf y determinando el valor que se encuentra al 0.95 de dicha función. Finalmente se calcula el nivel de confianza para el  $D_n$  calculado. Adicionalmente se realizó el cálculo de  $D_n$  y del

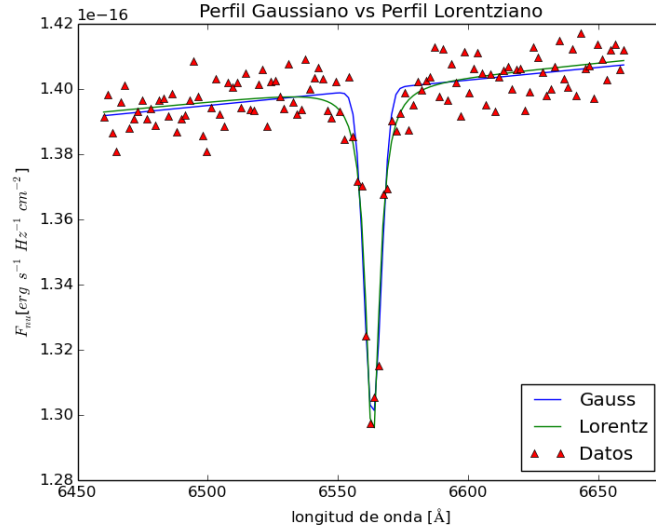


Figure 1: Gráfico de flujo versus longitud de onda. Se puede observar la dispersión de los datos experimentales (representados por triángulos rojos) y ajustes de perfil gaussiano (línea azul) y lorentziano (línea verde).

	Gauss	Lorentz
a [ $\text{erg s}^{-1} \text{Hz}^{-1} \text{cm}^{-2}$ ]	8.87e-17	8.81e-17
b [ $\text{erg s}^{-1} \text{Hz}^{-1} \text{cm}^{-2} \text{\AA}^{-1}$ ]	7.80e-21	7.92e-21
A [ $\text{erg s}^{-1} \text{Hz}^{-1} \text{cm}^{-2} \text{\AA}$ ]	8.22e-17	1.11e-16
$\mu$ [ $\text{\AA}$ ]	6563.22	6563.19
$\sigma$ [ $\text{\AA}$ ]	3.25	3.21
$\chi^2$ [ $\text{erg}^2 \text{s}^{-2} \text{Hz}^{-2} \text{cm}^{-4}$ ]	5.20e-35	5.00e-35

Table 1: Parámetros obtenidos para cada ajuste de modelo según la función curve\_fit. Para su obtención fue necesario ingresar parámetros de partida cercanos a los valores finales, debido a la escala de números en que se está trabajando.

nivel de confianza usando la función de scipy.stats.kstest, obteniéndose los resultados de la tabla 2.

	$D_n$	$D_n$ crítico	Nivel de Confianza	$D_{n2}$	Nivel de Confianza 2
Gauss	0.1647	0.1229	0.0026	0.1647	0.0023
Lorentz	0.1661	0.1229	0.0023	0.1661	0.0020

Table 2: Parámetros del test de Kolmogorov-Smirnov.  $D_n$  representa la distancia máxima entre las cdf experimental y de cada modelo respectivamente. Para ambas se tiene la misma distancia crítica pues exigimos el mismo porcentaje de confianza en ambos. El Nivel de Confianza representa el parámetro  $1 - \alpha$ . El parámetro  $D_{n2}$  representa la distancia máxima encontrada entre las CDF por la función kstest. Nivel de confianza 2 es el nivel de confianza encontrar por kstest.

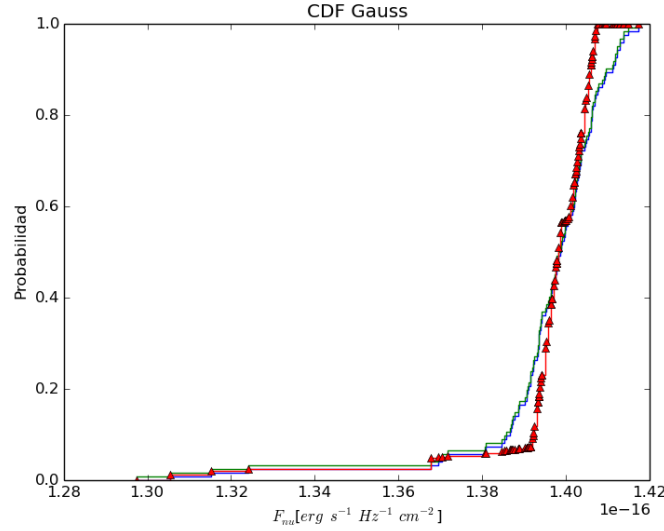


Figure 2: Comparación de la cdf del perfil gaussiano y la cdf obtenida a partir de los datos. La curva roja corresponde a la cdf del ajuste.

En la tabla 2 podemos apreciar que los  $D_n$  para el ajuste gaussiano y para el lorentziano son mayores al  $D_n$  crítico, por lo que se deben rechazar ambos modelos. A si mismo, los niveles de confianza de ambos modelos son bajos, siendo el del ajuste lorentziano menor, luego, el ajuste gaussiano es el menos malo entre ambos, a pesar de que en la tabla 1 se aprecia que el ajuste de lorentz minimiza mejor  $\chi^2$ .

### 3 Conclusión

A pesar de que ambos modelos parecieran ajustar bastante bien los datos, el test de Kolmogorov-Smirnov nos indica que no son aceptables. Esto se puede deber al ruido presente en la parte del continuo de los datos, ya que ambos modelos se ajustan bastante bien a la línea de absorción. Por lo mismo, el test también nos indica que el ajuste de la gaussiana es menos malo que el ajuste de la lorentziana, ya que la gaussiana considera menos puntos de la parte continua, y por ende, registra menos ruido.

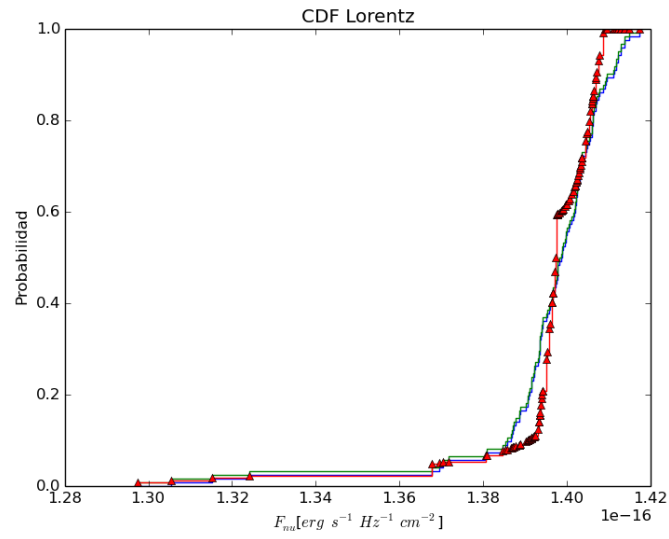


Figure 3: Comparación de la cdf del perfil lorentziano y la cdf obtenida a partir de los datos. La corresponde a la cdf del ajuste.