Informe Tarea 10, Métodos numéricos para la ciencia e injeniería

Farid Borbar

2 de diciembre de 2015

1. Pregunta 1

1.1. Introducción

La espectroscopía consiste en el estudio de la interacción de la radiación electromagnética y la materia, en relación a si existe una absorción o emisión de radiación por parte de un cuerpo, por ejemplo. Si se grafica la radiación que recibe un cuerpo v/s la longitud de onda de dicha radiación, puede interpretarse las caídas de la curva como absorciones de radiación, mientras que altos en la curva se interpretan como emisión de radiación.
En base a esto es que para la primera pregunta se trabajó con los datos obtenidos de un análisis de espectroscopía, intentando modelarlos mediante dos métodos diferentes: Una recta restada con una distribución gaussiana, y por otro lado una recta restada con una distribución de Lorentz.
Para ambos casos se trato de ajustar los parámetros para que fuesen óptimos y luego comparar con el gráfico experimental.

1.2. Marco Teórico y Metodología

El procedimiento consistió en modelar las funciones en base a los datos obtenidos del archivo *espectro.dat*, para luego usar la herramienta $curve - fit$ y encontrar los parámetros para cada función que hiciesen óptimo el ajuste. En el caso de la recta se trabajo con dos parámetros: M y N, de forma tal que $y = M * x + N$. Para la distribución gaussiana y de Lorentz, puesto que son similares, se trabajo con los parámetros de amplitud, centro de la distribución, y la varianza de la misma: A, μ y σ, respectivamente.
Las funciones utilizadas para generar las distribuciones mencionadas fueron:
Gaussiana, $g = A * scipy.stats.norm(loc = \mu, scale = \sigma).pdf(x)$.
Lorentz, $scipy.stats.cauchy(loc = \mu, scale = \sigma).pdf(x)$.

Y las adivinanzas iniciales para M, N, A, μ, σ fueron: $0, 1{,}39^{-16}, 0{,}1^{-16}, 6560, 10$ respectivamente.

1.3. Resultados

Los resultados obtenidos fueron los parámetros óptimos. Para la función que se construyo en base a la Gaussiana se obtuvo: $M = 7{,}802{*}10^{-21}$, $N = 8{,}876^{-17}$,

$A = 8{,}222 * 10^{-17}$, $\mu = 6{,}563 * 10^3$, $\sigma = 3{,}258$.
Mientras que para la distribución de Lorentz se obtuvo: $M = 7{,}923 * 10^{-21}$, $N = 8{,}811^{-17}$, $A = 1{,}114 * 10^{-16}$, $\mu = 6{,}563 * 10^3$, $\sigma = 3{,}219$.

Con estos parámetros se graficaron los ajustes, los cuales se observan comparados con los datos experimentales en la figura (1).

2. Pregunta 2

2.1. Introducción

En esta parte se buscó definir que método era el más acertado en base a un criterio relativamente definido por nosotros. Para esto se hizo uso del test de Kolmogorov-Smirnov.

2.2. Marco Teórico y Metodología

El procedimiento consistió en ordenar los datos de menor a mayor, tanto para los experimentales como para los obtenidos de los ajustes con Gauss y Lorentz. Posteriormente se aplica el test que *scipy* trae incorporado: *kstest*. En base a este test es que también obtuvimos las distancias, Dn, entre nuestros modelos y los datos, fijamos la distancia $D_critico$ la cual nos da el criterio para elegir un modelo por sobre otro: aquel modelo para el cual el Dn obtenido este más alejado del crítico, será el mejor. El mismo test nos permite conocer la probabilidad de que la hipótesis nula para cada caso, sea correcta, es decir, que el ajuste realizado pueda considerare como la distribución de la que vienen los datos experimentales.

2.3. Resultados

Para el ajuste realizado con Gauss se obtuvo un $Dn_scipy_Gauss = 0{,}164704918033$.
Para el realizado con Lorentz: $Dn_scipy_Lorentz = 0{,}164704918033$.
Sobre lo mismo se obtuvieron los niveles de confianza, o probabilidad de la hipótesis nula:
Probabilidad para Gauss = 0,164704918033.
Probabilidad para Lorentz = 0,164704918033.

Así mismo los gráficos de distribución de probabilidad para ambos casos pueden observarse en la figura (2).

Conclusiones Generales

Del análisis de los resultados de la primera pregunta puede verse que en general los datos siguen una distribución coherente con los ajustes que se intentaron hacer, tanto para el de Gauss como el de Lorentz. Por otro lado, los parámetros son similares para ambos ajustes, sin embargo, la amplitud difiere en un orden de magnitud, siendo la de Lorentz mayor.
Sin embargo, si bien los ajustes se ven bien, en el gráfico, los niveles de confianza para ambos, utilizando los parámetros óptimos, son bastante bajos, por lo que

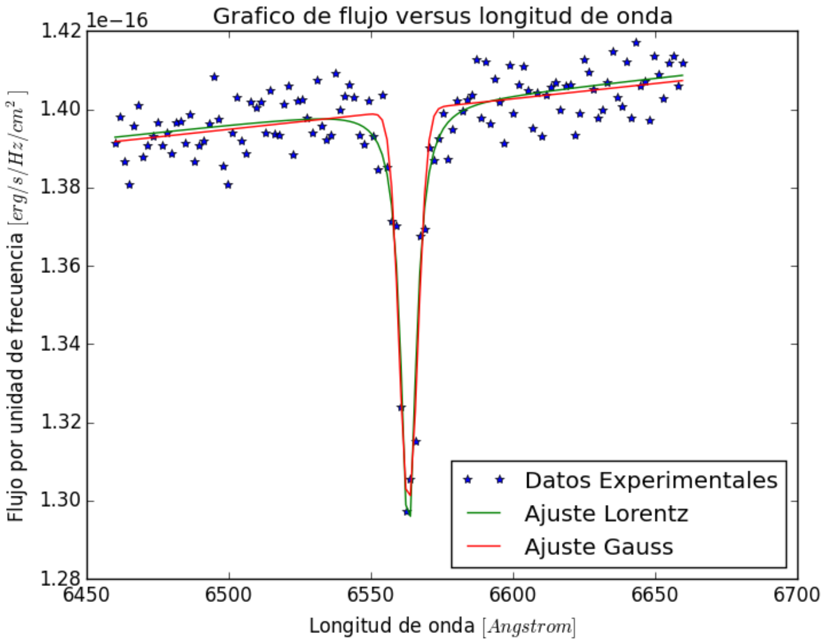

Figura 1: En este gráfico se muestran los ajustes en base a las distribuciones de Gauss (rojo) y Lorentz (verde), al mismo tiempo que los datos experimentales (puntos azul).

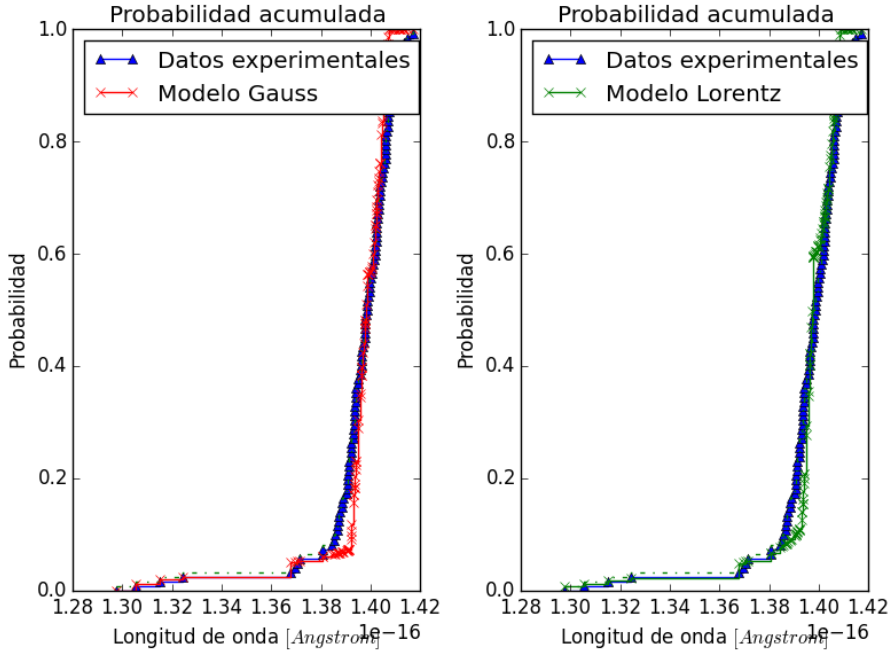

Figura 2: En este imagen se muestran los gráficos para ambas distribuciones con los datos ordenados de menor a mayor, con respecto a los experimentales.

dichos modelos debieran ser descartados como posibles distribuciones para los datos experimentales.