

# Tarea 10: Modelamiento de Espectros y Estimación de Parámetros

Eva DÍAZ

December 2, 2015

Curso:	Métodos Numéricos para la Ciencia e Ingeniería
Profesor:	Valentino González
Profesor Auxiliar:	Felipe Pesce

## 1 Introducción

La tarea consiste en realizar un ajuste del espectro emitido por una fuente, el cual muestra un continuo y una línea de absorción (Figura 1). El ajuste consiste en modelar el espectro de dos formas: primero aproximando por una recta más una gaussiana, y segundo mediante una recta ms un perfil lorentziano. Además, se calculan los parámetros que mejor ajustan las curvas de cada modelo.

Posteriormente, se comparan ambos métodos de ajuste mediante un test de Kolmogorov-Smirnov para decidir cuál de los dos es mejor.

## 2 Ajustes y estimación de parámetros

La 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 cuerpo emisor de la radiación.

En la Figura 1 se muestra el espectro al cual se realiza el ajuste utilizando los datos entregados en el archivo `espectro.dat`. Primero, se realiza un modelo que consiste en una línea recta (que modela el continuo) más una gaussiana (que modela la línea de absorción), de la siguiente manera:

$$f(x) = mx + n - A * G(x) \tag{1}$$

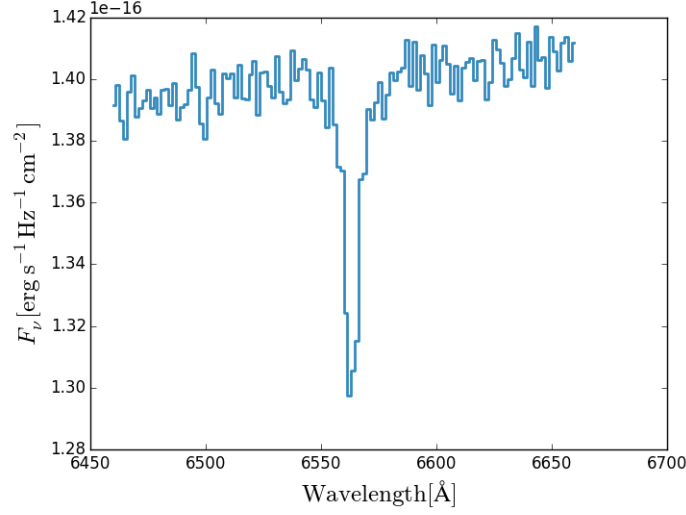


Figure 1: Espectro a ajustar.

Donde  $m$  (pendiente de la recta),  $n$  (coeficiente de posición de la recta) y  $A$  (amplitud de la gaussiana) son los parámetros que hay que optimizar.  $G(x)$ , por otra parte, es la función gaussiana que depende de los parámetros  $\mu$  y  $\sigma$ , que será modelada utilizando la función `gauss` de la librería `scipy.stats`. Para encontrar estos cinco parámetros óptimos se utiliza la función `curve_fit`, que recibe como argumentos la función a modelar (1), los datos de que se dispone (longitud de onda y flujo) y una estimación al ojo de los parámetros que se desea optimizar (para que la función demore menos en encontrarlos). Esta estimación 'al ojo' se puede realizar mirando la Figura 1, donde se puede observar que  $m$ ,  $n$  y  $A$  son muy pequeños, del orden de  $10^{-16}$ . Los parámetros  $\mu$  y  $\sigma$  (promedio y desviación estándar, respectivamente), por otra parte, se pueden estimar utilizando los datos disponibles.

El segundo modelo consiste en una línea recta más un perfil lorentziano (2). Este modelo se implementa de la misma forma que el anterior y utilizando la función `cauchy` del módulo `scipy.stats` para implementar el perfil de Lorentz.

$$f(x) = mx + n - A * L(x) \quad (2)$$

Los resultados de ambos modelos se pueden visualizar en la Figura 2. En la Tabla 1, por otro lado, se listan los parámetros óptimos encontrados por la

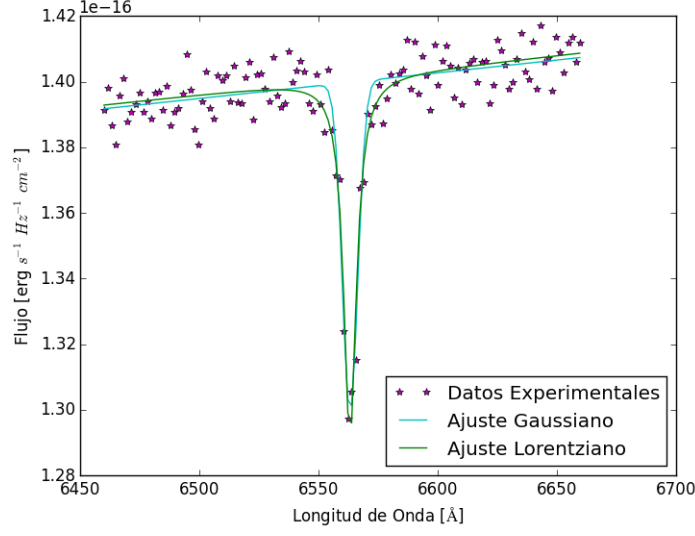


Figure 2: Modelos implementados vs. datos experimentales.

Table 1: Parámetros óptimos para el modelo recta-Gauss (M1) y recta-Lorentz (M2).

	m	n	A	$\mu$ [Å]	$\sigma$
M1	$7.8026 \times 10^{-21}$	$8.8769 \times 10^{-17}$	$8.2226 \times 10^{-17}$	6563.22	3.26
M2	$7.9231 \times 10^{-21}$	$8.8112 \times 10^{-17}$	$1.1140 \times 10^{-16}$	6563.19	3.22

función `curve_fit` para cada modelo.

Las unidades de medida de los parámetros son las siguientes:

- m:  $\text{erg s}^{-1} \text{Hz}^{-1} \text{cm}^{-2} / \text{Å}$
- n:  $\text{erg s}^{-1} \text{Hz}^{-1} \text{cm}^{-2}$
- A:  $\text{erg s}^{-1} \text{Hz}^{-1} \text{cm}^{-2}$
- $\mu$ : Å
- $\sigma$ : Å

Finalmente, se define la función  $\chi^2$  sobre el flujo del espectro de la siguiente forma:

$$\chi^2 = \sum_i (F_{\text{datos}i} - F_{\text{modelo}i})^2 \quad (3)$$

Table 2: Parámetros de comparación para el modelo recta-Gauss (M1) y recta-Lorentz (M2).

	$D_n$	Nivel de confianza
M1	0.1647	$2.3229 \times 10^{-3}$
M2	0.1656	$2.1455 \times 10^{-3}$

De este modo se determina el 'error' entre los datos entregados y los modelos propuestos. Los resultados para cada uno de los modelos se detallan a continuación:

- Recta+Gauss:  $\chi^2 = 5.204 \times 10^{-35}$  [ $\text{erg}^2 s^{-2} Hz^{-2} cm^{-4}$ ]
- Recta+Perfil de Lorentz:  $\chi^2 = 5.005 \times 10^{-35}$  [ $\text{erg}^2 s^{-2} Hz^{-2} cm^{-4}$ ]

### 3 Comparación

La comparación entre ambos modelos para decidir cuál de los dos representa mejor el espectro se realiza mediante un test de Kolmogorov-Smirnov. Para esto se definió la función de probabilidad acumulada para cada uno de los modelos implementados y mediante la función `kstest` de la librería `scipy.stats` para obtener el valor de  $D_n$  y el nivel de confianza que entrega cada modelo.

En la Figura 3 se puede apreciar la función de probabilidad acumulada para ambos modelos junto con los ajustes.

Los valores obtenidos de  $D_n$  y los niveles de confianza se enlistan en la Tabla 2.

### 4 Conclusiones

En el ajuste del espectro se observó que ambos modelos responden muy bien y se ajustan a los datos. Ambos modelos funcionan bien, de hecho, los parámetros óptimos resultaron ser muy similares y la función  $\chi^2$  resultó tener un valor muy chico, lo cual habla de un buen ajuste. Se puede apreciar que el modelo Recta+Lorentz presenta una amplitud mayor para la línea de absorción, sin embargo esta línea es más ancha que la que se ajusta con el modelo Recta+Gauss.

De la comparación se extrae que ambos modelos tienen bajísimos niveles de confianza, por lo cual ambos son malas aproximaciones. Esto puede deberse a que la parte lineal del espectro presenta muchas oscilaciones (como se puede apreciar en la Figura 1). El modelo de Gauss tiene una pequeña ventaja por sobre el de Lorentz en este sentido (nivel de confianza), así que se elige a este modelo como el 'mejor'.

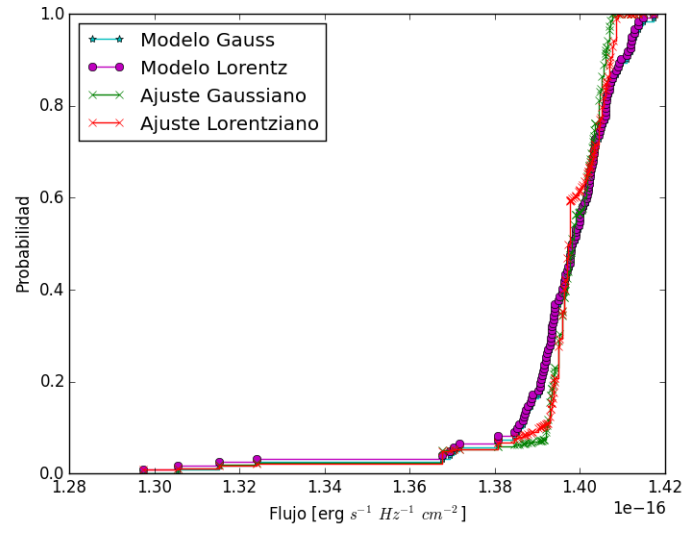


Figure 3: Función de probabilidad acumulada.