

FI3104 Métodos Numéricos para la Ciencia e Ingeniería

Tarea 10

Camila Sandivari

Profesor: Valentino Gonzalez

Profesor Auxiliar: Felipe Pesce

(Dated: 1 de diciembre de 2015)

En el presente reporte mostraremos el análisis y ajuste de un espectro utilizando dos modelos distintos, uno utiliza la Gaussiana y el otro un perfil de Lorentz. La espectroscopía estudia la interacción de las ondas electromagnéticas con la materia como absorción o emisión de energía radiante, en este caso, vemos una línea de absorción e intentamos simularla lo mejor posible, para esto optimizamos la función que define la diferencia entre los modelos y los datos. Podemos aprender también el método de test de Kolmogorov-Smirnov para evaluar cual de los métodos se ajusta mejor a los datos.

Procedimiento

Parte 1 Se utiliza como modelo una línea recta (1) y se le sustrae una Gaussiana (2) en el caso (a) y un perfil de Lorentz (3) en el caso (b). Para implementar las funciones se utiliza el paquete *scipy.stats*, en el caso de la Gaussiana es *scipy.stats.norm* y el Perfil de Lorentz es *scipy.stats.cauchy*. Ambas reciben como parámetros la amplitud A , la varianza σ y el centro μ . Entonces se tienen cinco parámetros para cada modelo, los tres parámetros de las funciones (Gaussiana, Perfil de Lorentz) y los dos parámetros de la línea recta a y b . Una vez establecido el modelo, se minimiza la función de χ^2 correspondiente mediante la función *Leastsq* del paquete *optimize* (Como se explicó en el reporte anterior esta función minimiza χ^2 usando el método levenberg-marquardt), esto nos entrega los cinco parámetros que optimizan cada ajuste.

Volviendo a los modelos, con los parámetros adecuados, se grafica ambos sobre los datos y observar el ajuste.

$$y = ax + b \quad (1)$$

$$f(x) = a \exp(-(x - b)^2 / 2c^2) \quad (2)$$

$$f(x) = \frac{1}{\pi(x^2 + 1)} \quad (3)$$

Parte 2 Para evaluar si los métodos son buenos o no, más aún, para evaluar cual de los dos es "mejor" se utiliza un test de Kolmogorov-Smirnov, que esta implementado en el paquete *scipy.stats* como *kstest*.

Resultados

Parte 1 Cuando se minimiza χ^2 se obtienen los parámetros para ambos métodos, se pueden observar en el cuadro 1, incluyendo la correspondiente minimización. Con estos parámetros se encuentran los ajustes, la figura 1 muestra ambos ajustes para los datos que se están utilizando.

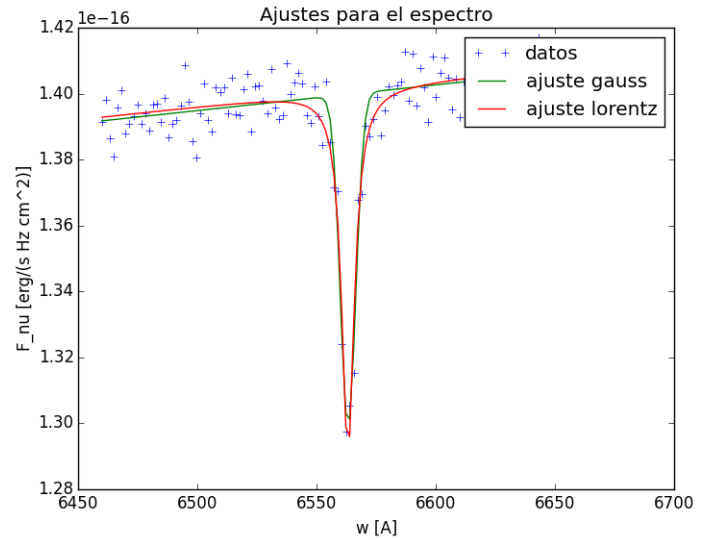


Figura 1. Gráfico con los ajustes de cada método sobre los datos obtenidos para el espectro

Conclusiones Tanto el perfil de lorentz, osea la distribución de cauchy, como la Gaussiana pueden ser utilizadas para generar un modelo que se ajuste a una línea de absorción de un espectro. Este ajuste se optimiza mediante la función χ^2 encontrando en este caso los 5 parámetros.

Método	A	μ	σ	a	b	χ^2
Gaussiana	8.22 e-17	6.56 e+03	3.26 e+00	8.88 e-17	8.88 e-17	5.20 e-35
Perfil de Lorentz	1.11 e-16	6.56 e+03	3.22 e+0	7.92 e-21	8.81 e-17	5.00 e-35

Cuadro I. Parámetros obtenidos en la minimización de χ^2 para cada método