

Métodos numéricos para la ciencia y la ingeniería

Tarea 10

Jean Paul Martel

30 de noviembre 2015

1 Espectro de absorción

1.1 Introducción

- La espectroscopía es una técnica astronómica que estudia el espectro de la radiación electromagnética emitida por alguna fuente. Es decir, estudia el flujo en función de la longitud de onda. Permite entender propiedades físicas de estrellas, galaxias, el medio intergaláctico, entre otros.
- Una línea de absorción, identificada como un descenso significativo de un flujo continuo, resulta de una carencia de fotones en una determinada longitud de onda (o frecuencia), cuando algunos fotones con la energía exacta provenientes de alguna fuente son absorbidos por átomos de algún material (gas) entre la emisión y el observador.
- En realidad una línea de absorción no es infinitamente delgada, si no que se observa para un rango de frecuencias. Este ensanchamiento de la línea espectral ocurre debido a diferentes mecanismos. Los dos más importantes son:
 1. Ensanchamiento natural, debido al principio de incertidumbre, donde el sistema se encontrará en energías dentro de un rango que se traducirá en un rango de frecuencias. Este ensanchamiento se modela bien con una gaussiana
 2. Ensanchamiento termal, por efecto doppler debido a la distribución de velocidades que tendrán los átomos (dependiendo de la temperatura) y de sus masas. Este efecto se modela bien con una curva lorentziana.
 3. Un mejor modelo para la línea es uno que combina los dos anteriores; se le llama *perfil de Voigt*.

1.2 Pregunta 1: Modelando espectro de absorción

- A continuación quiere modelarse el espectro de absorción que se observa luego en la figura 1.
- Los datos del espectro se encuentran en el archivo *espectro.dat*
- Primero se pretende modelar la línea con una forma gaussiana y luego con un perfil de Lorentz. Como ya se dijo, ninguno de los dos representa el modelo más exacto de la línea, pero puede obtenerse una idea del mecanismo físico que produce el ensanchamiento en este caso.

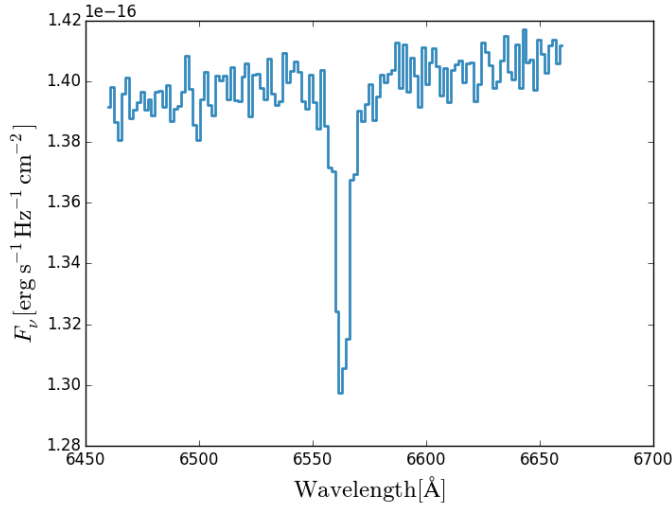


Figure 1: Espectro a modelar

1.2.1 Procedimiento

- Forma Gaussiana: El modelo completo será una recta menos una gaussiana. La recta depende de dos parámetros: pendiente "a" y constante "b". Mientras la función gaussiana depende de 3 parámetros: amplitud, centro y varianza. Para encontrar los valores más óptimos de los 5 parámetros se utiliza la rutina *scipy.stats.curve_fit*
- Forma Lorentziana: Análogo al anterior, el modelo consiste en una recta, esta vez restando un perfil de lorentz, que igualmente depende de 3 parámetros: amplitud, centro y varianza. Se usa la misma rutina anterior para encontrar los 5 parámetros óptimos
- Importante señalar que para utilizar *curve_fit* se necesitan ingresar parámetros iniciales, y estos deben estar "cerca" a los óptimos para que el algoritmo converja correctamente. Para encontrarlos se procede como sigue:
 - Pendiente "a" y constante "b" de la recta: Se realiza un ajuste polyfit a los datos.
 - Amplitud: Estimada del gráfico
 - Centro (μ): se calcula promedio de los datos para las longitudes de onda.
 - Varianza (σ^2): σ se obtiene calculando la raíz de la varianza para los datos de las longitudes de onda
- Además, el valor de χ^2 se calcula con:

$$\chi^2 = \sum_i (y_i^{datos} - y_i^{modelo})^2$$

1.2.2 Resultados

- En la tabla 1 pueden observarse los mejores valores encontrados para los parámetros de cada modelo (forma gaussiana y perfil de Lorentz)

Table 1: Comparación de parámetros para modelos gaussiano y lorentziano

	Modelo	
Parámetros	Gaussiano	Lorentziano
Pendiente(a)	7.80e-21	7.92e-21
Constante(b)	8.87e-17	8.81e-17
Amplitud(A)	8.22e-17	1.11e-16
Centro(μ)	6563.22	6563.20
Desviación estandar(σ)	3.25	3.22
χ^2	5.20e-35	5.00e-35

- En la figura a continuación se grafica el espectro observado junto a los mejores ajustes de cada modelo:

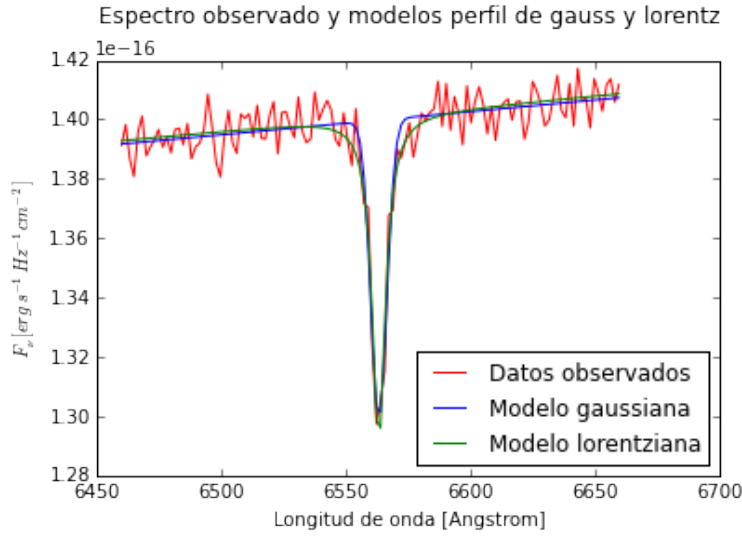


Figure 2: Gráfico Flujo versus Longitud de onda. Contiene: 1. Datos del espectro observado con linea de absorción contenidos en *espectro.dat*. 2. Combinación de Ajuste lineal y gaussiano para el espectro con los mejores parámetros (presentados en la tabla 1). 3. Combinación de Ajuste lineal y lorentziano para el espectro con los mejores parámetros (presentados en la tabla 1)

1.3 Pregunta 2: Comparando los modelos

- Ahora se desea comparar los modelos anteriores para determinar cual es más representativo de los datos. Más precisamente quiere determinarse:
 1. Si los modelos son aceptables.
 2. Cuál modelo es mejor de acuerdo a este test.
- Los errores asociados a la medición en cada pixel del detector del espectroscopio no son gaussianos sino poissonianos. Debido a esto, el valor de χ^2_{red} y el test de χ^2 asociado pueden no ser significativos.
- Entonces se utiliza un test de Kolmogorov-Smirnov (K-S) para determinar la hipotesis nula de cada modelo. La prueba de K-S tiene la ventaja de no depender de los errores.
- A grandes rasgos el test consiste en comparar frecuencias relativas acumuladas de las dos distribuciones ; observada y teórica. Si $F_0(x_i)$ corresponde a la distribución de la muestra observada y $F_M(x_i)$

la distribución del modelo (presentada como hipótesis nula), se comparan las distribuciones con el estadístico:

$$D = \max \|F_M(x_i) - F_0(x_i)\|$$

- Para realizar el test K-S primero se construye la función de probabilidad acumulada para los modelos. Primero se genera un arreglo de datos (de valores en x , es decir, "longitudes de ondas"), se evalúan en la función modelo, se ordenan estos valores obtenidos y (habiendo ordenado los valores de los datos), por cada valor y_i de los datos (flujos), se suman todos los valores obtenidos del modelo menores que ese y_i . Así queda creada la función de distribución para cada modelo.
- Habiendo hecho lo anterior, se ocupa la función de *kstest* de *Scipy* para realizar el test K-S. La función retorna el valor para el estadístico Dn y un nivel de confianza para el modelo.

1.3.1 Resultados

- Se encuentran los siguientes valores para el estadístico y nivel de confianza obtenido con el test K-S para cada modelo:
 - Dn gaussiana : 0.1627
 - Dn lorentziana : 0.1678
 - Nivel de confianza gaussiana : 0.0027
 - Nivel de confianza lorentziana: 0.0017

1.4 Conclusiones

- Los parámetros óptimos encontrados se notan similares en ambos modelos probados y los valores de χ^2 son pequeños para los dos casos. Esta prueba, en principio, indica que los modelos están bien ajustados a la distribución real de los datos. Además, para el perfil lorentziano el valor de χ^2 es ligeramente menor, por lo que representaría mejor la curva real que el otro modelo.
- A pesar de lo anterior, el test Kolmogorov-Smirnov que luego se aplicó a estos dos modelos, entregó niveles de confianza demasiado bajos, aunque un poco mayor en . Si las "hipótesis nulas" son los modelos de perfil gaussiano y lorentziano; los niveles de confianza indicarían que se deben rechazar ambas hipótesis. Entonces, ningún ajuste es aceptable para los datos. Pero podría decirse que el el perfil de Lorentz es una hipótesis más "verosímil" que el perfil gaussiano al tener mayor nivel de confianza.
- Este bajo nivel de confianza puede deberse al ruido que se observa en el espectro. Cualitativamente, los ajustes parecieran ajustarse bien a la línea de absorción misma, aunque fallan en la zona del espectro continuo. Podría confirmarse lo anterior si realiza el modelo para longitudes de ondas en un rango más acotado que contenga la línea.
- También es posible que los modelos sean simplemente malos para la correcta descripción de los datos. Como se dijo el "perfil de Voigt" combina los dos modelos anteriores y podría ajustarse mejor. También pueden influir otros mecanismos físicos como colisiones de partículas en el fluido que se observa, debido a la presión de este, entre otros posibles procesos físicos.
- Los valores de χ^2 son pequeños para ambos modelos. Esta prueba, en principio, indica que los modelos están bien ajustados a la distribución real de los datos.