



ESTIMACIÓN DE FUNCIONES DE TRANSFERENCIA EN EL RANGO DE LOS THz MEDIANTE MODELOS AUTORREGRESIVOS

Cristina Benacloche Llácer

Director: Borja Vidal Rodríguez

Trabajo Fin de Grado presentado en la Escuela Técnica Superior de Ingeniería de Telecomunicación de la Universitat Politècnica de València, para la obtención del Título de Graduado en Ingeniería de Tecnologías y Servicios de Telecomunicación

Curso 2020-21

Valencia, 10 de septiembre de 2021



Resumen

La banda de los THz, comprendida entre 100 y 10000 GHz, es una banda poco estudiada debido a que generar señales en esta región espectral conlleva una alta dificultad. El objetivo de este Trabajo Fin de Grado es utilizar métodos alternativos a los convencionales para estimar la función de transferencia y así poder extraer parámetros de materiales. La banda de los THz tiene especial interés en diferentes áreas de la industria, debido a que permite extraer información que en otras bandas resultaría imposible. Entre los materiales que se desean estudiar podemos destacar pinturas que se utilizan en distintas industrias como la automoción o aeroespacial, para ello se quiere hacer uso de procesados propios de las Telecomunicaciones. La FFT (Transformada rápida de Fourier) se ha venido usando en este tipo de aplicaciones en combinación con rutinas de optimización para obtener los parámetros a partir de modelos físicos. En este trabajo se pretende explorar la viabilidad de otro tipo de métodos no convencionales y realizar una comparativa entre las distintas técnicas, para la estimación de los diferentes espectros y la obtención de los parámetros ópticos mediante el uso de la herramienta MATLAB.

Resum

La banda dels THz, compresa entre 100 i 10000 GHz, és una banda poc estudiada pel fet que generar senyals en aquesta regió espectral comporta una alta dificultat. L'objectiu d'aquest treball Fi de Grau és utilitzar mètodes alternatius als convencionals per a estimar la funció de transferència i així poder extraure paràmetres de materials. La banda dels THz té especial interès en diferents àrees de la indústria, pel fet que permet extraure informació que en altres bandes resultaria impossible. Entre els materials que es desitgen estudiar podem destacar pintures que s'utilitzen en diferents indústries com l'automoció o aeroespacial, per a això es vol fer ús de processaments propis de les Telecomunicacions. La FFT (Transformada ràpida de Fourier) s'ha anat usant en aquesta mena d'aplicacions en combinació amb rutines d'optimització per a obtenir els paràmetres a partir de models físics. En aquest treball es pretén explorar la viabilitat d'una altra mena de mètodes no convencionals i realitzar una comparativa entre les diferents tècniques, per a l'estimació dels diferents espectres i l'obtenció dels paràmetres òptics mitjançant l'ús de l'eina MATLAB.

Abstract

The THz band, between 100 and 10000 GHz, is a band that has been little studied because generating signals in this spectral region is very difficult. The aim of this Final Degree Project is to use alternative methods to the conventional ones to estimate the transfer function and thus be able to extract material parameters. The THz band is of special interest in different areas of industry, as it allows information to be extracted that would be impossible in other bands. Among the materials to be studied we can highlight paints that are used in different industries such as the automotive or aerospace industry, for which we want to make use of telecommunications processing. The FFT (Fast Fourier Transform) has been used in this type of applications in combination with optimisation routines to obtain the parameters from physical models. The aim of this work is to explore the viability of other non-conventional methods and to make a comparison between the different techniques for the estimation of the different spectra and the obtaining of the optical parameters using the MATLAB tool.



Índice

Capítulo 1.	Objetivos	3
Capítulo 2.	Introducción teórica.....	4
2.1	Motivación	4
2.2	Estimación espectral.....	5
2.2.1	Métodos no paramétricos para la estimación del espectro	5
2.2.2	Métodos paramétricos para la estimación del espectro	6
2.3	Estimación espectral de señales en el dominio del tiempo utilizando métodos paramétricos	17
Capítulo 3.	Estimación espectral de señales de THz con métodos paramétricos.....	18
3.1	Objetivos	18
3.2	Búsqueda del orden del modelo	18
3.3	Comparativa de la estimación espectral	21
3.3.1	Estimación espectral método de Yule-Walker	22
3.3.2	Estimación espectral método de Burg	23
3.3.3	Estabilidad método de Yule-Walker	24
3.3.4	Estabilidad método de Burg	25
3.3.5	Comparativa método Yule-Walker vs Burg.....	25
Capítulo 4.	Extracción de constantes ópticas mediante métodos paramétricos	29
4.1	Extracción de la función de transferencia	29
4.1.1	División espectral	29
4.1.2	Estimación directa	30
4.1.3	Comparativa de los espectros obtenidos	30
4.2	Extracción de los parámetros ópticos.....	31
4.2.1	Estabilidad parámetros ópticos.....	34
4.3	Precisión de la estimación AR	35
4.4	Diseño filtro AR.....	37
4.4.1	Método de Prony	37
4.5	Tiempo de computación	39
Capítulo 5.	Conclusiones	40
Capítulo 6.	Referencias	42
Capítulo 7.	ANEXOS.....	44
7.1	Código MATLAB empleado.....	44
7.1.1	Código suavizado de la señal	44



7.1.2	Código resolución frecuencial.....	45
7.1.3	Código comparativo FFT vs AR vs MUSIC	46
7.1.4	Código obtención del orden del modelo.....	47
7.1.5	Código estimación espectral Yule-Walker vs FFT	48
7.1.6	Código estimación espectral de la función de transferencia procedimiento división espectral	51
7.1.7	Código estimación espectral de la función de transferencia procedimiento estimación directa.....	52
7.1.8	Código extracción de parámetros ópticos	53



Capítulo 1. Objetivos

El objetivo de este trabajo es determinar si utilizando algún método paramétrico se puede obtener una mejor estimación espectral o ventaja computacional respecto a los métodos convencionales, en concreto, la transformada rápida de Fourier. Para ello se realizará un estudio comparativo a través de la herramienta de cálculo MATLAB.

En primer lugar, en el capítulo 2, se explicarán las bases teóricas tanto para los métodos paramétricos como para los no paramétricos y se determinará de los diferentes métodos paramétricos que existen, cuales se utilizarán para compararlo con la transformada rápida de Fourier (FFT). Por otro lado, también se realizará un pequeño estudio comparando los métodos que se basan en los subespacios propios de la matriz de correlación.

Seguidamente en el capítulo 3, se estimará el espectro de la señal de referencia y comparándolos con la estimación obtenida con la FFT, se extrapolará la señal del espectro y se analizará la bondad de la estimación. Por otro lado, se analizará la estabilidad que proporcionan ambos estimadores. Y se determinará que método paramétrico es el más adecuado.

Por último, en el capítulo 4, se obtendrá la función de transferencia por diferentes procedimientos, división espectral y estimación directa. Adicionalmente se estudiará la viabilidad de usar esta función de transferencia para obtener los parámetros ópticos en concreto el índice de refracción y el coeficiente de absorción, por otro lado, se estudiará si de la estimación espectral obtenida se puede obtener la señal en tiempo sin rizado de ruido y así poder realizar la deconvolución normal sin tener que recurrir a métodos más complejos como la deconvolución de Wiener. Por último, se comparará el tiempo de computación para ambos métodos y comprobar si se hay alguna ventaja computacional.

Capítulo 2. Introducción teórica

2.1 Motivación

La región espectral entre los 100 GHz y los 10 THz, conocida como la banda de los Terahercios (THz) (Figura 1), ha sido poco explorada por la dificultades que había hasta hace poco para generar y detectar señales en esta banda. Sin embargo, en las últimas dos décadas ha habido desarrollos que han abierto esta región para su uso, tanto científico como en ingeniería.

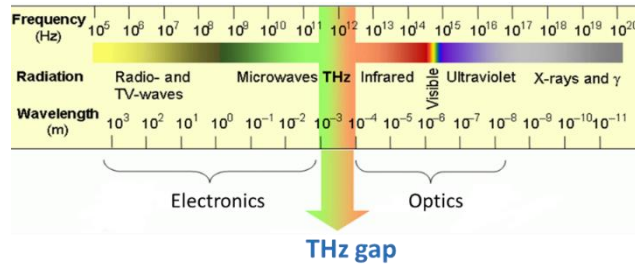


Figura 1. THz gap.

Esta banda resulta de interés porque permite extraer información que no es fácil obtener en otras bandas del espectro electromagnético, o incluso con otros tipos de sensores. Al estar comprendidas entre las microondas y el infrarrojo medio, las señales de THz presentan una combinación de características de ambas.

Las ondas de THz pueden penetrar en el interior de dieléctricos no polares igual que hacen las señales de radio, pero su resolución espacial es mucho mejor ya que su longitud de onda es mucho menor. Además, como no son ionizantes permiten la implementación de sensores que son mucho más fáciles de operar que los basados en rayos X. Finalmente hay un conjunto de materiales que tienen huellas espectrales específicas en esta banda lo que permite usar ondas de THz para su identificación. Estas características son muy convenientes para la caracterización de materiales tanto para aplicaciones científicas como industriales [1][2][3].

La técnica típica para realizar medidas en la banda de los THz se conoce como *THz Time Domain Spectroscopy (THz-TDS)*. Un esquema general de este tipo de instrumentos se muestra en la Figura 2. Esta técnica consiste en el uso de un emisor y receptor específico conocido como antenas fotoconductoras [4] que es un tipo de fotodiodo especial que genera señales de THz cuando se ilumina con pulsos ópticos de femtosegundo.

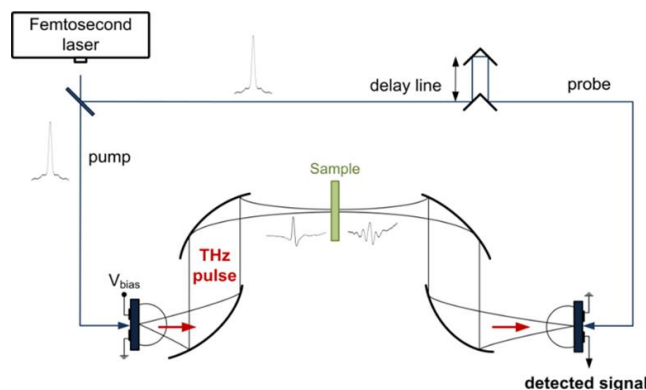


Figura 2. Esquema típico de un instrumento THz-TDS.

Estos instrumentos se han implementado tradicionalmente usando componentes de óptica espacial (lentes, espejos, ect) pero también pueden implementarse usando componentes de fibra óptica [5] lo que los hace especialmente atractivos para control de calidad industrial [6].

Los sistemas THz-TDS permiten la adquisición del campo eléctrico de la onda de THz tanto su amplitud y su fase. De esta forma, en su configuración básica un sistema THz-TDS permite la obtención directa de las constantes ópticas de los materiales que se desean analizar [7]. Estas constantes se derivan de la respuesta en frecuencia del material. Para obtener la respuesta en frecuencia es necesario disponer de una medida combinando una medida sin la muestra. Existen otras implementaciones que varían un poco sobre esta técnica como por ejemplo la elipsometría [8] que permite acelerar el proceso de toma de datos al no necesitar una señal de referencia.

Todos estos sistemas se basan en muestrear en el dominio del tiempo la señal. Para extraer la información del material bajo estudio se trabaja en el dominio de la frecuencia para lo que se emplea la transformada discreta de Fourier (DFT) [7][9][10][11].

El objetivo del presente trabajo es estudiar el uso de estimadores espectrales paramétricos para el procesado de señales THz-TDS, así como sus ventajas e inconvenientes.

2.2 Estimación espectral

La estimación espectral pretende proporcionar una representación en frecuencia de una señal temporal. Existen dos familias de métodos para obtener la estimación: técnicas no paramétricas y paramétricas.

2.2.1 Métodos no paramétricos para la estimación del espectro

La transformada de Fourier supuso el inicio de las técnicas de análisis espectral para señales en el dominio temporal. La FFT está basada en secuencias de datos infinitas, por tanto, cuando se toma secuencias de datos finitas o cortas surgen problemas a la hora de analizar dichos datos. La resolución espectral, Δf , viene dada por $\Delta f = \frac{1}{T}$, donde T es la duración temporal de la ventana de adquisición en tiempo. Con este tipo de métodos no es posible mejorar la resolución frecuencial ni a través de una mejora en la frecuencia de muestro ni tampoco a través del aumento de la longitud de la señal.

Tal y como se ha comentado, la transformada de Fourier no es capaz de mejorar la resolución frecuencial y en consecuencia se obtiene una deterioramiento de la dispersión espectral (*spectral leakage*) provocando en los laterales del segmento la aparición de discontinuidades. Los estimadores que usan los métodos no paramétricos están basados en segmentos de datos finitos, por tanto, la anchura espectral equivaldrá a la resolución frecuencial. [12]

El objetivo por tanto es obtener una estimación del espectro de la señal que se define como la transformada de Fourier de la correlación de la señal consigo misma.

$$P_{xx}(f) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} r_{xx}(m) e^{-j2\pi f m} \quad (2.1)$$

Utilizando el algoritmo de la FFT se obtiene de manera fácil y sencilla la estimación espectral, para este tipo de métodos no paramétricos.

Para obtener la estimación espectral utilizando los métodos no paramétricos se han definido dos técnicas a utilizar. En primer lugar, están los **métodos directos**, un ejemplo de este tipo de método es el periodograma y el periodograma modificado, esta técnica tiene la desventaja que no es consistente, es decir, si la duración de la señal es infinita la varianza no tiende a cero.

Finalmente, los métodos no paramétricos presentan las siguientes ventajas e inconvenientes:

Métodos no paramétricos	
Ventajas	Desventajas
Computacionalmente eficaz	El enventanado de la señal provoca la presencia de lóbulos laterales que a su vez introducen distorsión al espectro
Las componentes espectrales son directamente proporcionales a la densidad de potencia espectral	La longitud de los datos disponibles limita la resolución frecuencial
	Necesidad de realizar un promediado para obtener una robustez en la estimación.

Tabla 1. Ventajas y desventajas métodos no paramétricos.

2.2.2 Métodos paramétricos para la estimación del espectro

En el apartado anterior se ha comentado como los métodos no paramétricos usan la FFT con datos enventanados, el uso de estas ventanas conlleva que se produzca un enmascaramiento en las señales más débiles debido a la posible aparición de dispersión espectral, también se ha comentado como estos métodos no tienen la capacidad de mejorar su resolución frecuencial provocando un empeoramiento en la estimación que se desea obtener.

Los inconvenientes comentados en el apartado anterior no aparecen en los métodos paramétricos, una de las características más importantes que tienen estos tipos de métodos es que se consiguen generar los datos a partir de información que se tiene a priori, otro aspecto importante para tener en cuenta es que estos métodos extrapolan los valores para retardos $m > N$ [12] y por tanto no se tendrán los problemas mencionados acerca de la dispersión espectral. Para obtener una buena estimación es fundamental escoger el modelo AR adecuado y seguidamente obtener los parámetros estimados que permitirá calcular el espectro.

Contrariamente a lo que ocurre con los métodos no paramétricos, los paramétricos son capaces de eludir la dispersión espectral y por tanto se obtendrá una buena resolución frecuencial

El esquema que se utiliza en estos métodos paramétricos es asumir una secuencia de entrada $x(n)$ y una secuencia de salida $y(n)$ que se relacionan a través de la siguiente ecuación en diferencias. [14]

$$y(n) = -\sum_{m=1}^q a(m)y(n-m) + \sum_{m=0}^l b(m)x(n-m) = \sum_{k=0}^{\infty} h(m)x(n-m); \quad (2.2)$$

los parámetros q y l son el orden del modelo, comúnmente $q \geq l$, $h(m)$ es la respuesta al impulso en función de $a(m)$ y $b(m)$, $n = 0, 1, \dots, N$

A través de la ecuación 2.2 y adaptándola en función de z , se obtiene la función de transferencia del modelo.

$$H(z) = \frac{Y(z)}{X(z)} = \frac{1 + \sum_{m=1}^l b_m z^{-m}}{1 - \sum_{m=1}^q a_m z^{-m}} \quad (2.3)$$

La ecuación 2.3 generalmente se le denomina ARMA (*autoregressive moving average*). A causa de la dificultad de obtener los coeficientes, normalmente es frecuente obtener únicamente los ceros de la función de transferencia es decir $X(z) = 1$ y por lo tanto $H(z) = Y(z)$, en ese caso estaríamos hablando de un modelo MA (*moving average*). Por otro lado, si se calcula únicamente los polos de $H(z)$ el modelo es el siguiente $Y(z) = 1$ y en consecuencia $H(z) = \frac{1}{X(z)}$, la salida de este modelo se define como un modelo autorregresivo AR (*autoregressive model*) [13] [14].

De los dos modelos mencionados el más utilizado es AR, dado que una estimación precisa de los parámetros puede ser obtenida a través de la resolución de las ecuaciones Yule-Walker que este

caso son un conjunto de ecuaciones lineales y pueden ser resueltas aprovechando que son matrices de Toeplitz [12].

Los coeficientes del método AR $\{a_m\}$ se obtienen resolviendo las ecuaciones Yule-Walker [15].

$$\begin{bmatrix} \gamma_x(0) & \gamma_x(-1) & \dots & \gamma_x(-q+1) \\ \gamma_x(1) & \gamma_x(0) & \dots & \gamma_x(-q+2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \gamma_x(q-1) & \gamma_x(q-2) & \dots & \gamma_x(0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_q \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \gamma_x(1) \\ \gamma_x(2) \\ \vdots \\ \gamma_x(q) \end{bmatrix} \quad (2.4)$$

Donde $\gamma_x(n)$ es la correlación cruzada entre $y(n)$ y $x(n)$ [15].

$$\gamma_x(n) = \begin{cases} - \sum_{m=1}^q a_m \gamma_x(n-m), & m > 0 \\ - \sum_{m=1}^q a_m \gamma_x(n-m) + \sigma_w^2, & m = 0 \\ \gamma_x^*(-n), & m < 0 \end{cases} \quad (2.5)$$

En cambio, para un proceso ARMA o MA, se debe resolver ecuaciones no lineales. Asimismo, el teorema de descomposición de Wold determina que los métodos AR, MA y ARMA están relacionados entre sí [13]. El teorema de Wold establece que es posible obtener un modelo ARMA o MA a partir de un método AR, si se utiliza valores de orden cuyos valores tiendan a infinito, por tanto, se puede concluir que el principal inconveniente para obtener una buena estimación espectral es la elección de un modelo que sea simple de calcular, es decir, que necesite calcular pocos parámetros. Del teorema de Wold se puede extraer una importante conclusión, aunque se elija un modelo erróneo de entre los tres mencionados, aún se puede obtener una estimación razonable utilizando para ello un orden de valor alto. Por esta razón, en este proyecto se utilizará el modelo AR.

La función de transferencia de un modelo AR viene definida por [16]:

$$H(z) = \frac{1}{1 - \sum_{m=1}^q a_m z^{-m}} \quad (2.6)$$

Evaluando la ecuación 2.6 en el dominio frecuencial donde $z = e^{j2\pi fT}$, se obtiene la siguiente función de transferencia [16].

$$H(f) = \frac{1}{1 - \sum_{m=1}^q a_m z^{-j2\pi f m T}} \quad (2.7)$$

La estimación espectral se puede obtener a través de tres pasos.

1. Elección del modelo adecuado

A lo largo de los años se han ido obteniendo resultados experimentales que permiten tener un conocimiento más detallado acerca del tipo de modelo que funciona mejor para cada situación.

2. Obtención de los coeficientes del modelo

Los coeficientes necesarios para calcular el espectro se obtienen a través de las muestras de la señal, de estas muestras la mitad de ellas se utilizan para obtener los coeficientes y la otra mitad son utilizadas para comprobar que el modelo escogido es el adecuado. Estos coeficientes son obtenidos a través del método de mínimos cuadrados.

Los estimadores paramétricos parten de que se dispone de cierta información sobre el proceso a modelar que puede resumirse en el orden q del proceso. Si el orden del modelo tiene un valor muy pequeño, el espectro que se obtendrá estará muy suavizado y por lo tanto con poca resolución,

pero por el contrario si se escoge un valor muy elevado, pueden aparecer picos espúreos en el espectro.

A continuación, se va a estudiar a través de MATLAB el efecto de no usar el orden adecuado, en concreto, si se utiliza un orden demasiado pequeño el espectro es demasiado suavizado comparado con el orden adecuado¹.

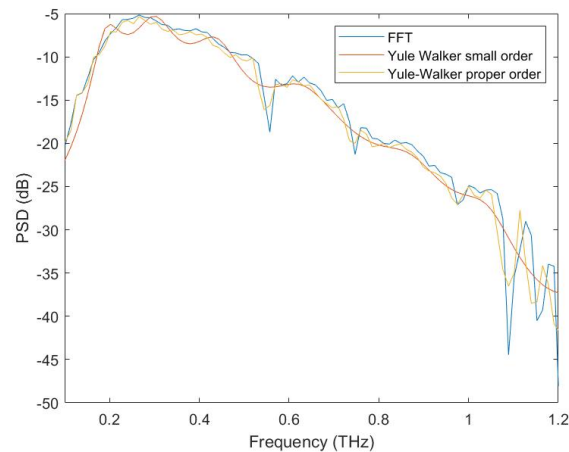


Figura 3. Efecto de no obtener un orden adecuado.

Como se puede observar en la figura 3 se ha obtenido el espectro para la señal de referencia y utilizando el método de Yule-Walker para un orden adecuado y por otro lado se ha realizado la estimación utilizando el mismo método, pero para un orden de valor mucho menor al óptimo, queda patente como utilizando un orden de valor mucho más pequeño se obtiene una estimación suavizada, pero cabe destacar que se puede apreciar como la estimación tiende a realizar la curva esperada.

3. Calcular el espectro de potencia

Un aspecto importante del uso de estos métodos es la obtención de una menor variabilidad y sesgo, por tanto, se obtiene una mejor resolución espectral en las estimaciones espectrales debido a tal y como se ha comentado anteriormente, los métodos paramétricos no tienen el efecto del uso de ventana.

2.2.2.1 Resolución espectral de señales con modelos paramétricos

Como se ha comentado, la resolución espectral, Δf , de los métodos no paramétricos, como por ejemplo la transformada de Fourier, está restringida a un valor $\Delta f = 1/T$, donde T corresponde con el periodo de muestreo de la señal. Los métodos paramétricos extrapolan la señal cuando se sale del intervalo a analizar y por esta razón utilizando estos métodos se debería de obtener una mejor resolución espectral.

La resolución espectral del modelo AR depende de la relación señal-ruido y del orden del modelo. A través de la siguiente expresión se puede expresar cual será la resolución espectral del modelado AR [14].

$$\Delta f_n = \frac{1.03}{T_s N (SNR(na+1))^{0.31}} \quad (2.8)$$

¹ Los pasos que se deben seguir para saber cuál es el orden adecuado y que método se ha empleado se explicará con mayor profundidad en el siguiente capítulo.

Donde na es el orden, $T_s N$ corresponde con el producto entre el tiempo de muestreo y el número de muestras de la señal, SNR indica la relación señal-ruido en unidades lineales.

Para profundizar más en este aspecto y comprobar todo lo comentado anteriormente se han creado dos tonos y a través de MATLAB se va a verificar si la resolución en frecuencia para los métodos paramétricos es mejor que los métodos convencionales.

Se van a generar dos tonos cuyas frecuencias estén separadas alrededor de 100 Hz, es decir, la frecuencia del primer tono es 30 Hz mientras que el segundo tono se encuentra en 130 Hz, seguidamente se mostrará tanto el espectro calculado a través de un método no paramétrico, FFT, como a través del modelo AR, obteniendo así la siguiente figura.

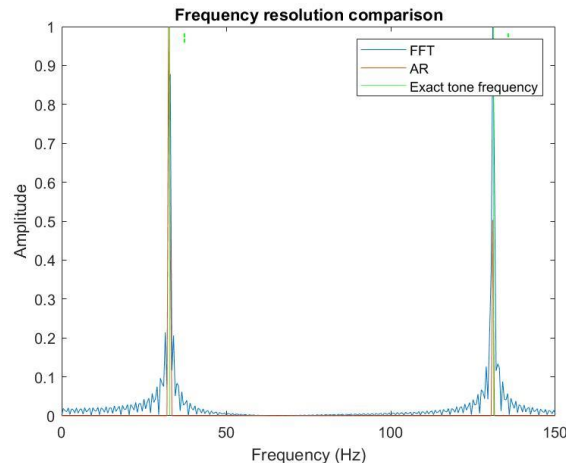


Figura 4. Comparativa resolución frecuencias lejanas.

La figura 4 nos muestra como obtenemos unos picos más definidos para AR que para el método no paramétrico, es decir, menor *spectral leakage*, además se ha añadido una línea punteada en las frecuencias exactas de los tonos creados donde se puede observar como para ambos métodos se consiguen acertar las frecuencias de los tonos creados.

Seguidamente, se van a acercar las frecuencias de los tonos creados, concretamente para una separación de 2 Hz, cuyo resultado se obtiene en la siguiente figura.

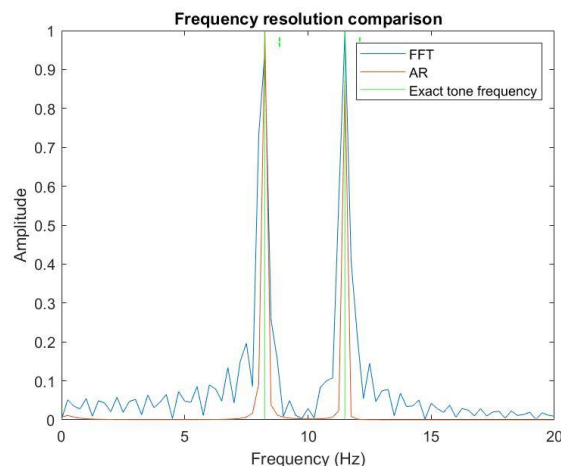


Figura 5. Comparativa resolución en frecuencias cercanas.

En la figura 5 se muestra dos tonos a frecuencias muy cercanas y como se puede observar para esta separación utilizando ambos métodos todavía se pueden distinguir con facilidad los dos tonos creados. Otro aspecto para tener en cuenta es fijarse en las frecuencias del tono, tal y como ocurre en la figura 4 ambos métodos son capaces de estimar con exactitud ambas frecuencias.

A continuación, se va a pasar a estudiar cuál es la resolución frecuencial para ambos métodos y comparándolo con los valores teóricos comprobar que con el modelado AR se obtiene una mejor resolución frecuencial. Para ello en las figuras 6 y 7² se va a mostrar en el eje x , la separación en frecuencia entre los dos tonos y en el eje y el valor mínimo de la amplitud del pico al valle entre los dos tonos, cuando ese valle sea 3 dB por debajo del pico según el criterio de Rayleigh no se puede distinguir y por lo tanto esa es la resolución en frecuencia que se quiere obtener, para saber dónde se encuentra exactamente esos 3 dB buscados se ha añadido una línea de puntos para indicarlo.

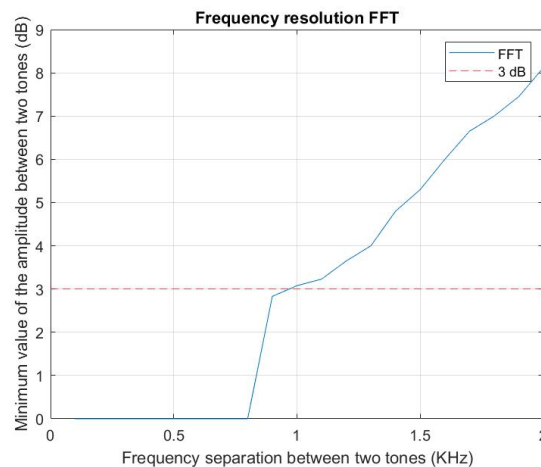


Figura 6. Resolución frecuencial modelo FFT.

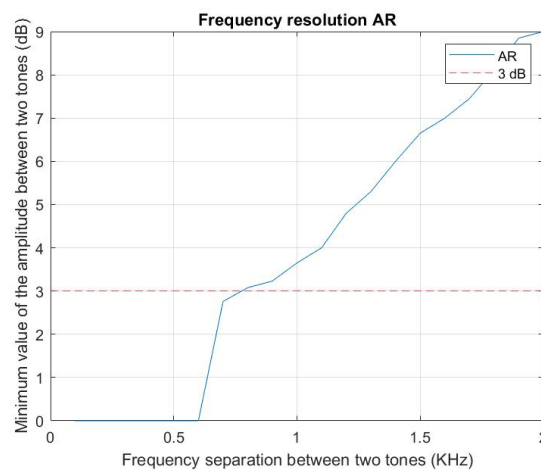


Figura 7. Resolución frecuencial modelo AR.

En primer lugar, en la figura 6 está representando cual es la separación frecuencial mínima en el cual los picos de los dos tonos dejan de distinguirse, tal y como se puede observar entre el rango de 0.9 - 1 KHz, rango de frecuencias donde se obtiene un valor de 3 dB, a partir de ese valor ya no se consigue pueden distinguirse los picos de los dos tonos, debido a que únicamente se observa un único pico.

² Se está utilizando una señal de 1500 puntos utilizando un modelado AR en concreto el método de Burg con un orden de valor 4, valor obtenido a través del criterio MSE en tiempo.

Por otro lado, en la figura 7 donde se está analizando la resolución frecuencial de los modelos AR, se puede observar cómo los 3 dB que marca el criterio de Rayleigh se encuentran alrededor de 0.8 kHz.

Seguidamente, se va a comparar la simulación realizada con los valores teóricos de resolución frecuencial calculada a partir de la expresión $\Delta f = 1/T$ y la ecuación 2.8, para la FFT se obtiene un valor de 1 KHz de resolución, mientras que para el modelado AR se obtiene una resolución frecuencial de 0.85 kHz, obteniendo así unos valores muy similares a los obtenidos experimentalmente. De esta forma se puede concluir que el modelado AR obtiene una mejor resolución frecuencial.

2.2.2.2 Métodos de estimación espectral autorregresiva (AR)

En este apartado se van a describir los diferentes tipos de métodos usados para estimar la densidad de potencia espectral en un modelado AR. Entre estos métodos se encuentran: el método de autocorrelación o método Yule-Walker, el método de la covarianza, el método de la covarianza modificada y el método de Burg. Los métodos anteriores realizan aproximaciones MLE [16], **estimador de máxima verosimilitud**, dado que para señales que contienen grandes cantidades de datos funciona como un estimador eficiente e insesgado.

2.2.2.2.1 Método Yule-Walker

Los parámetros AR calculados a través del método Yule-Walker son obtenidos mediante la minimización de la potencia del error de predicción [15][16].

$$\hat{\rho} = \frac{1}{N} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left| x(n) + \sum_{l=1}^q a(l)x(n-l) \right|^2 \quad (2.9)$$

$$r_x(n) = \frac{1}{N} \sum_{p=0}^{N-n-1} x^*(p)x(p+n), \quad n \geq 0 \quad (2.10)$$

Una de las características más importantes de este método es que la matriz de autocorrelación que se obtiene es positiva, la autocorrelación se obtiene a partir de las muestras de la señal y de estos datos estimados se obtienen los parámetros del modelo, con esta matriz positiva se garantiza que la forma utilizada por el estimados es sesgada.

La estimación del espectro de potencia viene definida en la siguiente expresión [16]

$$P_x^{\text{Yule-Walker}}(f) = \frac{\hat{\sigma}_q^2}{\left| 1 + \sum_{l=1}^q \hat{a}_q(l)e^{-j2\pi fl} \right|^2} \quad (2.11)$$

La ecuación 2.11 viene determinada por las siguientes variables: $\hat{a}_q(l)$ corresponde al valor de los parámetros AR y $\hat{\sigma}_q^2$ indica el valor cuadrático medio que se obtiene para un orden q . Uno de los aspectos más importantes para tener en cuenta a la hora de realizar estimaciones utilizando Yule-Walker es que si el segmento de datos a analizar es de longitud pequeña la estimación que se obtiene tiene una escasa resolución, si se utiliza datos de corta longitud el método más recomendado tal y como se verá en apartados siguientes es el método de Burg, pero por el contrario si el segmento a analizar es grande con Yule-Walker se obtiene una óptima resolución.

2.2.2.2.2 Método de la covarianza

Una de las características principales que tiene este método es que se obtienen los parámetros minimizando la potencia del error de predicción.[16]

$$\hat{\rho} = \frac{1}{N-q} \sum_{i=-\infty}^{\infty} \left| x(i) + \sum_{l=1}^q a(l)x(i-l) \right|^2 \quad (2.12)$$

De la ecuación 2.12 se puede llegar a concluir que la única desigualdad entre el método explicado en la sección anterior y el método de la covarianza se encuentra a la hora de estimar la potencia del error de predicción, debido a que no es necesario realizar *zero padding* ya que el rango del sumatorio utiliza los datos que han sido observados para evaluar $\hat{\rho}$

A través de la siguiente ecuación se puede obtener los parámetros del modelo AR.

$$c_x(i, j) = \frac{1}{N-q} \sum_{n=0}^{N-1} x^*(n-i)x(n-j), \quad (2.13)$$

Comparando las ecuaciones 2.10 y 2.12 utilizando este método escoge los primeros $N-q$ datos que al contrario que el primer método explicado se utilizan los N primeros datos, por tanto, si el segmento a estudiar contiene muchos datos, es decir, $N \gg q$, los extremos serán despreciables, obteniendo así una estimación similar a la que se obtiene con Yule-Walker.

2.2.2.2.3 Método de la covarianza modificada

Una de las características principales que tiene este método es la obtención de los parámetros minimizando la potencia del error de predicción hacia delante y hacia atrás. [14]

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{\rho}^f + \hat{\rho}^b) \quad (2.14)$$

donde:

$$\hat{\rho}^f = \frac{1}{N-q} \sum_{i=q}^{N-1} \left| x(i) + \sum_{l=1}^q a(l)x(i-l) \right|^2 \quad (2.15)$$

$$\hat{\rho}^b = \frac{1}{N-q} \sum_{i=0}^{N-1-q} \left| x(i) + \sum_{l=1}^q a^*(l)x(i-l) \right|^2 \quad (2.16)$$

Al igual que el método comentado en el apartado anterior solo se realiza la suma de los errores de predicción de las muestras que han sido observadas. Fijándose en las ecuaciones 2.15 y 2.16 se puede obtener una forma alternativa de observar este estimador, esta forma es: la estimación obtenida en la ecuación 2.16 es únicamente dar la vuelta y realizar la conjugación a los datos y una vez realizado este paso se puede obtener el nuevo conjunto de datos aplicando el predictor hacia delante.

A través de la siguiente ecuación se pueden obtener los parámetros AR

$$cm_x(i, j) = \frac{1}{2(N-q)} \sum_{m=q}^{N-1} x^*(m-i)x(m-j) + \sum_{l=0}^{N-1-q} x(l+i)x^*(l+j) \quad (2.17)$$

Si se compara las ecuaciones 2.13 y 2.17 se puede concluir que es indiferente si se escoge el método de la covarianza o la covarianza modificada ya que ambos métodos son idénticos a excepción de la definición de $cm_x(i, j)$

Este método fue propuesto en su origen por Nutall [17][18], Nutall lo denominó el método de hacia delante y hacia atrás, después fueron Ulrych y Clayton [19] quienes propusieron llamarlo aproximación cuadrática menor.

2.2.2.2.4 Método de Burg

Como se ha podido observar los métodos comentados anteriormente estiman de forma directa los parámetros AR, pero el método que se va a comentar en este apartado, en concreto, el método de Burg obtiene los parámetros de forma diferente, en primer lugar, se obtiene los coeficientes de reflexión y utilizando la recursión de Levinson se consigue la estimación de los parámetros, para ello los predictores que se utilizan son de distinto orden y además de forma recursiva minimiza la potencia de error.

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} (\hat{\rho}_{burg}^f + \hat{\rho}_{burg}^b) \quad (2.18)$$

donde:

$$\hat{\rho}_{burg}^f = \frac{1}{N-p} \sum_{i=p}^{N-1} \left| x(i) + \sum_{l=1}^p a_p(l)x(i-l) \right|^2 \quad (2.19)$$

$$\hat{\rho}_{burg}^b = \frac{1}{N-p} \sum_{i=0}^{N-1-p} \left| x(p) + \sum_{l=1}^p a_p^*(l)x(i+l) \right|^2 \quad (2.20)$$

2.2.2.2.5 Comparativa entre métodos autorregresivos

En la tabla 2 se realiza un resumen con las principales diferencias entre los diferentes métodos autorregresivos y en la tabla 3 se describen las ventajas e inconvenientes de cada uno de estos métodos.

Método paramétrico	Características
Yule-Walker	Se utiliza el criterio de mínimos cuadrados para minimizar el error
Covarianza	Se utiliza el criterio de mínimos cuadrados para minimizar el error hacia delante
Covarianza modificada	Se utiliza el criterio de mínimos cuadrados para minimizar el error hacia delante y hacia atrás
Burg	Los predictores utilizados, son predictores que a través de mínimos cuadrados minimiza el error hacia delante. Utiliza la recursión de Levinson-Durbin para obtener los coeficientes.

Tabla 2. Principales características métodos paramétricos.

Método paramétrico	Ventajas	Desventajas
Yule-Walker	Para señales de larga duración se obtiene una resolución óptima. Las señales que se obtiene con este método son estables.	Para señales con segmentos de datos cortos se obtiene una mala resolución.
Covarianza	Se obtiene una buena resolución para señales con segmentos largos de datos.	Los modelos obtenidos pueden ser inestables
Covarianza modificada	Las señales de corta duración tienen una mejor resolución No permite la separación de líneas espectrales	Los modelos obtenidos pueden ser inestables
Burg	Las señales de corta duración tienen una alta resolución Las señales obtenidas son estables.	Cuando valor del orden es elevado el espectro sufre separación de líneas

Tabla 3. Ventajas y desventajas métodos paramétricos.

Como se puede observar en las tablas 2 y 3, la dependencia que tienen los métodos paramétricos sobre el orden es su principal desventaja debido a que como se ha visto anteriormente la elección de un orden incorrecto provoca la obtención de resultados muy distintos a los que se obtiene con el valor óptimo. Al contrario de lo que ocurre en los métodos no paramétricos, la resolución depende de la duración de la señal, y por tanto en estos métodos se debe realizar una segmentación más grande.

Teniendo en cuenta tanto las ventajas como inconvenientes, así como las diferentes características que existen entre los distintos métodos paramétricos se llega a la conclusión de que este estudio se realizará utilizando los métodos Yule-Walker y método de Burg.

2.2.2.2.6 Implementación en MATLAB de los métodos de estimación espectral autorregresiva

Los métodos para modelar procesos AR disponibles en el *Signal Processing toolbox* de MATLAB son los siguientes.

a) Método Yule-Walker

La función para utilizar es *aryule*, dicha función se utiliza la recursión de Levinson-Durbin para resolver las ecuaciones de Yule-Walker y obtener así los parámetros AR, tal y como se ha comentado anteriormente se obtiene la minimización del error a través del criterio de mínimos cuadrados.

```
>> [parametros,error] = aryule(x,orden)
```

Donde la variable *parametros* es un vector que contiene los parámetros AR estimados, la variable *orden* contiene el valor del orden a utilizar, *error* es la varianza del error, *x* es la señal por modelar.

b) Método de la covarianza

La función *arcov* a través mínimos cuadrados obtiene los parámetros AR, al mismo tiempo se consigue que el error de predicción hacia delante sea minimizado.

```
>> [parametros,error] = arcov(x,orden)
```


c) Método de la covarianza modificada

La función *armcov*, se utiliza con el método de la covarianza modificada para obtener los parámetros a través del error de predicción hacia delante y hacia atrás por mínimos cuadrados.

```
>> [parametros,error] = armcov(x,orden)
```

d) Método de Burg

La función *arburg* se basa en usar de forma recursiva el algoritmo de Levinson-Durbin para obtener los parámetros por la minimización del error de predicción hacia delante y hacia atrás.

```
>> [parametros,error] = arburg(x,orden)
```

Todos estos métodos vienen recogidos en la función *ar* del *Systems Identification toolbox* de MATLAB para obtener la estimación en primer lugar como argumentos de entrada se debe de escoger tanto el orden como el criterio deseado para así poder hallar el modelo AR.

```
>> [estimacion] = ar(x,orden,criterio)
```

- aproximación = 'fb' – equivale a *armcov*- obtiene los parámetros a través del error de predicción hacia delante y hacia atrás por mínimos cuadrados
- aproximación = 'ls' – equivale a *arcov* - Mediante mínimos cuadrados se obtiene el modelo de predicción hacia delante minimizado.
- aproximación = 'burg' - equivale a *arburg* - se obtienen el modelo por la minimización de la media aritmética del error de predicción hacia delante y hacia atrás.
- aproximación = 'yw' - equivale a *aryule* – A través de mínimos cuadrados se obtiene una minimización del error de predicción.

2.2.2.2.7 Método de Pisarenko

Es un método que se basa en asumir que la señal está formada por un conjunto finito de exponenciales complejas. Este número debe conocerse a priori. La descomposición en frecuencia se obtiene a partir de los valores propios de la matriz de correlación [17]. En concreto, Pisarenko asume que la señal se compone de q exponenciales complejas a lo que se le debe de añadir el ruido blanco de forma que se tomará como dimensión de la matriz de correlación el valor $M = q+1$.

El estimador de Pisarenko puede escribirse de la siguiente forma (ecuación 2.21). Donde \hat{e}_M corresponde con el vector propio de la matriz de correlación, [15].

$$\hat{P}_{pis}(w) = \frac{1}{|a^H(w)w_0|^2} = \frac{1}{|a^H(w)\hat{e}_M|^2} \quad (2.21)$$

2.2.2.2.8 Algoritmo MUSIC

El algoritmo MUSIC se considera una ampliación del método anterior desarrollado por R. O. Schmidt en 1981 [25]. El método MUSIC al igual que el método Pisarenko asume que la señal está compuesta por q exponenciales complejas añadiéndole ruido. En concreto, la idea fundamental es realizar un promediado para mejorar la estimación de Pisarenko [14]

La expresión del estimador MUSIC es la siguiente.

$$\hat{P}_{music}(w) = \frac{1}{a^H(w)\hat{R}_{music}^{-1}a(w)} \quad (2.22)$$

Donde:

$$\hat{R}_{music}^{-1} = E_n E_n^H = \sum_{i=p+1}^M e_i e_i^H \quad (2.23)$$

En el cual $E = [e_1, \dots, e_n]$ son los valores propios del vector.

En general, MUSIC obtiene resultados de mayor precisión que el método de Pisarenko.

2.2.2.2.9 Comparación MUSIC con otros métodos

En esta sección vamos a estudiar el comportamiento de MUSIC con los métodos de estimación espectral estudiados anteriormente. Para hacer esta prueba se han creado dos tonos, concretamente a las frecuencias 1 THz y 1.02 THz y a estos tonos se les va a añadir ruido blanco para ver como estos algoritmos pueden llegar a modelarlo.

Con estos dos tonos también se calculará el espectro mediante la FFT y a través del método Yule-Walker. Al ser una señal de corta duración tal y como se ha explicado en apartados anteriores utilizaremos un orden que se encuentre dentro del rango $[N/3, N/2]$ [15] en concreto para esta señal utilizaremos un orden de $N/2$. Obteniendo las siguientes figuras.

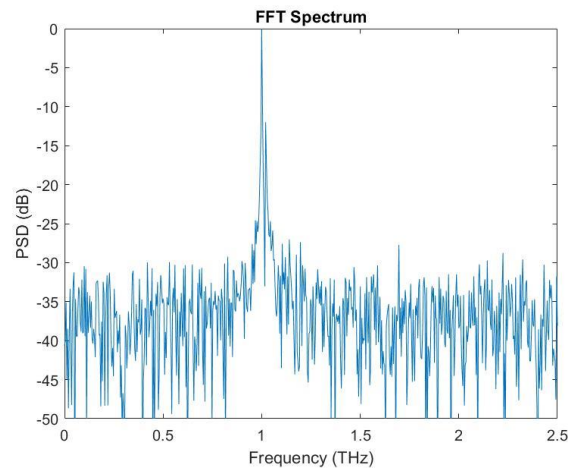


Figura 8. PSD mediante FFT.

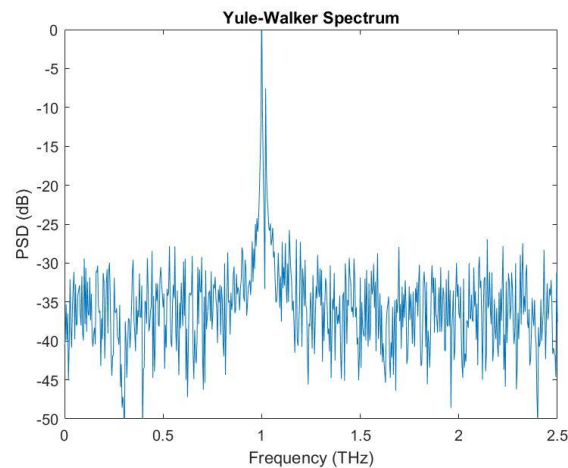


Figura 9. PSD obtenida mediante Yule-Walker.

La estimación de la señal que se muestra en las figuras 8 y 9 ha sido calculada utilizando 1000 puntos, además se ha introducido una SNR en ambas estimaciones de 30 dB.

A continuación, se pasará a obtener el espectro mediante el algoritmo Pisarenko/MUSIC. En primer lugar, se debe calcular el valor propio de la señal, este valor se obtiene a través de la función de MATLAB *eig*, como argumento de entrada se debe introducir una matriz de dimensiones $M \times M$, dicha matriz la debe definir el usuario dependiendo de las necesidades. En este caso al utilizar una señal que tiene 1000 puntos, se escoge un valor de $M = 10$ para así tener una matriz de dimensión 10×10 . Esta matriz tiene los valores de la señal a estudiar. Como

argumentos de salida proporciona una matriz en la cual las columnas contienen los vectores propios del tono creado.

A continuación, utilizando la ecuación 2.22 se obtiene la PSD cuyo resultado se muestra en la siguiente figura.

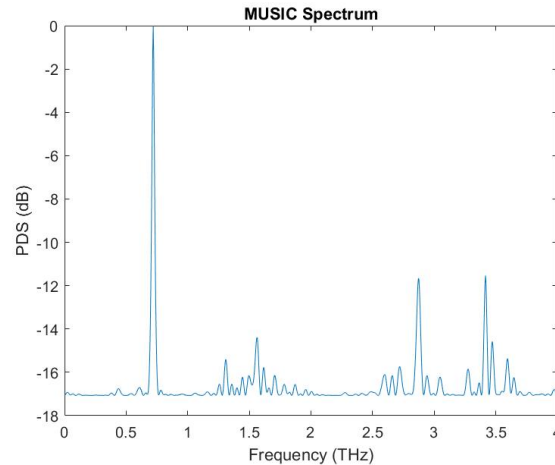


Figura 10. Espectro de los tonos creados mediante método MUSIC.

Comparando las figuras 8, 9 y 10 se puede apreciar que la FFT y el método Yule-Walker son prácticamente iguales y los dos métodos identifican correctamente los dos tonos. En cambio, puede observarse que el método MUSIC no es tan sencillo de utilizar. La estimación obtenida identifica un único tono y a una frecuencia incorrecta (0.75 THz en vez de 1 THz) además aparecen un conjunto de espúreos concretamente a la frecuencia de 1.7 THz, los cuales son espúreos artificiales.

2.3 Estimación espectral de señales en el dominio del tiempo utilizando métodos paramétricos

Una técnica muy utilizada para obtener los parámetros ópticos de un material en la banda de THz es la espectroscopia en el dominio de tiempo de terahercios (THz-TDS). El especial interés que se tiene por esta técnica es que los ensayos que se realizan no son invasivos sobre los materiales que se estudian.

Si bien se ha estudiado mucho su uso, el uso de estimadores paramétricos en este campo no se ha estudiado apenas. Solo hay dos trabajos [21], [22], que hayan estudiado la aplicación de estos métodos. El primero de ellos realizado por el grupo del profesor W. Tych de la universidad de Lancaster (UK) evalúa la estimación espectral de señales cortas, pero desde un enfoque distinto. Para ello utiliza una TOOLBOX creada por el autor denominada CAPTAIN.

Por otro lado, en el segundo trabajo, cuyos autores son F. Sanjuan y C. Galarza, se propone el uso de métodos autorregresivos como una forma de obtener una mejor resolución y variación espectral con respecto a la FFT.

Capítulo 3. Estimación espectral de señales de THz con métodos paramétricos

Como se ha descrito en el capítulo 2 de revisión del estado del arte, a través de distintos algoritmos se puede obtener la estimación espectral. Estos modelos paramétricos se pueden encontrar en MATLAB a través de su *toolbox Signal Processing*.

3.1 Objetivos

En este capítulo se pretende obtener el espectro de una señal pulsada de THz obtenida de un instrumento THz-TDS utilizando métodos paramétricos, en concreto de los métodos descritos en el capítulo anterior se van a utilizar Yule-Walker y Burg además se realizará una comparativa con la FFT. Para llegar a este objetivo se deben de realizar una serie de pasos previos como la búsqueda del orden del modelo.

3.2 Búsqueda del orden del modelo

La elección del orden del modelo es clave para obtener una buena estimación ya que condiciona el resultado de la estimación. Conforme el orden aumenta, se obtiene un mejor ajuste del modelo, pero si se utilizar un valor de orden demasiado elevado comienzan a aparecer oscilaciones indeseadas que provocan características espectrales artificiales, es decir, que originalmente no se encuentran en la señal, pero por el contrario si se utiliza un orden muy bajo la estimación que se obtiene es de una resolución muy suavizada si se compara con el espectro real.

Existen diferentes criterios que permiten obtener el valor óptimo.

En general se recomienda que, si se tuviera un número de muestras pequeño y además el proceso es ciego, el orden que se debería de escoger debería de estar dentro del rango $[N/3, N/2]$ para conseguir una buena estimación, donde N es el número de muestras [14].

Pero si por el contrario el proceso no es ciego y para un modelo específico se desea saber cuál es el orden adecuado, existen diferentes criterios para saberlo.

En primer lugar, Akaike propuso dos de los criterios más conocidos [23] [24]. El primero se denomina *criterio del error de predicción final*, *EPF*. En este caso el orden que se escogido es aquel que minimiza el índice de rendimiento.

$$EPF(p) = \hat{\sigma}_{wp}^2 \left(\frac{N+q+1}{N-q-1} \right) \quad (3.1)$$

Donde la variable $\hat{\sigma}_{wp}^2$ es la varianza estimada del error, N es el número de muestras y q es el valor del orden.

El segundo criterio es conocido como *criterio de información Akaike (AIC)* cuyo objetivo es obtener el valor del orden que minimiza el valor de $\hat{\sigma}_{wp}^2$

$$AIC(p) = \ln \hat{\sigma}_{wp}^2 + \frac{2p}{N} \quad (3.2)$$

A través del cálculo de la potencia del error es posible obtener el orden del modelo a utilizar, y este será el criterio para seguir en este trabajo. En concreto el parámetro a evaluar será el *MSE (Mean squared error)*. Se realizará una comparativa para comprobar si el orden se mantiene estable calculando el error obtenido realizando para ello una estimación temporal y el error obtenido realizando la estimación frecuencial.

Seguidamente, se va a mostrar las expresiones empleadas para calcular el error.

a) MSE temporal

En este caso se obtiene el valor del error a través de la ecuación 3.3

$$e(t) = x(t) - \text{ifft}(|X(w)|^{\text{AR}}) \quad (3.3)$$

Donde $x(t)$ es la señal medida y $\text{ifft}(|X(w)|^{\text{AR}})$ es la transformada inversa de Fourier de la señal estimada a través del método AR.

b) MSE frecuencial

En este caso obtenemos el MSE en el dominio de la frecuencia comparándolo con la FFT. El rango de frecuencias en el que calculamos este parámetro es entre 50 GHz hasta 1.2 THz, definimos este rango debido a que es donde se encuentra la información relevante de la señal, dado que a partir de 1.2 THz básicamente es ruido blanco.

$$e(t) = X(w) - (|X(w)|^{\text{AR}}) \quad (3.4)$$

En este caso el error se ha obtenido como la diferencia entre la FFT de la señal y la estimación espectral obtenido a través del método AR, en concreto en este caso se ha utilizado el método de Yule-Walker para realizar los cálculos oportunos.

Como ejemplo, se va a mostrar en la tabla 4 una comparativa en la cual se muestra el error cuadrático medio junto con el orden obtenido a través de los diferentes criterios citados anteriormente sobre una señal de referencia obtenida en un espectrómetro THz-TDS basado en fibra.

Conjunto de muestra	MSE estimado en tiempo	MSE estimado en frecuencia	Orden obtenido criterio Akaike	Orden estimado en tiempo	Orden estimado en frecuencia
Señal #1	0.13%	0.40%	124	125	128
Señal #2	0.33%	0.50%	121	123	126
Señal #3	0.22%	0.45%	126	124	129
Señal #4	0.23%	0.62%	128	126	131
Señal #5	0.18%	0.59%	119	122	125
Valor medio MSE	0.218%	0.512%			

Tabla 4. MSE y orden calculado de la señal de referencia.

Como se puede observar en la tabla 4 el error producido realizando la estimación frecuencial es mayor si lo comparamos con el MSE producido en la estimación temporal. En primer lugar, de los resultados obtenidos se observa que para los diferentes conjuntos de muestras el valor del orden se mantiene relativamente constante, es decir, se obtienen unos valores de orden relativamente cercanos entre ellos. Por otro lado, si se compara los resultados obtenidos en tiempo y frecuencia se observa como calculando el orden a través del tiempo se obtienen unos valores de orden menores a los obtenidos en el dominio frecuencial. Por otra parte, la columna del orden calculado a través del criterio Akaike se obtienen unos valores muy similares a los obtenidos en tiempo, a diferencia de los obtenidos en frecuencia cuyos valores están más alejados de los obtenidos por Akaike. Por tanto, después de analizar los resultados obtenidos en la tabla 4 se puede llegar a la conclusión que los criterios a utilizar para calcular el valor del orden son a través del criterio Akaike o MSE en tiempo.

A continuación, se va a analizar que ocurre con el valor del orden si se varía el número de muestras, para ello se empezará con 1000 puntos hasta llegar a la longitud completa de la señal a estudiar, para este estudio se va a comparar los criterios de Akaike y MSE en tiempo, obteniendo así los siguientes resultados.

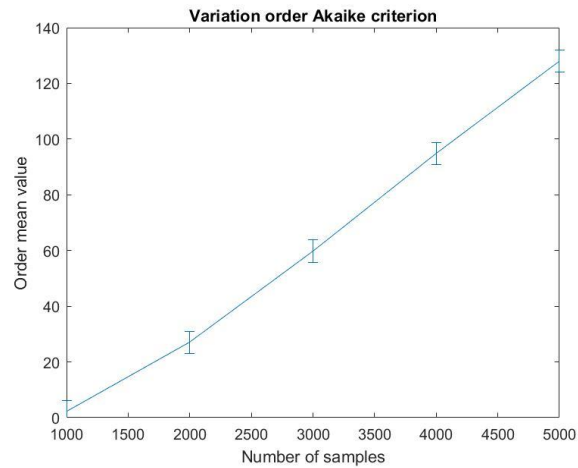


Figura 11. Variación del valor del orden criterio Akaike.

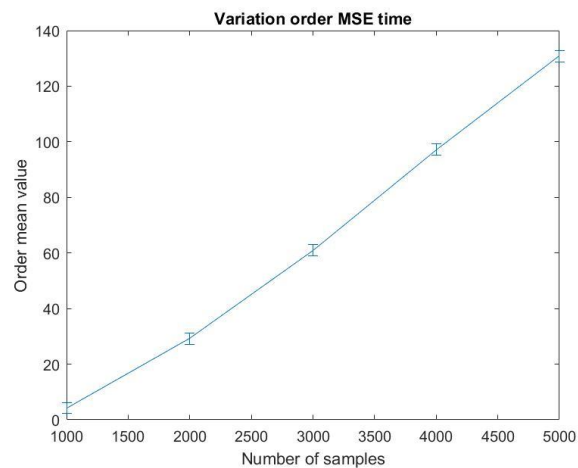


Figura 12. Variación del valor del orden criterio MSE en tiempo.

De las figuras 11 y 12 se observa que utilizando ambos criterios se obtiene la misma tendencia y en consecuencia se reafirma lo comentado en apartados anteriores, es decir, para señales con longitudes de datos grandes se obtienen valores de orden más elevados que por contra si la señal a estudiar tiene pocos datos el valor a obtener será pequeño. Un aspecto que destaca es la barra vertical del error de los datos, ya que como se observa es mayor para Akaike que para MSE en tiempo, esto se debe a que para Akaike la variación del valor del orden para las diferentes señales es un poco más grande que para MSE en tiempo.

Seguidamente, se va a estudiar que ocurre con el valor del orden, pero ahora utilizando el criterio MSE en frecuencia, para analizarlo se va a obtener el valor recortando el rango de frecuencia, es decir, se comenzará analizando el rango 500 GHz-1.2 THz y a partir de este rango se irá recortando el rango desde la frecuencia más elevada.

Obteniendo el siguiente resultado.

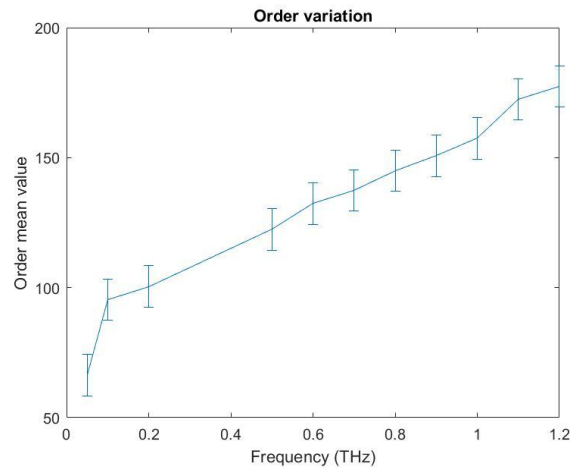


Figura 13. Variación del valor del orden.

La figura 13 muestra como a medida que el rango de frecuencias a estudiar es menor, disminuye el valor de orden a utilizar, otro aspecto a destacar es la barra vertical del error, a diferencia de lo que ocurre con el MSE en tiempo cuyo error es pequeño en este tipo de criterio se obtiene una variación del orden mayor.

De las figuras 11, 12 y 13 se concluye que el valor del orden aumenta conforme se tiene un mayor número de muestras, para el caso de los criterios Akaike y MSE en tiempo, o para el criterio MSE en frecuencia se obtiene un valor más elevado si el rango de frecuencias a analizar abarca valores de frecuencia elevados Al mismo tiempo de los tres criterios utilizados se ha observado que aquel que proporciona valores de orden más estable es MSE en tiempo seguido de Akaike y por último MSE en frecuencia.

3.3 Comparativa de la estimación espectral

En los apartados anteriores se ha explicado la importancia de elegir un valor de orden adecuado, así como el procedimiento que se ha seguido para obtenerlo. También se ha explicado los diferentes métodos de modelado AR que existen para obtener la estimación espectral. A continuación, se va a analizar como caracterizar materiales en la banda de THz mediante modelos paramétricos. Como se ha comentado anteriormente, en este trabajo se van a utilizar los métodos de Yule-Walker y Burg para obtener el espectro, para ello se han usado las funciones de MATLAB *pburg(x,orden,NFFT)*, *pyulear(x,orden,NFFT)*.

Los argumentos de entrada a estas funciones son las siguientes

x – Señal de entrada, esta señal debe ser introducida como vector columna, dicho vector columna será extraído de los ficheros de medidas de datos proporcionados.

orden – Valor del orden del modelo autorregresivo

NFFT – Número de puntos DFT

Como argumentos de salida se encuentra

pxx – Estimación PSD

Realizaremos la estimación de un conjunto de medidas que incluyen medidas de referencia y medidas de muestras formadas por policarbonato puro ambos conjuntos medidos mediante un instrumento THz – TDS disponible en el Centro de Tecnología Nanofotónica.

En los siguientes apartados se va a realizar una comparativa entre los métodos paramétricos de Yule-Walker y Burg con un método no paramétrico en este caso la transformada de Fourier.

3.3.1 Estimación espectral método de Yule-Walker

En primer lugar, se va a obtener una comparativa entre un método paramétrico (Yule-Walker) y un método no paramétrico (FFT), para más adelante realizar un análisis sobre el espectro obtenido para así poder determinar las posibles ventajas que pueda tener realizar las estimaciones a través del modelado AR.

En la figura 14 se muestra el resultado obtenido de realizar la estimación espectral utilizando FFT y Yule-Walker, obteniendo en ambos casos el espectro en frecuencia de la medida de la referencia o también denominada $X(w)$.

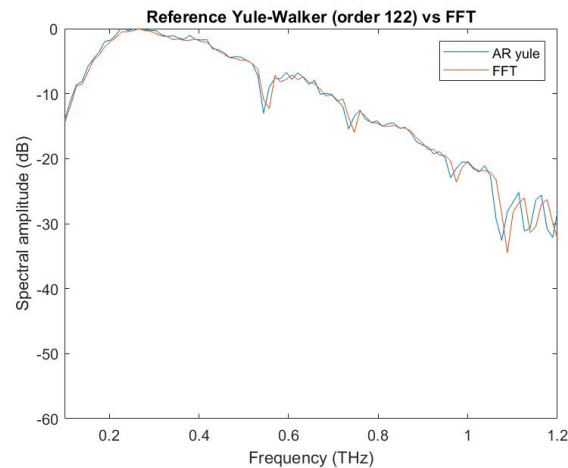


Figura 14. Estimación espectral Yule-Walker vs FFT.

El resultado que se muestra en la figura 14 ha sido obtenido a través de la función de MATLAB *pyulear* como señal de entrada se ha utilizado 2800 puntos de la señal #5, y en primer lugar se va a obtener el valor del orden para la señal #5 a través del criterio MSE en tiempo, obteniendo un valor de 122. De la figura 14 se puede apreciar como a través del método paramétrico (Yule-Walker) es posible conseguir una estimación muy aproximada a la que se obtiene mediante un método no paramétrico.

A continuación, se quiere obtener la misma estimación espectral, pero utilizando el criterio de Akaike, dicho valor es de 119. Mirando el valor del orden en un primer momento se debe pensar que el resultado a obtener no será muy diferente al obtenido en la figura 14, dado que dichos ordenes son de valores similares.

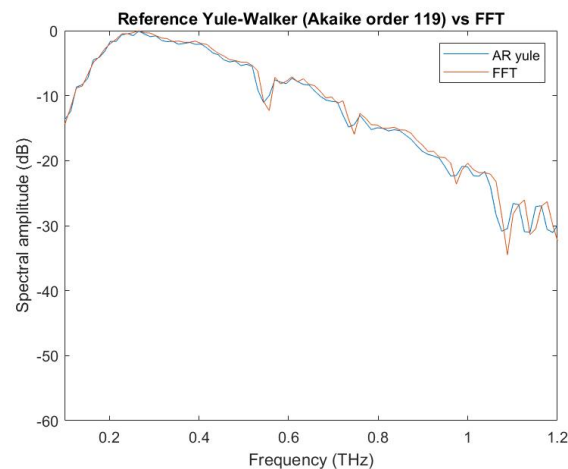


Figura 15. Estimación espectral Yule-Walker vs FFT criterio Akaike.

Tal y como se había comentado el espectro obtenido utilizando el criterio Akaike es muy similar al obtenido usando el criterio MSE en tiempo, al mismo tiempo se corrobora que como se está utilizando un orden de valor menor la estimación está más suavizada con respecto a la obtenida en la figura 14, dicho suavizado se aprecia con mayor claridad en los picos del espectro.

Seguidamente se va a estudiar la fidelidad de la estimación espectral obtenida con estos métodos.

Una de las características más importantes es la extrapolación que permite el modelo AR. Usando el rango de frecuencias hasta 1.2 THz para obtener el orden del modelo que permite obtener una buena estimación de las componentes relevantes de la señal y a la vez estimar el valor medio del ruido. Esto puede tener interés para ciertas aplicaciones como para facilitar la deconvolución.

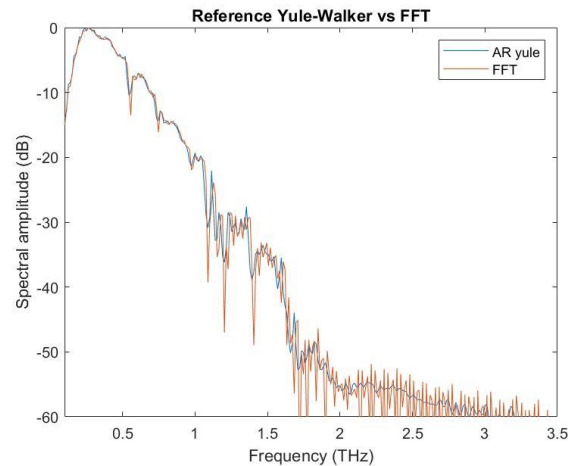


Figura 16. Extrapolación del espectro Yule-Walker vs FFT.

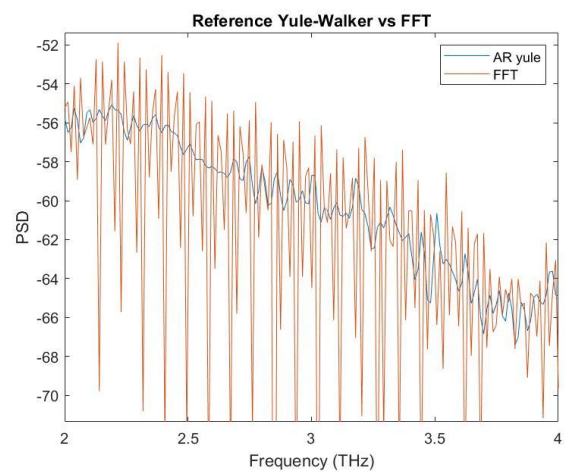


Figura 17. Zoom de la zona de ruido Yule-Walker vs FFT.

Cuando se visualiza la zona de ruido de la señal tal y como se aprecia en las figuras 16 y 17, el método Yule-Walker, se obtiene una señal que modela la media de ruido de manera muy buena además comparándola con la FFT no se obtiene los picos de ruido tan acentuados.

3.3.2 Estimación espectral método de Burg

El objetivo de esta sección es realizar el mismo procedimiento que el realizado en apartados anteriores, pero en esta ocasión se utilizará otro método concretamente el método Burg.

Tal y como se ha realizado en apartados anteriores en primer lugar se debe de calcular el orden para el modelo, obteniendo los siguientes resultados.

Conjunto de muestra	Criterio Akaike	Orden estimado en tiempo	Orden estimado en frecuencia
Señal #1	193	197	205
Señal #2	203	206	218
Señal #3	195	198	210
Señal #4	207	206	217
Señal #5	207	209	215

Tabla 5. Orden de la señal de referencia utilizando método de Burg.

La tabla 5 muestra como para el método de Burg utilizando el criterio MSE en frecuencia se obtiene unos valores de orden más elevados que para Akaike y MSE en tiempo los cuales tienen unos valores más parecidos entre sí. Por otro lado, si se compara la tabla 4 con la tabla 5 se observa que el método de Burg necesita un orden de mayor valor que si se utiliza el método de Yule-Walker.

Una vez obtenido el orden, se pasará a obtener la estimación espectral para la misma señal de referencia y el mismo número de puntos que la utilizada en el apartado 3.3.1. La función de MATLAB utilizada ha sido *pburg*.

Obteniendo el siguiente resultado.

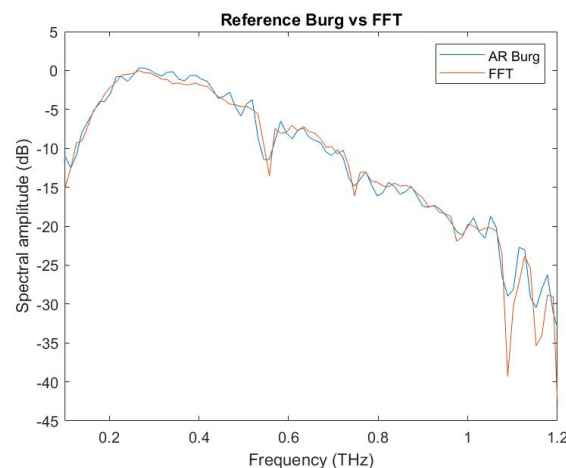


Figura 18. Estimación espectral método de Burg vs FFT.

En la figura 18 se observa como la estimación espectral no es tan buena como con Yule-Walker, figura 14, el método de Burg produce un rizado en la estimación que es artificial. Por tanto, se llega a la conclusión de que el método de Burg, aunque proporciona una estimación aproximada a la obtenida con la FFT, no es el método adecuado si se va a utilizar señales con ventanas grandes.

3.3.3 Estabilidad método de Yule-Walker

Se puede estudiar la estabilidad del estimador espectral estudiando la varianza. En la figura 19 se muestra la desviación estándar, utilizando la estimación espectral calculada a través del método de Yule-Walker dicha desviación ha sido calculada para cada frecuencia a partir de cinco medidas de señales de referencia, para ello se ha escogido el orden óptimo para cada señal utilizada, es decir, se obtiene un orden distinto para cada señal. El orden de las señales utilizadas en la figura 19 se ha calculado a través del MSE en tiempo.

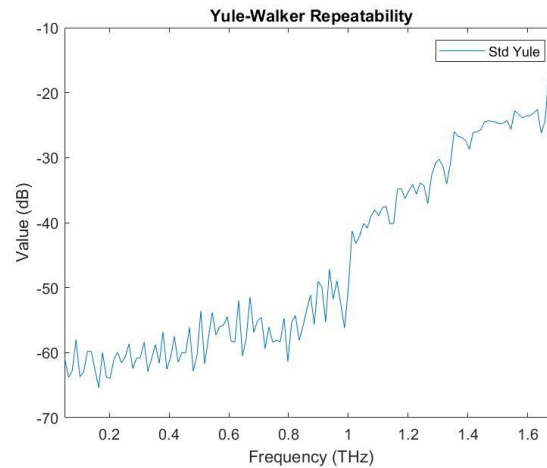


Figura 19. Repetibilidad método de Yule-Walker.

La figura 19 muestra el rango de frecuencias 0.1-1.7 THz para así poder comprobar que ocurre con la desviación estándar cuando la señal es prácticamente ruido. En primer lugar, se observa como para el rango 0.1-1THz que prácticamente es señal útil se obtiene unos valores constantes y con unos valores bajos de desviación, al mismo tiempo se observa como conforme se va subiendo en frecuencia y la señal presenta ruido la desviación estándar aumenta gradualmente obteniendo valores de desviación más altos.

3.3.4 Estabilidad método de Burg

A continuación, tal y como se ha realizado en el apartado 3.3.3 se estudiará la estabilidad del estimador espectral a través de la varianza. En la siguiente figura se muestra la desviación estándar de la estimación espectral usando el método de Burg. En primer lugar, se obtendrá la desviación estándar para el espectro cuyos valores de ordenes han sido calculado a través del criterio MSE en tiempo.

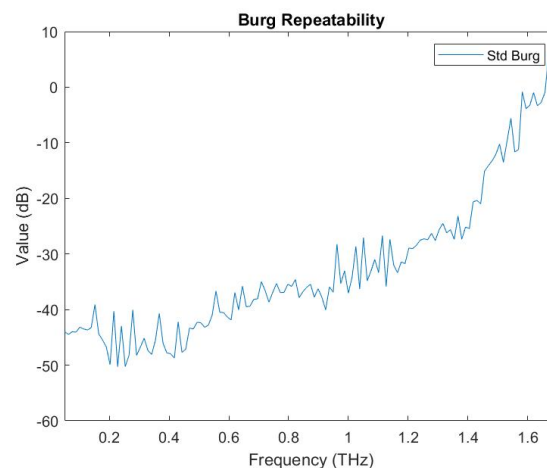


Figura 20. Repetibilidad método de Burg.

La figura 20 muestra la desviación estándar para el método de Burg, de esta figura se observa una misma tendencia que para Yule-Walker, es decir, en el rango de frecuencias donde se encuentra la señal útil se obtiene una desviación constante que a diferencia de la señal que contiene ruido donde esta desviación aumenta considerablemente.

3.3.5 Comparativa método Yule-Walker vs Burg

Una vez realizado las comparativas entre los métodos paramétricos y los no paramétricos se ha visto que con el método de Yule-Walker se obtiene una estimación más acertada del espectro que

con Burg, que, por el contrario, resalta más ciertas características espectrales. En este apartado se va a realizar una comparativa entre ambos métodos paramétricos para analizar y discutir las diferencias que existen.

A continuación, se va a mostrar una figura donde se representa la estimación de la señal #5 calculada a través del método de Yule-Walker y Burg, cuyos ordenes ha sido calculado a través del MSE en tiempo, siendo estos 122 y 209 respectivamente.

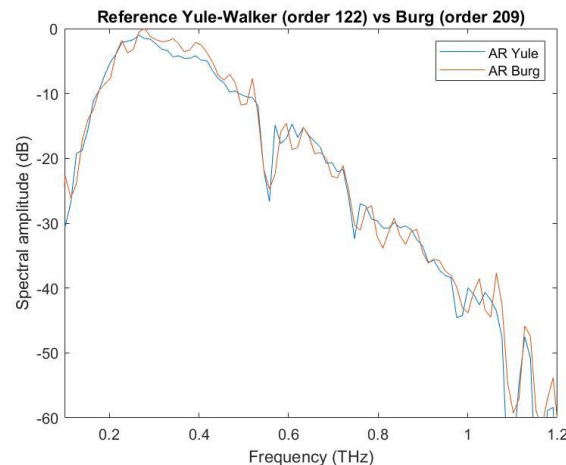


Figura 21. Comparativa métodos de Yule-Walker vs Burg.

A primera vista de la figura 21 se puede observar como la estimación obtenida a través del método de Burg presenta picos agudos a lo largo de la señal, en cambio el espectro obtenido a través del método Yule-Walker ocurre al contrario los picos que aparecen son poco agudos, esto confirma lo comentado en apartados anteriores, donde se afirmó que el método de Burg para ventanas de datos grandes³ presenta picos espúreos que no corresponden con la estimación deseada, esto es debido a que el método de Burg al conocer las características más relevantes a priori las resalta más que otros métodos, en este caso los picos, pero se debe de tener en cuenta que después introduce un rizado de fondo que no es deseado, un ejemplo de estos picos espúreos se puede observar en los picos que se encuentran en torno a 1 THz.

Por lo tanto, comparando ambos métodos se puede concluir que sí se van a utilizar ventanas de datos grandes, el método más adecuado es Yule-Walker por la menor presencia de posibles picos espúreos.

En la figura 21 se ha visto la comparativa entre los dos métodos para una longitud de datos grande, y se ha comprobado como Yule-Walker puede resultar más conveniente. En apartados anteriores se ha comentado que para ventanas de datos cortas⁴ ocurre lo contrario, es decir, el método de Burg realiza una mejor estimación que Yule-Walker, por esta razón se va a obtener una gráfica comparando ambos métodos para una ventana de datos cortas y así comprobar que aquello que la literatura dice es correcto.

A continuación, se va a mostrar en primer lugar una figura 22 que muestra la traza temporal para así poder tener constancia de cuantos puntos de la señal se están cogiendo.

³ Número de puntos utilizados: 2500

⁴ Número de puntos utilizados: 1000

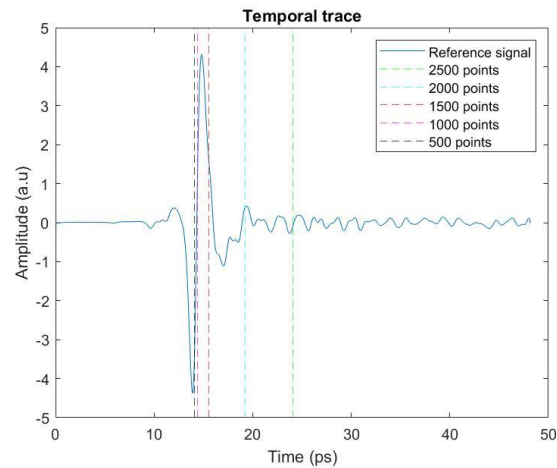


Figura 22. Localización del nº de puntos en la traza temporal.

A continuación, se muestra el espectro obtenido utilizando Burg y Yule-Walker para pocos coeficientes, cuyos ordenes han sido obtenidos a partir del MSE en tiempo cuyos valores son 12 y 6 respectivamente.

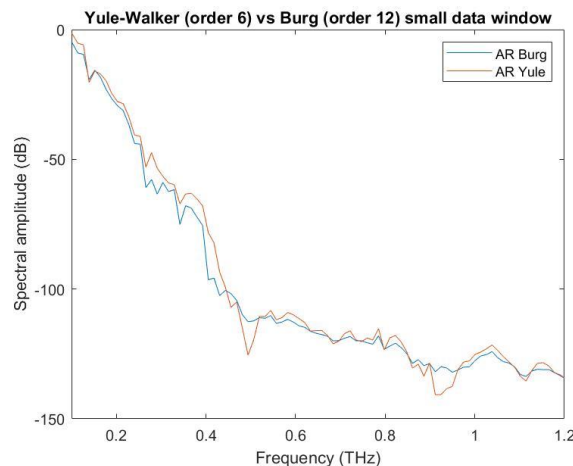


Figura 23. Comparativa métodos de Yule-Walker vs Burg pocos coeficientes.

De la figura 23 se puede observar como la estimación obtenida con Yule-Walker para una ventana corta de datos es una estimación con mucho suavizado y donde se producen picos que no se deberían, un ejemplo se encuentra el pico situado a 900 GHz, pero en cambio con el método de Burg el espectro obtenido de la señal de referencia tiene más coherencia. El método de Yule-Walker no se obtiene de manera adecuada debido a que para pocos datos los coeficientes AR presentan un gran sesgo.

A continuación, se va a comparar la desviación estándar de ambos estimadores tanto para una estimación con muchos coeficientes como para pocos coeficientes, a través del cálculo de la desviación estándar, obteniendo la siguiente figura.

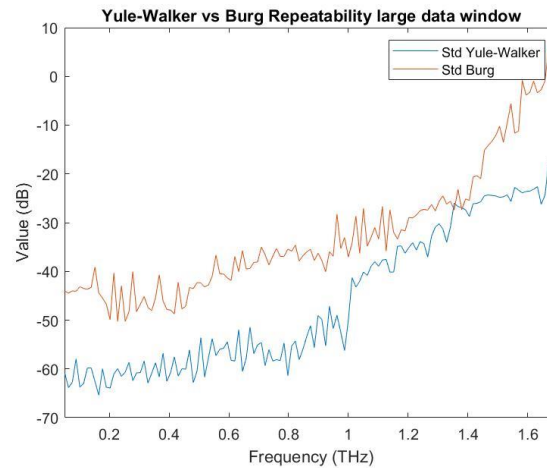


Figura 24. Repetibilidad métodos de Yule-Walker vs Burg ventana grande de datos.

En la figura 24 se ha representado la desviación estándar para el caso de tener una ventana grande de datos, y como resultado se observa que la desviación es mucho mejor para el método Yule-Walker, por lo tanto, se reafirma la idea que Burg no es un método adecuado para ventanas grandes de datos.

A continuación, se obtendrá una gráfica cuyo objetivo es corroborar aquello que dice la literatura y que se ha mostrado en la figura 22, en la que para ventana de datos corta el método de Burg se obtienen mejores resultados a nivel de estabilidad.

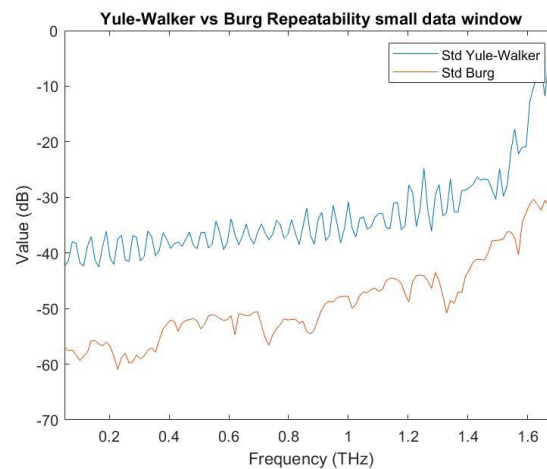


Figura 25. Repetibilidad métodos de Yule-Walker vs Burg ventana pequeña de datos.

En la figura 25 se puede observar que la desviación estándar para una ventana de datos corta es mucho más pequeña para el método de Burg que para el método de Yule-Walker y por lo tanto proporciona una estimación mucho más fiable, quedando comprobado que para este tipo de ventanas el mejor método es el de Burg.

Capítulo 4. Extracción de constantes ópticas mediante métodos paramétricos

En el capítulo anterior se ha observado como a partir de los métodos paramétricos se ha sido capaz de estimar la densidad espectral de potencia de forma similar a usando métodos no paramétricos, en este caso la transformada de Fourier. En este capítulo se va a estudiar el uso de modelos autorregresivos para estimar directamente una función de transferencia de un material. A partir de esta función se podrá derivar las constantes ópticas de los materiales y por tanto su caracterización electromagnética.

4.1 Extracción de la función de transferencia

A continuación, se va a obtener la función de transferencia, a través de dos procedimientos diferentes se va a conseguir llegar al objetivo propuesto. En primer lugar, utilizando las estimaciones espectrales calculadas en el capítulo anterior mediante la división de la estimación de la señal de referencia y la señal de la muestra, se obtendrá la respuesta en frecuencia. En segundo lugar, se obtendrá la respuesta en frecuencia a través de una estimación directa, es decir, introduciendo ambas muestras tanto $x(t)$ como $y(t)$ en una función de MATLAB que está orientada a la caracterización de sistemas dinámicos, se obtendrá directamente la función de transferencia, sin la necesidad de pasar primero por la estimación de cada muestra.

4.1.1 División espectral

La primera aproximación es usar el modelo AR para la estimación espectral de las dos medidas, referencia y muestra, y a partir de ellas obtener la respuesta en frecuencia que caracteriza el material. Las pruebas se van a hacer para muestras de policarbonato puro.

En primer lugar, se debe decidir qué método paramétrico se va a utilizar. Tal y como se ha visto en el capítulo 3, las pruebas indican que se obtienen mejores resultados con el método Yule-Walker. Una vez decidido el método se debe obtener el espectro tanto de la muestra como de la referencia del material deseado.

En segundo lugar, se obtiene el orden de la respuesta en frecuencia, este orden no debería de ser un valor muy elevado debido a que tenemos información previa sobre el material y se sabe que tiene una respuesta casi plana. El procedimiento para obtener el orden es el mismo que el comentado en el capítulo 3, es decir, minimizando el error MSE de la función de transferencia. Aplicando el procedimiento obtenemos valor de orden 32.

Mediante un script de MATLAB y utilizando la función *pyulear*, se consigue ambas estimaciones necesarias y mediante una división entre ambos espectros obtenemos la siguiente figura.

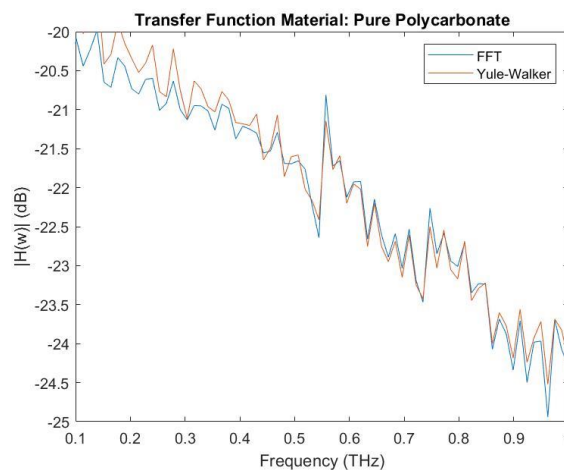


Figura 26. Función de transferencia técnica división de espectros.

De la figura 26 se aprecia como a través de la división espectral se obtiene un buen ajuste, uno de los inconvenientes de usar esta técnica es debido a que el resultado que nos proporciona MATLAB es únicamente el módulo de la función de transferencia y por lo tanto se pierde la fase y por lo tanto no se puede extraer los parámetros ópticos deseados.

4.1.2 Estimación directa

A continuación, se obtendrá la función de transferencia mediante estimación directa. Primeramente, se debe realizar la estimación de los coeficientes de la función de transferencia para ello se utiliza la función de MATLAB *aryule*. Tal y como se ha comentado en el capítulo 2 esta función devuelve los parámetros autorregresivos, en este caso se sigue usando el valor de orden obtenido en el apartado anterior, como argumento de entrada se debe introducir la respuesta en frecuencia, y seguidamente realizamos el cálculo del espectro asociado.

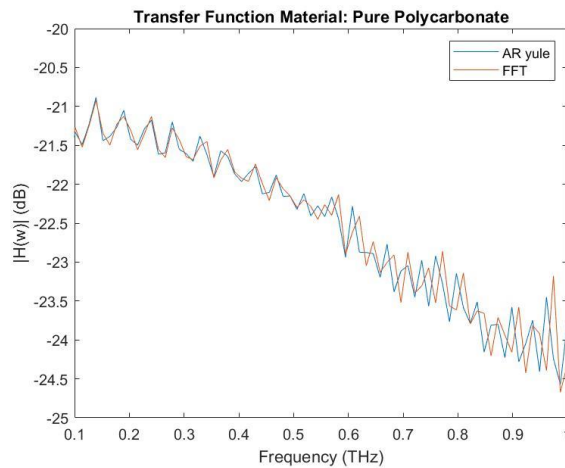


Figura 27. Función de transferencia técnica estimación directa.

Como se puede apreciar en la figura 27 se obtiene una función de transferencia que mantiene un buen ajuste si se compara con la FFT. Tal y como se ha comentado anteriormente *pyulear* no proporciona el valor de la fase, en cambio la función *aryule* si proporciona el valor de la fase y por lo tanto será la técnica que se utilizará a lo largo del trabajo para así poder obtener en apartados siguientes los parámetros ópticos deseados.

De las dos formas propuestas para obtener la respuesta en frecuencia y observando los resultados e inconvenientes que se obtienen, se puede concluir que la mejor forma para obtener el objetivo de este capítulo es a través de la estimación directa.

4.1.3 Comparativa de los espectros obtenidos

En este apartado se quiere comprobar que ocurre cuando extendemos las frecuencias en la gráfica para estudiar que ocurre con el ruido si se consigue atenuarlo o por el contrario tiene la misma tendencia que la FFT. Al mismo tiempo también se va a comprobar si se consigue el mismo resultado utilizando el orden que ha sido calculado en tiempo y en frecuencia

A continuación, se mostrará el resultado obtenido para el mismo caso de una muestra de policarbonato, pero utilizando un orden calculado en tiempo.

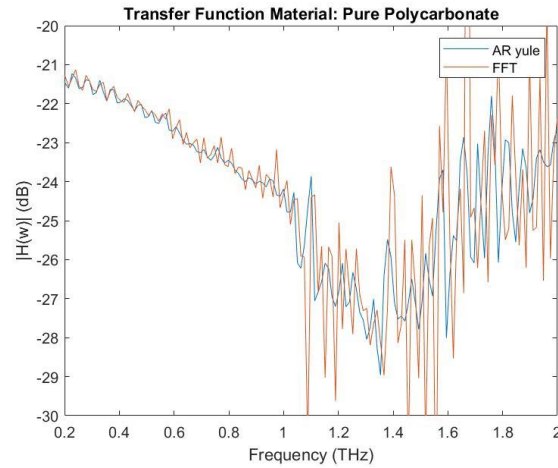


Figura 28. Extrapolación de la respuesta en frecuencia a través de estimación directa y comparación con la FFT ordenado en tiempo.

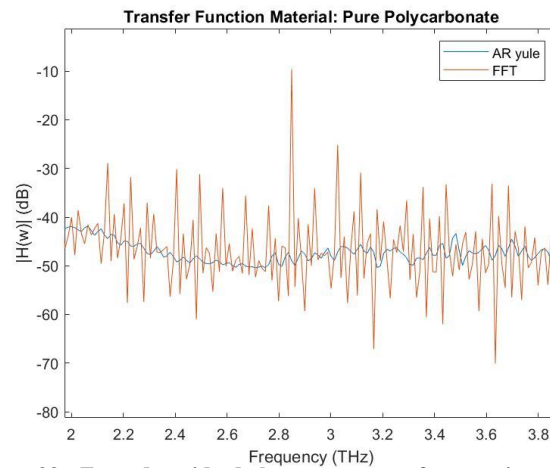


Figura 29. Zona de ruido de la respuesta en frecuencia a través de estimación directa y comparación con la FFT ordenado en tiempo.

En el capítulo 3 se mostró la extrapolación de la señal de referencia y se comprobó que hay una buena evolución media del ruido, en este apartado se ha querido comprobar dicha media del ruido, pero para la respuesta en frecuencia y tal y como se puede observar en la figura 28 y 29 puede reafirmar que utilizando un método AR la evolución media del ruido es mucho mejor que directamente con los métodos no paramétricos.

4.2 Extracción de los parámetros ópticos

A partir de la muestra estudiada se puede calcular los parámetros ópticos que sean de interés, en este caso se va a obtener el coeficiente de absorción dependiente de la frecuencia, así como el índice de refracción. Ambos parámetros pueden obtenerse a partir de la diferencia entre la referencia y la muestra $\phi_{reference}(v) - \phi_{sample}(v)$, donde v es la frecuencia. Para obtener el índice de refracción se necesita conocer el valor del espesor de las muestras, denominada d , en este caso al estar estudiando un material de policarbonato puro, se tendrá un espesor de 2 mm . Aplicando la siguiente expresión se obtiene el índice de refracción, n .

$$n(v) = 1 + \frac{(\phi_{reference}(v) - \phi_{sample}(v))c}{2dv\pi} \quad (4.1)$$

Por otro lado, la expresión que proporciona el coeficiente de absorción es la siguiente:

$$\alpha_{\max}d = 2 \ln \left[D(v) \frac{4n(v)}{(n(v) + 1)^2} \right] \quad (4.2)$$

A continuación, se va a mostrar la figura 30 donde se realiza una comparación entre los índices de refracción calculados utilizando los métodos paramétricos, en concreto utilizando Yule-Walker, y por otro lado métodos no paramétricos, FFT.

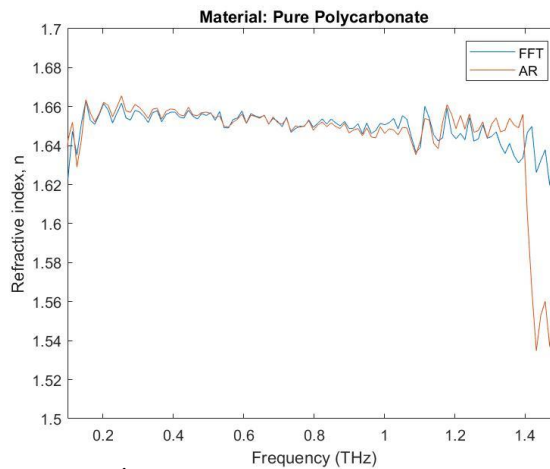


Figura 30. Índice de refracción policarbonato puro método paramétrico vs método no paramétrico.

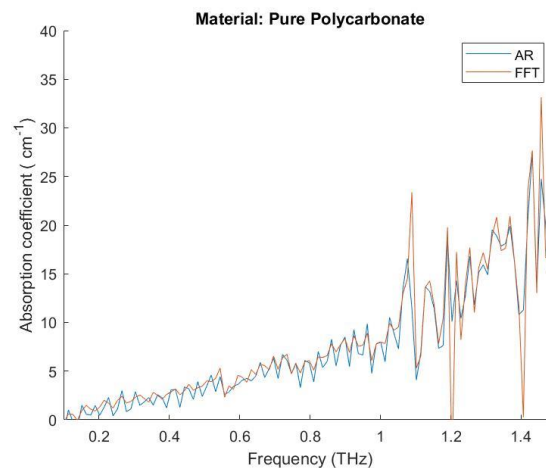


Figura 31. Coeficiente de absorción policarbonato puro método paramétrico vs método no paramétrico.

En las figuras 30 y 31 se observa como el método AR calcula de manera aproximada tanto el coeficiente de absorción como el índice de refracción. De estas figuras se puede destacar el rizado que se produce para el modelado AR para un valor de orden óptimo.

A continuación, se ha realizado una búsqueda en diferentes trabajos, los cuales se ha medido tanto el índice de refracción como el coeficiente de absorción en THz del material policarbonato puro [28] [29] [30] de las gráficas de estos trabajos se han obtenido los datos numéricos y a continuación se han añadido a las gráficas ya calculadas anteriormente, obteniendo los siguientes resultados

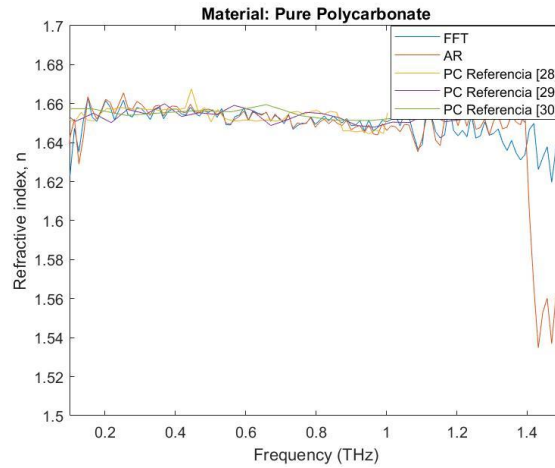


Figura 32. Índice de refracción policarbonato puro método paramétrico vs método no paramétrico comparando con diferentes estudios.

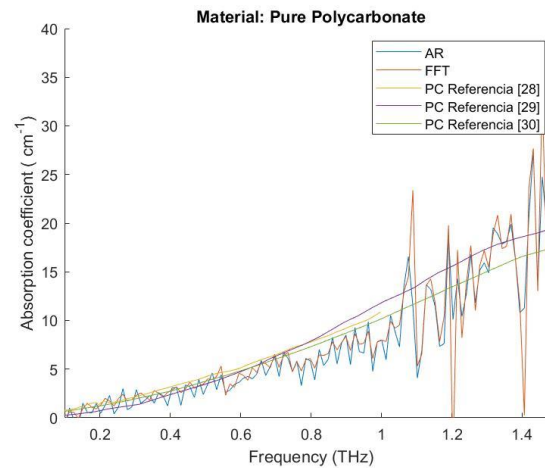


Figura 33. Coeficiente de absorción policarbonato puro método paramétrico vs método no paramétrico comparando con diferentes estudios.

De las gráficas 32 y 33 se observa cómo tanto para el índice de refracción como para el coeficiente de absorción los datos obtenidos a través de los diferentes trabajos tienden a los mismos valores que los mostrados en las figuras 30 y 31

Seguidamente se utiliza las mismas expresiones ecuación 4.1 y 4.2 para calcular el coeficiente de absorción para la lactosa monohidrato, para ello en primer lugar se debe de calcular el orden óptimo para un modelado AR, utilizando el método de Yule-Walker.

Material	Orden Yule-Walker
Lactosa Monohidrato	12

Tabla 6. Orden método paramétrico monohidrato de lactosa.

A continuación, se va a mostrar en la figura 34 donde se realiza una comparación entre ambos índices de refracción calculados para los diferentes métodos.

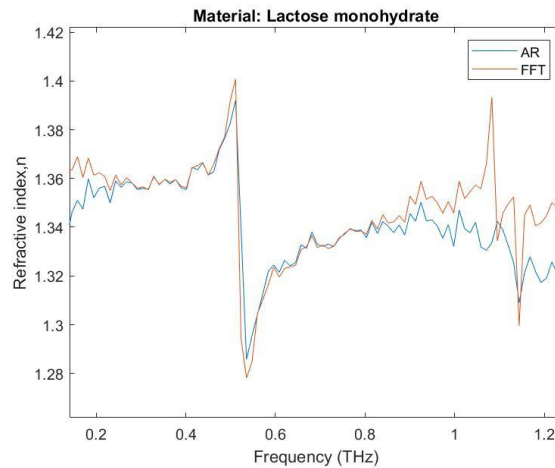


Figura 34. Índice de refracción lactosa método paramétrico vs método no paramétrico.

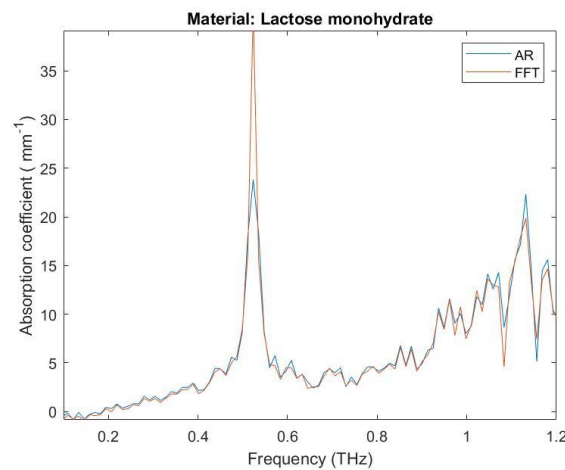


Figura 35. Coeficiente de absorción lactosa método paramétrico vs método no paramétrico.

De las figuras 30, 31, 34 y 35 se observa el método AR obtiene unos valores de índice de refracción como de coeficiente de absorción bastante similares a los que se obtiene a través de la FFT. Hay que destacar dos puntos. En primer lugar, se observa que cuando se acerca a frecuencias altas, alrededor de 1.2 THz, los valores obtenidos a través del modelado AR empiezan a variar respecto a los de la FFT y, por otro lado, tal y como se ha visto en figuras anteriores se aprecia como los picos que puedan aparecer los métodos paramétricos no son capaces de estimarlos de manera exacta.

4.2.1 Estabilidad parámetros ópticos

Tal y como se realizó en el capítulo 3, en este apartado se va a estudiar a través de la desviación estándar la estabilidad de los parámetros ópticos obtenidos en el apartado anterior para cinco medidas de muestra de policarbonato puro, obteniendo los siguientes resultados.

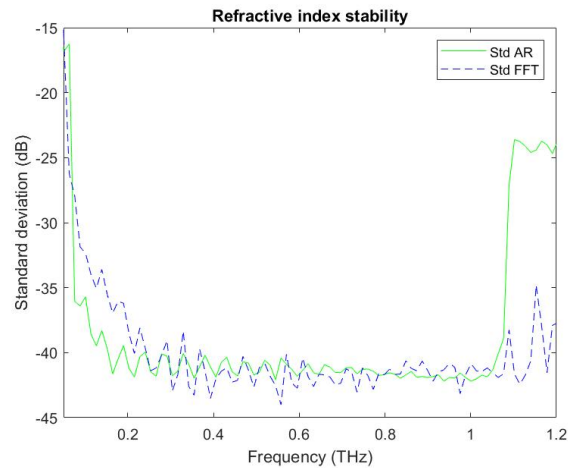


Figura 36. Estabilidad índice de refracción método paramétrico vs método no paramétrico.

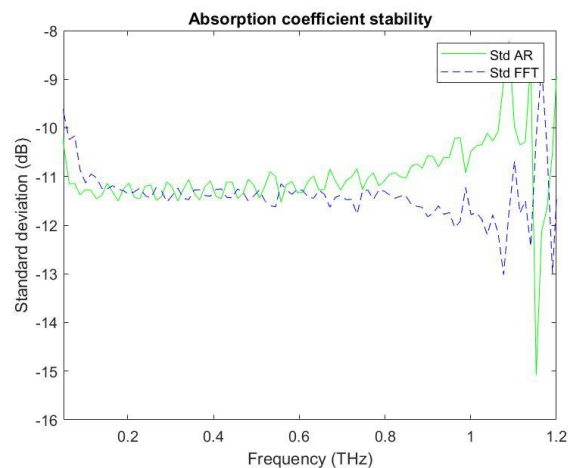


Figura 37. Estabilidad coeficiente de absorción método paramétrico vs método no paramétrico.

De las figuras 36 y 37 se observa que tanto para el índice de refracción como para el coeficiente de absorción si se compara los dos métodos utilizados se obtienen valores de desviación prácticamente idénticos pero un aspecto que llama la atención y que ha sido comentado con anterioridad en las figuras 30 y 31 es que cuando se está en frecuencias elevadas comienza a no obtener los resultados esperados y por lo tanto en estas figuras queda reflejado como la estabilidad a partir de 1 THz comienza a empeorar.

4.3 Precisión de la estimación AR

En el capítulo 3 se ha visto como a la hora de obtener la estimación de la señal de referencia se producía un offset en los picos.

El vapor de agua es una medida interesante de analizar en este caso debido a que es un material que ha sido muy estudiado y se conoce con bastante precisión donde se encuentran los picos extractos, para obtener una buena estimación se necesita tener unas condiciones atmosféricas normales, es decir, unas condiciones normales. Todas las medidas que van a ser analizadas están realizadas en el laboratorio a una temperatura ambiente de 25 °C. Esto es un dato importante para tener en cuenta debido a que a medida que la temperatura varía lo hace también los picos de absorción.

A continuación, se obtendrá la respuesta en frecuencia para el vapor de agua utilizando un modelado AR y la FFT y se compara con los datos obtenidos de la literatura [28] el posible offset que se produce.

En primer lugar, usaremos un modelado AR, en concreto el método de Yule-Walker, en el cual el orden óptimo en frecuencia calculado para este material es 24.

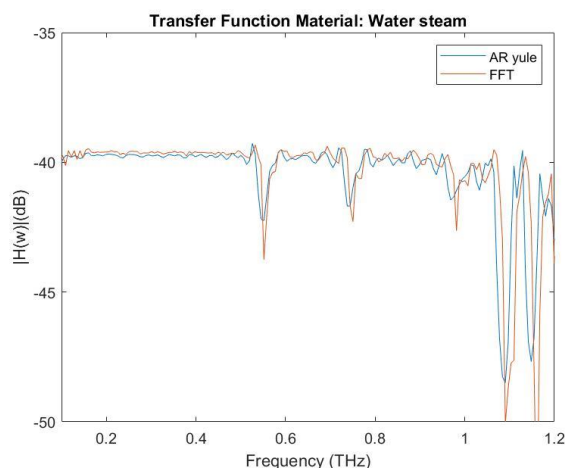


Figura 38. Respuesta en frecuencia del vapor de agua a través de la estimación directa.

La figura 38 muestra la respuesta en frecuencia del vapor de agua, tal y como se aprecia en los picos de absorción existe un offset entre los métodos estudiados. A continuación, se va a profundizar cual es el offset que se produce para ambos métodos si se compara con los valores que están marcados en la literatura.

En la banda de 500 GHz a 1.2 THz existen varios picos situados exactamente en las siguientes frecuencias 557, 620, 752, 916, 970, 987 GHz, 1.09 THz y 1.15 THz [26].

Literatura	Yule-Walker	Offset valores teóricos vs Yule-Walker	FFT	Offset valores teóricos vs FFT
557 GHz	545 GHz	12 GHz	552 GHz	5 GHz
620 GHz	613 GHz	7 GHz	616 GHz	4 GHz
752 GHz	738 GHz	14 GHz	750 GHz	2 GHz
916 GHz	892 GHz	24 GHz	911 GHz	5 GHz
970 GHz	969 GHz	1 GHz	975 GHz	5 GHz
987 GHz	⁵	-	982 GHz	5 GHz
1.09 THz	1.084 THz	6 GHz	1.09 THz	-
1.15 THz	1.142 THz	8 GHz	1.161 THz	11 GHz

Tabla 7. Picos de absorción del vapor de agua en la banda de THz.

⁵ no aparece ningún valor esto es debido a que es un pico pequeño y tal como se puede apreciar en la figura 39 no ha sido detectada por el método de Yule-Walker y por lo tanto no se ha podido representar.

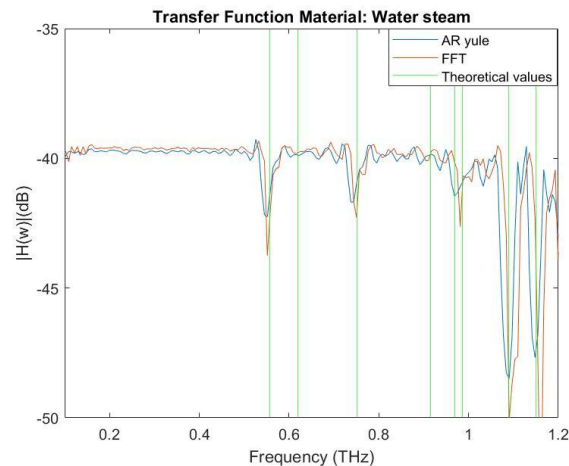


Figura 39. Respuesta en frecuencia del vapor de agua a través de la estimación directa con valores teóricos.

Por lo tanto, después de lo visto en las figuras 11, 20, 38, 39 y la tabla 7, se puede llegar a la conclusión que utilizando los dos métodos se produce un offset, pero en el caso de los métodos paramétricos este offset es mayor, además tal y como se ha comprobado en la figura 38 si la señal tiene picos de absorción pequeños en algunas ocasiones puede llegar a no modelarlos o incluso juntar dos picos en uno único y por lo tanto se puede llegar a la deducción que los métodos paramétricos no modelan de manera exacta los posibles picos que pueda haber en el espectro de la señal.

A continuación, se va a realizar el mismo procedimiento, pero ahora para las medidas de referencia utilizadas en el capítulo 3 y así comprobar si este offset es mayor o menor que el calculado para la respuesta en frecuencia.

Conjunto de muestra	Pico 1		Pico 2		Pico 3		Pico 4		Valor medio offset
	AR	FFT	AR	FFT	AR	FFT	AR	FFT	
Señal #1	0.540 ⁶	0.556	0.734	0.746	0.962	0.974	1.076	1.089	0.013
Señal #2	0.542	0.556	0.734	0.746	0.961	0.975	1.075	1.088	0.013
Señal #3	0.545	0.557	0.735	0.748	0.961	0.978	1.077	1.089	0.005
Señal #4	0.547	0.56	0.745	0.750	0.963	0.988	1.08	1.089	0.013
Señal #5	0.544	0.557	0.734	0.747	0.962	0.975	1.07	1.089	0.0145

Tabla 8. Picos de la señal de referencia comparando modelado AR y FFT.

4.4 Diseño filtro AR

A la hora de procesar señales en el dominio frecuencial los filtros tienen un papel muy importante. En este apartado se tiene como intención de diseñar un filtro autorregresivo a través del método Prony. Según la literatura consultada [25] utilizando el método de prony se puede conseguir un filtro IIR a partir de un filtro FIR.

4.4.1 Método de Prony

Una forma alternativa para diseñar un filtro IIR es a través del método Prony, este método se basa en calcular la diferencia entre la respuesta ideal y la respuesta real. La idea principal es obtener

⁶ Frecuencias en THz

un modelo casi exacto del sistema que se quiere modelar para ello se calculan los coeficientes del filtro colocando en cascada el filtro y el sistema a modelar, obteniendo, así como resultado la señal $y(n)$ [32].

El caso más simple es calcular los coeficientes para un filtro que solo contenga polos, obteniendo la siguiente expresión.

$$H(z) = \frac{a_0}{1 + \sum_{i=1}^q a_i \cdot z^{-i}} \quad (4.3)$$

Modificando el valor de los coeficientes del filtro se puede conseguir que la señal de salida sea prácticamente igual a la que se desea.

A continuación, se va a mostrar la respuesta frecuencial del filtro obtenido para un orden de valor 58⁷.

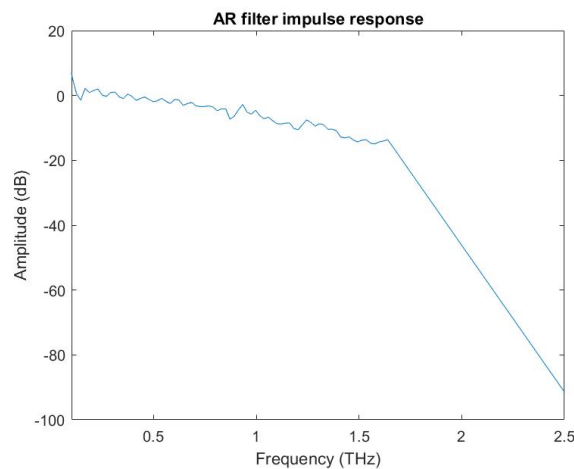


Figura 40. Respuesta frecuencial del filtro AR.

Como se puede observar en la figura 40 se obtiene la respuesta en frecuencia deseada, pero a partir de aproximadamente 1.5 THz hay un cambio brusco en la señal debido que tal y como se ha comentado con anterioridad, a partir de 1.2 THz la señal es prácticamente ruido y por lo tanto no se modela.

Seguidamente se va a comparar la respuesta obtenida anteriormente con los métodos de Yule-Walker y FFT.

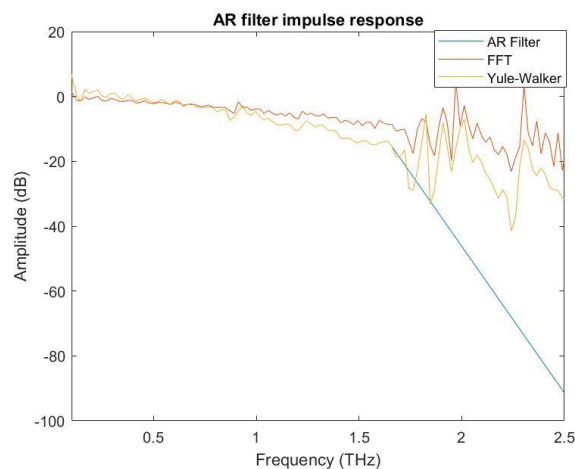


Figura 41. Respuesta frecuencial del filtro AR vs FFT vs Yule-Walker.

⁷ Orden obtenido a través del criterio Akaike.

Puede observarse como los métodos paramétricos proporcionan una respuesta similar pero no exactamente igual que la FFT, esta ligera diferencia puede venir directamente a la hora de escoger el valor del orden más adecuado para cada señal, ya que MATLAB proporciona y únicamente permite introducir en sus funciones valores enteros de orden y probablemente a la hora de calcular el orden con los diferentes criterios haya un truncamiento o redondeo que no permita obtener el valor exacto del orden. Así mismo, el método de Prony permite determinar el punto en el que la calidad de la señal se ha degradado tanto que la respuesta en frecuencia ya no tiene validez.

4.5 Tiempo de computación

Una de las ventajas que se atribuyen a los métodos no paramétricos, en concreto a la FFT, es la rapidez en el tiempo computacional. En este apartado se va a comprobar si los métodos paramétricos son igual de eficaces computacionalmente. Se calculará el tiempo que se tarda en calcular la FFT y el tiempo transcurrido en obtener los espectros utilizando los métodos paramétricos.

Se utilizará la misma muestra de referencia del policarbonato puro, material el cual ha sido estudiado a lo largo de este documento. Como ya ha sido explicado para utilizar los métodos paramétricos se necesita saber el orden, dicho parámetro utilizado es el utilizado en apartados anteriores. A través de la función *aryule* y *arburg* se han obtenido los parámetros necesarios para calcular el tiempo transcurrido.

A continuación, se muestra una tabla con los resultados obtenidos.

FFT	Yule-Walker	Burg
0.4832 ms	1.645 ms	1.5403 ms

Tabla 9. Tiempo computacional método no paramétrico vs método paramétrico.

De la tabla 9 se puede comprobar que el tiempo computacional de los métodos paramétricos utilizando el orden adecuado, el tiempo de computación es tres veces más lento si comparamos con la transformada de Fourier y por tanto en este aspecto no se puede sacar ninguna ventaja.

Capítulo 5. Conclusiones

Durante este trabajo, se han analizado diferentes métodos paramétricos para estimar el espectro y se han comparado con la FFT con el objetivo de estudiar su aplicación en sistemas de espectroscopia temporal de THz (THz-TDS).

En primer lugar, se explicó las bases teóricas de la transformada discreta de Fourier, posteriormente, se explicó que utilizando los métodos paramétricos en principio se debería de obtener una mejor resolución debido a que estos métodos pueden extrapolar la señal, para ello se utilizó el método de Burg. Para comprobar dicha teoría se simuló un sistema con dos tonos y después de una serie de pruebas y comparando con los valores teóricos se concluye que los métodos paramétricos tienen una mejor resolución, además tanto para la transformada rápida de Fourier como para los métodos paramétricos aciertan el valor teórico de la frecuencia de los tonos utilizados.

Seguidamente después de explicar los diferentes métodos de estimación espectral donde se comprobó que una de las características más importantes para obtener una buena estimación es la elección del orden, para ello se calculó el orden a través de diferentes criterios, tales como criterio Akaike, obtención del error cuadrático medio a través de la frecuencia y del tiempo, y tras un análisis de los valores obtenidos para diferentes situaciones se concluyó que los métodos más apropiados para obtener el valor del orden óptimo es calcularlo a través del criterio Akaike o MSE en tiempo.

A continuación, se pasó a comparar el espectro de la señal de referencia realizando en primer lugar una comparación Yule-Walker vs FFT y seguidamente Burg vs FFT. De la primera comparativa se concluye que utilizando Yule-Walker se obtiene una muy buena estimación del espectro, prácticamente igual a la obtenida con la FFT, también se extrapola la señal a la zona del ruido y se observó como los métodos paramétricos modelan de forma muy buena el ruido al contrario que la FFT que existen unos picos muy agudos. Por otro lado, se realizó un análisis sobre la comparativa Burg vs FFT, de este análisis se concluye no se consiguen las mismas prestaciones que se había obtenido con Yule-Walker, también se estudió la estabilidad obteniendo una peor desviación para el método de Burg. Por último, se realizó un análisis comparando ambos métodos paramétricos, es decir, Yule-Walker vs Burg, y se corroboró aquello que en la literatura se afirma, en concreto si se utiliza una señal con una ventana de datos grandes el método más adecuado es Yule-Walker, pero en cambio si se analiza una señal con una ventana de datos corta el método más adecuado es Burg.

Del capítulo 3, se puede concluir que utilizando los métodos paramétricos se consiguen los mismos resultados que utilizando los métodos convencionales, pero se debe tener en cuenta la longitud de la ventana de datos a utilizar para escoger bien el método. Además, el principal inconveniente de los métodos paramétricos es la obtención del orden y tal como se ha analizado si no se obtiene el orden adecuado los resultados obtenidos pueden llegar a ser muy distintos.

En este trabajo al estar utilizando una señal con gran cantidad de puntos, el método más adecuado es Yule-Walker y este método es el escogido para realizar las aproximaciones del capítulo 4.

En el capítulo 4 se calcularon diferentes constantes ópticas. En primer lugar, se extrajo la función de transferencia a través de dos procedimientos diferentes, división espectral y estimación directa, de los resultados obtenidos debido a los resultados que proporciona MATLAB se debe elegir la estimación directa debido a que la función *aryule* proporciona el valor de la fase al contrario que *pyulear* la cual únicamente proporciona el módulo del espectro calculado.

Una vez analizado el espectro se pasó a analizar la mayor desventaja encontrada en el capítulo 3, el offset que se produce en el modelado AR, para estudiar este offset se obtuvieron en primer lugar los picos de absorción teóricos consultando trabajos experimentales y se comparó estos valores con los obtenidos en las estimaciones para modelado AR y los métodos no paramétricos, de este análisis se concluye que los métodos paramétricos producen un pequeño offset comparado



con los valores esperados. Para profundizar más en este análisis se calculó el offset que se produce en las medidas de referencia del policarbonato obteniendo un valor medio de un offset de 0.013 THz entre el modelado AR y la FFT.

Seguidamente, una vez obtenidos los índices de refracción y el coeficiente de absorción para el policarbonato puro, para profundizar más en los valores que se han obtenido y comprobar que eran correctos se obtuvieron los datos de las gráficas obtenidas en las referencias [28] [29] [30] y realizando una comparación se concluye que los tanto el orden obtenido así como los valores del índice de refracción y el coeficiente de absorción son correctos con el matiz de el modelado AR produce un rizado a frecuencias altas.

Por último, se analizó el tiempo de computación entre los métodos no paramétricos, la transformada de Fourier y los métodos paramétricos, Yule-Walker, y se obtuvo que la transformada rápida de Fourier es tres veces más rápido que Yule-Walker.

Por tanto, después de analizar las ventajas e inconvenientes que tienen los modelos paramétricos se puede llegar a la conclusión de que, aunque se obtiene una estimación prácticamente igual a la obtenida con la FFT, el principal conveniente es obtener el valor del orden óptimo para así poder conseguir unos espectros prácticamente iguales a los que se obtiene con los métodos no paramétricos.

Capítulo 6. Referencias

- [1] S. Wietzke, C. Jansen, F. Rutz, D.M. Mittleman, M. Koch, “Determination of additive content in polymeric compounds with terahertz time-domain spectroscopy”, *Polymer Testing*, vol. 26, pp. 614-618, 2007.
- [2] M.A. Báez-Chorro, B. Vidal, “Terahertz Spectroscopy of Engineered Stone”, *44th International Conference on Infrared, Millimeter and Terahertz Waves (IRMMW-THz)*, Paris (France), 1-6 September 2019.
- [3] M.A. Báez-Chorro, R. Llorens-Chiralt, B. Vidal, “Comparison of THz Spectroscopy Measurements of Carbon Nanotubes Embedded in Polymer Matrices”, *44th International Conference on Infrared, Millimeter and Terahertz Waves (IRMMW-THz)*, Paris (France), 1-6 September 2019.
- [4] A. Bockelt, B. Vidal, “Dynamic tuning of mean carrier momentum relaxation time in InGaAs/InAlAs THz photoconductive switches”, *IEEE Transaction on Terahertz Science and Technology*, vol. 7, no. 1, pp. 107-113, Jan. 2017.
- [5] A. Bockelt, J. Palací, B. Vidal, “All-fiber Centralized Architecture for Parallel Terahertz Sensors”, *IEEE Transactions on Terahertz Science and Technology*, vol. 5, no.1, pp. 137-144, January 2015.
- [6] M.P.M. Colleoni, M.A. Báez-Chorro, B. Vidal, “Quantitative Characterization of Defects with Fixed-Delay THz Sensors”, *IEEE Sensors Letters*, vol. 3, no. 10, pp. 3501804, October 2019.
- [7] P.U. Jepsen, D.G. Cooke, M. Koch, “Terahertz spectroscopy and imaging – Modern techniques and applications”, *Laser and Photonics Reviews*, vol. 5, no. 1, pp. 124–166, 2011.
- [8] M.A. Báez-Chorro, B. Vidal, “Single trace terahertz spectroscopic ellipsometry”, *Optics Express*, vol. 27, no. 24, pp. 35468-35474, 2019.
- [9] F. Sanjuan, A. Bockelt, B. Vidal, “Birefringence measurement in the THz range based on double Fourier analysis”, *Optics Letters*, vol. 39, no. 4, pp. 809-8012, February 2014.
- [10] F. Sanjuan, B. Vidal, “Refractive index calculation from echo interference in pulsed THz spectroscopy”, *Electronics Letters*, vol. 50, no. 4, pp. 308-309, 13th February 2014.
- [11] F. Sanjuan, A. Bockelt, B. Vidal, “Determination of refractive index and thickness of a multilayer structure with a single THz time domain spectroscopy measurement”, *Applied Optics*, vol. 53, no. 22, pp. 4910-4913, August 2014.
- [12] G. U. Yule, “On a Method of Investigating Periodicities in Disturbed Series with Special Reference to Wolfer’s Sunspot Numbers” *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, Ser. A Vol. 226, pp. 267-298. 1987
- [13] Walker. G “On Periodicity in Series of Related Terms” *Proceedings of the Royal Society of London*, Ser. A, Vol 131, pp. 518-532, 1931.
- [14] John G. Proakis, Dimitris G. Manolakis, “Digital signal processing”, *PEARSON PRENTICE HALL*, 4th Edition, pp. 855-911
- [15] “Análisis Espectral Multivariable de Señales Cerebrales”, Chapter 3, pp. 49-92
- [16] Juan F. Guerrero Martinez, “Tema 5 Estimación espectral”, *Universidad de Valencia*, pp. 1-19
- [17] P.Gomis, “Estimación Espectral de señales biomédicas métodos clásicos (FFT) y paramétricos”, *Universitat Politècnica de Catalunya*, Capítulos 3-4, pp. 10-44.
- [18] A. H Nutall, “Spectral Analysis of a Univariate Process with Bad Data Points via Maximum Entropy and Linear Predictive Techniques”, *NUSC Technical Report TR-5303*, New London, CT, March 1976
- [19] T.J Ulcrych, R.W Clayton. “Times Series Modeling and Maximum Entropy”, *Phys. Earth Planet. Inter.*, Vol. 12, págs. 188-200, August 1976



- [20] R. D. Schmidt, "A Signal Subspace Approach to Multiple Emitter Location and Spectral Estimation", *Ph.D. dissertation*, Department of Electrical Engineering, Stanford University, Stanford, CA, November 1981.
- [21] K.M. Tych, C.D. Wood, W. Tych, "A simple transfer-function-based approach for estimating material parameters from Terahertz Time-Domain Data" *IEEE Photonics Journal*, vol. 6, no. 1, February 2014
- [22] F. Sanjuan, C. Galarza, "Spectral estimation of terahertz time-domain signals using a simple parametric method" *ELECTRONICS LETTERS*, vol. 51, no. 25, pp. 2130-2132, December 2015
- [23] H. Akaike, "Power Spectrum Estimation Through Autoregression Model Fitting", *Ann. Inst. Stat. Math*, Vol. 21, pp 149-407, 1969
- [24] H. Akaike, "A new look at the statistical model identification" *IEEE trans Autom Control*, vol 19, pp. 716-723, December 1974
- [25] J. Liu, E. Isufi and G. Leus, "Filter Design for Autoregressive Moving Average Graph Filters," in *IEEE Transactions on Signal and Information Processing over Networks*, vol. 5, no. 1, pp. 47-60, March 2019, doi: 10.1109/TSIPN.2018.2854627.
- [26] G.Siles, "Estudio sobre propagación atmosférica en la banda de los THz: influencia de gases y nubes en 100 y 300 GHz", Tesis Doctoral, departamento de Señales, Sistemas y Radiocomunicaciones, Universidad Politécnica de Madrid, Diciembre 2012
- [27] T.Tanabe, "High-Resolution Terahertz Spectroscopy of Water Vapor with Different Humidity Levels under Normal Atmospheric Conditions and in a Vapor-Liquid Coexistence at Reduced Pressure". *Biomedical Journal of Scientific & Technical Research*. 2018 10. 10.26717/BJSTR.2018.10.001907.
- [28] R. Piesiewicz, C. Jasen, S. Wietzke, "Properties of Building and Plastic Materials in the THz Range", *Int J Infrared Mili Waves* 28, 363-371, 2007
- [29] A. Min Zhai, D. Locquet, S. Citrin. "Pulsed THz imaging for thickness characterization of plastic sheets". *NDT & E International, Elsevier*, 2020, 116, pp.102338. 10.1016/j.ndteint.2020.102338. hal-02992680
- [30] E.R Brown, "Fundamentals of Terrestrial Millimeter-Wave and THz Remote Sensing", *International Journal of High-Speed Electronics and Systems*, Vol. 13, No. 04, pp. 995-1097, 2003 doi.org/10.1142/S0129156403002125
- [31] M.A.Bañuelos, "Espectroscopia THz en el dominio del tiempo", *SOMI Congreso de Instrumentación XXIX Edición*, Octubre 2014
- [32] M. Martinez, L. Gómez, A. J. Serrano, J. Vila, J. Gómez, "Filtros digitales", *Universitat de Valencia*, curso 2009-2010

Capítulo 7. ANEXOS

7.1 Código MATLAB empleado

7.1.1 Código suavizado de la señal

```
%% Suavizado orden
load ref5policarbonato.txt; % Aquí se debe introducir el fichero con la
señal de referencia

ref = ref5policarbonato;

% Clasificamos la información que se encuentra en el archivo de texto en
% dos variables

% En la primera columna se encuentra el valor del tiempo en ps.
tiempo_senyal_referencia = ref(:,1);
% En la segunda columna se encuentra el valor de la amplitud
amplitud_senyal_referencia = ref(:,2);

% Se define los vectores necesarios para representar las gráficas que se
% necesitaran más adelante
tiempo_vector = 1e-12*(ref(2,1)-ref(1,1));
frecuencia_sample = 1/tiempo_vector;
longitud = length(tiempo_senyal_referencia);

% ----- FFT-----
% Obtenemos el número de puntos de la DFT
numero_puntos_senyal = 2^nextpow(longitud);
% Calculamos la transformada de Fourier
X_fft = fft(amplitud_senyal_referencia,numero_puntos_senyal);

% ----- AR -----
% Un orden pequeño
pxx_yule_peq =
pyulear(amplitud_senyal_referencia,4,numero_puntos_senyal);
% el orden adecuado
pxx_yule = pyulear(amplitud_senyal_referencia,24,numero_puntos_senyal);

% ----- Representación-----

vector_frec = frecuencia_sample.*(0:numero_puntos_senyal-
1)./numero_puntos_senyal;
vector_frec_yule = vector_frec(1:length(pxx_yule));
frec_fft = vector_frec(1:length(X_fft));

% Representamos las señales
figure
plot(frec_fft*1e-12, 10*log10(X_fft));
hold on
plot(vector_frec_yule*1e-12, 10*log10(pxx_yule_peq));
hold on
plot(vector_frec_yule*1e-12, 10*log10(pxx_yule));
legend('FFT','Yule Walker small order','Yule-Walker proper order');
xlim([0.1 1.2])
xlabel('Frequency (THz)')
ylabel('PSD (dB)')
```

7.1.2 Código resolución frecuencial

```
%% Resolución frecuencial

% Creación de los dos tonos
frecuencia_sample = 1000;
tiempo_sample = 1/frecuencia_sample;
frecuencia_tono1 = 30;
frecuencia_tono2 = 130; % Hay que cambiar el valor para acercar las
frecuencias o alejarlas

% Creación de las señales
duracion_senyal = 0:0.1:tiempo_sample;
tono1 = 20*sin(frecuencia_tono1*2*pi*duracion_senyal);
tono2 = 20*sin(frecuencia_tono2*2*pi*duracion_senyal);
suma_tonos = tono1+tono2;

% Creación de los parámetros a utilizar
longitud_tono = length(suma_tonos);
numero_puntos = 2^nextpow2(longitud_tono);
vector_frecuencia = 0:frecuencia_sample/(numero_puntos-
1):frecuencia_sample;

% ----- FFT-----

% Se realiza la transformada de Fourier a la señal
X_fft = fft(suma_tonos,numero_puntos);
% Se obtiene el valor absoluto del vector
X_fft_abs = abs(X_fft(1:length(vector_frecuencia)));
% Normalizamos la señal obtenida
normaliz_fft = X_fft_abs./max(X_fft_abs);

% ----- AR -----
pxx_burg = pburg(suma_tono,or,numero_puntos);
% Normalizamos la señal obtenida
normaliz_burg = abs(pxx_burg)./max(pxx_burg);

%----- Representación-----
figure
plot(vector_frecuencias,normaliz_fft);
hold on
plot(vector_frecuencias,normaliz_burg);
xline(f1,'g','--')
xline(f2,'g','--')
legend('FFT','AR','Exact tone frequency')
title('Frequency resolution comparison')
xlabel('Frequency (Hz)')
ylabel('Amplitude')
xlim([0 80])
```

7.1.3 Código comparativo FFT vs AR vs MUSIC

```
%% Comparativa FFT vs AR vs MUSIC
% Definimos las variables para la creación de los tonos
numero_sample = 1000;
frec_tono1 = 1e12;
frec_tono2 = 1.2e12;
frec_sample = 4*frec_tono1;
frec_angul = (frec_tono1/frec_sample)*2*pi;
frec_angul2 = (frec_tono2/frec_sample)*2*pi;

% Creación de la señal
longitud = 1:numero_sample;
tono1 = 1*exp(1i*frec_angul*longitud);
tono2 = 1*exp(1i*frec_angul2*longitud);
ruido = 1*(randn(1,longitud)+1i*randn(1,longitud));
suma_tonos = tono1+tono2+ruido;
% ----- FFT-----

% Creamos el vector de frecuencias
frec_fft = 0:frec_sample/(longitud-1):frec_sample;
% Obtenemos la FFT de la suma de los tonos
X_fft = fft(suma_tonos,longitud);
% Se calcula el valor absoluto y normalizamos la señal
X_fft_normaliz = abs(X_fft)./max(abs(X_fft));

% Representamos el espectro de la FFT
figure
plot(f*1e-12,10*log10(X_fft_normaliz));
xlabel('Frequency (THz)')
ylabel('PSD (dB)')
title('FFT Spectrum')
xlim([0 2.5])
% ----- AR-----
% Obtenemos el valor de la estimación a través del modelo AR

pxx_yule = pyulear(suma_tonos,or,longitud);

% Representamos el espectro del modelado AR
figure
plot(f*1e-12,10*log10(pxx_yule));
xlabel('Frequency (THz)')
ylabel('PSD (dB)')
title('Yule-Walker Spectrum')
xlim([0 2.5])
% ----- MUSIC-----

% Definimos los parámetros a utilizar
dimension_matriz = 10;
% Creamos la matriz a utilizar
MUSIC_matriz = zeros(dimension_matriz,dimension_matriz);

vector_frec_MUSIC = 0:frec_sample/(longitud-1):frec_sample;
frec_angul_MUSIC = (vector_frec_MUSIC/frec_sample)*2*pi;

% Calculamos el denominador del estimador MUSIC

denominador_MUSIC = zeros(length(frec_angul_MUSIC),1);
```



```
MUSIC_matriz =  
MUSIC_matriz+(suma_tonos(i:i+dimension_matriz))*(suma_tonos(i:i+dimension_matriz))';  
  
% Calculamos el vector y valor propio de la matriz MUSIC  
[vector_propio,valor_propio] = eig(MUSIC_matriz);  
  
% Definimos la exponencial  
exponencial = exp(1i*(1:dimension_matriz)*frec_angu_MUSIC);  
  
vector_propio = (vector_propio(:,i));  
denominador_MUSIC =  
denominador_MUSIC+(abs(exponencial')*vector_propio).^2;  
  
estimador_MUSIC = 1./denominador_MUSIC;  
  
% Normalizamos la función  
MUSIC_normalizada = estimador_MUSIC./max(estimador_MUSIC);  
% Representamos la estimación obtenida  
figure  
plot(vector_frec_MUSIC,10*log10(MUSIC_normalizada))  
xlabel('Frequency (THz)')  
ylabel('PSD (dB)')  
title('MUSIC Spectrum')
```

7.1.4 Código obtención del orden del modelo

```
%% Cálculo del valor del orden  
load ref5policarbonato.txt % Hay que poner los documentos de texto de la  
señal de referencia y muestra  
load sam5policarbonato.txt  
  
% Definimos las variables a utilizar  
ref = ref5policarbonato;  
sam = sam5policarbonato;  
% Clasificamos los valores que hay dentro de los archivos  
tiempo_referencia = ref(:,1);  
tiempo_muestra = sam(:,1);  
  
X = ref(:,2);  
Y = sam(:,2);  
% ----- Orden tiempo-----  
% inicializamos la variable  
v_tiempo = 1;  
rango_tiempo = length(X)*0.55;  
for i = 1:rango_tiempo  
    error_tiempo = x(i) - ifft(X_AR(i));  
    v_tiempo = [i,v_tiempo];  
    v_tiempo = [v_tiempo,error_tiempo];  
end  
  
error_cuadratico_tiempo =  
v_tiempo((length(v_tiempo)/2)+1:length(v_tiempo));  
orden_tiempo = v_tiempo(2:(length(v_tiempo)/2)+1);
```

```
% Buscamos el valor mínimo de error
min_error_tiempo =
min(error_cuadratico_tiempo(1:length(error_cuadratico_tiempo)));

% Buscamos entre el vector donde se encuentra ese valor
indice = find(error_cuadratico_tiempo == min_error_tiempo);
or_tiempo = orden_tiempo(indice);

% ----- Orden Frecuencia-----
% Inicializamos la variable
v_frecuencia = 1;
rango_frecuencia = length(X)*0.55;
for i = 1:rango_frecuencia
    error_frecuencia = X_fft(i) - (pxx_burg(i));
    v_frecuencia = [1,v_frecuencia];
    v_frecuencia = [v_frecuencia,error_frecuencia];
end

error_cuadratico_frecuencia =
v_frecuencia((length(v_frecuencia)/2)+1:length(v_frecuencia));
orden_frecuencia = v_frecuencia(2:length(v_frecuencia)+1);

% Buscamos el valor mínimo
min_error_frecuencia =
min(error_cuadratico_frecuencia(1:length(error_cuadratico_frecuencia)));
indice_frecuencia = find(error_cuadratico_frecuencia ==
min_error_frecuencia);
or_frecuencia = orden_frecuencia(indice_frecuencia);

% ----- Orden AKAIKE-----
% Definimos el rango donde escoger el valor del orden
rango_aic = (1:length(X)*0.55);

% Creamos un vector que contiene las varianzas de error
vector_aic = arxstruc(X,rango_aic);
valor_orden = selstruc(vector_aic,'aic');
```

7.1.5 Código estimación espectral Yule-Walker vs FFT

```
%% Comparativa espectro referencia Yule-Walker vs FFT
load ref5policarbonato.txt % Hay que cambiarlo para cada señal que se
desea obtener el espectro
ref = ref5policarbonato;

% Definimos las variables a utilizar
tiempo_referencia = ref(:,1);
vector_tiempo = 1e-12*(ref(2,1)-ref(1,1));
frecuencia_sampling= 1/vector_tiempo;
longitud = length(ref(:,1));
numero_puntos = 2^nextpow2(longitud);
% Renombramos a la amplitud de la señal
X = ref(:,2);
vector_frec_plot = frecuencia_sampling.*(0:numero_puntos-
1)./numero_puntos;

% ----- FFT-----
X_fft = fft(X,numero_puntos);
```



```
% ----- AR (Yule-Walker) -----  
  
% Estimación espectral mediante el método de Yule-Walker  
pxx_yule = pyulear(X,or,numero_puntos);  
  
% Creamos el vector de frecuencias  
f_AR = vector_frec_plot (1:length(pxx_yule));  
f_fft = vector_frec_plot (1:length(X_fft));  
  
% Normalizamos la señales para poder representarlas  
pxx_normalizado = pxx_yule./max(pxx_yule);  
X_fft_norma = X_fft./max(X_fft);  
  
% FFT vs Yule  
figure  
plot(f_AR*1e-12,10*log10(pxx_normalizado(1:length(f_AR))),f_fft*1e-  
12,10*log10(X_fft(1:length(f_fft))));  
xlabel('Frequency (THz)');  
ylabel('Spectral amplitude (dB)');  
title('Reference Yule-Walker vs FFT')  
legend('AR Yule-Walker','FFT')  
xlim([0.1 1.2])  
  
%% Cálculo de la desviación estándar Yule-Walker  
load reflpolicarbonato.txt  
load ref2policarbonato.txt  
load ref3policarbonato.txt  
load ref4policarbonato.txt  
load ref5policarbonato.txt  
  
% Definimos todas las variables a utilizar  
ref1 = reflpolicarbonato;  
ref2 = ref2policarbonato;  
ref3 = ref3policarbonato;  
ref4 = ref4policarbonato;  
ref5 = ref5policarbonato;  
  
tiempo_referencia = ref1(:,1);  
vector_tiempo = 1e-12*(ref1(2,1)-ref1(1,1));  
frec_sampling = 1/vector_tiempo;  
longitud = length(ref1(:,1));  
numero_puntos = 2^nextpow2(longitud);  
frec = frec_sampling.*(1:numero_puntos)./numero_puntos;  
  
X1 = (ref1(:,2));  
X2 = (ref2(:,2));  
X3 = (ref3(:,2));  
X4 = (ref4(:,2));  
  
%-----AR-----  
% Realización de la estimación espectral de potencia mediante el método  
de Yule-Walker  
  
pxx_yule1 = pyulear(X1,or1,numero_puntos);  
pxx_yule2 = pyulear(X2,or2,numero_puntos);  
pxx_yule3 = pyulear(X3,or3,numero_puntos);  
pxx_yule4 = pyulear(X4,or4,numero_puntos);  
pxx_yule5 = pyulear(X5,or5,numero_puntos);
```



```
pxx_yule1_normalizado = pxx_yule1./max((pxx_yule1));
pxx_yule2_normalizado = pxx_yule2./max((pxx_yule2));
pxx_yule3_normalizado = pxx_yule3./max((pxx_yule3));
pxx_yule4_normalizado = pxx_yule4./max((pxx_yule4));
pxx_yule5_normalizado = pxx_yule5./max((pxx_yule5));

f_yule = freq(1:length(pxx_yule1_normalizado));

for i = 1:length(f_yule)
    desv_yule1 = std(pxx_yule1_normalizado(i),0,2);
    desv_yule2 = std(pxx_yule2_normalizado(i),0,2);
    desv_yule3 =std(pxx_yule3_normalizado(i),0,2);
    desv_yule4 =std(pxx_yule4_normalizado(i),0,2);
    desv_yule5 =std(pxx_yule5_normalizado(i),0,2);
    muestras_yule = [desv_yule1(i), desv_yule2(i), desv_yule3(i),
desv_yule4(i), desv_yule5(i)];
end

% ----- CALCULAMOS LA DESVIACIÓN TIPICA-----
-
figure
plot(f_yule*1e-12,10*log10(muestras_yule))
xlim([0.1 1.1])
legend('Std Yule-Walker')
xlabel('Frequency (THz)')
ylabel('Value (dB)')
title('Yule-Walker Repeatability')

% NOTA: SE REALIZA EL MISMO PROCEDIMIENTO PARA MÉTODO DE BURG
```

7.1.6 Código estimación espectral de la función de transferencia procedimiento división espectral

```
%% Obtención de la función de transferencia procedimiento división
espectral
load ref5policarbonato.txt % Hay que cambiarlo para cada muestra
load sam5policarbonato.txt

ref = ref5policarbonato;
sam = sam5policarbonato;

tiempo_referencia = ref(:,1);
tiempo_muestra = sam(:,1);
vector_tiempo = 1e-12*(ref(2,1)-ref(1,1));
frec_samplng = 1/vector_tiempo;
longitud = length(ref(:,1));
numero_puntos = 2^nextpow2(longitud);
frec = frec_samplng.*(1:numero_puntos)./numero_puntos;

X = ref(:,2);
Y = sam(:,2);
% ----- FFT-----
X_fft = fft(X,numero_puntos);
Y_fft = fft(Y,numero_puntos);
H_fft = Y_fft./X_fft;
% ----- AR-----

% Obtención de la función de transferencia a través de la división
directa

pxx_yule = pyulear(X,or1,numero_puntos);
pxy_yule = pyulear(Y,or2,numero_puntos);

% Realizamos la división entre la señal de entrada y la señal de salida
H_yule = (pxy_yule./pxx_yule);

% Normalizamos las señales para poder representarlas
H_yule_normalizado = H_yule./max((H_yule));
H_fft_normalizado = H_fft./max((H_fft));
% Creamos los vectores de frecuencias
f_yule = frec(1:length(H_yule));
f_fft = frec(1:length(H_fft));

% FFT vs Yule
figure
plot(f_fft*1e-12,10*log10((H_fft_normalizado)));
hold on
plot(f_yule*1e-12,10*log10((H_yule_normalizado)));
legend('FFT','Yule-Walker')
xlim([0.1 1.2])
xlabel('Frequency (THz)');
ylabel('|H(w)| (dB)')
title('Transfer Function Material: Pure Polycarbonate')
```

7.1.7 Código estimación espectral de la función de transferencia procedimiento estimación directa

```
%% Obtención de la función de transferencia procedimiento estimación
directa
load ref5policarbonato.txt % Hay que cambiarlo para cada muestra
load sam5policarbonato.txt

ref = ref5policarbonato;
sam = sam5policarbonato;

tiempo_referencia = ref(:,1);
tiempo_muestra = sam(:,1);
vector_tiempo = 1e-12*(ref(2,1)-ref(1,1));
frec_samplng = 1/vector_tiempo;
longitud = length(ref(:,1));
numero_puntos = 2^nextpow2(longitud);
frec = frec_samplng.*(1:numero_puntos)./numero_puntos;

X = ref(:,2);
Y = sam(:,2);
% ----- AR-----

% Obtención de la función de transferencia a través de la división
directa
[coef1,error_su]=aryule(X,or1);
[coef2,error_sum]=aryule(Y,or2);
[H_f,~]=freqz(coef1,coef2, numero_puntos);

% Normalizamos las señales para poder representarlas
H_f_normalizado = H_f./max((H_f));
H_fft_normalizado = H_fft./max((H_fft));
% Creamos los vectores de frecuencias
f_f = frec(1:length(H_f));
f_fft = frec(1:length(H_fft));

% FFT vs Yule
figure
plot(f_fft*1e-12,10*log10((H_fft_normalizado)));
hold on
plot(f_f*1e-12,10*log10((H_f_normalizado)));
legend('FFT','Yule-Walker')
xlim([0.1 1.2])
xlabel('Frequency (THz)');
ylabel('|H(w)| (dB)')
title('Transfer Function Material: Pure Polycarbonate')
```

7.1.8 Código extracción de parámetros ópticos

```
%% Parameter extraction
naire=1.00026;
c=2.99796e8;

f_up=min(f_up_sam,f_up_ref);
f_down=max(f_down_ref,f_down_sam);

% ----- DESENVOLVER DE LA FASE -----
phi0_ref = 2*pi*frecuencias_ref*t0ref;
phi0_sam = 2*pi*frecuencias_sam*t0sam;

% Al multiplicar por esta fase se corrige el origen de tiempos al
% máximo del pulso. De esta forma el unwrapping es independiente de
% la posición del pulso en la ventana.
phase_red_ref = angle(Y_ref(1:NFFT_ref/2)'.*exp(1i.*phi0_ref));
phase_red_sam = angle(Y_sam(1:NFFT_sam/2)'.*exp(1i.*phi0_sam));

% Se hace el unwrapping con la diferencia de fases ya que la
% pendiente será menos
phase_red_diff_prime = unwrap(phase_red_sam-phase_red_ref);

% Corregir offsets en la fase de un número entero de veces 2pi
fit_phase = polyfit(frecuencias_ref(f_down:f_up)*1e-
12,phase_red_diff_prime(f_down:f_up),1);
phi_offset = 2*pi*round(fit_phase(2)./(2*pi));
phase_red_diff = phase_red_diff_prime-phi_offset;
phase_diff = phase_red_diff + phi0_ref - phi0_sam;

f_up=255;
f_down=1;

% Calculo del índice de refracción
N2=zeros(length(frecuencias_ref(f_down:f_up)),5);

N2(:,1) =
naire+(c.*phase_diff(f_down:f_up))./(2.*pi.*frecuencias_ref(f_down:
f_up).*thickness);
N2(:,2) =
c./(2.*pi.*frecuencias_ref(f_down:f_up)'.*thickness).*log(mod_H(f_d
own:f_up).*abs(naire.*(N(:,1)+nwall).^2./(N(:,1).*(naire+nwall).^2
));
N2(:,3) = -4.*pi.*N2(:,2).*frecuencias_ref(f_down:f_up)'./(100.*c);
%[cm^-1]
N2(:,4) = frecuencias_ref(f_down:f_up)';
N2(:,5) = mod_H(f_down:f_up).*exp(0.5*N2(:,3)*100*thickness);

% Nota: Hay que realizar el mismo procedimiento para las demás
medidas y los otros métodos
```