Métodos Numéricos para la Ciencia e Ingeniería

Informe Tarea 10

Nelson Soto Medina

Pregunta 1:

En esta tarea se nos introduce la técnica de la espectroscopia y se nos pide modelar un segmento del espectro de una fuente, la que muestra un continuo y una línea de absorción.

Primero hay que modelar la línea como si tuviese una forma Gaussiana y luego según el perfil de Lorentz.

Para ambos casos se toma una recta y se le resta una Gaussiana o el Perfil de Lorentz en el lugar de la línea de absorción, quedando consecutivamente las siguientes funciones:

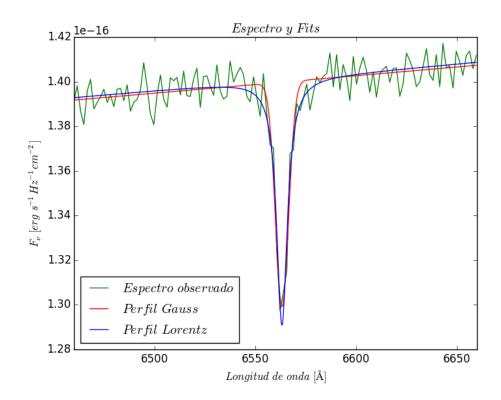
$$y = ax + b - A \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(\frac{-(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$$
$$y = ax + b - A \frac{1}{\pi\sigma} \frac{1}{1 + \frac{(x-\mu)^2}{\sigma^2}}$$

Para ambas ecuaciones se tienen 5 parámetros: alfa (α) y beta (β) de la recta, A, la amplitud de la línea de absorción, mu (μ) , el centro y sigma (σ) , la varianza.

Utilizando la función *curve_fit* de *scipy.optimize* se hizo un ajuste a los puntos para obtener α y β . Luego se estimó los parámetros de los perfiles viendo el gráfico de datos usando *norm* y *cauchy* de *scipy.stats*, para el perfil de Gauss y Lorentz respectivamente. χ^2 se calcula por la definición:

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

Con esto se obtiene el siguiente gráfico y tabla:



Parámetro	Gauss	Lorentz
α [erg s ⁻¹ Hz ⁻¹ cm ⁻² Å ⁻¹]	7.802*10 ⁻²¹	7.923*10 ⁻²¹
β [erg s ⁻¹ Hz ⁻¹ cm ⁻²]	8.877*10 ⁻¹⁷	8.811*10 ⁻¹⁷
A [erg s ⁻¹ Hz ⁻¹ cm ⁻² Å]	8.235*10 ⁻¹⁷	1.113*10 ⁻¹⁶
μ [Å]	6563.224	6563.201
σ [Å]	3.268	3.215
$\chi^2 [{\rm erg^2 s^{-2} Hz^{-2} cm^{-4}}]$	5.204*10 ⁻³⁵	5.006*10 ⁻³⁵

En el gráfico se ven los dispersos datos experimentales junto a la notable línea de absorción, donde además se ajustan los perfiles de Gauss y Lorentz.

Se puede ver que los modelos se ajustan bien en la línea, a pesar de la dispersión en los otros lados por el ruido. Notar que la Gaussiana tiene curva más cerrada en el sector de la línea de absorción y llega a una amplitud más parecida a los datos observados que el perfil de Lorentz. Lo más natural es que las líneas de absorción sean más delgadas, por lo que me parece que el perfil se ajusta mejor.

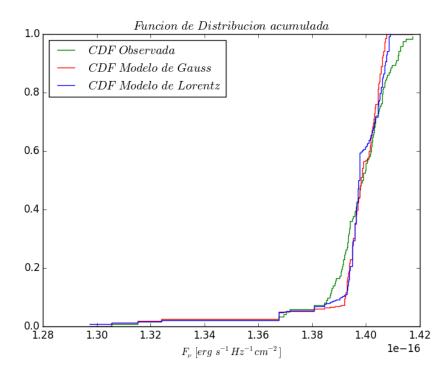
Pregunta 2:

En esta parte se debe determinar cuál modelo representa mejor los datos.

Para eso se utiliza el test de Kolmogorov-Smirnov, el cual no depende de los errores, para determinar la probabilidad asociada a la hipótesis nula de cada modelo.

Primero se ordenan los datos y se calcula la cdf para cada modelo. Luego el test de Kolmogorov-Smirnov (*ktest* de *scipy.stats*) entrega la máxima distancia D_n entre la función distribución del modelo y los datos. Con esto finalmente se calcula el nivel de confianza y poder juzgar que tan bien los modelos representan las mediciones.

Finalmente se obtiene el siguiente gráfico y trabla:



Resultados	Gauss	Lorentz
D_n	0.1646	0.166
Nivel de Confianza	2.34*10 ⁻³	2.09*10 ⁻³

En el gráfico vemos que hay lugares en que se acerca más Gauss a los datos observados y otras donde Gauss y Lorentz coinciden pero no se ajustan bien a los datos.

Con los resultados presentes en la tabla se ve un nivel de confianza bastante bajo para ambos modelos, por lo que deberían rechazarse ambos.

Pero aun que los dos estén mal, el que tiene menor distancia en la función distribución es la de Gauss, que es la similar a la de Poisson.

Conclusión:

Se observa que los perfiles de Gauss y Lorentz se ajustan bien a los datos observados de la línea de absorción, pero ambos son malos según el test de Kolmogorov-Smirnov, siendo el de Gauss un poco más cercano.

Esto podría explicarse por el ruido en el resto del espectro, ya que son datos muy dispersos y una sola recta no entrega los valores de confianza adecuados para que el test acepte los modelos.

Yo creo que si los datos estuvieran menos dispersos, o bien se considerara solo la parte de la línea de absorción el test entregaría resultados a favor de los perfiles de Gauss y Lorentz.