

Métodos Numéricos para la Ciencia e Ingeniería:
Informe 10

Álvaro Céspedes

December 2015

Introducción

El objetivo de esta tarea es modelar el flujo de absorción y continuo para un flujo de radiación emitida por alguna fuente. En la figura 1 se muestra el flujo a modelar.

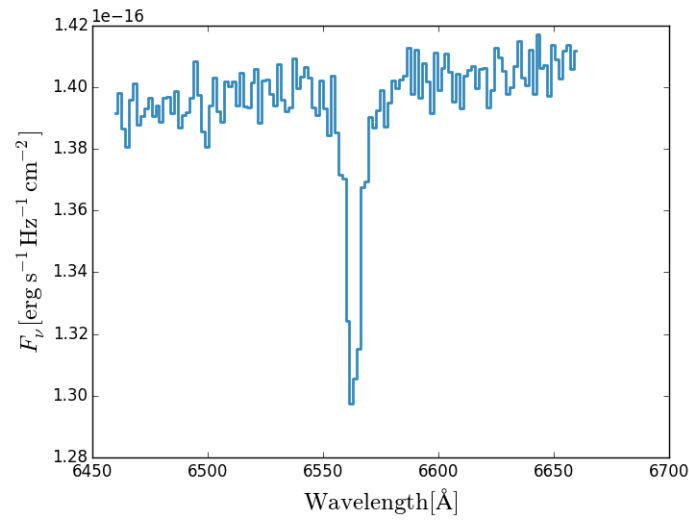


Figure 1: *Gráfico de un segmento del espectro de radiación emitida por una fuente*

Para lograr este objetivo, se propone modelar la línea de absorción a través de dos métodos distintos: aproximación Gaussiana y ensanchamiento tipo perfil de Lorentz. Finalmente, se busca discernir entre cual de ellos consigue una mejor aproximación de la línea de absorción mostrada en el segmento de flujo de radiación emitida.

Procedimiento

Para modelar las curvas Gaussiana y perfil de Lorentz se utilizan las funciones $Gauss = A * \text{scipy.stats.norm}(loc = \mu, scale = \sigma).pdf(x)$ y $Lorentz = A * \text{scipy.stats.cauchy}(loc = \mu, scale = \sigma).pdf(x)$, las cuales finalmente se usarán para crear los modelos 1 y 2: recta menos Gaussiana y recta menos Lorentz. Como se logra ver en la figura 1, los datos tienen una clara tendencia lineal (Obviando la línea de absorción), por lo que se hace un *polyfit* de los datos para obtener la mejor recta que adapta los datos. En la figura 2 se muestra dicho *polyfit*.

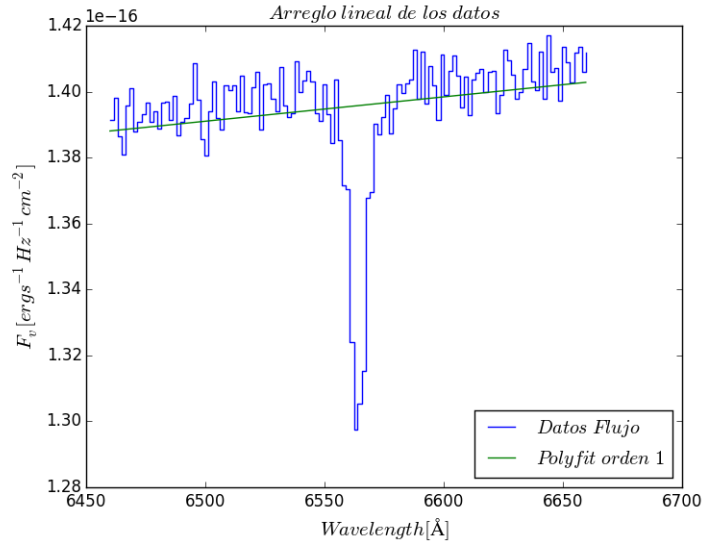


Figure 2: *Arreglo lineal del flujo de radiación, con pendiente = $7.389e^{-21}$ y coeficiente de posición = $9.108e^{-17}$*

Con estos valores de pendiente y posición se busca realizar una primera aproximación a lo que serían los óptimos 5 datos que modelan ambos ensanchamientos de líneas, por lo que, adicionalmente, se entrega una estimación de los valores de Amplitud, μ : centro y σ : varianza y se procede a minimizar la función χ^2 de cada modelo (A través de la función *curve.fit* de la librería *scipy.optimize*). La *adivinanza* fue creada a partir de los datos del flujo de radiación. Se encuentra en el archivo *Tarea10.py*, en la sección *Setup*.

Finalmente, para elegir cuál de los dos ensanchamientos es mejor (o menos malo) se procede a realizar el test de Kolmogorov-Smirnov, a través de la función *kstest* de la librería *scipy.stats*, que calcula la probabilidad asociada a la hipótesis nula de cada modelo, y así determinar si cada uno por separado es confiable, además de elegir cuál es el más "suitable" a predecir el fenómeno que produce el ensanchamiento de las líneas de absorción.

Resultados

Los resultados de las modelaciones se presentan en la figura 3, donde se graficaron los datos de flujo, la curva obtenida para el modelo de Gauss y el perfil de Lorentz.

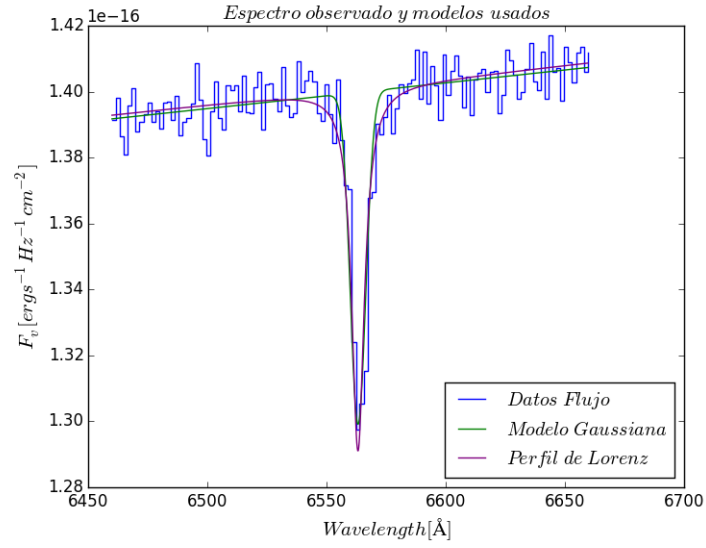


Figure 3: Gráfico de las dos distintas modelaciones hechas para el flujo de radiación; Gaussiana en verde y perfil de Lorentz en morado

A continuación se muestran los resultados de los parámetros óptimos de la modelación, el valor de la función χ^2 , D_n : Distancia vertical entre el modelo y los datos y el nivel de confianza de cada modelo.

Para el modelo 1 (Recta menos Gaussiana):

- $Pendiente = 7.803e^{-21}$
- $Coef.deposicion = 8.877e^{-17}$
- $Amplitud = 8.222e^{-17}$
- $\mu = 6563.223$
- $\sigma = 3.258$
- $\chi^2 = 3.376e^{-34}$
- $D_n = 0.1647$
- $Prob.hipotesisnula = 0.002322$

Para el modelo 2 (Recta menos Lorentz):

- $Pendiente = 7.9231e^{-21}$
- $Coef.deposicion = 8.811e^{-17}$
- $Amplitud = 1.114e^{-16}$
- $\mu = 6563.2$
- $\sigma = 3.219$
- $\chi^2 = 3.359e^{-34}$
- $D_n = 0.1656$
- $Prob.hipotesisnula = 0.002145$

Discusión y conclusiones

De la figura 2 se puede observar que los dos modelamientos son relativamente similares, sin embargo, el modelo de Gauss es más sensible que el modelo de Lorentz a los valores iniciales de parámetros que uno le entrega, ya que si se cambia el centro a un valor un poco menor que el expuesto en el informe (Algo del estilo 6540), el modelamiento falla.

Sin embargo, el valor de D_n máximo aceptado es de 0.1223, por lo que, como ambos modelos tienen un D_n mayor, se presume que ninguno de los dos podría explicar asertivamente el fenómeno de ensanchamiento, a pesar de que la probabilidad de hipótesis nula es relativamente baja (El modelo de Lorentz, en este contexto, tiene mayor credibilidad).

Finalmente, mi pensamiento es que el método de Lorentz debería ser aceptable (Al menos bajo ciertas suposiciones y valores característicos), por lo que los valores de la adivinanza estén provocando que el modelo en sí sea rechazado.