

TESIS TESIS TESIS TESIS TESIS



Centro de Ciencias Básicas
Departamento de Matemáticas y Física

TESIS

Reconstrucción 3D y caracterización de materiales usando algoritmos de aprendizaje supervisado aplicados a espectroscopía terahertz.

PRESENTA

Ing. Alexander Santa Cruz Pacheco Ortega

PARA OBTENER EL GRADO DE:

Maestría en Ciencias con Opciones a la Computación, Matemáticas Aplicadas

TUTORES

Dra. Mariana Alfaro Gómez

Dra. Luz Judith Rodríguez Esparza

INTEGRANTE DEL COMITÉ TUTORAL

Dr. Enrique Castro Camus

Aguascalientes, Ags., Julio de 2026

TESIS TESIS TESIS TESIS TESIS

AUTORIZACIONES

Mtro. Guillermo Domínguez Aguilar
DECANO DEL CENTRO DE CIENCIAS BÁSICAS

PRESENTE

Por medio del presente como **DIRECTOR** designado del estudiante **ALEXANDER SANTA CRUZ PACHECO ORTEGA** con ID 557764 quien realizó la tesis titulado/a: **RECONSTRUCCIÓN 3D Y CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES USANDO ALGORITMOS DE APRENDIZAJE SUPERVISADO APLICADOS A ESPECTROSCOPÍA TERAHERTZ**, un trabajo propio, innovador, relevante e inédito y con fundamento en la fracción IX del Artículo 43 del Reglamento General de Posgrados, doy mi consentimiento de que la versión final del documento ha sido revisada y las correcciones se han incorporado apropiadamente, por lo que me permito emitir el **VOTO APROBATORIO**, para que el pueda continuar con el procedimiento administrativo para la obtención del grado.

Pongo lo anterior a su digna consideración y sin otro particular por el momento, me permito enviarle un cordial saludo.

ATENTAMENTE
"Se Lumen Proferre"
Aguascalientes, Ags., a 30 de junio de 2026.


Dra. Mariana Alfaro Gómez
Director de tesis

c.c.p.- Interesado
c.c.p.- Coordinación del Programa de Posgrado

CARTA DE VOTO APROBATORIO

Mtro. Guillermo Domínguez Aguilar
DECANO DEL CENTRO DE CIENCIAS BÁSICAS

PRESENTE

Por medio del presente como **CODIRECTOR** designado del estudiante **ALEXANDER SANTA CRUZ PACHECO ORTEGA** con ID 557764 quien realizó *la tesis* titulado/a: **RECONSTRUCCIÓN 3D Y CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES USANDO ALGORITMOS DE APRENDIZAJE SUPERVISADO APLICADOS A ESPECTROSCOPIA TERAHERTZ**, un trabajo propio, innovador, relevante e inédito y con fundamento en la fracción IX del Artículo 43 del Reglamento General de Posgrados, doy mi consentimiento de que la versión final del documento ha sido revisada y las correcciones se han incorporado apropiadamente, por lo que me permito emitir el **VOTO APROBATORIO**, para que *el* pueda continuar con el procedimiento administrativo para la obtención del grado.

Pongo lo anterior a su digna consideración y sin otro particular por el momento, me permito enviarle un cordial saludo.

ATENTAMENTE
"Se Lumen Proferre"

Aguascalientes, Ags., a 29 de junio de 2026.

Luz Judith R.E.

Dra. Luz Judith Rodríguez Esparza
Co director de tesis

c.c.p.- Interesado
c.c.p.- Coordinación del Programa de Posgrado

CARTA DE VOTO APROBATORIO

Mtro. Guillermo Domínguez Aguilar
DECANO DEL CENTRO DE CIENCIAS BÁSICAS

PRESENTE

Por medio del presente como **ASESOR** designado del estudiante **ALEXANDER SANTA CRUZ PACHECO ORTEGA** con ID 557764 quien realizó *la tesis* titulado/a: **RECONSTRUCCIÓN 3D Y CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES USANDO ALGORITMOS DE APRENDIZAJE SUPERVISADO APLICADOS A ESPECTROSCOPÍA TERAHERTZ**, un trabajo propio, innovador, relevante e inédito y con fundamento en la fracción IX del Artículo 43 del Reglamento General de Posgrados, doy mi consentimiento de que la versión final del documento ha sido revisada y las correcciones se han incorporado apropiadamente, por lo que me permito emitir el **VOTO APROBATORIO**, para que *el* pueda continuar con el procedimiento administrativo para la obtención del grado.

Pongo lo anterior a su digna consideración y sin otro particular por el momento, me permito enviarle un cordial saludo.

ATENTAMENTE
"Se Lumen Proferre"

Aguascalientes, Ags., a 30 de junio de 2026.



Dr. Enrique Castro Camus
Asesor de tesis

c.c.p.- Interesado
c.c.p.- Coordinación del Programa de Posgrado



**DICTAMEN DE LIBERACIÓN ACADÉMICA
PARA INICIAR LOS TRÁMITES DEL EXAMEN DE GRADO**



Fecha de dictaminación (dd/mm/aaaa): 22/06/2026

NOMBRE: Alexander Santa Cruz Pacheco Ortega **ID** 557764

PROGRAMA: Maestría en Ciencias con Opciones a la Computación, Matemáticas Aplicadas **LGAC (del posgrado):** computación - inteligencia artificial

MODALIDAD DEL PROYECTO DE GRADO: Tesis Tradicional (x) *Tesis por artículos científicos () **Tesis por Patente () Trabajo Práctico ()

TÍTULO: Reconstrucción 3D y caracterización de materiales usando algoritmos de aprendizaje supervisado aplicados a espectroscopia terahertz.

IMPACTO SOCIAL (señalar el impacto logrado): Aporta un método seguro y no invasivo para analizar materiales con ondas terahertz, que ayuda a automatizar tareas de inspección que hoy requieren mucha especialización, y queda disponible de forma libre para que otros lo reutilicen.

INDICAR SEGÚN CORRESPONDA:

Elementos para la revisión académica del trabajo de tesis o trabajo práctico:	
SI	El trabajo es congruente con las LGAC del programa de posgrado
SI	La problemática fue abordada desde un enfoque multidisciplinario
SI	Existe coherencia, continuidad y orden lógico del tema central con cada apartado
SI	Los resultados del trabajo dan respuesta a las preguntas de investigación o a la problemática que aborda
SI	Los resultados presentados en el trabajo son de gran relevancia científica, tecnológica o profesional según el área
SI	El trabajo demuestra más de una aportación original al conocimiento de su área
SI	Las aportaciones responden a los problemas prioritarios del país
NO	Generó transferencia del conocimiento o tecnológica
SI	Cumple con la ética para la investigación (reporte de la herramienta antiplagio)
El egresado cumple con lo siguiente:	
SI	Cumple con lo señalado por el Reglamento General de Posgrados
SI	Cumple con los requisitos señalados en el plan de estudios (créditos curriculares, optativos, actividades complementarias, estancia, predoctoral, etc.)
SI	Cuenta con los votos aprobatorios del comité tutorial
SI	Cuenta con la carta de satisfacción del Usuario (En caso de que corresponda)
SI	Coincide con el título y objetivo registrado
SI	Tiene congruencia con cuerpos académicos
SI	Tiene el CVU de la SECHTI actualizado
SI	Tiene el o los artículos aceptados o publicados y cumple con los requisitos institucionales (en caso de que proceda)
*En caso de Tesis por artículos científicos publicados (completar solo si la tesis fue por artículos)	
NA	Aceptación o Publicación de los artículos en revistas indexadas de alto impacto según el nivel del programa
NA	El (la) estudiante es el primer autor(a)
NA	El (la) autor(a) de correspondencia es el Director (a) del Núcleo Académico
NA	En los artículos se ven reflejados los objetivos de la tesis, ya que son producto de este trabajo de investigación.
NA	Los artículos integran los capítulos de la tesis y se presentan en el idioma en que fueron publicados
**En caso de Tesis por Patente	
NA	Cuenta con la evidencia de solicitud de patente en el Departamento de Investigación (anexarla al presente formato)

Con base en estos criterios, se autoriza continuar con los trámites de titulación y programación del examen de grado:

Si ☒ X
No ☐

FIRMAS

Elaboró:

*NOMBRE Y FIRMA DEL(LA) CONSEJERO(A) SEGÚN LA LGAC DE ADSCRIPCION:

DR. ROGELIO SALINAS GUTIÉRREZ

*En caso de conflicto de intereses, firmará un revisor miembro del NA de la LGAC correspondiente distinto al director o miembro del comité tutorial, asignado por el Decano.

NOMBRE Y FIRMA DEL COORDINADOR DE POSGRADO:

DRA. MARIANA ALFARO GÓMEZ

Revisó:

NOMBRE Y FIRMA DEL SECRETARIO DE INVESTIGACIÓN Y POSGRADO:

DRA. ILIANA ERNESTINA MEDINA RAMÍREZ

Autorizó:

NOMBRE Y FIRMA DEL DECANO:

Mtro. GUILLERMO DOMÍNGUEZ AGUILAR

Nota: procede el trámite para el Depto. de Apoyo al Posgrado

En cumplimiento con el Art. 24 fracción V del Reglamento General de Posgrado, que a la letra señala entre las funciones del Consejo Académico: Proponer criterios y mecanismos de selección, permanencia, egreso y titulación de estudiantes para asegurar la eficiencia terminal y la titulación y el Art. 28 fracción IX, atender, asesorar y dar el seguimiento del estudiantado desde su ingreso hasta su titulación.

Elaborado por: D. Apoyo al Posg.
Revisado por: D. Control Escolar/D. Gestión de Calidad.
Aprobado por: D. Control Escolar/ D. Apoyo al Posg.

Código: DO-SEE-FO-15
Actualización: 02
Emisión: 12/08/25



AGRADECIMIENTOS

Al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías (CONAHCYT) —actualmente Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI)—, por la beca otorgada (Solicitud 66c4e6c2951cef449ab51992, CVU 2055580) que hizo posible la realización de mis estudios de maestría.

A la Universidad Autónoma de Aguascalientes, por abrirme sus puertas y permitirme realizar mis estudios de maestría, así como por la formación académica y los recursos que pusieron a mi alcance a lo largo de este proceso.

A mi colectivo tutorial, por su acompañamiento y dedicación a lo largo de este trabajo: a mi tutora principal, la Dra. Mariana Alfaro Gómez; a mi co-tutora, la Dra. Luz Judith Rodríguez Esparza; y a mi asesor, el Dr. Enrique Castro Camus. Su guía y sus observaciones fueron fundamentales para el desarrollo de esta tesis.

Índice general

Índice de tablas	3
Índice de figuras	4
Acrónimos	5
Resumen en Español	7
Abstract	8
1 Introducción	9
2 Marco Teórico	11
2.1 Fundamentos de la Espectroscopía THz-TDS y Modelo Físico	11
2.1.1 Refracción y Transmisión en Interfaces Dieléctricas	12
2.1.2 Geometría del Haz Gaussiano THz	13
2.1.3 Respuesta Dieléctrica de Polímeros y Materiales Compuestos en la Banda THz	14
2.2 Métodos de Reconstrucción Tomográfica	14
2.3 Representaciones Neurales Implícitas para Campos Ópticos THz	15
2.3.1 Fundamentos de las Representaciones Neurales Implícitas	15
2.3.2 Codificación Posicional de Fourier	15
2.3.3 Extracción de Características Multivista y Mecanismos de Atención	16
2.3.4 Factorización de Silueta y Regresión Condicional	16
2.4 Métricas de Evaluación para Regresión Continua de Campos Ópticos	17
2.4.1 Métricas de Error: MAE y RMSE	18
2.4.2 Intersección sobre Unión de Silueta	18
3 Metodología	19
3.1 Generación de Fantomas Sintéticos	19
3.1.1 Formas Base	19
3.1.2 Estructuras Internas	21
3.1.3 Transformación de Pose	22
3.1.4 Asignación de Propiedades Ópticas	23
3.1.4.1 Materiales de referencia	23
3.1.4.2 Muestreo y Asignación a los Vóxeles	24
3.1.5 Máscara de Silueta	24
3.2 Simulación THz-TDS	24
3.2.1 Sistema Experimental Real	24
3.2.2 Modelo de Simulación	28
3.2.2.1 Preparación de la Escena Rotada	28
3.2.2.2 Trazado de Rayos con Ley de Snell	29
3.2.2.3 Función de Transferencia $H(f)$	29
3.2.2.4 Modelo del Haz Gaussiano	30
3.2.2.5 Descomposición en Rayos	32

3.2.2.6	Modelo de Ruido del Sistema	33
3.2.2.7	Validación del modelo directo	33
3.3	Arquitectura NeuralFieldTHz	34
3.3.1	Codificador de Vistas (ViewEncoder U-Net)	34
3.3.2	Proyección Radon y Muestreo Bilineal	35
3.3.3	Agregación Multivista por Atención	35
3.3.4	Codificación Posicional de Fourier	35
3.3.5	Decodificador con Factorización de Silueta	35
3.4	Entrenamiento	35
3.4.1	Función de Pérdida	35
3.4.2	Optimización y Programación del Aprendizaje	36
3.4.3	Configuración del Entrenamiento	37
3.4.4	Conjunto de Datos y División Train/Val/Test	37
3.4.5	Protocolo de Evaluación	37
3.5	Reconstrucción Volumétrica 3D	38
4	Resultados	39
4.1	Convergencia del Entrenamiento	39
4.2	Métricas de Validación	40
4.3	Reconstrucción Volumétrica sobre Fantomas Sintéticos	40
4.4	Validación con Datos Reales	41
4.4.1	Procesamiento del Escaneo Real	41
4.4.2	Reconstrucción del Cubo Real	42
4.4.3	Propiedades ópticas reconstruidas sobre el cubo real	44
5	Discusión	45
5.1	Desempeño en el dominio sintético y contraste con la hipótesis	45
5.2	Reconstrucción del índice frente a la absorción	46
5.3	La brecha de dominio sintético-real	46
5.4	Posicionamiento frente a la literatura	47
5.5	Limitaciones	48
6	Conclusiones	49
6.1	Cumplimiento de los objetivos	49
6.2	Veredicto de la hipótesis y respuesta a la pregunta de investigación	49
6.3	Trabajo futuro	50
	Glosario	51
	Referencias	56

Índice de tablas

3.1	Los nueve materiales de referencia y sus propiedades ópticas	23
3.2	Pesos por frecuencia de la función de pérdida de regresión	36
3.3	Hiperparámetros del entrenamiento del modelo NeuralFieldTHz	37
3.4	División del conjunto de datos sintéticos para entrenamiento, validación y prueba.	37
4.1	Métricas del modelo NeuralFieldTHz sobre el subconjunto de validación	40
4.2	Métricas del modelo NeuralFieldTHz sobre el subconjunto de prueba	40
4.3	Coefficiente de absorción reconstruido en el cubo real	44
5.1	Comparación de métodos de reconstrucción en el conjunto de prueba	45

Índice de figuras

2.1	Esquema de un espectrómetro THz-TDS en transmisión	11
2.2	Refracción y reflexión total interna en una interfaz dieléctrica	13
2.3	Arquitectura del modelo NeuralFieldTHz	17
3.1	Diagrama del <i>pipeline</i> de reconstrucción volumétrica THz	19
3.2	Las ocho formas base del generador de fantomas	21
3.3	Seis tipos de estructura interna sobre una forma base	22
3.4	Construcción acumulativa de un fantoma	23
3.5	Propiedades ópticas de los nueve materiales	24
3.6	Geometría de adquisición THz-CT	25
3.7	Cubo de validación de polipropileno impreso en FDM	25
3.8	Las 19 proyecciones de amplitud THz del objeto de control	26
3.9	Señales THz-TDS reales del objeto de control	27
3.10	Componentes de la función de transferencia de un rayo del cono	30
3.11	Recorrido físico de un rayo del cono a través del fantoma	31
3.12	Sección transversal del haz Gaussiano THz	32
3.13	Descomposición del haz THz en el cono de 81 rayos	33
3.14	Validación del modelo directo sobre una muestra de HDPE	34
4.1	Curvas de entrenamiento y validación del modelo NeuralFieldTHz	39
4.2	Vista volumétrica 3D de una reconstrucción de fantoma sintético	41
4.3	Reconstrucción INR del cubo impreso real	42
4.4	Reconstrucción 3D del cubo real en el campo de visión completo	43
4.5	Localización de la silueta predicha frente al diseño del cubo real	43
5.1	Comparación visual en un fantoma sintético de prueba	46
5.2	Comparación de FBP y SART sobre el cubo impreso real	47

ACRÓNIMOS

2D Bidimensional (*Two-Dimensional*).

3D Tridimensional (*Three-Dimensional*).

BCE Entropía Cruzada Binaria (*Binary Cross-Entropy*).

CT Tomografía Computarizada (*Computed Tomography*).

FBP Retroproyección Filtrada (*Filtered Back Projection*).

FDM Modelado por Deposición Fundida (*Fused Deposition Modeling*).

FFT Transformada Rápida de Fourier (*Fast Fourier Transform*).

FIB-SEM Microscopía Electrónica de Barrido con Haz de Iones Focalizado (*Focused Ion Beam-Scanning Electron Microscopy*).

FWHM Ancho Total a Media Altura (*Full Width at Half Maximum*).

GFRP Polímero Reforzado con Fibra de Vidrio (*Glass Fiber Reinforced Polymer*).

HDPE Polietileno de Alta Densidad (*High-Density Polyethylene*).

INR Representación Neural Implícita (*Implicit Neural Representation*).

IoU Intersección sobre Unión (*Intersection over Union*).

MAE Error Absoluto Medio (*Mean Absolute Error*).

MIP Proyección de Intensidad Máxima (*Maximum Intensity Projection*).

MLP Perceptrón Multicapa (*Multilayer Perceptron*).

MSE Error Cuadrático Medio (*Mean Squared Error*).

NeRF Campos de Radiancia Neural (*Neural Radiance Fields*).

PA6 Poliamida 6 (*Polyamide 6*).

PC Policarbonato (*Polycarbonate*).

PMMA Polimetilmetacrilato (*Polymethyl Methacrylate*).

PP Polipropileno (*Polypropylene*).

PS Poliestireno (*Polystyrene*).

PVC Policloruro de Vinilo (*Polyvinyl Chloride*).

ReLU Unidad Lineal Rectificada (*Rectified Linear Unit*).

RMSE Raíz del Error Cuadrático Medio (*Root Mean Square Error*).

SART Técnica de Reconstrucción Algebraica Simultánea (*Simultaneous Algebraic Reconstruction Technique*).

SNR Relación Señal a Ruido (*Signal-to-Noise Ratio*).

THz Terahertz.

THz-TDS Espectroscopía de Terahertz en el Dominio del Tiempo (*Terahertz Time-Domain Spectroscopy*).

U-Net Red Neuronal Convolutiva en Forma de U (*U-shaped Convolutional Neural Network*).

VTK Kit de Herramientas de Visualización (*Visualization Toolkit*).



RESUMEN

Revisar por dentro piezas de plástico y materiales compuestos, sin cortarlas, se complica cuando sus densidades son parecidas. Los rayos X no las separan bien y los métodos destructivos obligan a cortar la pieza. Frente a eso, esta tesis evalúa otra vía: combinar espectroscopía de Terahertz en el dominio del tiempo (THz-TDS) con aprendizaje automático para reconstruir el interior de un objeto en tres dimensiones y estimar, punto por punto, su índice de refracción n y su coeficiente de absorción $\alpha(f)$. El modelo se llama NeuralFieldTHz. Se entrenó con 500 piezas que generó un simulador físico de la medición — 19 ángulos y 13 frecuencias entre 0.1 y 1.5 THz— y se evaluó sobre 150 piezas nuevas, frente a dos métodos clásicos, la retroproyección filtrada (FBP) y la reconstrucción algebraica simultánea (SART). Sobre datos simulados el resultado no deja dudas: ubica la forma del objeto con un solapamiento de 0.849, ahí donde los clásicos quedan en casi cero, y reduce el error del índice de 0.111 a 0.028. La prueba decisiva llegó con una pieza real, un cubo de polipropileno impreso en 3D. Y ahí el modelo falló. Recuperó una forma equivocada: solapamiento 0.079, centro corrido 4.67 mm. El índice del material sí lo recuperó —predijo el polipropileno del que está hecho el cubo—; la geometría, no. La pieza impresa trae huecos de aire del relleno e interfaces que reflejan y refractan el haz, y eso produce una medición que el simulador idealizado no reproduce. Dentro de su simulación el método promete, pero llevarlo a una medición real deja todavía muchos desafíos por delante. Cerrar esa brecha permitiría extender la caracterización THz tridimensional por composición a los plásticos y compuestos de las industrias aeroespacial y automotriz.

Palabras clave: espectroscopía de Terahertz, THz-TDS, representación neural implícita, reconstrucción tomográfica, caracterización no destructiva de materiales.

ABSTRACT

Inspecting the inside of plastic and composite parts without cutting them is difficult when the materials have similar density: X-rays do not separate them well, and destructive methods require cutting the part. This thesis evaluates an alternative: combining terahertz time-domain spectroscopy (THz-TDS) with machine learning to reconstruct the interior of an object in three dimensions and to estimate, at each point, its refractive index n and its absorption coefficient $\alpha(f)$. The model, NeuralFieldTHz, was trained on 500 parts generated by a physical simulator of the measurement—19 angles and 13 frequencies between 0.1 and 1.5 THz—and was evaluated on 150 new parts against two classical methods: filtered back-projection (FBP) and the simultaneous algebraic reconstruction technique (SART). On simulated data the result is decisive: it locates the object's shape with an overlap of 0.849 where the classical methods stay near zero, and it lowers the index error from 0.111 to 0.028. The decisive test was a real part: a 3D-printed polypropylene cube. There the model failed—it recovered a wrong shape (overlap 0.079, centroid shifted by 4.67 mm). It did recover the material's index—it predicted the polypropylene the cube is made of—but not the geometry: the printed part, with air gaps from its infill and interfaces that reflect and refract the beam, produces a measurement that the idealized simulator does not reproduce. The method shows promise within its simulation, but transferring it to a real measurement still has many challenges to overcome; bridging that gap would extend three-dimensional, composition-based THz inspection to the plastics and composites of the aerospace and automotive industries.

Keywords: terahertz spectroscopy, THz-TDS, implicit neural representation, tomographic reconstruction, non-destructive material characterization.

CAPÍTULO 1 INTRODUCCIÓN

En muchas áreas es necesario analizar el interior de ciertos objetos sin comprometer su estructura. La medicina lo hace con tomografía axial computada de rayos x y los aeropuertos con escáneres de onda milimétrica. En la ingeniería de materiales esa función la cumple la caracterización, que permite conocer qué hay dentro de un material y comprobar si se comporta como se espera. Ese comportamiento lo gobierna la microestructura: cómo se distribuyen las fases, los defectos, las inclusiones y la porosidad dentro del volumen determina cómo responde el material (Callister & Rethwisch, 2020). Por eso la caracterización no puede quedarse en la superficie ni en la imagen de un corte: necesita recuperar la distribución en todo el volumen, es decir, una reconstrucción tridimensional (Poudel et al., 2022; Vászrhelyi et al., 2020).

La técnica no destructiva más utilizada para reconstruir ese volumen es la tomografía computarizada de rayos X. Su debilidad es el contraste, apenas separa materiales de densidad parecida, como dos polímeros (Withers et al., 2021). Por eso este trabajo recurre a la espectroscopía de terahertz en el dominio del tiempo (THz-TDS), que opera entre las microondas y el infrarrojo lejano. Además de no ionizar ni destruir la muestra (Cherkasova et al., 2021; Wilmink & Grundt, 2011), penetra materiales opacos a la luz visible. Como es espectroscópica, separa fases por composición y no solo por densidad, cuando su respuesta dieléctrica es distinta (Jepsen et al., 2011; Nsengiyumva, Zhong, Zheng et al., 2023), justo donde los rayos X pierden contraste.

Elegir THz-TDS resuelve el contraste, pero abre el problema central de esta tesis, que es cómo reconstruir el volumen a partir de sus mediciones. La tomografía clásica, tanto la retroproyección filtrada como los métodos algebraicos, descansa sobre la Transformada de Radon, y esa transformada solo funciona cuando cada medición equivale a sumar un único valor de atenuación a lo largo de una línea recta (Withers et al., 2021). Los rayos X cumplen esa condición, mientras que la señal THz se comporta de otra manera.

Para entender esa diferencia basta con seguir el camino del haz dentro de la muestra y observar qué le ocurre en cada tramo. El haz no avanza como una línea delgada, porque es un haz gaussiano enfocado que se abre al atravesar el objeto, y cada medición termina recogiendo un cono completo (Saleh & Teich, 2019). Al cruzar una interfaz el rayo se desvía según la ley de Snell y pierde amplitud por la transmisión de Fresnel (Saleh & Teich, 2019), y entre caras paralelas rebota y produce ecos internos de tipo Fabry-Pérot (Withayachumnankul & Naftaly, 2014). La atenuación tampoco tiene un valor fijo, ya que el coeficiente de absorción $\alpha(f)$ cambia con la frecuencia y queda ligado al índice $n(f)$ por las relaciones de Kramers-Kronig (Kronig, 1926), y a eso se suma el esparcimiento en bordes e interfaces (Mittleman et al., 1997; Nsengiyumva, Zhong, Zheng et al., 2023). Por último, el sistema registra cada medición como una función de transferencia compleja $H(f)$ con amplitud y fase (Duvillaret et al., 1996), una información que se pierde si la medición se reduce a un solo número.

Los métodos clásicos no contemplan nada de esa física, así que al aplicarlos sobre mediciones THz la reconstrucción sale cargada de artefactos (Recur et al., 2012).

Adaptar la tomografía clásica al THz empezó por los métodos analíticos, cuando Ferguson et al. (2002) demostraron la tomografía computarizada THz por retroproyección filtrada y Recur et al. (2012) le añadieron después un modelo de haz gaussiano que reduce los artefactos de difracción. El aprendizaje automático entró por otra vía, la de extraer el índice de refracción a partir de espectros, aunque siempre sobre señales unidimensionales de muestras planas y sin llegar a la reconstrucción volumétrica (Klokkou et al., 2022, 2023). A ese panorama se sumaron las representaciones neurales implícitas, redes neuronales que guardan un objeto como una función continua capaz de devolver las propiedades de cualquier punto que se consulte. Con ellas ya se recuperan volúmenes de tomografía de rayos X a partir de pocas vistas (Rückert et al., 2022; Zha et al., 2022), pero esos trabajos manejan solo la atenuación y dejan fuera la transmisión dispersiva y la fase coherente propias del THz. Hasta donde alcanza esta revisión, nadie ha llevado todavía esta técnica a la reconstrucción tomográfica THz en tres dimensiones.

Cerrar ese hueco importa. El modelo de medición THz se puede simular hacia adelante, pero no invertir de forma analítica: sus efectos físicos se acoplan, y la inversión clásica los corrige de a uno. Un modelo que aprende esa inversión desde un simulador directo los absorbe juntos, y así lleva a tres dimensiones el contraste por composición del THz, donde

los rayos X no separan y el microscopio destruye.

Por eso este trabajo no invierte la Transformada de Radon. Aprende de los datos a reconstruir la estructura tridimensional interna del objeto directamente desde las mediciones THz-TDS. El mismo modelo, además, caracteriza el material: en cada punto estima el índice de refracción n y el coeficiente de absorción $\alpha(f)$ como valores continuos, sin encasillarlos en clases discretas (Helal et al., 2022; Klokou et al., 2022). Leer ese espectro a mano, punto por punto, sería inviable; un modelo supervisado lo vuelve tratable.

De esta propuesta surge la pregunta de investigación: ¿pueden los algoritmos de aprendizaje supervisado, aplicados a datos de espectroscopía THz-TDS, reconstruir en tres dimensiones la estructura interna de un material y caracterizar sus propiedades ópticas —índice de refracción n y coeficiente de absorción $\alpha(f)$ — en cada punto del volumen?

El objetivo general de esta investigación es aplicar algoritmos de aprendizaje supervisado para la caracterización y reconstrucción tridimensional de materiales mediante datos provenientes de espectroscopía Terahertz. Para alcanzarlo se plantean los siguientes objetivos específicos:

1. Generar un conjunto de datos sintético de fantasmas mediante la simulación directa de la adquisición THz-TDS.
2. Diseñar y entrenar un modelo de representación neural implícita que reconstruya la geometría interna tridimensional del objeto y estime, mediante regresión continua, los campos de n y $\alpha(f)$.
3. Evaluar la reconstrucción geométrica y la estimación de las propiedades ópticas sobre un conjunto de prueba sintético.
4. Validar el modelo entrenado sobre una muestra física real medida en un sistema THz-TDS.

La hipótesis de trabajo es que un modelo de aprendizaje supervisado —en concreto, una representación neural implícita— entrenado con datos THz-TDS sintéticos puede reconstruir la geometría interna tridimensional de un objeto con un error igual o menor al de los métodos clásicos de reconstrucción tomográfica, y además estimar sus propiedades ópticas continuas. La hipótesis se refuta si el error de reconstrucción geométrica del modelo supera al de dichos métodos de referencia.

El Capítulo 2 establece los fundamentos teóricos de THz-TDS y la reconstrucción tomográfica. El Capítulo 3 describe la generación del conjunto de datos sintético, el diseño de la representación neural implícita y el protocolo de evaluación. El Capítulo 4 reporta el error de reconstrucción sobre el conjunto de prueba sintético y sobre la muestra de polipropileno. El Capítulo 5 interpreta esos resultados frente a los baselines clásicos y discute las limitaciones del dominio real. El Capítulo 6 cierra con las conclusiones y las líneas de trabajo futuro.

CAPÍTULO 2 MARCO TEÓRICO

Este capítulo reúne los fundamentos teóricos que sostienen la propuesta del trabajo. Se desarrolla primero la física de la medición THz-TDS, desde cómo el pulso atraviesa la muestra hasta las propiedades ópticas que la señal codifica. Sobre esa base se examinan los métodos de reconstrucción tomográfica clásicos y sus condiciones de validez, lo que justifica abordar el problema con una representación neural implícita que estima el campo óptico continuo. El capítulo termina presentando las métricas con que se evalúa esa reconstrucción.

2.1. Fundamentos de la Espectroscopía THz-TDS y Modelo Físico

La espectroscopía en el dominio del tiempo de Terahertz (THz-TDS), que opera en la banda 0.1–10 THz, surgió a partir del desarrollo de antenas fotoconductoras excitadas por láseres de femtosegundos ($\sim 10^{-15}$ s) (Grishkowsky et al., 1990; Smith et al., 1988) y se desarrolló como técnica de caracterización con múltiples implementaciones a lo largo de las décadas de 1990 y 2000 (Jepsen et al., 2011). Se basa en la generación y detección de pulsos electromagnéticos de corta duración, del orden de los picosegundos ($\sim 10^{-12}$ s). Típicamente, un láser de femtosegundos ilumina una antena fotoconductora (el emisor), generando un pulso de THz que se colima y se dirige a través de la muestra a analizar. Un pulso de THz de referencia (que no atraviesa la muestra) y el pulso que sí la ha atravesado son detectados de forma coherente por una segunda antena fotoconductora (el detector). El término *coherente* indica que la medición conserva la fase de la señal, y no solo su intensidad: a diferencia de una detección incoherente, sensible únicamente a la energía que incide, el sistema accede al retardo temporal del pulso. Es justamente ese acceso a la fase lo que distingue al THz-TDS y lo que más adelante permitirá despejar el índice de refracción del material, tal y como se esquematiza en la Figura 2.1 (Neu & Schmuttenmaer, 2018).

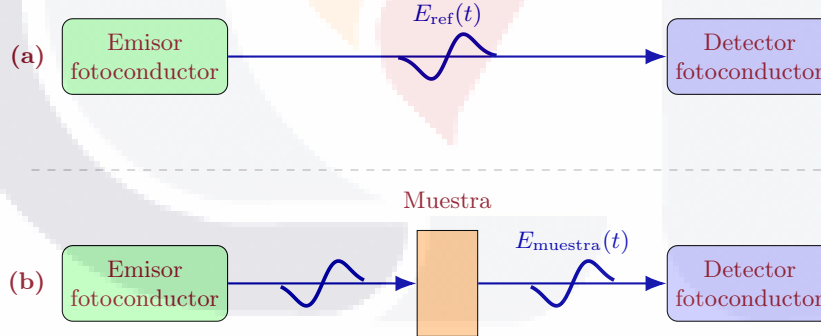


Figura 2.1. Esquema de un espectrómetro THz-TDS en configuración de transmisión. (a) Medición de referencia: el pulso THz $E_{\text{ref}}(t)$ se adquiere con la muestra físicamente retirada. (b) Medición de muestra: el pulso $E_{\text{muestra}}(t)$ se adquiere con la muestra interpuesta en el camino del haz. Ambas señales son detectadas de forma coherente por el detector fotoconductor; su cociente en el dominio frecuencial define la función de transferencia del material.

Lo que se mide directamente en un experimento de THz-TDS es la forma de onda del campo eléctrico del pulso en función del tiempo, $E(t)$, tanto para la referencia ($E_{\text{ref}}(t)$) como para la muestra ($E_{\text{muestra}}(t)$). Para extraer información espectral de estas señales, se aplica la Transformada de Fourier, una operación matemática que descompone una señal temporal en sus componentes frecuenciales, expresándola como una superposición de exponenciales complejas asociadas a cada frecuencia angular ω , relacionada con la frecuencia f mediante $\omega = 2\pi f$. En esta sección las derivaciones se expresan en ω . En los capítulos siguientes, los resultados se reportan en función de la frecuencia $f = \omega/2\pi$. En la práctica computacional, esta operación se implementa de manera eficiente mediante el algoritmo de la Transformada Rápida de Fourier (FFT, *Fast Fourier Transform*), que aplica la versión discreta de la transformación al campo eléctrico muestreado. En su forma continua,

la transformación del dominio del tiempo al dominio de la frecuencia angular ω se expresa como

$$E(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} E(t) e^{-i\omega t} dt. \quad (2.1)$$

El resultado de esta transformación es un espectro complejo $E(\omega) = A(\omega)e^{i\phi(\omega)}$, que contiene información simultánea sobre la amplitud $A(\omega)$ y la fase $\phi(\omega)$ del pulso (Neu & Schmittenmaer, 2018). La relación entre la señal que interactuó con la muestra y la señal de referencia define la función de transferencia compleja del material, $H(\omega)$ (Duvillaret et al., 1996):

$$H(\omega) = \frac{E_{\text{muestra}}(\omega)}{E_{\text{ref}}(\omega)} = \frac{A_{\text{muestra}}(\omega)}{A_{\text{ref}}(\omega)} e^{i(\phi_{\text{muestra}}(\omega) - \phi_{\text{ref}}(\omega))}. \quad (2.2)$$

A partir de esta función de transferencia se derivan las propiedades ópticas del material. La primera es la absorción: la pérdida de intensidad que sufre la señal al atravesar un medio absorbente. La ley de Beer-Lambert la describe como un decaimiento exponencial regido por el coeficiente de absorción $\alpha(\omega)$ del material y el espesor físico d de la muestra atravesada por el haz (Dorney et al., 2001; Withayachumnankul & Naftaly, 2014), $I(\omega, d) = I_0(\omega) \exp(-\alpha(\omega) d)$. Ahora bien, esa expresión está en términos de intensidad, y la detección THz-TDS es del campo, no de la intensidad. Como $I \propto E^2$, el campo varía con la raíz cuadrada de la intensidad; al tomar esa raíz, el exponente se divide entre dos.

$$A_{\text{muestra}}(\omega) = A_{\text{ref}}(\omega) \exp\left(-\frac{\alpha(\omega) d}{2}\right). \quad (2.3)$$

La otra propiedad óptica es el índice de refracción, que mide cuánto reduce el medio la velocidad de la onda frente al aire. Esa caída de velocidad retrasa la señal, y en frecuencia ese retraso aparece como un desfase $\Delta\phi$ proporcional al exceso de índice respecto del aire,

$$\Delta\phi(\omega) = \phi_{\text{muestra}}(\omega) - \phi_{\text{ref}}(\omega) = \frac{\omega d}{c} (n(\omega) - 1). \quad (2.4)$$

En la práctica, esa pareja de ecuaciones es el método estándar para caracterizar un material con THz-TDS, porque la amplitud de la Ecuación (2.3) entrega $\alpha(\omega)$ y el desfase de la Ecuación (2.4) despeja $n(\omega)$ a partir del espesor d , la frecuencia ω y la velocidad de la luz en el vacío c (Koch et al., 2023). Ese despeje directo es posible porque la muestra se prepara a su medida, ya que ambas ecuaciones suponen una lámina de material uniforme, de caras planas y espesor conocido, que el haz cruza de frente y una sola vez, y por eso dejan fuera efectos reales como las reflexiones de Fresnel en cada superficie y los ecos internos del etalón de Fabry-Pérot (Withayachumnankul & Naftaly, 2014). Un objeto tridimensional cualquiera, con formas y materiales variados en su interior, rompe todos esos supuestos a la vez, y ese salto entre la lámina idealizada y el volumen arbitrario es el problema que esta tesis enfrenta.

Este trabajo responde con un modelo directo que simula la medición completa sobre ese tipo de objetos, apoyado en la física de las interfaces y del haz que desarrollan las dos subsecciones siguientes y ensamblado, junto con el ruido instrumental, en la Sección 3.2. Del caso ideal conserva todavía una simplificación, pues supone que la onda no rebota repetidas veces dentro de la muestra y por tanto no modela las reflexiones internas múltiples.

2.1.1. Refracción y Transmisión en Interfaces Dieléctricas

El modelo idealizado anterior supone incidencia normal y desprecia el comportamiento del haz en las fronteras entre materiales. Sin embargo, cuando un rayo incide oblicuamente sobre la interfaz entre dos medios de índices n_1 y n_2 , ocurren dos fenómenos físicamente distintos que el modelo directo de este trabajo sí incorpora: el rayo cambia de dirección (refracción) y su amplitud se atenúa parcialmente (transmisión de Fresnel). Ambos están encadenados, pues la transmisión depende de los ángulos que fija la refracción.

La dirección del rayo transmitido la gobierna la *ley de Snell*, $n_1 \sin \theta_i = n_2 \sin \theta_t$, donde θ_i y θ_t son los ángulos de incidencia y refracción medidos respecto a la normal $\hat{\mathbf{n}}$ de la interfaz. En su forma vectorial, para una dirección incidente unitaria $\hat{\mathbf{d}}$ y con $\eta = n_1/n_2$, el rayo refractado unitario es (Saleh & Teich, 2019):

$$\hat{\mathbf{d}}_t = \eta \hat{\mathbf{d}} + (\eta \cos \theta_i - \cos \theta_t) \hat{\mathbf{n}}, \quad \cos \theta_t = \sqrt{1 - \eta^2 (1 - \cos^2 \theta_i)}. \quad (2.5)$$

Cuando el rayo viaja en sentido inverso, del medio más denso (n_2) al menos denso (n_1), el radicando de la Ecuación (2.5) puede volverse negativo: entonces no existe ángulo de transmisión real y toda la energía se refleja. Es la *reflexión total interna* (TIR), que ocurre cuando el ángulo de incidencia supera el ángulo crítico $\theta_c = \arcsin(n_1/n_2)$ (Figura 2.2). En el

modelo de este trabajo, un rayo que sufre TIR en una interfaz interna no se transmite y se descarta, de modo que no llega al detector y recorta la amplitud de la proyección.

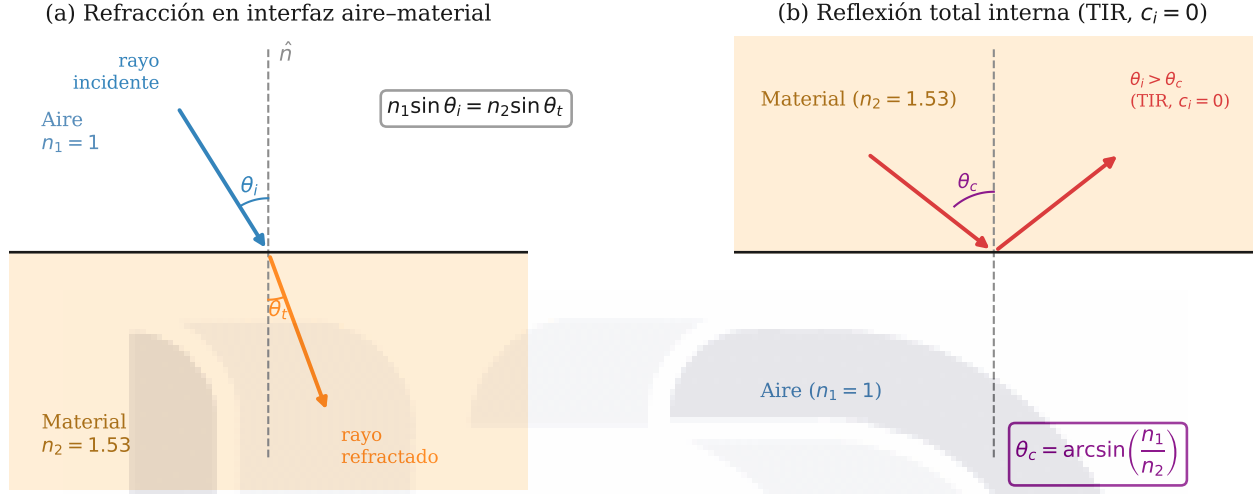


Figura 2.2. Refracción y reflexión total interna en una interfaz entre dos medios dieléctricos. (a) Refracción: el rayo incidente (azul) pasa de un medio de índice n_1 a otro más denso $n_2 > n_1$ y se desvía según la ley de Snell vectorial (Ecuación (2.5)); el caso ilustrado usa $n_2 = 1.53$, típico de un plástico en la banda THz. (b) Reflexión total interna: cuando el rayo vuelve del medio denso al menos denso y supera el ángulo crítico $\theta_c = \arcsin(n_1/n_2)$, no hay rayo transmitido y toda la energía se refleja.

La fracción de amplitud del campo que cruza la interfaz la da el coeficiente de transmisión de Fresnel. Por la misma razón —la detección es del campo, no de la intensidad—, la magnitud relevante es el coeficiente de amplitud y no el de potencia. Como el haz está linealmente polarizado, esa transmisión depende de la orientación del campo respecto al plano de incidencia. Se modela con el coeficiente de polarización s (campo eléctrico perpendicular a ese plano); el de polarización p da prácticamente el mismo valor, porque ambos solo se separan en incidencia muy oblicua, y esos rayos se pierden por reflexión total interna o no alcanzan la lente receptora. El coeficiente de transmisión de amplitud para polarización s en una interfaz $n_1 \rightarrow n_2$ es (Saleh & Teich, 2019):

$$t_s = \frac{2 n_1 \cos \theta_i}{n_1 \cos \theta_i + n_2 \cos \theta_t}. \quad (2.6)$$

Esta expresión depende explícitamente de los ángulos θ_i y θ_t que provee la Ecuación (2.5). La transmisión de Fresnel total de un rayo es el producto de los coeficientes (2.6) de todas las interfaces que atraviesa. En el caso particular de incidencia normal ($\theta_i = \theta_t = 0$) cada coeficiente se reduce a $t_s = 2n_1/(n_1 + n_2)$, y para una losa homogénea ($n_1=1 \rightarrow n_2=n \rightarrow n_1=1$) ese producto recupera la transmisión de amplitud $4n/(1+n)^2$. Como estos materiales casi no dispersan (Sección 2.1.3), sus índices apenas cambian dentro de la banda, así que ese producto no depende de la frecuencia. La forma en que estos efectos se suman sobre el cono de rayos del haz se detalla en la Sección 3.2.2.2.

2.1.2. Geometría del Haz Gaussiano THz

El haz THz no es infinitamente fino, tiene un ancho que cambia a lo largo de su recorrido, y ese ancho es lo que fija cuánto detalle puede resolver la imagen. Su intensidad sigue un perfil Gaussiano, $I(r) \propto \exp(-2r^2/w^2)$, donde r es la distancia al eje y w el radio del haz. Tres rasgos describen su geometría, y todos dependen de la frecuencia.

La primera es la cintura w_0 , el radio mínimo del haz en el foco de la lente. La difracción la fija a partir de la focal f_L y el diámetro efectivo D de la lente (Saleh & Teich, 2019):

$$w_0(f) = \frac{2\lambda f_L}{\pi D} = \frac{2c f_L}{\pi f D}. \quad (2.7)$$

Como $w_0 \propto 1/f$, a más frecuencia el foco es más fino y la resolución lateral mejora (Baillergeau et al., 2016).

La segunda describe qué pasa al alejarse del foco, donde el haz se ensancha conforme se propaga,

$$w(\zeta, f) = w_0(f) \sqrt{1 + \left(\frac{\zeta}{z_R(f)} \right)^2}, \quad (2.8)$$

con ζ la distancia axial al foco y $z_R(f) = \pi w_0^2(f)/\lambda(f) \propto 1/f$ la longitud de Rayleigh, que mide la profundidad de campo —el tramo donde el haz sigue fino. Aquí aparece el compromiso central de la imagen THz-CT, porque subir la frecuencia afina el foco pero también acorta la profundidad de campo al mismo ritmo.

La tercera es la divergencia en campo lejano ($\zeta \gg z_R$), el ángulo con que el haz se abre lejos del foco:

$$\theta_d = \frac{\lambda(f)}{\pi w_0(f)}. \quad (2.9)$$

Como λ y w_0 escalan ambas con $1/f$, su cociente es constante: la apertura angular la fija la óptica, no la frecuencia. Los parámetros de calibración del sistema experimental se detallan en la Sección 3.2.2.4.

2.1.3. Respuesta Dieléctrica de Polímeros y Materiales Compuestos en la Banda THz

En la banda THz, lo que diferencia a un material dieléctrico de otro se resume en las dos propiedades ópticas ya introducidas: el índice de refracción n y el coeficiente de absorción α (Jepsen et al., 2011). Ambas dependen de la frecuencia a través de la función dieléctrica del material (Nsengiyumva, Zhong, Luo & Wang, 2023; Sommer et al., 2016) y están ligadas entre sí por las relaciones de Kramers-Kronig (Kronig, 1926; Lucarini et al., 2005): una no puede cambiar sin arrastrar a la otra.

En los polímeros de baja pérdida de este trabajo la absorción es pequeña, y esa misma ligadura hace que su índice apenas varíe con la frecuencia (Withayachumnankul & Naftaly, 2014). Ese hecho ordena el resto del análisis, porque un índice tan estable no aporta información espectral y funciona como un valor propio de cada material más que como una firma. La firma que sí cambia con la frecuencia, la que distingue un material de otro, está en $\alpha(f)$. El contraste se ve en el caso límite, donde un vacío de aire (*voids*) tiene $n \approx 1$ y $\alpha \approx 0$, así que ni retrasa ni atenúa la onda y no deja rastro; un polímero o un compuesto de fibra de vidrio, en cambio, sí, cada uno con su índice y su atenuación propios (Kang et al., 2016; Sommer et al., 2016). La hipótesis de este trabajo es que los modelos predictivos aprovechan esa diferencia de n y $\alpha(f)$ entre materiales para caracterizarlos (Helal et al., 2022; Park & Son, 2021).

2.2. Métodos de Reconstrucción Tomográfica

La tomografía recupera la estructura interna de un objeto a partir de proyecciones tomadas desde distintos ángulos, y el formalismo clásico que ordena ese proceso es la Transformada de Radon. La transformada parte de una función $\rho(x, y)$ que describe cómo se reparte por el plano la propiedad que atenúa el haz, y a cada par ángulo–desplazamiento (θ, s) le asigna el valor acumulado de esa propiedad a lo largo de la recta correspondiente, su integral de línea. Al reunir esos valores para todos los ángulos se obtiene el sinograma, la huella completa del objeto visto desde todas las direcciones, y reconstruir consiste en invertir la transformada para recuperar $\rho(x, y)$ a partir de esa huella (Withers et al., 2021).

La primera manera de invertirla es la Retroproyección Filtrada (*Filtered Back Projection*, FBP), donde retroproyectar significa devolver cada proyección extendiéndola sobre la recta que la generó. Hacerlo sin más produce una imagen borrosa, porque lo devuelto se esparce también por zonas ajenas al rayo, así que FBP aplica antes a cada proyección un filtro de rampa $|\omega|$ en la frecuencia espacial, que realza los detalles finos en la medida justa para compensar ese emborronamiento (Withers et al., 2021). El resultado es un método analítico, directo y rápido, aunque necesita proyecciones desde muchos ángulos para funcionar bien.

La otra familia son los métodos algebraicos iterativos, con la Técnica de Reconstrucción Algebraica Simultánea (*Simultaneous Algebraic Reconstruction Technique*, SART) como representante habitual. En lugar de una fórmula de inversión, estos métodos plantean la reconstrucción como un sistema de ecuaciones lineales donde cada medición es la suma ponderada de los píxeles que el rayo atraviesa, y lo resuelven por aproximaciones sucesivas, comparando en cada iteración las proyecciones que produciría la imagen actual con las medidas y corrigiendo con esa diferencia los píxeles responsables. Ese esquema tolera mejor un número reducido de ángulos, a cambio de mucho más cómputo y una marcada sensibilidad al ruido.

Ahora bien, ambas familias heredan de Radon la premisa de un rayo recto que acumula un único valor, y la física de las Secciones 2.1.1 y 2.1.2 ya mostró que el haz THz no la cumple, de modo que FBP y SART pierden su base en este dominio (Mittleman et al., 1997; Nsengiyumva, Zhong, Zheng et al., 2023). Este trabajo toma por eso el camino contrario a la inversión y entrena un modelo de aprendizaje automático que predice las propiedades ópticas del material en cada punto del volumen, formulado como regresión continua y no como clasificación en categorías discretas, porque los materiales no ocupan clases separadas sino rangos continuos de propiedades, en línea con la baja dispersión de la Sección 2.1.3.

Conviene aclarar que lo descartado es la inversión analítica del espacio de Radon y no su geometría de proyección directa, que más adelante se reutiliza para muestrear las características de cada posición. La estimación en sí entrega un índice de refracción n escalar, promediado en la banda porque su valor apenas cambia con la frecuencia en este régimen, junto con el coeficiente de absorción $\alpha(f)$ resuelto en frecuencia, ambos como campos continuos sobre el volumen, y en principio

alcanzaría a materiales que el entrenamiento nunca vio, siempre que sus propiedades caigan dentro del rango aprendido, aunque el trabajo no lo comprueba.

2.3. Representaciones Neurales Implícitas para Campos Ópticos THz

Este trabajo aproxima esa estimación con una representación neural implícita (INR) —una red entrenada para esta tarea—. Formalicemos primero su entrada y su salida. Para una frecuencia f y un plano axial z fijos, la medición THz-TDS es un sinograma de dos coordenadas: una transversal x y una angular θ . Apilando esos sinogramas sobre las N_f frecuencias y los Z planos se obtiene el tensor de entrada $\mathbf{S} \in \mathbb{C}^{N_\theta \times N_f \times Z \times X}$, complejo porque guarda amplitud y fase del campo medido. La salida es, en cada punto $\mathbf{p} = (x, y, z)$, el índice n y la absorción $\alpha(f)$ ya descritos. Aprender el mapeo equivale a ajustar una función $\mathcal{F}_{\mathbf{w}}$ que, dado $\mathbf{S}$, asigne a cualquier coordenada $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3$ esas propiedades:

$$\mathcal{F}_{\mathbf{w}}(\mathbf{p} | \mathbf{S}) \longrightarrow (n, \alpha(f_1), \dots, \alpha(f_{N_f})) \in \mathbb{R}^{1+N_f}. \quad (2.10)$$

El subíndice $\mathbf{w}$ denota los pesos que aprende la red; N_f y N_θ , en cambio, quedan fijados por el sistema experimental (Capítulo 3).

Aproximar $\mathcal{F}_{\mathbf{w}}$ pide cuatro bloques: una codificación posicional de Fourier, un codificador de vistas por ángulo, un mecanismo de atención multivista y un decodificador con factorización de silueta. No son piezas sueltas. El decodificador recibe la concatenación del contexto multivista con la codificación de Fourier (Ecuación 2.17), de modo que ninguno funciona por su cuenta. Los cuatro se desarrollan en ese orden; el Capítulo 3 los ensambla en el modelo concreto.

2.3.1. Fundamentos de las Representaciones Neurales Implícitas

Una representación neural implícita (INR, *Implicit Neural Representation*) no almacena un campo en una cuadrícula de vóxeles: lo lleva en los pesos $\mathbf{w}$ de una red neuronal $f_{\mathbf{w}} : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^m$ (Mildenhall et al., 2020; Sitzmann et al., 2020). Entrenada una vez, la red queda como una función continua que se consulta en cualquier punto y a cualquier resolución, sin atarse a una malla. De ahí su atractivo para la tomografía THz: las propiedades ópticas quedan representadas como un campo continuo sobre el volumen, acorde con su variación continua y no discreta (Sección 2.1.3).

La INR clásica, sin embargo, tiene un límite. El NeRF original (*Neural Radiance Fields*) (Mildenhall et al., 2020) ajusta sus pesos a una sola escena: codifica ese volumen y ninguno más, y cambiar de muestra obliga a reentrenar desde cero. Cuando cada fantoma es una escena distinta, ese costo se vuelve prohibitivo.

Condicionar la red en el sinograma $\mathbf{S}$, como hace la Ecuación 2.10, rompe esa atadura. La red ya no codifica un volumen: aprende a decodificar cualquiera a partir de su medición. Es el paradigma de los campos neurales generalizables (Wang et al., 2021; Yu et al., 2021): se entrenan sobre una distribución de fantasmas y, en inferencia, toman el sinograma de una muestra nueva como contexto sin reajustar $\mathbf{w}$. Ese reparto del costo tiene nombre —inferencia amortizada (Gershman & Goodman, 2014)—: la optimización se paga una sola vez, en el entrenamiento, y cada muestra nueva se resuelve después en un único paso hacia adelante.

2.3.2. Codificación Posicional de Fourier

Un perceptrón multicapa (MLP, *Multilayer Perceptron*) que recibe coordenadas crudas arrastra un problema conocido: el sesgo espectral (*spectral bias*). Con activaciones estándar (ReLU, tanh) aprende primero las componentes de baja frecuencia espacial y converge muy despacio hacia las de alta (Rahaman et al., 2019). El decodificador de este modelo es precisamente un MLP que consume las coordenadas de consulta (Sección 3.3), así que el problema lo afecta de lleno: para un campo óptico con interfaces abruptas entre materiales distintos, la reconstrucción se suaviza y pierde definición geométrica en los bordes. Ese suavizado es de origen algorítmico. Se suma a un límite físico previo —la cintura finita del haz acota la resolución de los bordes con independencia del modelo (Sección 2.1.2)—; la codificación de Fourier ataca la parte algorítmica.

El método que lo consigue es la codificación de características de Fourier: Mildenhall et al. (Mildenhall et al., 2020) la introdujeron en los campos neurales y Tancik et al. (Tancik et al., 2020) le dieron base teórica. Su mecanismo es directo. En lugar de entregar la coordenada al MLP sin más, la proyecta sobre un banco de senos y cosenos de frecuencia creciente. Para una coordenada p normalizada al rango $[-1, 1]$:

$$\gamma(p) = \left[p, \sin(\nu_0 p), \cos(\nu_0 p), \dots, \sin(\nu_{K-1} p), \cos(\nu_{K-1} p) \right], \quad \nu_k = 2^k \pi. \quad (2.11)$$

El factor 2^k duplica cada frecuencia respecto de la anterior —una escala logarítmica en base 2—. Las primeras ν_k recogen la estructura gruesa del campo; las últimas, el detalle fino. Con esas bases oscilantes disponibles, el MLP compone las

variaciones espaciales de alta frecuencia como combinaciones lineales, sin generarlas desde cero.

Los tres ejes espaciales se codifican por separado. Contando la coordenada original sin transformar, cada uno aporta $1 + 2K$ componentes, de modo que la entrada posicional tiene dimensión

$$\dim(\gamma(x, y, z)) = 3(1 + 2K). \quad (2.12)$$

Este vector —con K fijado en el Capítulo 3 (Sección 3.3)— alimenta al decodificador junto con el contexto multivista de la subsección siguiente.

2.3.3. Extracción de Características Multivista y Mecanismos de Atención

Las proyecciones angulares no se agregan con un peso fijo: el modelo aprende cuánto aporta cada vista según la posición del punto de consulta $\mathbf{p}$. Esto ocurre en tres etapas —codificar cada vista, muestrear el rayo de $\mathbf{p}$ en todas ellas y atender el conjunto resultante—, que se describen a continuación.

Codificador por vista (*ViewEncoder*). Antes de cualquier mezcla entre ángulos, cada proyección se comprime en un mapa de características propio. Para ello, el ángulo θ_k se reordena como una imagen de $Z \times X$ píxeles con $2N_f$ canales —las partes real e imaginaria de las N_f frecuencias—. Una red U-Net (Ronneberger et al., 2015) la transforma en un mapa de d_{feat} canales:

$$\mathbf{F}_k = \text{ViewEncoder}(\text{Re}[\mathbf{S}_k] \parallel \text{Im}[\mathbf{S}_k]) \in \mathbb{R}^{d_{\text{feat}} \times Z \times X}, \quad k = 1, \dots, N_\theta. \quad (2.13)$$

Se elige la U-Net por sus conexiones de salto (*skip connections*): conservan el detalle de los bordes de la muestra, que es donde se concentra la información geométrica del campo óptico. Su configuración interna queda para la Sección 3.3.

Proyección Radon y muestreo bilineal. Para cada punto de consulta $\mathbf{p} = (x, y, z)$ y cada ángulo θ_k , la geometría de Radon fija la coordenada del sensor s donde cae el rayo que pasa por $\mathbf{p}$:

$$s(\theta_k) = x \sin \theta_k + y \cos \theta_k. \quad (2.14)$$

La coordenada axial z no cambia. El vector $\mathbf{f}_k(\mathbf{p}) \in \mathbb{R}^{d_{\text{feat}}}$ de cada vista k sale de interpolar bilinealmente el mapa $\mathbf{F}_k$ en la posición $(s(\theta_k), z)$.

Atención multivista (*CrossViewSetAttention*). Las características $\{\mathbf{f}_1(\mathbf{p}), \dots, \mathbf{f}_{N_\theta}(\mathbf{p})\}$ forman un conjunto sin orden (*set*) que pasa por un codificador Transformer de auto-atención multi-cabeza (Vaswani et al., 2017): cada vista consulta a las demás y se pondera según su utilidad para $\mathbf{p}$. Las N_h cabezas comparan todas las vistas mediante una atención escalada y sus salidas se recombinan con una proyección W^O :

$$\text{cabeza}_i = \text{softmax}\left(\frac{Q_i K_i^\top}{\sqrt{d_h}}\right) V_i, \quad (2.15)$$

$$\text{MultiHead} = [\text{cabeza}_1 \parallel \dots \parallel \text{cabeza}_{N_h}] W^O, \quad (2.16)$$

donde $d_h = d_{\text{feat}}/N_h$ es la dimensión por cabeza y $\parallel$ denota concatenación. Tras la capa Transformer queda un vector por vista; promediarlos entrega un único vector contextual $\mathbf{h}(\mathbf{p}) \in \mathbb{R}^{d_{\text{feat}}}$ para cada punto de consulta. El vector final de entrada al decodificador concatena el contexto multivista con la codificación posicional:

$$\mathbf{z}(\mathbf{p}) = \mathbf{h}(\mathbf{p}) \parallel \gamma(\mathbf{p}) \in \mathbb{R}^{d_{\text{feat}} + 3(1 + 2K)}. \quad (2.17)$$

2.3.4. Factorización de Silueta y Regresión Condicional

El fondo de aire no necesita estimación: sus propiedades ópticas se conocen de antemano. En este régimen se asume $n_{\text{aire}} = 1.0$ y $\alpha_{\text{aire}} = 0.0$ en todas las frecuencias, y con esos valores se generan los fantasmas sintéticos. Predecirlas por regresión libre en cada vóxel desperdiciaría la capacidad de la red e introduciría errores justo en los bordes de la muestra —donde la transición de aire a material es abrupta.

Para evitarlo se adopta la *factorización de silueta*. Una cabeza auxiliar del decodificador produce un logit $\ell_s(\mathbf{p}) \in \mathbb{R}$, y la sigmoide lo convierte en una probabilidad de presencia de material $p_s = \sigma(\ell_s) \in (0, 1)$. La probabilidad es continua, no

binaria: el modelo puede entrenar por gradiente y la frontera entre material y aire se afina poco a poco, sin saltos bruscos. La silueta binaria llega después. Al evaluar la geometría se umbraliza $p_s > 0.5$ (Ecuación 2.23); ese 0.5 no es un umbral ajustado a los datos: es el punto de decisión natural de una probabilidad, donde el material pasa a ser más probable que el aire. Esta probabilidad modula multiplicativamente las propiedades ópticas estimadas $\hat{n}$ y $\hat{\alpha}$ —los estimadores del índice n y la absorción α de la Ecuación 2.10—:

$$\hat{n} = 1.0 + p_s \cdot \Delta n_{\text{raw}} \quad (2.18)$$

$$\hat{\alpha}(f_i) = p_s \cdot \alpha_{\text{raw}}(f_i) \quad (2.19)$$

donde Δn_{raw} (un escalar por vóxel) y $\alpha_{\text{raw}}(f_i)$ son las salidas crudas de la cabeza de regresión: los valores que la red estima, no cantidades conocidas de antemano. El comportamiento en los extremos se lee directamente en las ecuaciones. En el fondo de aire ($p_s \rightarrow 0$) las estimaciones tienden a $\hat{n} \rightarrow 1.0$ y $\hat{\alpha} \rightarrow 0.0$; en el material sólido ($p_s \rightarrow 1$) quedan Δn_{raw} y α_{raw} sin modificación. La factorización funciona como un sesgo inductivo: desacopla la *localización geométrica* de la muestra (silueta) de su *caracterización material* (regresión), y cada cabeza se especializa en una tarea.

Esta garantía llega hasta cierto punto. El piso del aire se cumple solo de forma asintótica: como $p_s \in (0, 1)$ estrictamente, $\hat{n} = 1.0$ y $\hat{\alpha} = 0.0$ se alcanzan únicamente cuando $\ell_s \rightarrow -\infty$. Hay un segundo límite. La factorización no dice nada sobre la validez física del material: la cabeza de regresión no impone restricción de signo sobre Δn_{raw} ni α_{raw} , así que las cotas esperadas en materiales pasivos — $\hat{n} \geq 1$ y $\hat{\alpha} \geq 0$ — se inducen desde los datos de entrenamiento pero no se imponen estructuralmente.

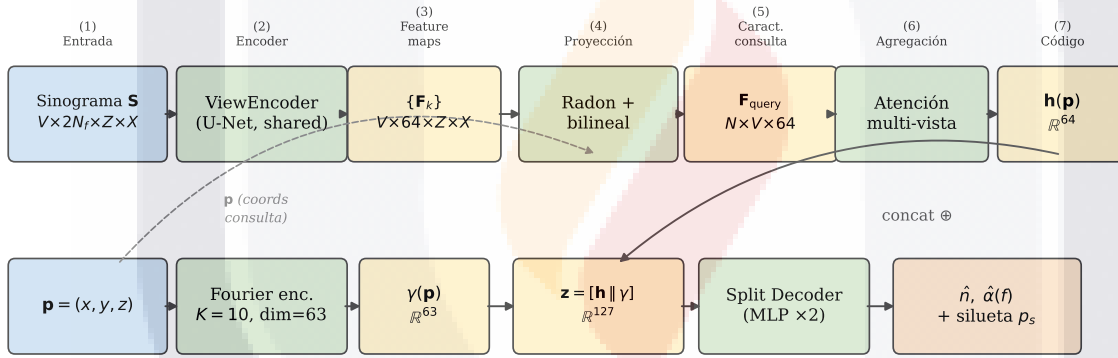


Figura 2.3. Arquitectura del modelo NeuralFieldTHz. Flujo de izquierda a derecha: (1) el sinograma complejo de entrada es procesado por el *ViewEncoder* U-Net por cada ángulo; (2) para cada coordenada de consulta se proyectan los puntos sobre los feature maps mediante la geometría de Radon y se samplea bilinealmente; (3) la *CrossViewSetAttention* agrega las 19 vistas; (4) la codificación posicional de Fourier enriquece la representación espacial; (5) el *split decoder* produce el logit de silueta, el índice estimado $\hat{n}$ y el vector $\hat{\alpha}(f)$ mediante la factorización multiplicativa.

El decodificador completo —el *split decoder*— se divide en dos cabezas que comparten la entrada $\mathbf{z}(\mathbf{p})$ pero no los pesos. Cada una es un MLP con activación ReLU seguido de una capa lineal, y difieren solo en su salida:

Cabeza de silueta: un escalar $\ell_s \in \mathbb{R}$.

Cabeza de regresión: $1 + N_f$ valores: $[\Delta n_{\text{raw}}, \alpha_{\text{raw}}(f_1), \dots, \alpha_{\text{raw}}(f_{N_f})]$, con Δn_{raw} un escalar por vóxel y α_{raw} resuelto en las N_f frecuencias.

La profundidad y la anchura de ambos MLP se especifican en el Capítulo 3 (Sección 3.3), mientras que la Figura 2.3 muestra el flujo de inferencia completo.

2.4. Métricas de Evaluación para Regresión Continua de Campos Ópticos

El modelo produce tres salidas distintas: un índice de refracción $\hat{n}$ escalar por vóxel, un coeficiente de absorción $\hat{\alpha}(f)$ resuelto en frecuencia y la silueta del objeto. Para las dos propiedades ópticas usamos el error absoluto medio (MAE) y la raíz del

error cuadrático medio (RMSE); para la geometría, la intersección sobre unión (IoU). Son tres porque cada una capta algo que las otras dos no.

2.4.1. Métricas de Error: MAE y RMSE

El MAE promedia el error en valor absoluto. Para N puntos de consulta, el del índice de refracción es

$$\text{MAE}_n = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |\hat{n}_j - n_j^*|, \quad (2.20)$$

donde n_j^* es el índice de referencia en el vóxel j y $\hat{n}_j$ es el índice estimado en ese vóxel. El coeficiente de absorción depende de la frecuencia, así que su error se mide a cada frecuencia, $\text{MAE}_\alpha(f_i) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |\hat{\alpha}_j(f_i) - \alpha_j^*(f_i)|$, y se promedia sobre las N_f frecuencias de trabajo:

$$\overline{\text{MAE}}_\alpha = \frac{1}{N_f} \sum_{i=1}^{N_f} \text{MAE}_\alpha(f_i). \quad (2.21)$$

El MAE del índice se reporta de dos formas: $\text{MAE}_{n,\text{all}}$ promedia sobre todo el volumen —incluido el aire de fondo, donde $n^* = 1$ — y refleja la fidelidad global; $\text{MAE}_{n,\text{mat}}$ promedia solo sobre los vóxeles de material y aísla el error en la región de interés, sin el optimismo que introduce el aire.

El RMSE eleva los errores al cuadrado antes de promediar, por lo que castiga más las desviaciones grandes y es sensible a los *outliers*:

$$\text{RMSE}_n = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (\hat{n}_j - n_j^*)^2}. \quad (2.22)$$

Para la absorción se calcula igual que el MAE —por frecuencia y luego promediado, $\overline{\text{RMSE}}_\alpha$ —. La razón RMSE/MAE , siempre ≥ 1 , resume la dispersión del error: cerca de 1 los errores son homogéneos; un valor mayor delata una cola de *outliers*.

2.4.2. Intersección sobre Unión de Silueta

La IoU, o Índice de Jaccard (Berman et al., 2018; Jaccard, 1912), mide cuánto se solapan la silueta predicha y la real. La silueta predicha $\hat{\mathcal{S}}$ reúne los puntos donde la probabilidad de silueta supera 0.5 —los que el modelo considera material—: $\hat{\mathcal{S}} = \{\mathbf{p} : \sigma(\ell_s(\mathbf{p})) > 0.5\}$. La métrica la enfrenta a la silueta de referencia $\mathcal{S}^*$ dividiendo lo que ambas comparten por todo lo que cubren juntas:

$$\text{IoU}_S = \frac{|\hat{\mathcal{S}} \cap \mathcal{S}^*|}{|\hat{\mathcal{S}} \cup \mathcal{S}^*|}. \quad (2.23)$$

El valor va de 0 a 1: llega a 1 cuando las dos siluetas coinciden por completo y baja en cuanto el modelo pone material donde hay aire (falso positivo), omite material que existe (falso negativo) o desplaza los bordes del objeto. Así, mientras el MAE y el RMSE evalúan si la propiedad óptica es correcta, la IoU evalúa si el objeto está donde debe —un paso previo necesario para que caracterizar el material tenga sentido.

CAPÍTULO 3 METODOLOGÍA

El objetivo de este capítulo es describir el sistema completo de reconstrucción volumétrica THz implementado en este trabajo. El sistema toma como entrada mediciones THz-TDS adquiridas en 19 ángulos de proyección y 13 frecuencias, y produce como salida un volumen tridimensional con los valores continuos del índice de refracción n y el coeficiente de absorción $\alpha(f)$ en cada punto del espacio. El modelo central es NeuralFieldTHz, una red neuronal condicional de representación implícita entrenada íntegramente con datos sintéticos generados mediante simulación física.

El *pipeline* de procesamiento consta de cinco etapas secuenciales: (1) generación de fantasmas sintéticos con propiedades ópticas continuas, (2) simulación THz-TDS con modelo de haz Gaussiano, (3) entrenamiento del modelo NeuralFieldTHz, (4) inferencia sobre nuevas muestras, y (5) reconstrucción y exportación volumétrica. La Figura 3.1 esquematiza estas etapas y las agrupa en dos fases: entrenamiento (etapas 1–3) e inferencia (etapas 4–5). Las secciones siguientes describen formalmente cada etapa.



Figura 3.1. Diagrama del *pipeline* de reconstrucción volumétrica THz. La fase de entrenamiento se ejecuta una sola vez sobre datos sintéticos y produce el modelo NeuralFieldTHz; la fase de inferencia reutiliza ese modelo ya entrenado para reconstruir cada nueva muestra.

3.1. Generación de Fantasmas Sintéticos

Un fantoma es un volumen digital donde cada vóxel ya tiene asignadas sus propiedades ópticas desde que se crea. Esa certeza es lo que necesita el modelo para aprender, porque compara su estimación contra un valor conocido en cada punto. Una muestra física no la ofrece, ya que su interior no se puede medir vóxel por vóxel y deja al entrenamiento sin una referencia. Cada fantoma se arma por etapas, y la primera es definir su forma.

3.1.1. Formas Base

Cada fantoma ocupa un volumen de N^3 vóxeles, y el tamaño N se sortea por separado para cada uno con $N \sim \mathcal{U}\{24, 88\}$ (enteros), de modo que el conjunto cubra un rango amplio de escalas. A la resolución del sistema THz-TDS (0.25 mm/vóxel, Sección 3.2), ese rango abarca de 6 a 22 mm, lo que incluye al objeto de control de 10 mm (40 vóxeles) y deja su escala dentro de lo que el modelo ve al entrenar.

El trazado de rayos condiciona qué geometrías se pueden usar, y por eso la forma de cada fantoma se elige entre ocho superficies implícitas analíticas (Figura 3.2). El motivo es la refracción del haz, porque aplicar la ley de Snell (Sección 3.2.2.2) en cada frontera de material exige la normal a la superficie, y solo una superficie analítica la entrega en forma cerrada en todo punto. Las formas generadas por campos de ruido quedan fuera, ya que no ofrecen esa normal.

Cada geometría es una regla (condición de pertenencia) que decide, vóxel por vóxel, si ese punto está dentro o fuera del objeto. Para aplicar la regla se mide la posición de cada vóxel desde el centro del volumen,

$$\mathbf{c} = (x, y, z) = (X - N/2, Y - N/2, Z - N/2), \quad (3.1)$$

donde (X, Y, Z) son los índices del vóxel. Medir desde el centro hace que cada forma quede centrada; su giro en el espacio se sortea más adelante, como transformación de pose (Sección 3.1.3). Las ocho formas son:

Elipsoide.

$$\left(\frac{x}{a_x}\right)^2 + \left(\frac{y}{a_y}\right)^2 + \left(\frac{z}{a_z}\right)^2 \leq 1,$$

con semiejes $a_x, a_y, a_z \sim \mathcal{U}(N/6, N/2)$.

Cubo redondeado (superelipsoide).

$$\left|\frac{x}{s}\right|^q + \left|\frac{y}{s}\right|^q + \left|\frac{z}{s}\right|^q \leq 1,$$

con $s \sim \mathcal{U}(N/6, N/2)$ y $q \in [2.5, 4.0]$. El exponente $q > 2$ aplana las caras: cuanto mayor es q , más se acerca la forma a un cubo; en el límite $q \rightarrow \infty$ sería uno perfecto. El rango acotado a $[2.5, 4.0]$ mantiene las aristas redondeadas, no afiladas.

Cilindro compuesto.

$$x^2 + y^2 \leq r(z)^2, \quad |z| \leq h,$$

donde $r \sim \mathcal{U}(N/8, N/4)$, $h \sim \mathcal{U}(N/6, N/2)$ y

$$r(z) = r \left[1 + \frac{z}{h}(\tau - 1) \right],$$

con $\tau \in [0.5, 1.5]$ el factor de conicidad.

Aglomerado. Unión booleana de $K \sim \mathcal{U}\{2, 4\}$ esferas:

$$\bigcup_{k=1}^K \left\{ (x - d_{x,k})^2 + (y - d_{y,k})^2 + (z - d_{z,k})^2 \leq R_k^2 \right\},$$

donde $R_k \sim \mathcal{U}(N/10, N/4)$ y $d_{x,k}, d_{y,k}, d_{z,k} \sim \mathcal{U}(-N/6, N/6)$.

Toro.

$$\left(\sqrt{x^2 + y^2} - R_{\text{mayor}} \right)^2 + z^2 \leq r_{\text{menor}}^2,$$

con $R_{\text{mayor}} \in [N/5, N/3]$ y $r_{\text{menor}} \in [N/10, N/6]$.

Cubo recto.

$$|x| \leq a_x, \quad |y| \leq a_y, \quad |z| \leq a_z,$$

con $a_x, a_y, a_z \sim \mathcal{U}(N/8, N/3)$.

Prisma rectangular.

$$|x| \leq s_x, \quad |y| \leq s_y, \quad |z| \leq s_z,$$

con $s_x, s_y, s_z \sim \mathcal{U}(N/8, N/3)$ y $s_x \neq s_y$.

Prisma triangular. Prisma triangular equilátero, obtenido al extruir a lo largo de z la sección que definen tres semiespacios en el plano xy :

$$|z| \leq h,$$

con $h \sim \mathcal{U}(N/8, N/3)$.

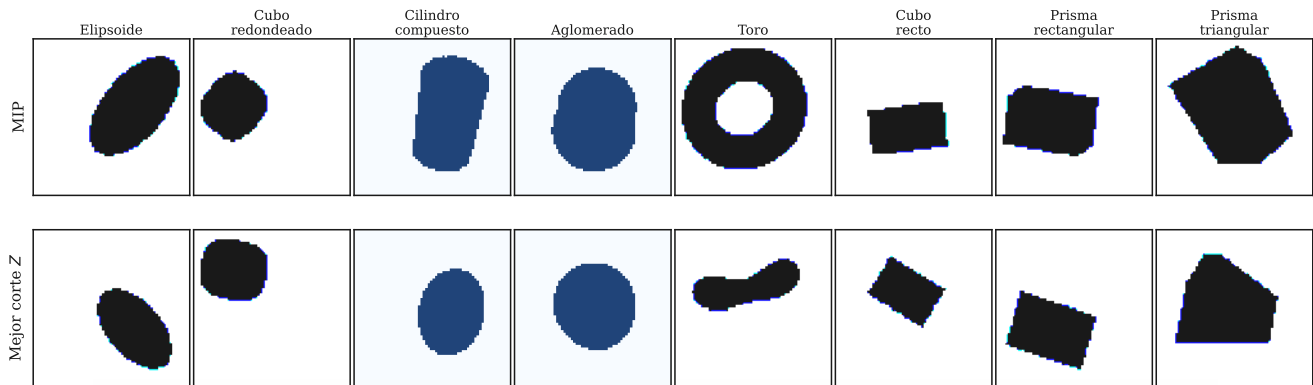


Figura 3.2. Las ocho formas base que genera el sistema. La fila de arriba muestra la proyección de máxima intensidad (MIP) de cada volumen, y la de abajo su corte central en $Z = N/2$.

3.1.2. Estructuras Internas

Sobre la forma base se generan las estructuras internas: vacíos y grietas, los defectos típicos en la inspección de polímeros. Todas son cavidades de aire ($n = 1$, $\alpha = 0$) que el generador abre quitando material de una región del objeto.

Cada fantoma recibe entre cero y cinco estructuras ($\sim \mathcal{U}\{0, 5\}$). Para aceptar una candidata se exigen dos condiciones: que su solapamiento con las cavidades ya generadas no supere el 30 % y que el objeto conserve al menos el 10 % de su volumen.

Los tipos de estructura interna son seis, también de geometría analítica (Figura 3.3):

1. **Homogéneo**: sin modificación interna.
2. **Grieta**: lámina delgada de aire, orientada al azar, con semigrosor de 0.5 a 2 vóxeles.
3. **Inclusión esférica**: cavidad de forma esférica con posición y tamaño aleatorios.
4. **Inclusión cúbica**: cavidad con geometría cúbica.
5. **Inclusión prismática rectangular**: cavidad prismática de sección rectangular.
6. **Inclusión prismática triangular**: cavidad prismática de sección triangular equilátera.

Los seis tipos se muestrean con probabilidades de 25.0, 8.3, 33.3, 16.7, 8.3 y 8.3 %, respectivamente, favoreciendo las inclusiones esféricas y el caso homogéneo. Las cavidades con orientación propia se rotan de forma independiente del objeto huésped según la transformación de pose descrita en la Sección 3.1.3.

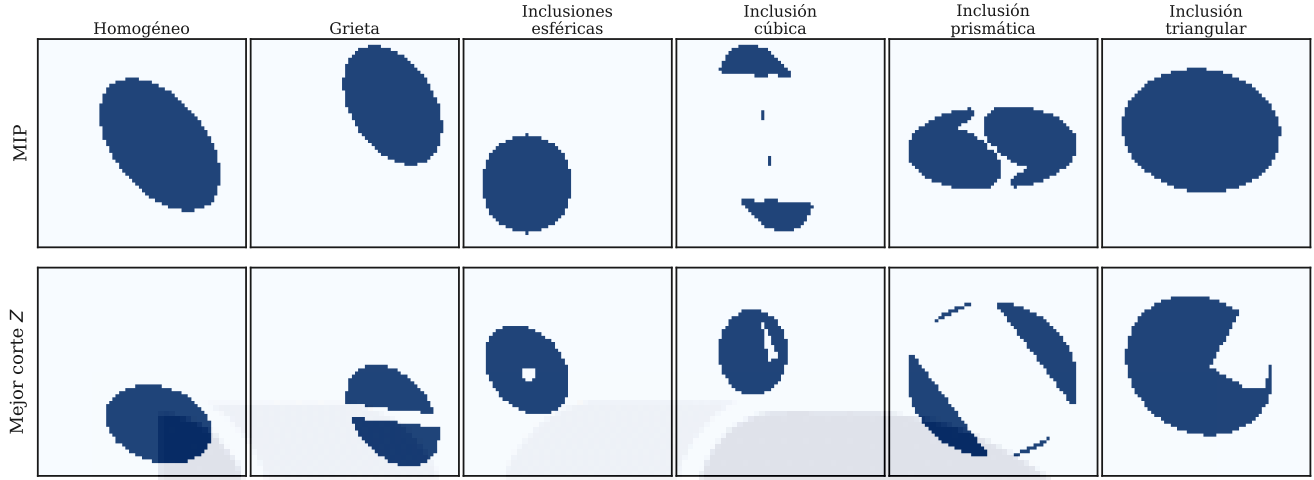


Figura 3.3. Seis tipos de estructura interna aplicados sobre una forma elipsoide base. Las cavidades de aire (grietas e inclusiones) se renderizan en contraste con la matriz sólida para hacerlas visibles.

3.1.3. Transformación de Pose

La transformación de pose cambia la orientación y la posición del fantoma dentro del campo de visión: configuraciones espaciales distintas, mismas propiedades de material.

Orientación (rotación 3D): Tres ángulos de Euler independientes, $(\theta_x, \theta_y, \theta_z) \sim \mathcal{U}(0, 2\pi)$, fijan la orientación del fantoma a través de la matriz de rotación compuesta

$$R = R_z R_y R_x.$$

Cada eje tiene su matriz elemental; las rotaciones alrededor de X , Y y Z son

$$R_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta_x & -\sin \theta_x \\ 0 & \sin \theta_x & \cos \theta_x \end{pmatrix}, \quad R_y = \begin{pmatrix} \cos \theta_y & 0 & \sin \theta_y \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta_y & 0 & \cos \theta_y \end{pmatrix}, \quad R_z = \begin{pmatrix} \cos \theta_z & -\sin \theta_z & 0 \\ \sin \theta_z & \cos \theta_z & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

La rotación es intrínseca, porque las coordenadas de cada forma se transforman, antes de evaluar su condición de pertenencia, como

$$\mathbf{c}_{\text{rot}} = \mathbf{c} R^\top.$$

La geometría nace así directamente en la orientación deseada, y como R es ortonormal y preserva distancias y volúmenes, el objeto se reorienta sin deformarse. La forma base y sus inclusiones internas rotan por separado, de modo que la orientación de las cavidades no queda ligada a la del objeto huésped.

Posición (desplazamiento): Con la orientación ya fijada, el centro de masa de la muestra se ubica en una posición entera aleatoria alrededor del centro del volumen, acotada para conservar un margen mínimo de $\max(2, N/32)$ vóxeles respecto a cada cara, y al ser entera no necesita interpolación. Sortear tanto la orientación como la posición evita que el modelo asocie un material a un lugar fijo del campo de visión. La Figura 3.4 resume esta construcción acumulativa, con la forma base, el tallado de las cavidades internas y la reorientación con desplazamiento dentro del volumen.

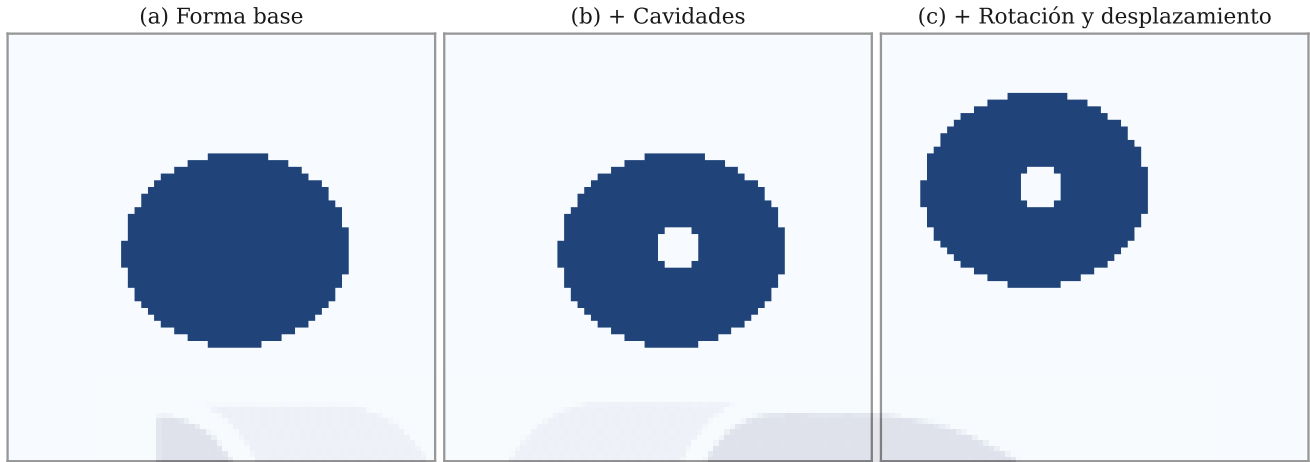


Figura 3.4. Construcción acumulativa de un fantoma. (a) Forma base en su orientación 3D aleatoria. (b) Tras tallar las cavidades de aire internas, cada una con orientación propia. (c) Tras la rotación 3D y el desplazamiento entero aleatorios dentro del campo de visión. La rotación es intrínseca (sin remuestreo de la malla) y el desplazamiento es una traslación exacta del volumen ya formado.

3.1.4. Asignación de Propiedades Ópticas

A cada vóxel de material se le asignan, desde una tabla de referencia, el índice de refracción y la absorción del material correspondiente. Estas propiedades, junto con la máscara de ocupación de la Sección 3.1.5, constituyen la verdad terreno con la que se entrena el modelo.

3.1.4.1. Materiales de referencia

Siete de los materiales utilizados provienen de mediciones THz-TDS de Piesiewicz et al. (2007), que reportan n (promedio de banda 0.1–1.0 THz) y α medido a 0.1, 0.35, 0.5 y 0.7 THz para siete plásticos de uso industrial. El octavo es el polipropileno (PP), incorporado por ser el material del objeto de validación real (Sección 4.4). Como no figura en la fuente, su índice se fija en $n = 1.50$, valor consistente con las mediciones primarias del índice de refracción del PP macizo en la región del infrarrojo lejano y THz (Birch, 1992; Flores-Mijangos & Beltrán-López, 2003); siendo el PP prácticamente no dispersivo en la banda (Sección 2.1.3), aproximarlos por un único n constante introduce un error frecuencial despreciable. La absorción del PP se aproxima por la del HDPE, un polímero de la misma familia química que absorbe de forma muy parecida. Con el aire, los ocho plásticos suman los nueve materiales de referencia de la Tabla 3.1.

El sistema trabaja con 13 frecuencias, pero la fuente solo mide cuatro, el resto se obtiene por interpolación lineal entre ellas. Por encima de 0.7 THz ya no hay datos entre los cuales interpolar, así que se extrapola con la pendiente del último tramo medido (0.5 a 0.7 THz). Su incertidumbre crece con la frecuencia, y la Tabla 3.1 marca esas columnas con el símbolo †.

Material	Clase	n	α (0.5 THz) (mm ⁻¹)	α (1.0 THz) [†] (mm ⁻¹)	α (1.5 THz) [†] (mm ⁻¹)
Aire	—	1.00	0.000	0.000	0.000
PP [‡]	polímero	1.50	0.022	0.062	0.102
HDPE	polímero	1.53	0.022	0.062	0.102
PS	polímero	1.59	0.100	0.288	0.475
PMMA	polímero	1.61	0.493	2.886	5.278
PC	polímero	1.66	0.367	2.225	4.082
PVC	polímero	1.67	0.644	1.909	3.174
Nylon PA6	polímero	1.74	0.735	4.898	9.060
GFRP	material compuesto	2.14	1.390	6.790	12.190

Tabla 3.1. Los nueve materiales de referencia con su índice de refracción n y su absorción α a tres frecuencias. El símbolo † marca los valores extrapolados; el ‡, los valores adoptados para el polipropileno.

3.1.4.2. Muestreo y Asignación a los Vóxeles

Cada fantoma recibe un material. Lo decide un sorteo uniforme entre los ocho plásticos de la Tabla 3.1:

$$m \sim \text{Uniforme}(\{\text{PP, HDPE, PS, PMMA, PC, PVC, PA6, GFRP}\}). \quad (3.3)$$

El material elegido fija las propiedades de cada vóxel: un índice de refracción n constante en frecuencia y un coeficiente de absorción $\alpha(f)$ que sí varía con ella. Una propiedad no determina a la otra. En la banda THz, dos materiales de índice casi igual pueden absorber de manera muy distinta (Figura 3.5): a 0.5 THz el PVC ($n = 1.67$) absorbe bastante más que el PC ($n = 1.66$) y el PMMA ($n = 1.61$), de índices vecinos. Por eso n y $\alpha(f)$ se tratan como salidas separadas.

El fondo y las cavidades internas quedan como aire, sin material asignado.

La variabilidad entre muestras de un mismo material se reproduce añadiendo a los valores tabulados de absorción una perturbación log-normal multiplicativa, independiente por frecuencia:

$$\alpha_{\text{final}}(f) = \alpha_{\text{tabla}}(m, f) \cdot \exp(\mathcal{N}(0, \sigma_{\log}^2)), \quad (3.4)$$

con $\sigma_{\log} = \ln(1 + 0.30) \approx 0.262$, de modo que el 68 % de las muestras cae en el intervalo $[0.77\alpha, 1.30\alpha]$.

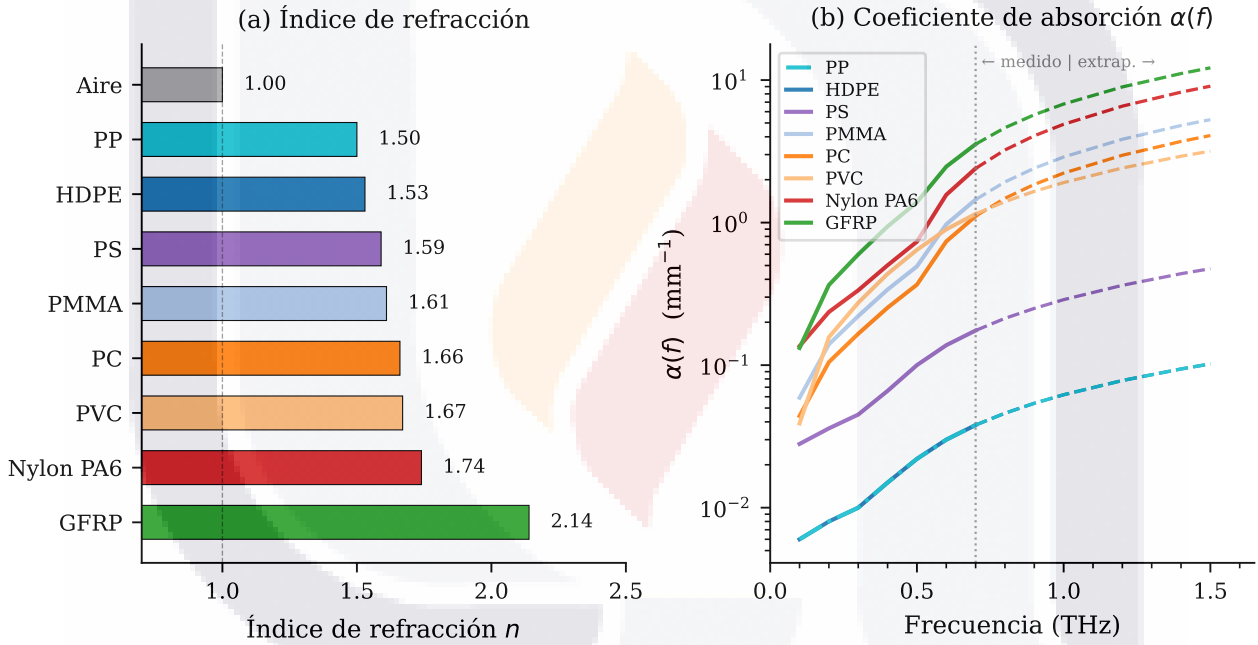


Figura 3.5. Propiedades ópticas de los nueve materiales. A la izquierda, el índice de refracción n ; a la derecha, la absorción $\alpha(f)$. Los tramos discontinuos, por encima de 0.7 THz, corresponden a valores extrapolados. La curva punto-rama del PP coincide con la del HDPE, de la que toma su absorción.

3.1.5. Máscara de Silueta

Para que el modelo aprenda dónde está el objeto y dónde no hay nada, el generador produce una segunda etiqueta junto a las propiedades ópticas: la máscara de silueta $\mathcal{S}$. Es un mapa que vale 1 donde hay material y 0 donde hay aire, así que recorta la forma del objeto y deja en cero tanto el fondo como las cavidades internas. Sobre ella se apoya la factorización de silueta (Sección 3.3), que fuerza $\hat{n} \rightarrow 1$ y $\hat{\alpha} \rightarrow 0$ donde la silueta se desvanece.

Al finalizar esta etapa, cada fantoma queda descrito por su geometría, su índice de refracción n , su absorción $\alpha(f)$ y la máscara $\mathcal{S}$. Estas etiquetas alimentan el simulador THz-TDS (Sección 3.2).

3.2. Simulación THz-TDS

3.2.1. Sistema Experimental Real

Las mediciones reales se adquirieron con un espectrómetro THz-TDS API TeraGauge (Advanced Photonix Inc., actualmente Luna Innovations), un sistema de antenas fotoconductoras que opera en el dominio del tiempo y en configuración de

transmisión (Figura 3.6). Dos lentes idénticas de $f = 152.4 \text{ mm}$ coliman el haz de la antenna emisora sobre la muestra y lo recogen hacia el detector. Para la tomografía, la muestra gira en pasos de 10° , con $N_\theta = 19$ proyecciones entre 0° y 180° . Estas mediciones cumplen dos funciones en el trabajo: sirven de referencia para calibrar el simulador y constituyen el objeto de control con que se evalúa el pipeline.

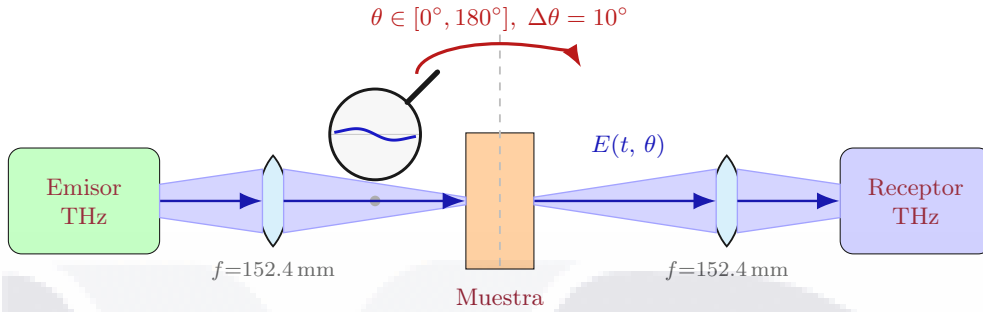


Figura 3.6. Geometría de adquisición THz-CT. La antenna fotoconductora emisora genera un pulso THz que es colimado por la primera lente ($f = 152.4 \text{ mm}$) y enfocado sobre la muestra por la segunda lente idéntica. La muestra rota $N_\theta = 19$ ángulos $\theta \in [0^\circ, 180^\circ]$ en pasos de 10° alrededor de su eje vertical Z ; los rayos THz se propagan a lo largo del eje X .

Cada proyección consiste en un barrido 2D del plano (Z, X) con paso espacial de 0.25 mm por píxel. En cada posición del barrido se registra la forma de onda temporal completa $E(t)$ con $N_t = 1600$ puntos y paso temporal $\Delta t = 0.1 \text{ ps}$, dando una ventana de 160 ps .

Con el sistema descrito se midió el objeto de control: un cubo de 10 mm de lado impreso por deposición fundida (FDM) en polipropileno (PP), con una cavidad esférica de aire de 2 mm de diámetro en su centro (Figura 3.7).

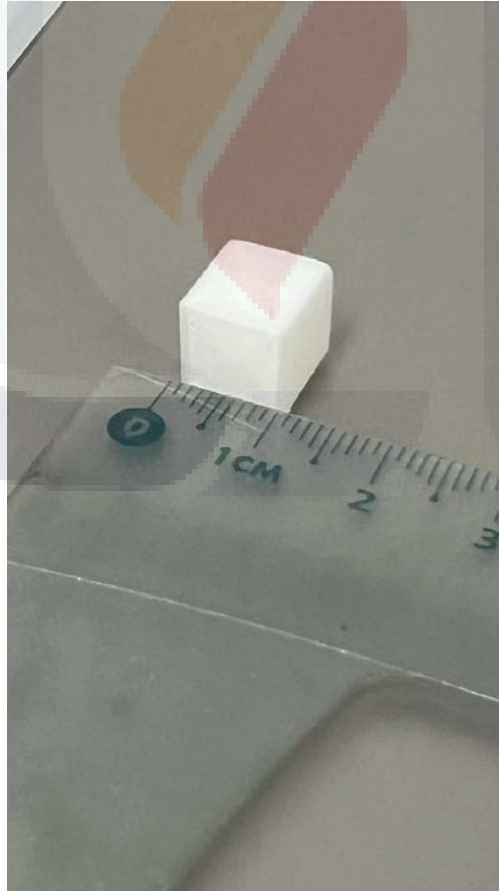


Figura 3.7. Cubo de validación impreso en FDM con polipropileno (PP), de 10 mm de lado, junto a una escala de referencia. En su centro aloja una cavidad esférica de aire de 2 mm de diámetro.

La Figura 3.8 muestra las 19 proyecciones de amplitud $\max_t |E(t)|$ del objeto de control. La zona oscura corresponde a la sombra del cubo, donde el haz THz es atenuado por el material, y su contorno varía con el ángulo de rotación, evidenciando la naturaleza tomográfica de la adquisición.

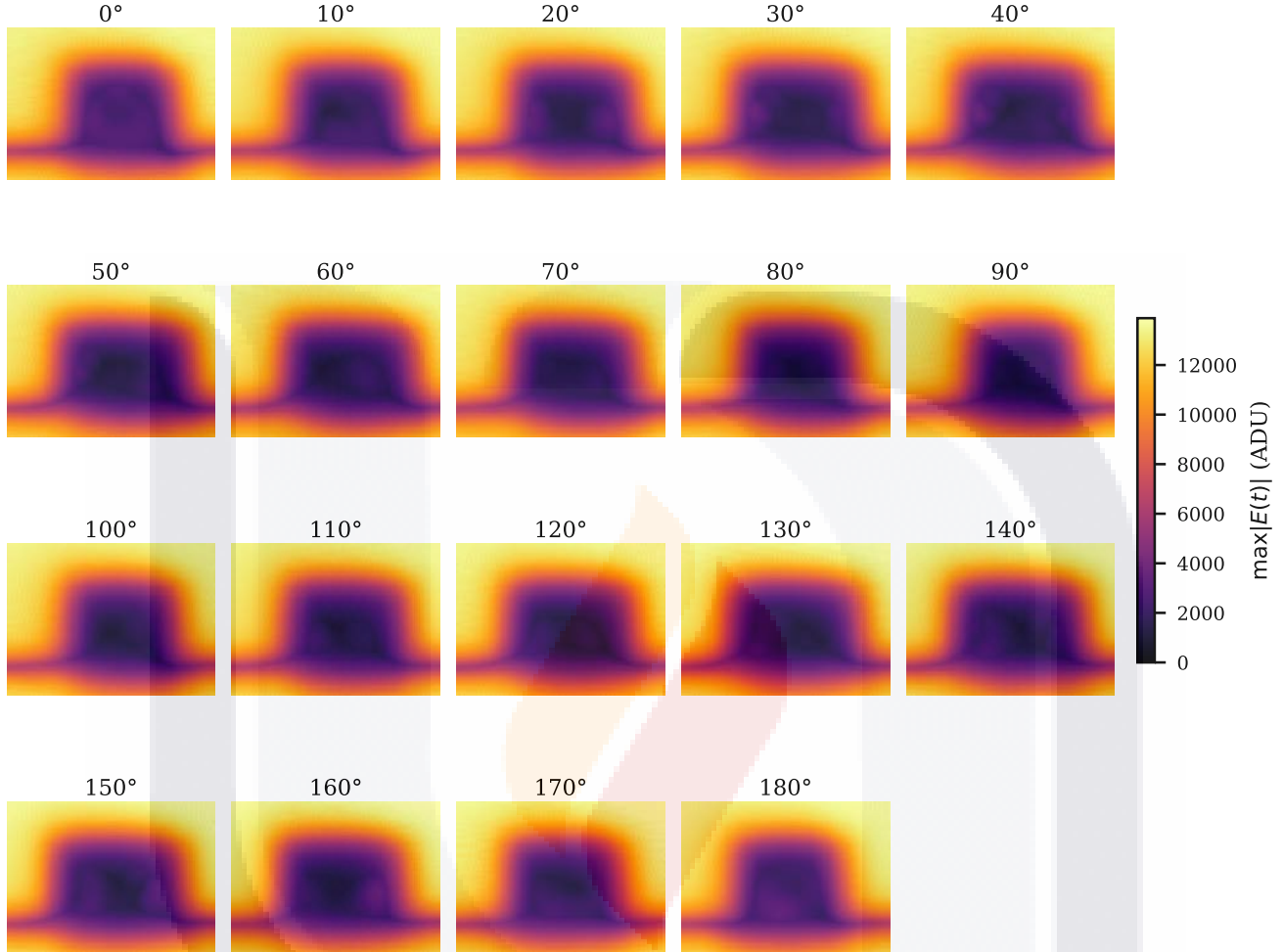


Figura 3.8. Las 19 proyecciones de amplitud THz del objeto de control, $\max_t |E(t, z, x)|$, para $\theta \in [0^\circ, 180^\circ]$ en pasos de 10° . La zona oscura corresponde a la región de la muestra donde el haz es atenuado; la escala de color es compartida entre todas las proyecciones.

Cada píxel de esas proyecciones resume una señal temporal completa. Dos señales sostienen todo el análisis posterior, y hay que fijarlas antes de procesar nada. La señal de referencia $E_{\text{ref}}(t)$ se toma de un píxel en una esquina del campo de visión, donde no hay muestra y el haz THz solo atraviesa aire: es el pulso tal como lo emite el sistema, sin perturbar, y contra ella se mide todo lo demás.

La otra es la señal de muestra $E(t, \theta)$, tomada de un píxel centrado en la proyección, donde el haz sí atraviesa el objeto. Frente a la referencia trae dos efectos combinados. Uno es un retardo de fase, producido por el índice de refracción del material: con $n > 1$ la propagación de fase se ralentiza. El otro es una atenuación de amplitud, causada por la absorción del material y por las reflexiones en las interfaces.

La Figura 3.9 muestra ambas señales para la proyección a $\theta = 0^\circ$ del objeto de control. La señal de muestra llega atenuada y retardada respecto a la referencia, y arrastra ecos Fabry-Pérot de las reflexiones internas del cubo, ausentes en el aire. En frecuencia, la banda útil del sistema llega hasta aproximadamente 1.5 THz; dentro de ella se eligen las 13 frecuencias de trabajo $f_{\text{THz}} = [0.1, 0.2, \dots, 1.0, 1.2, 1.4, 1.5]$ THz.

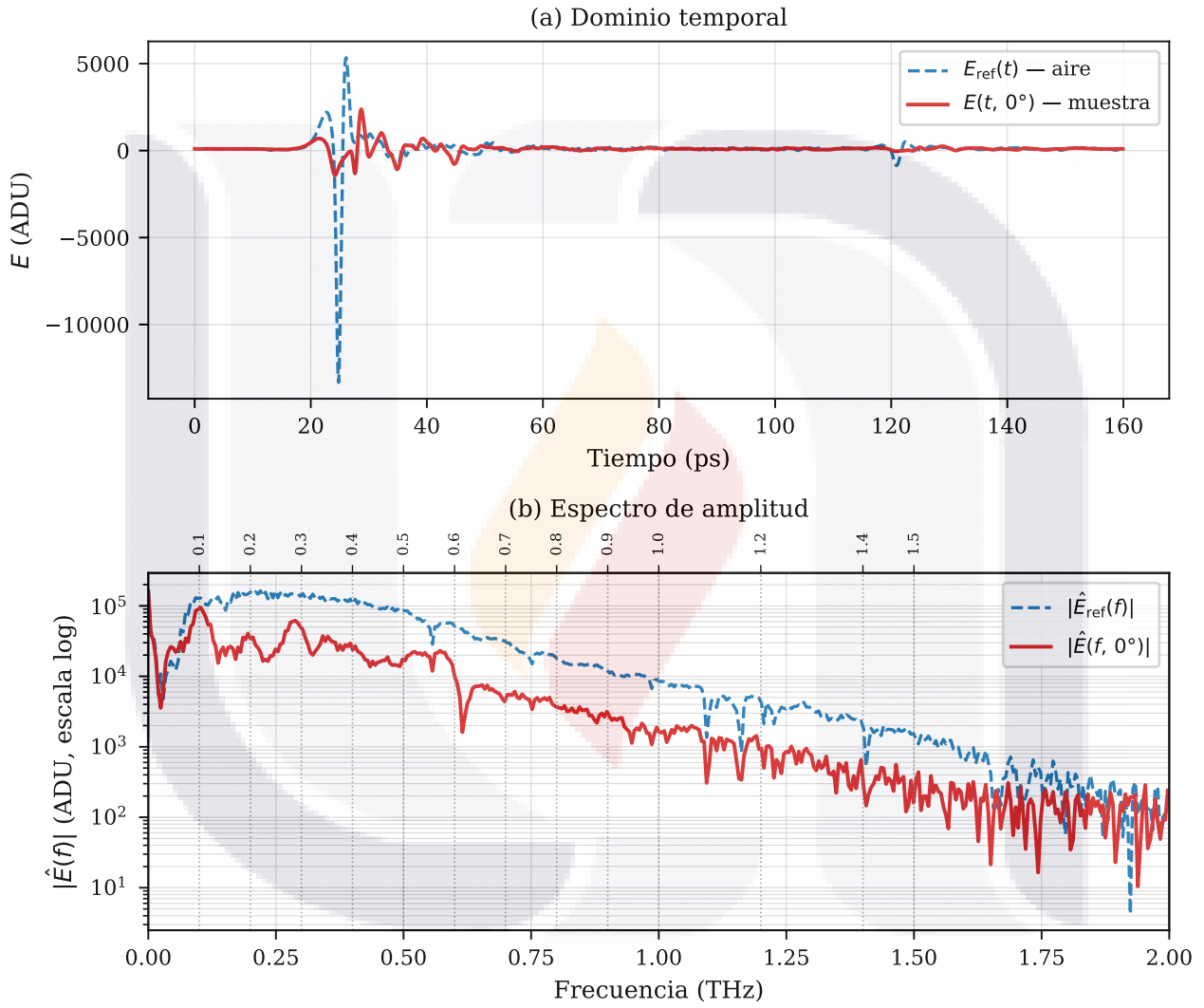


Figura 3.9. Señales THz-TDS reales del objeto de control a $\theta = 0^\circ$, en amplitud bruta sin normalizar. (a) Dominio temporal: la señal de muestra se atenúa unas $5.6\times$ respecto a la de aire y muestra ecos Fabry-Pérot de las reflexiones entre las caras del cubo, ausentes en la referencia. (b) Espectro de amplitud en escala logarítmica: la banda útil llega hasta aproximadamente 1.5 THz, donde la amplitud cae al piso de ruido; las líneas verticales grises marcan las 13 frecuencias de trabajo elegidas dentro de esa banda.

El pulso de referencia admite una forma analítica sencilla, y vale la pena escribirla porque el simulador la reutiliza: es la onda que se hace pasar por la respuesta del material para reconstruir la señal transmitida. Su modelo es la primera derivada de una gaussiana, el perfil habitual de las antenas fotoconductoras de THz (Withayachumnankul & Naftaly, 2014):

$$E(t) = -\frac{t - t_0}{\sigma^2} \exp\left(-\frac{(t - t_0)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (3.5)$$

con $t_0 = 24.7$ ps y $\sigma = 0.34$ ps medidos sobre el pulso real del sistema; esa anchura equivale a una FWHM ≈ 0.80 ps.

Conviene separar dos usos. Los valores de la función de transferencia $H(f)$ no dependen de este pulso: se obtienen de forma analítica a partir de los parámetros ópticos del camino de cada rayo (Ecuación (3.8)), directamente sobre las 13 frecuencias de trabajo. El pulso entra después, al volver al dominio del tiempo: aplicando $H(f)$ sobre el espectro del pulso de referencia $-\hat{E}(f)$, la transformada de Fourier de $E(t)$ (Ecuación (3.5))— se reconstruye la señal transmitida, $\text{irfft}(\hat{E}(f)H(f))$, donde se hacen visibles el retardo y la atenuación que el material acumula a lo largo del camino (Figura 3.11).

3.2.2. Modelo de Simulación

Antes de medir algo es necesario saber cómo deforma el fantoma a la señal, y eso es lo que captura la función de transferencia compleja $H(f, z, x)$: para cada fantoma y cada ángulo de proyección compara, píxel por píxel y frecuencia por frecuencia, la señal que sale del material con la referencia de aire de la Figura 3.9, de modo que H es, sencillamente, la huella que el material deja sobre la onda. Esa huella se arma de cuatro efectos físicos, que el rayo va sufriendo a medida que entra, cruza y sale del material:

1. **Refracción en interfaces** (ley de Snell vectorial): la refracción es el quiebre que sufre el rayo al pasar de un material a otro de distinto índice; como cambia de dirección, también cambia el largo del camino que recorre y el tiempo que tarda en llegar, y ese retraso la señal lo registra como un corrimiento de fase.
2. **Absorción a lo largo del camino óptico** (ley de Beer-Lambert): la absorción es la amplitud que el campo va perdiendo mientras avanza por el material; esa pérdida se acumula, de manera que crece de forma exponencial con la distancia recorrida y con el coeficiente de absorción $\alpha(f)$.
3. **Reflexiones parciales en interfaces** (coeficientes de Fresnel): en cada frontera no todo el campo sigue de largo, una parte se refleja, y la fracción que logra transmitirse la fija el coeficiente de Fresnel para polarización s (Ecuación (2.6)), que depende del ángulo con que el rayo incide, es decir del mismo ángulo que dejó marcado la refracción del paso anterior.
4. **Pérdida de colección**: la lente receptora solo alcanza a juntar los rayos que caen dentro de su cono de apertura, así que los que se escapan, desviados por una refracción muy oblicua o devueltos por reflexión total interna, nunca llegan al detector y recortan la amplitud final.

Reproducir estos efectos requiere cuatro pasos, que estructuran el resto de la sección de lo simple a lo complejo: (i) preparar el volumen rotado y sus campos ópticos para el ángulo de proyección; (ii) trazar un rayo individual a través de la muestra —aplicando refracción, absorción y reflexión (efectos 1–3)— y obtener su función de transferencia $H_i(f)$; (iii) reconstruir el haz THz real, que no es un rayo ideal sino un cono Gaussiano, como la suma ponderada de muchos de esos rayos, descartando los que no alcanzan el detector (efecto 4); y (iv) añadir el ruido del sistema.

3.2.2.1. Preparación de la Escena Rotada

Cada una de las 19 proyecciones observa la muestra desde su propio ángulo, con $\theta \in \{0^\circ, 10^\circ, \dots, 180^\circ\}$, y fijar ese ángulo se reduce a girar la muestra alrededor del eje vertical Z , igual que en el experimento real (Figura 3.6). Rotarla no exige remuestrear ningún volumen, porque la muestra no es una grilla de vóxeles sino el conjunto de superficies analíticas ya descrito (Sección 3.1.1). Basta entonces con aplicar a la posición y la orientación de cada cuerpo la rotación $R_z(\theta)$, la matriz elemental de la Ecuación (3.2) evaluada en el ángulo de proyección. Como R_z mantiene fija la coordenada Z , cada cuerpo gira en su plano horizontal sin cambiar de altura.

La escena rotada ya lleva las propiedades ópticas de la muestra —el índice n_m y la absorción $\alpha_m(f)$ del material muestreado (Ecuación (3.3)), con las cavidades como aire—. El trazado de rayos las evalúa de forma analítica a lo largo de cada tramo del camino, sin discretizarlas en una grilla de vóxeles.

3.2.2.2. Trazado de Rayos con Ley de Snell

El trazado sigue un rayo a través de la muestra: avanza en la dirección del haz, el eje X , y en cada frontera entre medios se dobla según la ley de Snell. De ese recorrido salen las integrales de línea y los ángulos de incidencia que la subsección siguiente convierte en la función de transferencia del rayo. Para doblarlo en una frontera hacen falta dos cosas: hacia dónde mira la frontera y cómo se quiebra el rayo al cruzarla.

Normales de superficie. Refractar el rayo en una frontera exige su normal. Como las formas son superficies analíticas (Sección 3.1.1), la normal se obtiene en forma cerrada de la geometría de cada cuerpo —la cara de un prisma según su orientación, o el gradiente de la ecuación implícita en una superficie cuádrica como la esfera, el elipsoide o el cilindro—, sin discretizar ni suavizar ningún campo.

Ley de Snell vectorial. Con la normal $\hat{\mathbf{n}}$ y la dirección incidente $\hat{\mathbf{d}}$, la dirección refractada $\hat{\mathbf{d}}_t$ al pasar del índice n_1 al n_2 se obtiene aplicando la Ecuación (2.5) del marco teórico, con $\cos \theta_i = |\hat{\mathbf{d}} \cdot \hat{\mathbf{n}}|$ y $\eta = n_1/n_2$. Cuando el radicando de $\cos \theta_t$ se vuelve negativo no existe ángulo de salida: es reflexión total interna, y el rayo se descarta como no colectado ($c_i = 0$). Tras cada refracción la dirección se renormaliza.

Acumulación a lo largo del camino. El rayo no se marcha vóxel a vóxel: avanza de interfaz en interfaz. En cada paso busca la intersección más cercana con las superficies de la escena, salta hasta ese punto y, si cambia de medio, se refracta. Mientras atraviesa material va acumulando la longitud de camino interno y, con ella, el retardo de fase y la absorción que el material impone (en las unidades del *pipeline*: n adimensional, α en mm^{-1} , longitudes en mm):

$$\begin{aligned} L(z, x) &= \sum_k \ell_k \\ \Delta_{\text{ret}}(z, x) &= (n_m - 1) L(z, x) \\ \Delta_{\text{abs}}(f_i, z, x) &= \alpha_m(f_i) L(z, x), \end{aligned} \quad (3.6)$$

donde ℓ_k son los tramos que el rayo recorre dentro del sólido entre interfaces sucesivas y L su suma, la longitud total en material. El retardo Δ_{ret} no depende de la frecuencia —el índice es no dispersivo—, mientras que la absorción $\Delta_{\text{abs}}(f_i)$ sí, a través de $\alpha_m(f_i)$. La geometría de la refracción y de la reflexión total interna en una interfaz se ilustra en la Figura 2.2 del marco teórico.

3.2.2.3. Función de Transferencia $H(f)$

Para cada rayo i , la señal transmitida se modela mediante una función de transferencia que incorpora la transmisión de Fresnel en las interfaces, la absorción Beer-Lambert y el retardo de fase. La transmisión de Fresnel se evalúa interfaz por interfaz mediante el coeficiente de amplitud para polarización s definido en la Ecuación (2.6) del marco teórico, usando los ángulos θ_i y θ_t que provee el trazado de rayos (Sección 3.2.2.2). La transmisión total que acumula el rayo es el producto de los coeficientes sobre las K_i interfaces que atraviesa:

$$T_{F,i} = \prod_{k=1}^{K_i} \frac{2 n_k \cos \theta_{i,k}}{n_k \cos \theta_{i,k} + n_{k+1} \cos \theta_{t,k}}. \quad (3.7)$$

Como los índices de estos materiales son prácticamente constantes a lo largo de la banda THz (régimen de baja dispersión), $T_{F,i}$ es un factor puramente geométrico, independiente de la frecuencia.

Los valores de α almacenados siguen la convención de intensidad ($I = I_0 e^{-\alpha L}$); como $H(f)$ es una transferencia de campo, el exponente de absorción se divide por dos, según la Ecuación (2.3) del marco teórico:

$$H_i(f) = T_{F,i} \cdot \exp\left(-\frac{\Delta_{\text{abs}}(f)}{2}\right) \cdot \exp\left(-j \frac{2\pi f \cdot \Delta_{\text{ret}}}{c}\right), \quad (3.8)$$

con $c = 0.29979 \text{ mm/ps}$. La Ecuación (3.8) describe la función de transferencia de *un único rayo* que atraviesa la muestra.

La Figura 3.10 ilustra el comportamiento de cada uno de los tres factores de $H_i(f)$ en función de la frecuencia y de los parámetros del camino óptico.

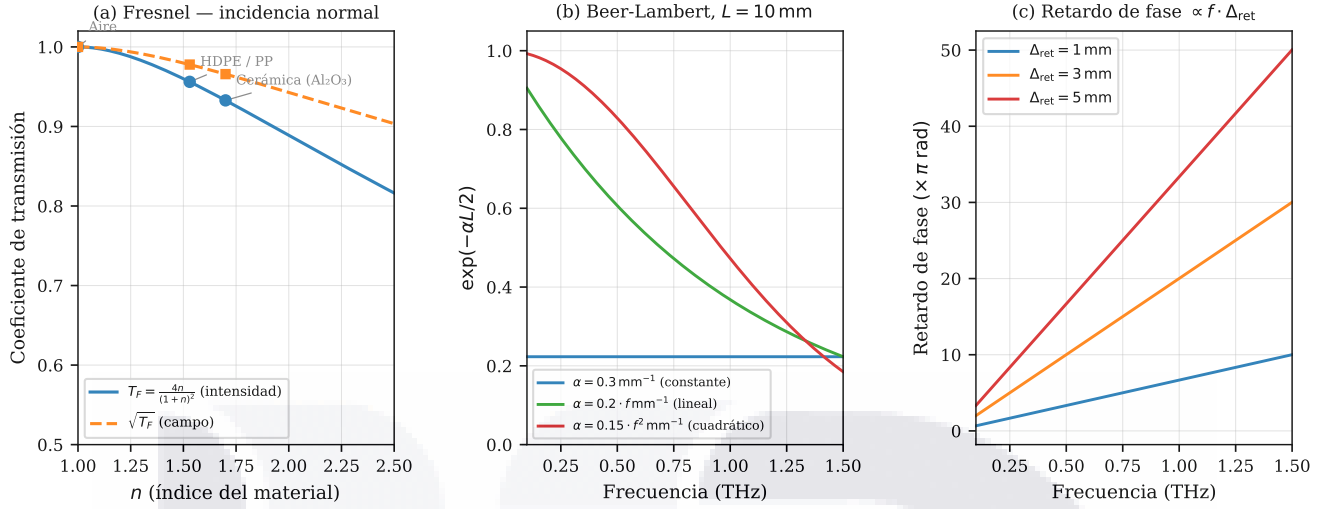


Figura 3.10. Componentes de la función de transferencia $H_i(f)$ para un rayo del cono. (a) Transmitancia de Fresnel en el límite de incidencia normal, $4n/(1+n)^2$, en función del índice del material: la pérdida es mayor para materiales de alto índice. Los marcadores indican valores típicos en THz (aire, plástico HDPE/PP, cerámica). El modelo completo evalúa el coeficiente oblicuo de la Ecuación (3.7) en cada interfaz. (b) Atenuación Beer-Lambert $\exp(-\alpha L/2)$ para $L = 10$ mm y tres perfiles de absorción representativos; la absorción crece con la frecuencia, lo que limita el uso de frecuencias altas en materiales absorbentes. (c) Retardo de fase $2\pi f \Delta_{ret}/c$ (en unidades de π rad) para tres valores de retardo acumulado Δ_{ret} ; la fase crece linealmente con la frecuencia, lo que produce el desplazamiento temporal observable en el dominio del tiempo.

La Figura 3.11 integra los elementos anteriores en el recorrido completo de un único rayo del cono efectivamente colectado por el detector: la refracción en cada interfaz (ley de Snell, Sección 3.2.2.2), la pérdida de amplitud por Fresnel y Beer-Lambert a lo largo del camino, el criterio de colección en la apertura receptora y el pulso transmitido resultante en el dominio del tiempo.

3.2.2.4. Modelo del Haz Gaussiano

El desarrollo anterior trazó y caracterizó un rayo aislado. El haz THz real tiene perfil de intensidad gaussiano $I \propto \exp(-2r^2/w^2)$ (Figura 3.12): la señal detectada en cada píxel es la suma ponderada de los rayos dentro del cono de apertura de la lente.

Cintura de enfoque dependiente de la frecuencia. Como establece la ley de difracción (Sección 2.1.2), en un sistema THz-TDS real la cintura del haz enfocado es proporcional a la longitud de onda: $w_0 \propto \lambda \propto 1/f$ (Baillergeau et al., 2016). El parámetro de calibración utilizado en este trabajo es

$$w_0(f) = W_{0,ref} \cdot \frac{f_{ref}}{f}, \quad (3.9)$$

donde $W_{0,ref} = 1.03$ mm es la cintura a $f_{ref} = 1.0$ THz, obtenida a partir de mediciones directas del cubo de calibración: $FWHM_{lateral} = 2.43$ mm a 0.5 THz implica $w_0(0.5) = 1.03/0.5 = 2.06$ mm = $2.43/1.177$ mm, coherente con la conversión Gaussiana.

Ángulo de divergencia. Sustituyendo $w_0(f) = k/f$ (con $k = W_{0,ref} \cdot f_{ref} = 1.03$ mm·THz) en la definición del ángulo de campo lejano (Saleh & Teich, 2019):

$$\theta_d = \frac{\lambda(f)}{\pi w_0(f)} = \frac{c/f}{\pi k/f} = \frac{c}{\pi k} \approx 0.093 \text{ rad}, \quad (3.10)$$

con $c = 0.29979$ mm/ps. Así, θ_d queda independiente de la frecuencia, fijado por la apertura numérica de la lente ($\theta_{NA} = 0.124$ rad). De ahí que la geometría del cono pueda fijarse una vez para todas las frecuencias.

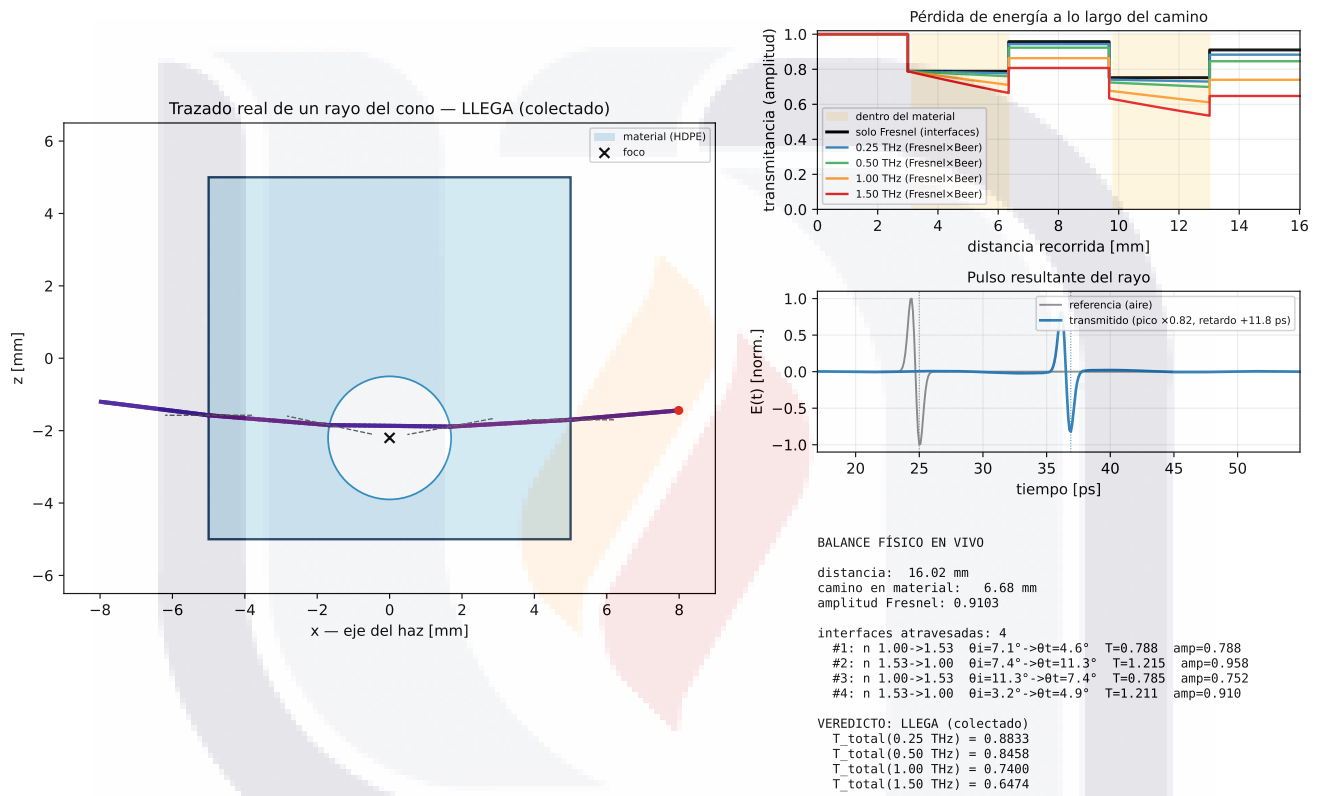


Figura 3.11. Recorrido físico completo de un rayo del cono a través del fantoma (caja de HDPE con una cavidad esférica de aire).

Izquierda: trazado real del rayo en el plano $x-z$; se dobla por refracción de Snell en cada interfaz y, en este caso, alcanza la apertura del receptor (rayo colectado). **Arriba, derecha:** transmitancia de amplitud acumulada a lo largo del camino —escalones de Fresnel en las interfaces y decaimiento exponencial de Beer-Lambert dentro del material—, mostrada para cuatro frecuencias (la absorción crece con f). **Centro, derecha:** pulso transmitido resultante en el tiempo, $\text{irfft}(\hat{E}_{\text{ref}}(f) H_i(f))$, comparado con la referencia en aire; se aprecian el retardo de grupo $(n-1)\ell_{\text{mat}}/c$ y la atenuación. **Abajo, derecha:** balance físico del rayo (ángulos de incidencia y refracción, coeficiente de Fresnel e índices en cada interfaz). Todos los valores provienen del modelo directo de la Sección 3.2.2; corresponden a *un solo rayo* y no a la señal medida, que es la suma coherente ponderada de los 81 rayos del cono (Ecuación (3.14)).

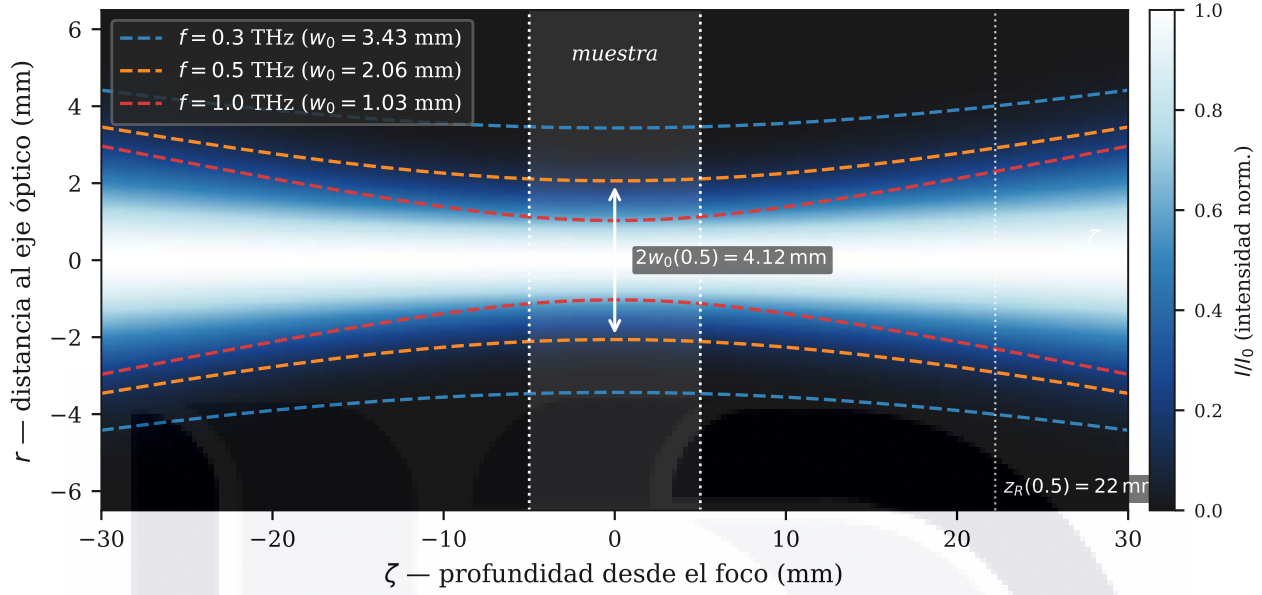


Figura 3.12. Sección transversal del haz Gaussiano THz en el plano de propagación (ζ, r) . El mapa de color muestra la intensidad normalizada $I/I_0 = \exp(-2r^2/w^2)$ para $f = 0.5$ THz. Las curvas discontinuas muestran la envolvente $w(\zeta, f) = w_0(f)\sqrt{1 + (\zeta/z_R)^2}$ para tres frecuencias representativas; dado que $w_0(f) = 1.03/f$ mm, a mayor frecuencia el spot focal es más estrecho. La región punteada corresponde a la posición de la muestra.

3.2.2.5. Descomposición en Rayos

El perfil Gaussiano del haz se aproxima con $N_{\text{rayos}} = 81$ rayos discretos, dispuestos en una malla polar cónica según su dirección angular (Figura 3.13). Su extensión queda delimitada por el ángulo de apertura numérica de la lente receptora:

$$\theta_{\text{NA}} = \arctan\left(\frac{R_{\text{lente}}}{f_{\text{lente}}}\right) = \arctan\left(\frac{19.05 \text{ mm}}{152.4 \text{ mm}}\right) \approx 0.124 \text{ rad} (\approx 7.1^\circ). \quad (3.11)$$

Los rayos se organizan en seis anillos concéntricos con ángulos polares $\rho_k = k\theta_{\text{NA}}/5$ para $k = 0, 1, \dots, 5$: el anillo central ($k = 0$) contiene un único rayo sobre el eje óptico; cada uno de los cinco anillos restantes contiene 16 rayos azimutalmente uniformes:

$$\hat{\mathbf{d}}_{k,m} = \begin{pmatrix} \cos \rho_k \\ \sin \rho_k \cos \phi_m \\ \sin \rho_k \sin \phi_m \end{pmatrix}, \quad \phi_m = \frac{2\pi m}{16}, \quad m = 0, \dots, 15, \quad (3.12)$$

dando un total de $1 + 5 \times 16 = 81$ rayos. Como estas direcciones abren tanto en Y como en Z , los rayos de un mismo píxel alcanzan alturas distintas, así que cada proyección recoge aportes de alturas vecinas y la reconstrucción es genuinamente tridimensional, en lugar de una pila de cortes 2D independientes.

La contribución de cada rayo se pondera con el perfil Gaussiano del haz real, evaluado con el ángulo de divergencia de la Ecuación (3.10):

$$w_i = \exp\left(-\frac{\rho_i^2}{\theta_d^2}\right), \quad (3.13)$$

donde ρ_i es el ángulo polar del rayo i respecto al eje óptico. Como θ_d no depende de la frecuencia (Ecuación (3.10)), los pesos w_i tampoco: la geometría del cono —número de rayos, direcciones y pesos— se fija una sola vez, y la dependencia frecuencial del modelo entra solo por la física de propagación de cada rayo individual —Snell, Beer-Lambert y retardo de fase.

Un rayo se considera colectado ($c_i = 1$) si, tras refractarse dentro de la muestra, arriba dentro del área útil de la lente receptora; de lo contrario $c_i = 0$, modelando la pérdida de colección por refracción oblicua o reflexión total interna. La

función de transferencia del píxel (z, x) a la frecuencia f resulta del promedio ponderado sobre los rayos colectados:

$$H(f, z, x) = \frac{\sum_{i=1}^{81} w_i \cdot c_i \cdot H_i(f, z, x)}{\sum_{i=1}^{81} w_i}, \quad (3.14)$$

donde $H_i(f, z, x)$ es la función de transferencia de cada rayo (Ecuación (3.8)), obtenida con el trazado de la Sección 3.2.2.2 y las pérdidas de Fresnel y Beer-Lambert de la Sección 3.2.2.3. Repitiendo este cálculo para los 19 ángulos de proyección se obtiene el sinograma complejo de la muestra, $\mathbf{S}(\theta, f, z, x) = H(f, z, x)$, que constituye la entrada del modelo de reconstrucción.

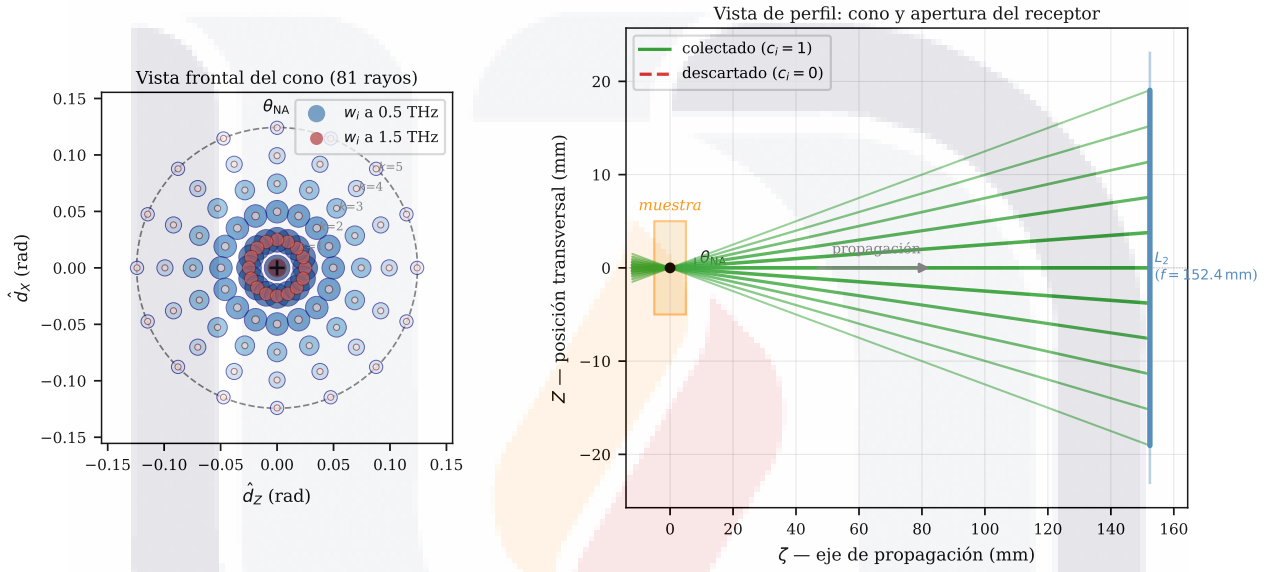


Figura 3.13. Descomposición del haz THz en el cono de 81 rayos $(1 + 5 \times 16)$. El grosor y la saturación de cada flecha codifican el peso Gaussiano $w_i(f)$ para una frecuencia representativa. El rayo central concentra la mayor parte de la energía; los rayos periféricos contribuyen con menor peso. Los rayos que no alcanzan la apertura de la lente receptora se descartan ($c_i = 0$).

3.2.2.6. Modelo de Ruido del Sistema

Para que el modelo no sobreajuste a una única condición de calibración del equipo, durante la generación de cada fantoma se aplican dos perturbaciones, muestreadas una sola vez por fantoma —las 19 vistas comparten los mismos valores, ya que el SNR y la calibración dependen de la sesión de medición y del equipo, no del ángulo de proyección:

- Ruido gaussiano complejo aditivo en el dominio de la frecuencia, con relación señal-ruido $\text{SNR} \sim \mathcal{U}(26, 46)$ dB referida a la amplitud del aire ($\sigma = 1/(\sqrt{2} \text{SNR}_{\text{lineal}})$, con $\text{SNR}_{\text{lineal}} = 10^{\text{SNR}_{\text{dB}}/20}$ por tratarse de una relación de amplitudes de campo; el factor $\sqrt{2}$ reparte la varianza entre las partes real e imaginaria, de modo que el SNR de amplitud efectivo coincide con el nominal). El rango se calibró midiendo el piso de ruido por frecuencia sobre el sinograma real del sistema experimental (Sección 4.4).
- Variación de ganancia: factor multiplicativo de amplitud $g \sim \mathcal{U}(0.76, 1.08)$, que modela el *drift* de calibración del equipo; su rango proviene de la envolvente del nivel de aire $|H|$ medida entre frecuencias en el mismo sinograma real.

El desplazamiento espacial de la muestra dentro del campo de visión ya viene incorporado desde la generación del fantoma (Sección 3.1).

3.2.2.7. Validación del modelo directo

Antes de generar datos con el simulador hay que verificar que produce la función de transferencia correcta. La Figura 3.14 compara, para una muestra canónica —un cubo de HDPE a incidencia normal—, la $H(f)$ que entrega el simulador contra su expresión analítica cerrada. El alcance del modelo importa aquí: el trazador sigue únicamente el rayo transmitido, sin

reflexiones internas, de modo que no representa el efecto Fabry–Pérot; por coherencia, la referencia analítica es también de un solo paso. Bajo esa premisa, la amplitud decae con la frecuencia por la absorción de Beer–Lambert y la fase crece de forma lineal por el exceso de retardo $(n - 1)L$ del camino en material. El rayo central reproduce la fórmula cerrada a precisión de máquina, lo que verifica las unidades, el signo de la fase y la acumulación del camino óptico —la longitud en material que acumula el trazador coincide con la geométrica—. El cono completo de 81 rayos se mantiene muy cercano, con una desviación menor en alta frecuencia atribuible a los rayos oblicuos del haz.

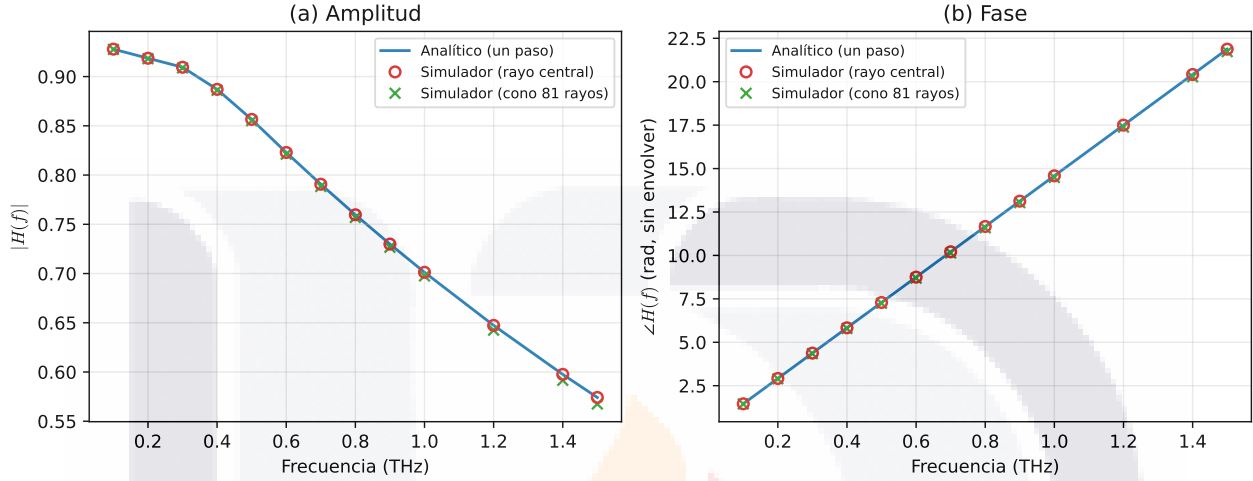


Figura 3.14. Validación del modelo directo: función de transferencia $H(f)$ en amplitud (a) y fase desenrollada (b) para una muestra canónica de HDPE ($n = 1.53$, $\alpha(f)$ tabulado en la Figura 3.5; espesor $L = 10$ mm) a incidencia normal. Los marcadores son la salida del simulador (rayo central, círculos; cono completo de 81 rayos, cruces); la línea continua es la expresión analítica cerrada de un solo paso. El trazador sigue únicamente el rayo transmitido, sin reflexiones internas, por lo que no modela el efecto Fabry–Pérot; la referencia analítica es también de un solo paso. El rayo central reproduce la fórmula cerrada a precisión de máquina (error máximo $\sim 3 \times 10^{-16}$ en amplitud y $\sim 3 \times 10^{-14}$ rad en fase); el cono completo se desvía levemente en alta frecuencia por la contribución de los rayos oblicuos.

3.3. Arquitectura NeuralFieldTHz

NeuralFieldTHz es una red condicional: dado el sinograma complejo $\mathbf{S}$ de una muestra, predice las propiedades ópticas continuas ($\hat{n}, \hat{\alpha}(f)$) en cualquier coordenada de consulta $\mathbf{p} = (x, y, z)$. El flujo de transformaciones de su arquitectura es:

$$(\mathbf{S}, \mathbf{p}) \xrightarrow{\text{ViewEncoder}} \{\mathbf{F}_k\} \xrightarrow{\text{Radon+ bilineal}} \{\mathbf{f}_k(\mathbf{p})\} \xrightarrow{\text{Atención}} \mathbf{h}(\mathbf{p}) \xrightarrow{\oplus \gamma(\mathbf{p})} \mathbf{z}(\mathbf{p}) \xrightarrow{\text{Decoder}} (\hat{n}, \hat{\alpha}, \ell_s) \quad (3.15)$$

3.3.1. Codificador de Vistas (ViewEncoder U-Net)

El sinograma complejo $\mathbf{S} \in \mathbb{C}^{N_\theta \times N_f \times Z \times X}$ pasa a representación real concatenando por canal las partes real e imaginaria: $\mathbf{S}_{\text{real}} \in \mathbb{R}^{N_\theta \times 2N_f \times Z \times X}$ (con $2N_f = 26$ canales por ángulo). Un codificador U-Net compartido procesa cada proyección angular por separado:

1. Encoder (contracción):
 - Nivel 1: DoubleConv($2N_f \rightarrow 32$, GroupNorm(4 grupos), ReLU), MaxPool $2\times$
 - Nivel 2: DoubleConv($32 \rightarrow 64$, GroupNorm(8 grupos), ReLU), MaxPool $2\times$
2. Bottleneck: DoubleConv($64 \rightarrow 128$, GroupNorm(16 grupos), ReLU) — resolución $Z/4 \times X/4$
3. Decoder (expansión con skip connections):
 - Up $2\times$ + concat nivel 2 $\rightarrow$ DoubleConv($128+64 \rightarrow 64$)
 - Up $2\times$ + concat nivel 1 $\rightarrow$ DoubleConv($64+32 \rightarrow 32$)
 - Conv 1×1 : $32 \rightarrow d_{\text{feat}} = 64$

La salida es un mapa de características de resolución completa $\mathbf{F}_k \in \mathbb{R}^{64 \times Z \times X}$ para cada uno de los 19 ángulos; las *skip connections* del decodificador U-Net concatenan el detalle fino de los bordes que el *bottleneck* descartaría.

3.3.2. Proyección Radon y Muestreo Bilineal

Para cada punto de consulta $\mathbf{p}_j = (x_j, y_j, z_j)$ y cada ángulo θ_k , la coordenada del sensor sale de la proyección directa de Radon (Ecuación 2.14):

$$s_{jk} = x_j \sin \theta_k + y_j \cos \theta_k, \quad z_{jk} = z_j. \quad (3.16)$$

Las coordenadas (s_{jk}, z_{jk}) se normalizan al rango $[-1, 1]$ para el operador de muestreo bilineal `grid_sample`, que interpola el mapa $\mathbf{F}_k$ en la posición proyectada y extrae el vector de características $\mathbf{f}_{jk} \in \mathbb{R}^{64}$. Para un lote de N puntos de consulta y N_θ ángulos, la salida de esta etapa es $\mathbf{F}_{\text{query}} \in \mathbb{R}^{N \times N_\theta \times 64}$.

3.3.3. Agregación Multivista por Atención

Los $N_\theta = 19$ vectores de características por punto de consulta se procesan con un Transformer de 1 capa y 4 cabezas de atención en modo Pre-LN (*LayerNorm* antes de la auto-atención). El Transformer opera sobre la dimensión de vistas tratándola como secuencia; la salida se promedia sobre los 19 pasos para obtener un único vector contextual $\mathbf{h}_j \in \mathbb{R}^{64}$ por punto:

$$\mathbf{h}_j = \frac{1}{N_\theta} \sum_{k=1}^{N_\theta} \text{TransformerEncoder}(\mathbf{F}_{\text{query},j})_k. \quad (3.17)$$

La auto-atención refina cada representación de vista en función de las demás antes del promedio, ponderando cada vista según su cobertura del punto de consulta.

3.3.4. Codificación Posicional de Fourier

Las coordenadas $\mathbf{p}_j$ normalizadas al cubo unitario $[-1, 1]^3$ se codifican mediante la función γ de la Ecuación (2.11) con $K = 10$ frecuencias por dimensión, produciendo $\gamma(\mathbf{p}_j) \in \mathbb{R}^{63}$. El vector de entrada final al decodificador se forma por concatenación:

$$\mathbf{z}_j = \mathbf{h}_j \parallel \gamma(\mathbf{p}_j) \in \mathbb{R}^{127}. \quad (3.18)$$

3.3.5. Decodificador con Factorización de Silueta

El decodificador (*split decoder*) instancia las dos cabezas independientes de la factorización de silueta descrita en el marco teórico (Ecuaciones 2.18–2.19), con las dimensiones siguientes:

Cabeza de silueta (3 capas, 96 unidades):

$$\ell_s^j = \text{MLP}_{\text{sil}}(\mathbf{z}_j; 3 \text{ capas, } 96 \text{ neuronas}) \in \mathbb{R}, \quad p_s^j = \sigma(\ell_s^j). \quad (3.19)$$

Cabeza de regresión (5 capas, 192 unidades):

$$[\Delta n^j, \alpha_{\text{raw}}^j] = \text{MLP}_{\text{reg}}(\mathbf{z}_j; 5 \text{ capas, } 192 \text{ neuronas}) \in \mathbb{R}^{1+N_f}. \quad (3.20)$$

A partir de estas salidas, las propiedades ópticas se obtienen aplicando la factorización multiplicativa de silueta (Ecuaciones 2.18–2.19).

Ambas cabezas terminan en una capa lineal, de modo que la positividad de las salidas no se impone estructuralmente sino que se induce por los datos (Sección 2.3.4). En este montaje, dado que $n \in [1.50, 2.14]$ implica $\Delta n^* \geq 0.5$ y que $\alpha^* \geq 0$ por definición física, la pérdida de Huber empuja sistemáticamente las predicciones hacia el régimen positivo.

3.4. Entrenamiento

3.4.1. Función de Pérdida

La función de pérdida total es una combinación de tres términos con pesos configurables, fijados en este trabajo en $w_{\text{reg}} = w_{\text{sil}} = 1.0$ y $w_{\text{suav}} = 0.1$:

$$\mathcal{L} = w_{\text{reg}} \mathcal{L}_{\text{reg}} + w_{\text{sil}} \mathcal{L}_{\text{sil}} + w_{\text{suav}} \mathcal{L}_{\text{suav}}. \quad (3.21)$$

Pérdida de regresión con pesos por frecuencia ($\mathcal{L}_{\text{reg}}$). Se utiliza la función de pérdida de Huber (Huber, 1964) con umbral $\delta = 0.5$, ponderada por frecuencia con una rampa suave que da algo más de peso a las frecuencias altas:

$$\mathcal{L}_{\text{reg}} = \frac{1}{BN N_f} \sum_{b,j,i} w_i [H_\delta(\hat{n}_{bj} - n_{bj}^*) + H_\delta(\hat{\alpha}_{bj}(f_i) - \alpha_{bj}^*(f_i))], \quad (3.22)$$

donde $H_\delta(x) = 0.5x^2$ si $|x| < \delta$, y $\delta|x| - 0.5\delta^2$ en caso contrario. La función de Huber es robusta frente a outliers (a diferencia del MSE) pero diferenciable en el origen (a diferencia del MAE puro). Los pesos por frecuencia w_i (Tabla 3.2) siguen una rampa suave motivada por la física: las frecuencias altas aportan más contraste de absorción y menor longitud de onda, y las bajas tienen menor relación señal-ruido. Promedian aproximadamente 1.0 (media = 0.99), con un rango máximo/mínimo de $3.3\times$, así que reordenan el peso relativo entre bandas sin cambiar la escala global de la pérdida. Una ablación que aíse su aporte individual queda como trabajo futuro; su magnitud moderada sugiere, en todo caso, un efecto secundario. El índice $\hat{n}_{bj}$ es un escalar por vóxel, no dispersivo, de modo que su residuo es idéntico en las N_f frecuencias; al sumarse dentro de $\sum_i$ su término recibe el peso efectivo $\bar{w} = \frac{1}{N_f} \sum_i w_i \approx 1.0$, mientras que solo $\hat{\alpha}$ se penaliza de forma resuelta en frecuencia.

Frec. (THz)	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0	1.2	1.4	1.5
Peso w_i	0.48	0.56	0.64	0.72	0.80	0.88	0.96	1.04	1.12	1.20	1.36	1.52	1.60

Tabla 3.2. Pesos por frecuencia para la función de pérdida de regresión. Las frecuencias altas reciben algo más de peso por un criterio físico —mayor contraste de absorción y menor longitud de onda—, y las bajas algo menos por su menor relación señal-ruido. Media = $0.99 \approx 1.0$ (la escala global del loss se preserva).

Pérdida de silueta ($\mathcal{L}_{\text{sil}}$). Se utiliza entropía cruzada binaria con logits que, al ser las etiquetas de silueta duras ($s^* \in \{0, 1\}$), equivale a la divergencia KL entre la distribución predicha y la de referencia (la entropía de la etiqueta se anula):

$$\mathcal{L}_{\text{sil}} = \frac{1}{BN} \sum_{b,j} \text{BCE}_{\text{logits}}(\ell_{s,bj}, s_{bj}^*), \quad (3.23)$$

donde $s_{bj}^* \in \{0, 1\}$ es la etiqueta de silueta de referencia.

Pérdida de suavidad espectral ($\mathcal{L}_{\text{suav}}$). Regulariza únicamente el coeficiente de absorción a lo largo del eje de frecuencias, bajo el supuesto físico de que la dispersión dieléctrica varía de forma suave entre bins THz contiguos. Es la norma L_1 de la primera diferencia finita de $\hat{\alpha}$ en frecuencia:

$$\mathcal{L}_{\text{suav}} = \frac{1}{BN(N_f - 1)} \sum_{b,j} \sum_{i=1}^{N_f-1} |\hat{\alpha}_{bj}(f_{i+1}) - \hat{\alpha}_{bj}(f_i)|. \quad (3.24)$$

Con su peso reducido ($w_{\text{suav}} = 0.1$) queda como regularización secundaria frente a los términos de datos.

3.4.2. Optimización y Programación del Aprendizaje

El optimizador es AdamW (Loshchilov & Hutter, 2019), con tasa de aprendizaje inicial $\eta_0 = 1 \times 10^{-3}$ y decaimiento de pesos $\lambda = 10^{-4}$. La tasa de aprendizaje sigue un programa de coseno (*Cosine Annealing*) (Loshchilov & Hutter, 2017) que la reduce desde η_0 hasta un piso $\eta_{\text{mín}} = \eta_0 \cdot 10^{-3} = 1 \times 10^{-6}$ a lo largo de $T_{\text{máx}}$ épocas:

$$\eta(t) = \eta_{\text{mín}} + \frac{1}{2}(\eta_0 - \eta_{\text{mín}}) \left(1 + \cos\left(\frac{\pi t}{T_{\text{máx}}}\right) \right). \quad (3.25)$$

El horizonte del recocido se fijó en $T_{\text{máx}} = 100$ épocas, pero la parada temprana (paciencia de 15 épocas) puede interrumpir el entrenamiento antes de completarlo; en ese caso $\eta_{\text{mín}}$ es solo el piso nominal del programa, y la tasa de aprendizaje con que quedó el *checkpoint* conservado se reporta en el Capítulo 4.

Antes de cada actualización de pesos, los gradientes se recortan a norma máxima 1.0 para prevenir su explosión.

3.4.3. Configuración del Entrenamiento

Los hiperparámetros del entrenamiento quedan resumidos en la Tabla 3.3. El criterio de parada temprana (*early stopping*) interrumpe el entrenamiento cuando la pérdida de validación no mejora durante 15 épocas consecutivas, y se conserva el checkpoint de la época con menor pérdida de validación.

Hiperparámetro	Valor
Épocas máximas	100
Paciencia <i>early stopping</i>	15 épocas
Tasa de aprendizaje (η_0)	1×10^{-3}
Tasa mínima ($\eta_{\min} = \eta_0 \cdot 10^{-3}$, piso teórico)	1×10^{-6}
Decaimiento de pesos	10^{-4}
AdamW (β_1, β_2)	(0.9, 0.999)
AdamW ϵ	10^{-8}
Recorte de gradiente (max norm)	1.0
Puntos de consulta por batch (N)	4096
Dimensión de características (d_{feat})	64
Frecuencias de Fourier (K)	10
Cabezas de atención (N_h)	4
Capas Transformer	1
Semilla aleatoria	42
Sesgo inicial cabeza de silueta	prior 0.07
Muestreo de puntos (entren./valid.)	balanceado (50 % material / 50 % aire)
Muestreo de puntos (prueba)	natural (uniforme en el volumen)
Dispositivo de cómputo	GPU Intel Arc (XPU)

Tabla 3.3. Hiperparámetros del entrenamiento del modelo NeuralFieldTHz. Los momentos (β_1, β_2) y el término ϵ de AdamW se mantuvieron en los valores por defecto de la implementación.

El código fuente del modelo y del *pipeline* de entrenamiento, junto con la configuración completa de hiperparámetros y los pesos del *checkpoint* definitivo, está disponible en el repositorio público <https://github.com/alexanderscpo/thz-3d-reconstruction>, de modo que los resultados reportados puedan reproducirse de extremo a extremo.

3.4.4. Conjunto de Datos y División Train/Val/Test

El modelo se entrenó sobre un conjunto de 800 fantasmas sintéticos generados con el procedimiento descrito en la Sección 3.1, con semilla maestra `seed = 42` para reproducibilidad. Los fantasmas se dividieron aleatoriamente —permutación con la semilla maestra 42, sin estratificación por clase de material— en tres subconjuntos disjuntos:

Subconjunto	Fantomas	Proporción
Entrenamiento	500	62.5 %
Validación	150	18.75 %
Prueba	150	18.75 %
Total	800	100 %

Tabla 3.4. División del conjunto de datos sintéticos para entrenamiento, validación y prueba.

El modelo se entrena con un *batch size* de 2 fantasmas por paso de gradiente; el modelo definitivo se selecciona con el criterio de parada temprana ya descrito. Las curvas de entrenamiento y validación, la época seleccionada y las métricas del modelo resultante se presentan en el Capítulo 4.

Al no estar estratificada, la partición reparte la composición del pool —siete polímeros y un material compuesto (GFRP) muestreados de forma uniforme, de modo que en valor esperado los polímeros constituyen el 87.5 % y el material compuesto el 12.5 % de los 800 fantasmas— solo en valor esperado; la fracción exacta de cada clase puede desviarse en el conjunto de prueba de 150 fantasmas. Los tres subconjuntos provienen del mismo proceso generativo sintético, por lo que la evaluación sobre el subconjunto de prueba mide generalización *dentro de la distribución* (*in-distribution*); la única evaluación fuera de distribución es la del cubo real (Capítulo 4).

3.4.5. Protocolo de Evaluación

El desempeño se cuantifica con el error absoluto medio (MAE) definido en las Ecuaciones (2.20)–(2.21) del marco teórico, evaluado sobre el conjunto de prueba con muestreo natural y reportado por separado para todos los vóxeles ($\text{MAE}_{n,\text{all}}$)

y restringido a los vóxeles de material ($MAE_{n,mat}$). Para anclar la interpretación de estos valores, el modelo se contrasta —bajo el mismo conjunto, muestreo y métrica— contra dos referencias: (i) una línea base trivial que predice el índice medio del entrenamiento ($\bar{n} \approx 1.69$) en todo el volumen, y (ii) los métodos clásicos de reconstrucción tomográfica (FBP y SART). Las métricas de todas ellas se reportan en el Capítulo 5.

3.5. Reconstrucción Volumétrica 3D

La reconstrucción consiste en evaluar el modelo NeuralFieldTHz en todos los vóxeles del espacio 3D. Para un volumen de N^3 vóxeles, el proceso de inferencia sigue tres pasos:

1. Se genera la cuadrícula de coordenadas físicas $\{(x_j, y_j, z_j)\}_{j=1}^{N^3}$ en mm, con origen en el centro del volumen y paso $\Delta_{px} = 0.25$ mm.
2. Los N^3 puntos se procesan en bloques de $N_{bloque} = 4096$ coordenadas para respetar la memoria del dispositivo. Para cada bloque, la inferencia del modelo produce $(\hat{n}_j, \hat{\alpha}_j(f_i), p_{s,j})$, con $i = 1, \dots, 13$ frecuencias para $\hat{\alpha}_j$ y un único valor de $\hat{n}_j$ por vóxel.
3. El sinograma complejo $\mathbf{S}$ de la muestra se computa una sola vez y se reutiliza para todos los bloques, ya que la codificación $\{\mathbf{F}_k\}$ es la misma para toda la muestra.

El resultado es un volumen de índice de refracción $\hat{n}(z, y, x)$ de dimensiones (N, N, N) y un volumen espectral de absorción $\hat{\alpha}(z, y, x, f)$ de dimensiones $(N, N, N, 13)$, en precisión float32. El mapa de silueta se obtiene binarizando $p_s > 0.5$. Los volúmenes se exportan en formato VTK ImageData (.vti) para visualización interactiva en ParaView, con espaciado físico de 0.25 mm en cada eje.

CAPÍTULO 4 RESULTADOS

Este capítulo pone a prueba el modelo NeuralFieldTHz presentado en el Capítulo 3. Primero muestra cómo aprende sobre los datos sintéticos, luego qué precisión alcanza en los conjuntos de validación y prueba, y por último cómo se comporta frente a una medición real sin ningún reajuste, que es el escenario más exigente de todos.

4.1. Convergencia del Entrenamiento

El ajuste del modelo tomó 53 épocas, contadas desde la 0 hasta la 52. En cada una el modelo recorrió los 500 fantasmas del subconjunto de entrenamiento (Tabla 3.4) y, al terminar, se midió su pérdida sobre los 150 fantasmas de validación. Como esos fantasmas quedan fuera del ajuste, esa pérdida indica qué tan bien responde el modelo ante datos que nunca vio.

Al principio la pérdida de validación bajó rápido, desde $\mathcal{L}_{\text{val}} = 0.234$ en la época 0 hasta un mínimo de 0.125 en la época 38. A partir de ahí dejó de mejorar y empezó a subir de forma lenta pero sostenida, hasta llegar a 0.142 en la época 52. Ese cambio de rumbo marca el sobreajuste, el punto en que el modelo deja de aprender lo que generaliza y comienza a memorizar el conjunto de entrenamiento. Por eso el modelo que se conserva es el de la época 38, el mejor antes de que empezara el deterioro.

La parada temprana estaba fijada en 15 épocas sin mejora (Sección 3.4). El corte, sin embargo, se hizo manualmente en la época 52, una antes de que se activara sola, cuando ya se acumulaban 14 épocas seguidas sin superar el mínimo. Ese corte también dejó su marca en el ajuste. El programa de coseno repartía la baja de la tasa de aprendizaje sobre un horizonte de $T_{\text{máx}} = 100$ épocas, así que en la 52 esa baja iba por la mitad. Por eso el modelo conservado se entrenó con una tasa efectiva de $\approx 6.7 \times 10^{-4}$, más de dos órdenes de magnitud por encima del piso teórico $\eta_{\text{mín}} = 1 \times 10^{-6}$, que nunca llegó a tocarse.

La Figura 4.1 traza esta evolución, tanto para la pérdida total $\mathcal{L}$ como para los errores absolutos medios en el índice de refracción y en la absorción, MAE_n y MAE_α .

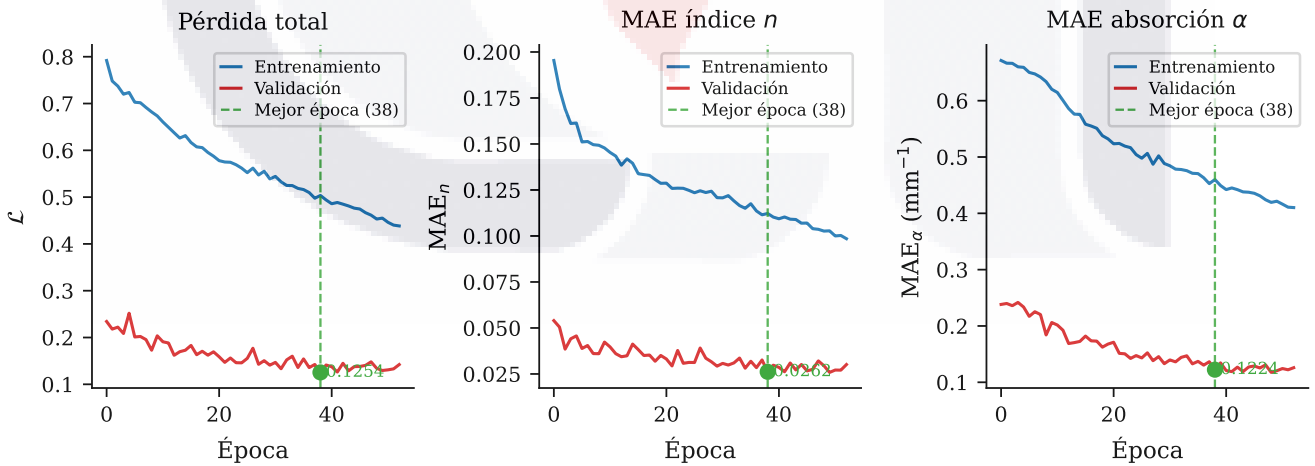


Figura 4.1. Curvas de entrenamiento y validación del modelo NeuralFieldTHz. De izquierda a derecha: pérdida total $\mathcal{L}$, error absoluto medio en el índice de refracción MAE_n y error absoluto medio en el coeficiente de absorción MAE_α . La línea verde discontinua indica la época de mínimo de validación, cuyo *checkpoint* se conserva como modelo definitivo (valores en la Tabla 4.1). La brecha moderada entre las curvas de entrenamiento y validación indica ausencia de sobreajuste severo.

De las dos partes que componen la pérdida, la que más pesa es la de regresión ($\mathcal{L}_{\text{reg}} = 0.071$ frente a $\mathcal{L}_{\text{sil}} = 0.049$; Tabla 4.1). El empeoramiento posterior a la época 38 es leve. El error en el índice de refracción solo pasa de 0.026 a 0.030.

4.2. Métricas de Validación

La Tabla 4.1 resume las métricas del modelo definitivo sobre el subconjunto de validación.

Métrica	Valor	Descripción
$\mathcal{L}_{\text{val}}$ (total)	0.1254	Pérdida compuesta (Ec. 3.21)
$\mathcal{L}_{\text{reg}}$ (validación)	0.0716	Componente de regresión (Ec. 3.22)
$\mathcal{L}_{\text{sil}}$ (validación)	0.0490	Componente de silueta (Ec. 3.23)
MAE_n	0.026	Error en índice de refracción
MAE_α	0.122 mm^{-1}	Error en coef. de absorción
Época óptima	38 (de 0 a 52)	Mínimo de $\mathcal{L}_{\text{val}}$

Tabla 4.1. Métricas del modelo NeuralFieldTHz sobre el subconjunto de validación (150 fantasmas sintéticos), evaluadas durante el entrenamiento bajo muestreo balanceado de puntos de consulta (50 % material / 50 % aire). El MAE_n se expresa en unidades adimensionales de índice de refracción; el MAE_α en mm^{-1} .

El modelo atiende dos tareas a la vez: marcar dónde hay material (la silueta) y estimar las propiedades ópticas de cada punto (la regresión). Ese error no se reparte por igual entre las dos tareas. La regresión concentra el 57 % de la pérdida, la silueta el 39 % y el término de suavidad espectral el 4 % restante. La física detrás de este reparto es clara, ya que ubicar el objeto resulta sencillo, mientras que estimar el índice de refracción n y la absorción $\alpha(f)$ dentro del material es la parte difícil.

Visto en términos relativos, el $\text{MAE}_n = 0.026$ es un error bajo. Representa el 4.1 % del rango de entrenamiento $n \in [1.50, 2.14]$, cuya amplitud es de 0.64, y baja al 1.7 % frente al índice del PP, el más bajo con $n = 1.50$, o al 1.2 % frente al GFRP, el más alto con $n = 2.14$. Ese promedio, sin embargo, incluye vóxeles de aire fáciles de predecir, de modo que al medirlo solo sobre el material el error sube (Tabla 4.2).

La evaluación se llevó también al subconjunto de prueba, formado por 150 fantasmas que no participaron ni en el entrenamiento ni en la validación. Para cada muestra se reconstruye el volumen completo con muestreo natural, sin balancear, y se compara contra los valores reales de cada fantasma. La Tabla 4.2 reúne las métricas sobre los vóxeles de material según la silueta de referencia.

Conviene leer estos valores junto a los de validación. El $\text{MAE}_n = 0.026$ de la Tabla 4.1 se calcula durante el entrenamiento sobre puntos de consulta balanceados —la mitad son vóxeles de aire, triviales de predecir ($\hat{n} \rightarrow 1$)— y por eso diluye el error hacia abajo: no se compara de forma directa con un error restringido al material. El valor honesto es otro: $\text{MAE}_{n,\text{mat}} = 0.160 \pm 0.103$, el error sobre vóxeles de material en datos de prueba. Esa es la estimación de generalización del índice de refracción, y la que se enfrenta a los métodos clásicos en la Discusión (Sección 5.1).

Métrica	Valor	Descripción
$\text{MAE}_{n,\text{all}}$	0.028	Error medio en n sobre todos los vóxeles (incluye aire)
$\text{MAE}_{n,\text{mat}}$	0.160 ± 0.103	Error medio en n restringido a vóxeles de material
$\text{RMSE}_{n,\text{mat}}$	0.190 ± 0.102	Raíz del error cuadrático medio en n (material)
$\text{MAE}_{\alpha,\text{mat}}$	0.949 ± 0.853	Error medio en α (mm^{-1}) sobre vóxeles de material
$\text{RMSE}_{\alpha,\text{mat}}$	1.493 ± 1.287	Raíz del error cuadrático medio en α (mm^{-1} , material)
IoU silueta	0.849 ± 0.096	Jaccard entre silueta predicha ($p_s > 0.5$) y referencia

Tabla 4.2. Métricas del modelo NeuralFieldTHz sobre el subconjunto de *prueba* (150 fantasmas sintéticos, todos con material para las métricas restringidas a material), evaluadas sobre el volumen completo con muestreo natural. Media $\pm$ desviación estándar entre fantasmas. Estos valores —no los de validación de la Tabla 4.1— constituyen la estimación de generalización del modelo.

4.3. Reconstrucción Volumétrica sobre Fantasmas Sintéticos

La reconstrucción volumétrica sobre el conjunto de prueba sintético sigue el procedimiento de la Sección 3.5: el modelo recorre todos los vóxeles del volumen en bloques de 4096 coordenadas y devuelve el mapa de índice $\hat{n}(z, y, x)$, los mapas de absorción $\hat{\alpha}(z, y, x, f_i)$ y la probabilidad de silueta $p_s(z, y, x)$. La Tabla 4.2 compara estas salidas contra el volumen de referencia en los 150 fantasmas de prueba. Las dos propiedades ópticas no se reconstruyen con la misma consistencia: la razón RMSE/MAE vale $0.190/0.160 \approx 1.19$ para el índice y $1.493/0.949 \approx 1.57$ para la absorción. En el índice el error es parejo en todos los fantasmas; en la absorción, en cambio, unos pocos casos fallan mucho más que el resto y suben el promedio. Por qué pasa esto, y cómo se comparan estos números con los métodos clásicos de reconstrucción, se ve en la Discusión (Secciones 5.1 y 5.2).

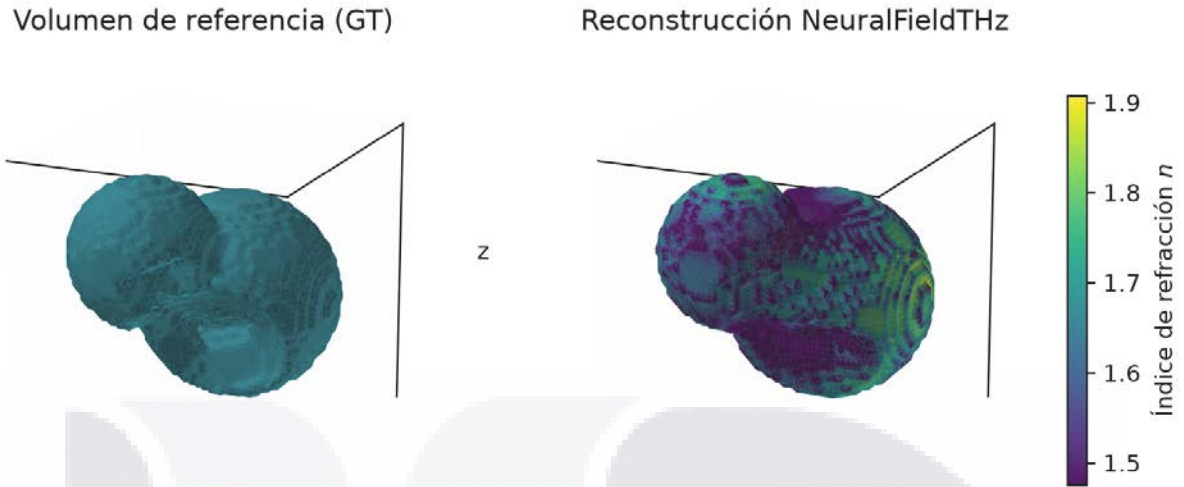


Figura 4.2. Vista volumétrica 3D de la reconstrucción sobre un fantoma sintético de prueba representativo (índice de Jaccard de silueta igual a la mediana del conjunto de prueba, $\text{IoU} = 0.868$). Cada panel muestra la isosuperficie de la silueta —extraída por *marching cubes*— coloreada por el índice de refracción n (escalar, no dispersivo) en cada vóxel de la superficie, con sombreado lambertiano según las normales para legibilidad sobre papel. Izquierda: volumen de referencia (*ground truth*). Derecha: reconstrucción de NeuralFieldTHz. El fantoma tiene un único material, así que su índice es homogéneo y el volumen de referencia se ve de color uniforme; la variación espacial de color es propia de la reconstrucción, que estima un $\hat{n}$ por vóxel. El modelo recupera la morfología global del objeto, pero suaviza el detalle fino (fusión parcial del lóbulo menor) e introduce desviaciones locales del índice (vóxeles atípicos de n elevado), los mismos que elevan la razón RMSE/MAE de la Tabla 4.2.

4.4. Validación con Datos Reales

Como el modelo se entrenó solo con datos sintéticos, aplicarlo a una medición real mide si lo aprendido se transfiere a un objeto físico. Esa medición se tomó con el sistema experimental (Sección 3.2.1).

4.4.1. Procesamiento del Escaneo Real

La muestra es el cubo de control descrito en la Sección 3.2.1 (Figura 3.7). Por cómo se imprime, con cáscaras sólidas y relleno interior parcial, no es una pieza maciza sino un medio efectivo, y la medición lo confirma. El retardo de la primera llegada del pulso a través de las caras paralelas (0° , 90° y 180°) da un índice de refracción efectivo $n_{\text{ef}} = 1.11 \pm 0.02$, más bajo todavía que el del PP macizo ($n = 1.50$, el menor de la Tabla 3.1) y por tanto fuera del rango de entrenamiento $[1.50, 2.14]$. Unos 17 ps después de esa primera llegada aparece una segunda, compatible con el pulso que sí atraviesa el material denso; con 10 mm de camino, ese retardo da un índice $n_{\text{denso}} \approx 1.52$. Son dos índices distintos que conviene no confundir: n_{denso} caracteriza al material del que está hecha la pieza, mientras que n_{ef} caracteriza a la pieza entera —material más aire del relleno— y baja cuanto menos denso es el relleno. La absorción efectiva, $\alpha_{\text{ef}} \approx 0.30\text{--}0.31 \text{ mm}^{-1}$, se mantiene casi plana entre 0.2 y 0.9 THz, y corresponde a la extinción efectiva de la pieza impresa más que a la absorción propia del material.

Las formas de onda medidas recorren la misma cadena de procesamiento de la Sección 3.2, ordenada en los pasos siguientes.

1. Cada forma de onda pasa del tiempo a la frecuencia mediante una FFT, con *zero-padding* a 2048 puntos.
2. La señal de referencia $E_{\text{ref}}(f)$ se toma del espectro de la esquina $[0, 0]$, donde solo hay aire.
3. En cada píxel se calcula la función de transferencia compleja $H(f) = E_{\text{muestra}}(f)/E_{\text{ref}}(f)$ (Ecuación (2.2)), un cómputo que ya se validó contra su solución analítica en la Figura 3.14.
4. Las 13 frecuencias objetivo (Tabla 3.2) arman el sinograma, un tensor complejo $(N_\theta, N_f, N_z, N_x) = (19, 13, N_z, N_x)$.
5. El modelo recorre el volumen vóxel a vóxel y entrega los tres mapas $\hat{n}$, $\hat{\alpha}$ y p_s .

El escaneo real respalda la cota superior fijada para la banda de trabajo: la muestra conserva señal modulada por encima del ruido hasta 1.5 THz (Figura 3.9).

4.4.2. Reconstrucción del Cubo Real

Con el sinograma real construido, el modelo se aplicó al cubo tal cual, con los mismos parámetros que en los fantasmas sintéticos. El resultado (Figura 4.3) no fue el esperado: la silueta predicha ni sigue la forma del cubo ni ubica el material donde corresponde.

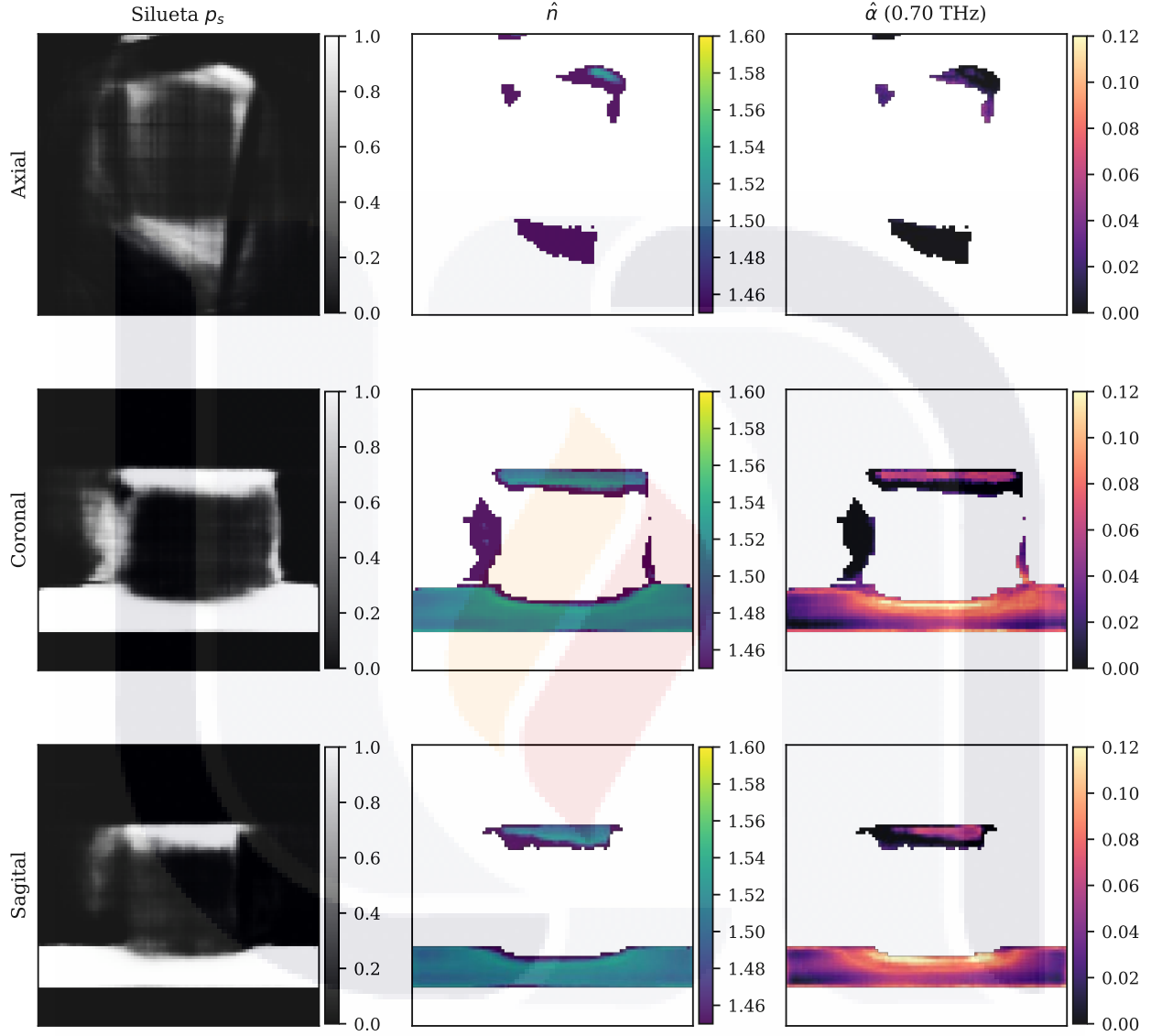


Figura 4.3. Reconstrucción INR del cubo impreso real con el modelo NeuralFieldTHz. Cada fila corresponde a un plano de corte: axial (superior), coronal (centro) y sagital (inferior). Columnas de izquierda a derecha: probabilidad de silueta p_s , índice de refracción $\hat{n}$ (escalar, no dispersivo) y coeficiente de absorción $\hat{\alpha}$ a 0.70 THz. El material predicho ocupa el 18.0 % del volumen total escaneado, con probabilidad de silueta máxima ($p_{s,\text{máx}} = 1.000$); sin embargo, se concentra en una banda transversal y no en la región del cubo. La silueta p_s modula a $\hat{n}$ y $\hat{\alpha}$ (Ecuaciones 2.18–2.19): un error en la silueta arrastra las propiedades ópticas a los vóxeles equivocados, de modo que la geometría y los valores de n y α no son problemas independientes.

El modelo marca como material 122565 de los 681472 vóxeles del volumen, un 18.0 % del total. Pero esa silueta no es el cubo: el material se agolpa en una banda que cruza casi todo el plano (la lámina inferior de la Figura 4.4 y la franja blanca de los cortes coronal y sagital de la Figura 4.3), mientras que la zona central, donde de verdad está el cubo de 10 mm, queda casi vacía: solo el 11.4 % del material predicho cae ahí. Las propiedades ópticas que reconstruye sobre ese material se detallan a continuación.

Geometría nominal (diseño)

Reconstrucción NeuralFieldTHz

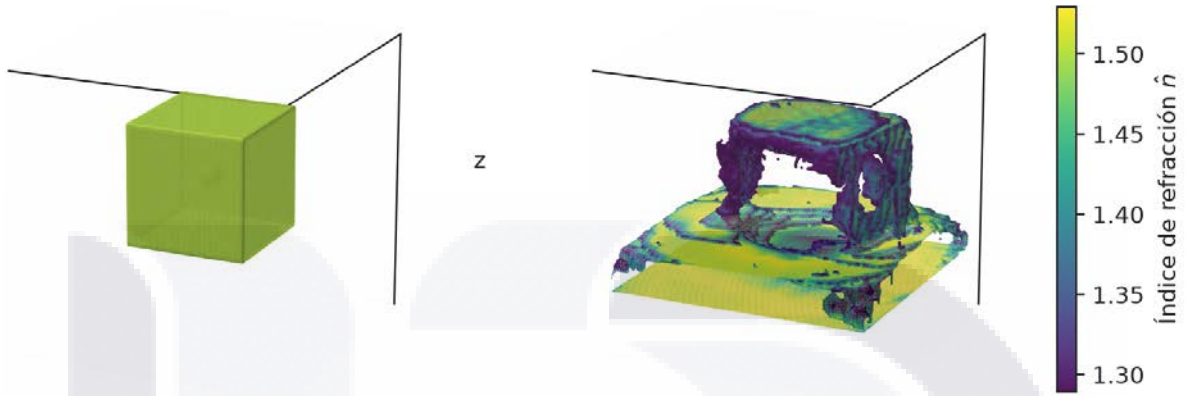


Figura 4.4. Reconstrucción 3D del cubo real sobre el campo de visión completo del escaneo, sin recorte (88 vóxeles de 0.25 mm, 22 mm de lado por eje). En vista lateral e isométrica se superponen dos cosas: en verde, la geometría de diseño (cubo de 10 mm de lado con cavidad esférica central de 2 mm), que es la forma esperada y no una verdad de terreno medida en 3D; en rojo, la isosuperficie predicha por NeuralFieldTHz. Se marcan los centroides de ambas. El material predicho no reproduce el cubo: ocupa el 18.0 % del volumen, repartido entre una lámina en la base del campo (z alto, abajo en los cortes) y una capa sobre la cara superior del cubo, con el centro casi vacío. La brecha de dominio sintético-real que explica esta degradación se analiza en la Discusión (Sección 5.3).

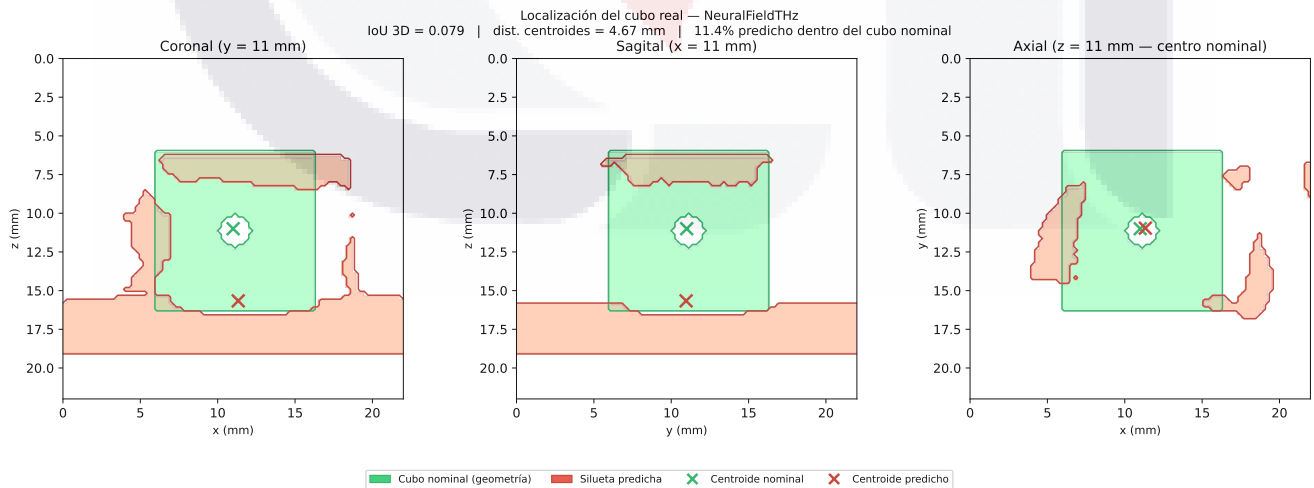


Figura 4.5. Localización de la silueta predicha frente a la forma de diseño del cubo real, en tres cortes (coronal, sagital y axial) sobre el campo de visión completo (0–22 mm). El cubo de diseño (verde) está centrado, pero la silueta predicha (rojo) se acumula en una banda abajo y una lámina arriba, y deja el centro casi vacío. Los números lo confirman: los centroides (cruces) están a 4.67 mm uno del otro, los dos volúmenes apenas se solapan ($\text{IoU} = 0.079$) y solo el 11.4 % del material predicho cae dentro del cubo.

4.4.3. Propiedades ópticas reconstruidas sobre el cubo real

La silueta se detecta, pero las propiedades ópticas reconstruidas no coinciden con la caracterización del objeto. La Tabla 4.3 muestra lo que el modelo reconstruye sobre los vóxeles que marca como material.

Frecuencia (THz)	$\hat{\alpha}$ medio (mm^{-1})	σ_{α} (mm^{-1})
0.10	0.014	0.019
0.50	0.025	0.023
0.70	0.045	0.033
1.00	0.101	0.050
1.40	0.077	0.060

Tabla 4.3. Coeficiente de absorción reconstruido $\hat{\alpha}(f)$ sobre los 122565 vóxeles identificados como material por el modelo NeuralFieldTHz en el cubo real. El índice de refracción predicho es escalar, $\hat{n} = 1.488 \pm 0.059$ por vóxel. La referencia medida del objeto es su índice efectivo $n_{\text{ef}} = 1.11 \pm 0.02$ (retardo de grupo de primera llegada, caras paralelas), con $n_{\text{denso}} \approx 1.52$ implícito para los trayectos por material denso.

El índice predicho, $\hat{n} = 1.488 \pm 0.059$, casi coincide con el componente denso del cubo ($n_{\text{denso}} \approx 1.52$; diferencia $\Delta n \approx 0.03$), pero se aleja del efectivo medido ($n_{\text{ef}} = 1.11$; diferencia $\Delta n \approx 0.38$).

La absorción reconstruida refuerza esa lectura. Se mantiene baja en toda la banda, ya que sube de 0.014 a 0.101 mm^{-1} entre 0.1 y 1.0 THz y luego cae a 0.077 mm^{-1} en 1.40 THz (Tabla 4.3). Ese es el perfil de un polímero macizo y no la respuesta plana y más alta que mide el objeto real ($\alpha_{\text{ef}} \approx 0.30\text{--}0.31 \text{ mm}^{-1}$).

La geometría tampoco acompaña. La silueta predicha apenas solapa con el cubo, con un IoU = 0.079 y el centroide a 4.67 mm del centro real (Figura 4.5). La probabilidad de silueta llega al máximo ($p_{s,\text{máx}} = 1.000$), aunque eso solo mide la confianza del clasificador y no el acierto sobre dónde está el material.

Del cubo real, el modelo recupera bien una sola cosa, que es el índice del componente denso. No acierta ni la geometría ni el valor efectivo de la pieza con su relleno de aire. Las causas de esta brecha, evaluadas sobre una única muestra física (Sección 5.5), se analizan en la Discusión (Sección 5.3), junto con la comparación contra FBP y SART sobre el mismo cubo (Figura 5.2).

CAPÍTULO 5 DISCUSIÓN

Este capítulo interpreta los resultados del Capítulo 4: qué significan frente a la pregunta de investigación y a la hipótesis de trabajo. La discusión avanza en orden: cómo se compara el modelo con los métodos clásicos en el dominio sintético, por qué el índice de refracción se reconstruye mejor que el coeficiente de absorción, qué separa el entrenamiento con datos simulados de la medición sobre la muestra real, y qué lugar ocupan estos resultados frente a otros trabajos. El capítulo cierra con las limitaciones del estudio.

5.1. Desempeño en el dominio sintético y contraste con la hipótesis

Como punto de comparación absoluto para NeuralFieldTHz se implementaron dos baselines clásicos de tomografía: la retroproyección filtrada (FBP) con filtro *ramp* (Ferguson et al., 2002), analítica, que invierte la transformada de Radon filtrada sobre los sinogramas de fase y amplitud; y la reconstrucción algebraica simultánea (SART) (Andersen & Kak, 1984; Recur et al., 2012), iterativa, con 3 iteraciones. Ambos reconstruyen cada rebanada axial por separado y para cada frecuencia. La Tabla 5.1 reúne sus métricas junto a las de NeuralFieldTHz sobre los 150 fantasmas de prueba.

Método	$MAE_{n,all}$	$MAE_{n,mat}$	$MAE_{\alpha,mat}$ (mm^{-1})	IoU silueta
FBP	0.111	0.697 ± 0.209	—	0.0005 ± 0.0015
SART	0.111	0.697 ± 0.209	—	0.0023 ± 0.0050
NeuralFieldTHz	0.028	0.160 ± 0.103	0.949 ± 0.853	0.849 ± 0.096

Tabla 5.1. Comparación de métodos de reconstrucción sobre los 150 fantasmas del conjunto de prueba (todos con material para las métricas restringidas a material; media $\pm$ desviación estándar entre fantasmas). $MAE_{n,mat}$ y $MAE_{\alpha,mat}$ se calculan sobre los vóxeles identificados como material en el volumen de referencia; $MAE_{n,all}$ incluye también vóxeles de aire. FBP y SART reconstruyen solo el índice a partir del retardo de fase y no estiman el coeficiente de absorción (columna marcada con —). Su silueta se obtiene por umbralización $\hat{n} > 1.05$; la de NeuralFieldTHz, a partir de la probabilidad de silueta $p_s > 0.5$. En negrita, el mejor resultado por columna.

Para entender por qué FBP y SART se quedan tan atrás hay que mirar la física del haz. Estos métodos suponen que los rayos viajan en línea recta sin desviarse, y que el retardo de fase se puede proyectar de forma lineal sobre el volumen (Ecuación 2.4), pero el haz del sistema THz-TDS no cumple ese supuesto. El haz está focalizado y su perfil es gaussiano, de modo que los vóxeles que están fuera del eje también aportan señal a la medición, aunque con menos peso. Ese efecto se conoce como *beam smearing* y reduce la fase que registra el sinograma, sobre todo dentro del material. Además, el muestreo con solo 19 ángulos introduce artefactos en forma de rayas que elevan el índice estimado en el aire. Al aplicar el criterio clásico de marcar como material los vóxeles con $\hat{n} > 1.05$ apenas se encuentra alguno, y la silueta de FBP y SART queda casi vacía con un IoU cercano a cero. Por eso los métodos clásicos ni siquiera logran aislar el objeto del fondo.

NeuralFieldTHz se entrenó con sinogramas simulados que ya incluyen el haz gaussiano y el *beam smearing*, de modo que aprende a compensar ese efecto durante el entrenamiento. En el conjunto de prueba sintético logra lo que los clásicos no logran, es decir, ubicar el objeto en el volumen y recuperar la silueta con un IoU de 0.849, mientras que FBP y SART se quedan cerca de cero (Figura 5.1). El error del índice sobre el volumen completo también mejora de forma clara, casi cuatro veces menor que el de los métodos clásicos. Como la hipótesis solo exigía que el error del modelo no superara al de FBP y SART, en geometría e índice global el dominio sintético la apoya. Pero esa ventaja no se reparte por igual entre todos los vóxeles.

El límite aparece sobre los vóxeles de material. Ahí el error del modelo, con un MAE de 0.160, apenas se distingue del de un estimador trivial que asigna a todo el material el índice medio del entrenamiento ($\bar{n} \approx 1.69$), cuyo error es 0.151. Dentro del material, entonces, el modelo casi no mejora ese valor constante, aunque siga muy por debajo del error de FBP y SART. El segundo frente abierto está del lado de la absorción.

La hipótesis pedía comparar el error tanto en índice como en absorción, pero FBP y SART no ofrecen un mapa volumétrico de α que sirva de referencia. Estos métodos reconstruyen la amplitud rebanada por rebanada y de ahí no

se puede derivar la absorción volumétrica. Sin ese contraste, el MAE de absorción del modelo, 0.949 mm^{-1} , queda como un valor absoluto sin punto de comparación. El balance entonces resulta favorable en índice y geometría, pero abierto en absorción. Esa asimetría entre las dos propiedades es justo lo que analiza la sección siguiente.

Axial slice $z=44$ ($f = 0.50 \text{ THz}$)

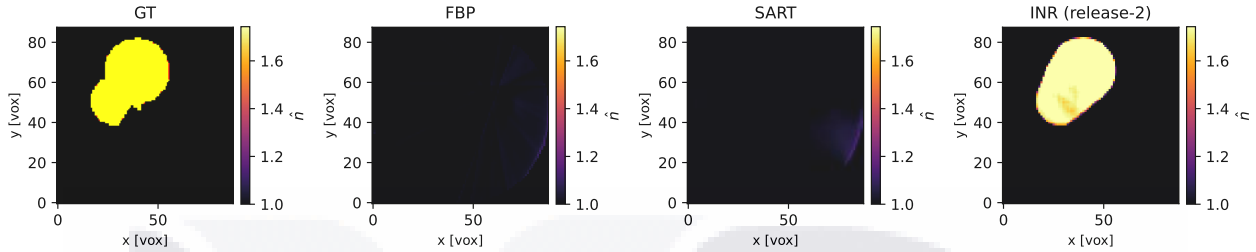


Figura 5.1. Comparación visual en un fantoma sintético de prueba. De izquierda a derecha: volumen de referencia (n de verdad terreno) y las reconstrucciones de FBP, SART y NeuralFieldTHz. Se muestra el mapa de índice de refracción escalar $\hat{n}$ en el corte axial central. Sobre sinogramas con el haz finito modelado, FBP y SART no recuperan el objeto; NeuralFieldTHz, en cambio, reconstruye la forma y un índice cercano a la referencia.

5.2. Reconstrucción del índice frente a la absorción

El modelo reconstruye mejor el índice que la absorción, una diferencia que ya se nota en la razón RMSE/MAE de la Tabla 4.2, donde la absorción muestra unos pocos casos con un error muy por encima del resto. La causa no es la más evidente. Que la absorción se estime en 13 frecuencias y el índice en uno solo no la vuelve más difícil de recuperar, porque cada frecuencia se resuelve por separado y esas salidas de más no complican el cálculo. El problema nace, más bien, de dos factores de fondo que este trabajo no llegó a separar.

El primero tiene que ver con la señal de la que sale cada propiedad. El índice se lee en la fase del pulso, mientras que la absorción depende de su amplitud, una señal más ruidosa y más cambiante con la frecuencia (Withayachumnankul & Naftaly, 2014). El segundo factor viene de cómo se entrenó el modelo. En la tabla de materiales (Tabla 3.1) cada material es un par fijo de índice y absorción, de modo que el modelo no estima la absorción por su cuenta, sino que reconoce el material y lee de él ambos valores a la vez. El atajo se sostiene mientras el objeto pertenezca a la tabla; en cuanto aparece uno que no está en ella, la absorción que predice se aparta de la que mide el experimento.

En la práctica, esto obliga a confiar menos en la absorción que en el índice, y más aún cuando el material se aleja de los que vio en el entrenamiento. Medir cuánto aporta cada factor exigiría un experimento de ablación, que apaga uno por vez para aislar su efecto, y ese diseño queda fuera del alcance de este trabajo. El cubo real, de todos modos, ya anticipa lo que ocurre cuando el material cae fuera de la tabla, y con él se abre la brecha entre el dominio sintético y el real que ocupa la sección siguiente.

5.3. La brecha de dominio sintético–real

El cuarto objetivo era validar el modelo sobre una muestra física real, y el resultado es el principal hallazgo negativo del trabajo. Usado en transferencia directa, es decir, sin reentrenarlo ni mostrarle un solo dato real, el modelo no recupera el cubo. Ese fallo, sin embargo, también sirve como una prueba de qué aprendió el modelo y qué no, porque cada variable de salida responde distinto al salto del dominio sintético al real. Leerlas por separado muestra dónde está la brecha y dónde no.

El índice de refracción se transfiere bien incluso sobre el cubo real. El modelo predice $\hat{n} = 1.488$ sobre el material que marca (Sección 4.4.3), un valor que cae dentro del rango de entrenamiento y casi coincide con el componente denso de la pieza ($n_{\text{denso}} \approx 1.52$). Eso indica que la relación entre la fase del pulso y el índice se aprendió bien en la simulación y sobrevive a la medición real, de modo que el problema no está en la óptica del material sino en otra parte.

La geometría, en cambio, se aparta del objeto, y no porque el modelo no reconozca un cubo sino porque la estructura de la pieza genera una señal que el simulador nunca produjo. El cubo no es macizo, ya que su relleno parcial deja huecos de aire que el pulso cruza por dos caminos, uno rápido por el aire (retardo equivalente a $n_{\text{ef}} \approx 1.11$) y otro lento por el material denso ($n_{\text{denso}} \approx 1.52$). Ese trayecto doble, con interfaces que reflejan y refractan a escala milimétrica, carga el sinograma real de información que el modelo directo idealizado no reproduce. El modelo, entrenado solo con objetos macizos, no encuentra

esa forma familiar, y la silueta que reconstruye no se parece al cubo, con un solapamiento de apenas $\text{IoU} = 0.079$ y el centroide a 4.67 mm del real (Sección 4.4.2, Figuras 4.3 y 4.4).

La absorción no falla por su cuenta, sino que arrastra el error de la identificación del material. Como el modelo la lee del material que infiere, y no la estima aparte (Sección 5.2), sobre el cubo predice el perfil de un polímero macizo en lugar de la respuesta plana y más alta que mide el experimento ($\alpha_{\text{ef}} \approx 0.30\text{--}0.31 \text{ mm}^{-1}$; Sección 4.4.3). El cubo real expone así, en un objeto físico, ese acoplamiento entre índice y absorción que en el dominio sintético queda oculto, porque allí el material siempre pertenece a la tabla.

Los métodos clásicos fallan sobre el mismo cubo, pero en sentido contrario. El *beam smearing* lleva el índice de FBP y SART por debajo del componente denso, mientras que el modelo neuronal lo sobreestima al fijarlo justo en ese componente (Figura 5.2).

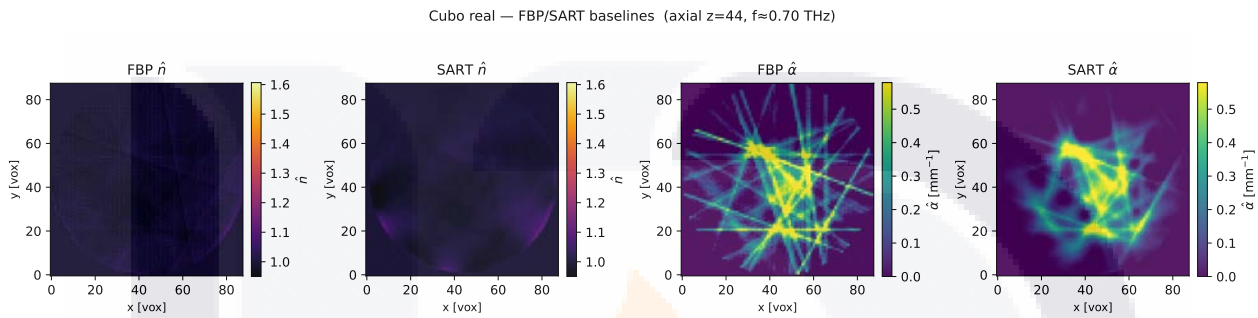


Figura 5.2. Comparación de FBP y SART sobre el cubo impreso real en el corte axial central a 0.70 THz. De izquierda a derecha: FBP $\hat{n}$, SART $\hat{n}$, FBP $\hat{\alpha}$ y SART $\hat{\alpha}$. En ambos métodos el índice reconstruido colapsa hacia el del aire ($\hat{n} \approx 1.0$), muy por debajo del componente denso del objeto ($n_{\text{denso}} \approx 1.52$), y la absorción exhibe fuertes artefactos de rayas; el modelo neuronal, en cambio, recupera un índice cercano a ese componente denso ($\hat{n} = 1.488$, Sección 4.4.3).

Como el caso es único, estas causas se plantean como hipótesis, no como conclusiones firmes (Sección 5.5), aunque el patrón es coherente. La causa dominante es la brecha de física entre el simulador y la medición. El cubo real produce reflexiones de Fabry-Pérot entre sus caras paralelas, que en la medición se suman a $H(f)$ mientras el simulador deja pasar el rayo una sola vez por interfaz, además de refracción en las interfaces del relleno, difracción y ruido que el modelo directo no reproduce. Lo que el modelo acierta y lo que falla coincide con lo que el simulador modela bien y lo que no, de modo que la brecha no está en la óptica del material sino en la física de la propagación del pulso por una estructura heterogénea.

Esa lectura, aunque limitada a un solo objeto, señala dónde intervenir para cerrar la brecha, no en la estimación del índice, que ya funciona, sino en el modelado de la estructura interna de la pieza y en el acoplamiento entre índice y absorción que impone la tabla de materiales. Confirmada en simulación, la hipótesis no queda demostrada en datos reales, y llevar el modelo hasta ahí es el reto que queda abierto.

5.4. Posicionamiento frente a la literatura

Poner estos resultados en contexto exige mirarlos contra la literatura, aunque la comparación llega solo hasta cierto punto, porque ningún trabajo previo reporta las mismas métricas sobre el mismo tipo de objeto. Frente a la tomografía THz clásica, la retroproyección de Ferguson et al. (2002) y el estudio del haz de Recur et al. (2012), el contraste no pasa de lo cualitativo, ya que ninguno publica un índice de Jaccard ni un error volumétrico del índice. Aun así deja ver un patrón compartido. Recur et al. (2012) ya notó que los artefactos de haz limitan a los métodos clásicos sobre datos reales, y esa misma debilidad reaparece cuando NeuralFieldTHz se transfiere al cubo físico. En simulación el modelo aprovecha lo que los clásicos no modelan, pero sobre la medición real ambos chocan con el mismo límite, lo que confirma desde otro ángulo que el obstáculo está en el modelo físico de los datos, no en el algoritmo de reconstrucción.

Del lado del aprendizaje automático tampoco hay una referencia directa. Los métodos que extraen el índice de refracción de espectros THz-TDS (Klokkou et al., 2022, 2023) operan sobre señales unidimensionales de muestras planas, y los precedentes de representaciones neurales implícitas en tomografía (Rückert et al., 2022; Zha et al., 2022) comparten la representación continua del volumen pero en la modalidad de rayos X. Sin un sistema equivalente contra el cual medirse, la comparación con los métodos clásicos en el dominio sintético queda como la única ancla cuantitativa.

Esa ausencia de un punto de comparación es, más que una carencia, el rasgo de un terreno poco explorado. El aporte no está en ganarle a otro método, porque todavía no hay con quién, sino en mostrar que una representación neural implícita puede aplicarse a la tomografía THz tridimensional y en señalar dónde el modelo sintético y la medición real se separan.

En esa medida, ofrece una primera referencia cuantitativa donde antes no la había.

5.5. Limitaciones

El alcance de este trabajo empieza en el simulador, que tuvo que equilibrar precisión física y costo de cómputo, y de ahí vienen los primeros límites. El generador de fantasmas trata toda estructura interna como un hueco de aire ($n = 1$, $\alpha = 0$), sin relleno con un segundo material sólido, así que el entrenamiento se limitó al contraste entre material y aire y nunca vio dos materiales sólidos distintos juntos, como una inclusión de fibra de vidrio dentro de una matriz de plástico. Además, cada material compuesto entra como un medio uniforme, con un solo índice de refracción para todo el objeto y una absorción sacada de la tabla de materiales (Tabla 3.1). Quedan afuera la mezcla real de fibra y matriz por debajo del tamaño del vóxel, la orientación de las fibras, la proporción de cada material y la dispersión de la señal en sus interfaces. El modelo aprende un promedio uniforme y no distingue la estructura interna de un compuesto; cubrir esos casos obligaría a rehacer el generador y volver a entrenar.

Ese límite importaría menos si el modelo se pudiera probar en muchos objetos reales distintos, pero la prueba con datos reales se hizo sobre una sola muestra, el cubo de polipropileno ya descrito (Sección 4.4). Con una sola pieza no hay manera de saber cuánto de lo que se vio en ese cubo se repetiría en otras formas y materiales, y cuánto es propio de este cubo con su relleno parcial y sus caras paralelas.

Con un solo caso, esos hallazgos sobre la brecha sintético-real no tienen respaldo estadístico. Una sola muestra no permite saber cuánto cambia el resultado de una pieza a otra, ni separar un error constante en $\hat{n}$ del ruido de la medición. Distinguir lo que es tendencia general de lo que es propio de esta pieza pediría muchas más mediciones de las que se pudieron hacer.

Estos límites no van por separado, se encadenan. Las simplificaciones del simulador limitan lo que el modelo puede aprender, la prueba sobre una sola muestra limita cómo se lo puede evaluar, y de esa única muestra se sigue que lo que se concluye sobre datos reales vale como indicio y no como prueba firme. Los resultados en simulación son sólidos y el camino queda abierto, pero hasta que el simulador no sume más física y la prueba no incluya más muestras, la transferencia al mundo real seguirá siendo un indicio y no algo demostrado.

CAPÍTULO 6 CONCLUSIONES

Este capítulo cierra el trabajo: balance de los objetivos, veredicto de la hipótesis y lo que sigue.

6.1. Cumplimiento de los objetivos

El primer objetivo, generar el conjunto de datos sintético, se cumplió por necesidad más que por elección, porque etiquetar muestras reales a la escala que pide el entrenamiento no es viable y la simulación era el único camino. Para eso se construyó un simulador directo de la adquisición THz-TDS, que modela la refracción y transmisión de Fresnel, la atenuación de Beer-Lambert, el haz gaussiano y el ruido instrumental. Con él se generaron 800 fantasmas con su verdad de terreno, repartidos en 500 de entrenamiento, 150 de validación y 150 de prueba, y su salida se validó contra la solución analítica de la función de transferencia para un caso canónico (Sección 3.2.2.7, Figura 3.14). Esa base sostiene todo lo que viene después.

El segundo objetivo, diseñar y entrenar el modelo, se cumplió con NeuralFieldTHz, una representación neural implícita condicional que estima por regresión continua un índice de refracción $\hat{n}$ escalar, un coeficiente de absorción $\hat{\alpha}(f)$ resuelto en 13 frecuencias y la silueta del objeto, donde la silueta modula a las otras dos salidas mediante una factorización multiplicativa. Entrenado sobre esos datos, alcanzó su menor pérdida de validación en la época 38, antes de que el sobreajuste empezara a crecer (Capítulo 3).

El tercer objetivo, evaluar la reconstrucción sobre el conjunto de prueba sintético, dio un resultado favorable pero no parejo. El modelo supera a los métodos clásicos en geometría y en índice global, con un IoU de 0.849 frente a valores casi nulos y un error de índice de 0.028 frente a 0.111. Dentro del material, en cambio, la mejora sobre un predictor constante centrado en el índice medio es mínima (0.160 frente a 0.151; Sección 5.1), de modo que el modelo ubica el objeto y le asigna un índice cercano al real, pero los detalles finos de la estructura interna se pierden. El objetivo se cumplió con ese matiz.

El cuarto objetivo, validar sobre una muestra física real, dio un resultado negativo pero informativo. La prueba usó un solo objeto ($N = 1$), el cubo de polipropileno impreso en 3D, y la transferencia no se logró. La geometría no se recuperó (solapamiento IoU = 0.079, centroide a 4.67 mm del real) y la absorción quedó muy por debajo de la medida; solo el índice del componente denso se transfirió bien ($\hat{n} = 1.488$, con $n \approx 1.5$ el del polipropileno). La causa no está en la óptica del material, que cae dentro del rango de entrenamiento, sino en la física de la propagación, porque el simulador de un solo paso no reproduce las reflexiones y refracciones que genera el relleno interno de la pieza (Sección 5.3). El objetivo se ejecutó y sirvió para exponer la brecha de dominio, pero la validación como tal, demostrar que el modelo funciona en datos reales, no se logró.

6.2. Veredicto de la hipótesis y respuesta a la pregunta de investigación

La hipótesis de trabajo planteaba que el modelo podía reconstruir la geometría interna tridimensional con un error igual o menor al de los métodos clásicos y estimar además propiedades ópticas continuas, con el error geométrico como criterio de refutación (Capítulo 1). Sobre los 150 fantasmas del conjunto de prueba sintético la hipótesis no se refuta, porque el modelo iguala o supera a la retroproyección filtrada y a la reconstrucción algebraica en geometría y en índice global. Para la absorción no hay veredicto, ya que esos métodos no entregan un mapa volumétrico de α con el cual comparar.

Sobre la muestra real, en cambio, la hipótesis no se sostiene sin adaptación, porque el modelo no reconstruye la geometría y la absorción estimada no coincide con la medición. Solo el índice se transfiere, y ese acierto parcial señala que lo que falta no es la maquinaria de estimación de propiedades sino la física ausente entre el simulador y la realidad. La hipótesis, entonces, se verifica en el dominio sintético y no en el real.

De ahí se sigue la respuesta a la pregunta de investigación. Dentro del dominio en que fue entrenado, el aprendizaje supervisado sobre datos THz-TDS reconstruye la geometría interna tridimensional y recupera el índice de refracción global; la caracterización punto a punto de las propiedades ópticas, y en particular de la absorción, es más débil y queda como una capacidad parcial. Fuera de ese dominio, sobre una medición física real, la transferencia no quedó demostrada, y cerrar esa brecha es el paso que este trabajo deja señalado pero no resuelto.

6.3. Trabajo futuro

La brecha de dominio abre varias líneas de trabajo, pero no todas pesan igual ni son igual de urgentes. La más urgente es la validación experimental, porque sin un panel de muestras con materiales e índices conocidos, y con repeticiones por muestra, cualquier mejora del simulador o del modelo se evalúa sobre un solo caso y no se puede separar el avance real del accidente. Ampliar la validación a un conjunto variado de objetos es el cambio de menor costo y el que más información devuelve por esfuerzo, y permitiría estimar la varianza de la transferencia y separar el sesgo sistemático de la variabilidad de la medición.

Con la validación en pie para medir el progreso, el paso siguiente es el simulador. El modelo directo actual sigue un solo rayo transmitido por interfaz y no incluye las reflexiones de Fabry-Pérot ni la refracción en los huecos de aire del relleno; incorporar esos efectos acercaría los sinogramas sintéticos a los reales y le permitiría al modelo manejar la estructura interna de piezas impresas por deposición fundida, como el cubo de control. En la misma línea entra la adaptación de dominio, sea por ajuste fino del modelo con mediciones reales, sea por calibración del simulador contra la física que de verdad se mide, ruido y artefactos de adquisición incluidos.

Con una validación sólida y un simulador más realista, las mejoras sobre el modelo cobran sentido. Ampliar el rango de índices y absorciones del entrenamiento, agregar contraste material-material en el generador y atacar el error de absorción con pérdidas o arquitecturas específicas apuntan a un modelo más general y más preciso, pero hoy no se pueden evaluar con limpieza porque la base todavía no está firme. Conviene además no esperar de ahí lo que no puede dar, porque ampliar el rango óptico no resuelve el cubo real, cuyo material ya cae en rango y cuyo fallo es geométrico. El modelo actual funciona en simulación y mostró el camino; falta construir los andamios para que funcione también en mediciones reales.

GLOSARIO

Se reúnen los términos técnicos empleados a lo largo de este trabajo, de los dos dominios que confluyen en él —aprendizaje automático y óptica de Terahertz—, ordenados alfabéticamente.

Aprendizaje supervisado (*supervised learning*) Paradigma de entrenamiento en el que la red ajusta sus pesos w minimizando una función de pérdida calculada contra pares de entrada y salida de referencia (*ground truth*) proporcionados por el conjunto de datos. Contrasta con el aprendizaje no supervisado, donde no existen etiquetas de referencia.

Atención (auto-atención, *self-attention*) Mecanismo que permite a cada elemento de una secuencia ponderar y agregar información de los demás según su afinidad mutua, calculada con las proyecciones Q , K , V . En este trabajo, la atención multivista deja que las características de cada ángulo de proyección se refinan en función de las otras vistas antes de combinarse.

Beer-Lambert, ley de Describe el decaimiento exponencial de la intensidad de una radiación al atravesar un medio absorbente, $I = I_0 e^{-\alpha d}$, con α el coeficiente de absorción y d el espesor. En THz-TDS, al medirse el campo y no la intensidad, el exponente de atenuación se divide por dos.

Capa lineal (*linear layer*) Transformación afín $y = Wx + b$, donde W es una matriz de pesos y b un vector de sesgo, ambos aprendidos durante el entrenamiento.

Capa oculta (*hidden layer*) Capa de la red neuronal ubicada entre la entrada y la salida; no es observable directamente. Cada capa oculta aplica una transformación lineal seguida de una función de activación.

Cintura del haz (*beam waist*, w_0) Radio mínimo de un haz gaussiano, alcanzado en el plano focal. En el sistema experimental la cintura depende de la frecuencia: $w_0(f) = 1.03/f$ mm (calibrado a partir del cubo real; a 0.5 THz: $w_0 = 2.06$ mm).

Coefficiente de absorción (α) Propiedad óptica que cuantifica la atenuación de la amplitud de la onda por unidad de longitud dentro de un material (unidades mm^{-1}). Junto con el índice de refracción, es una de las dos magnitudes que el modelo reconstruye en cada vóxel.

Conexiones de salto (*skip connections*) Atajos que conectan capas tempranas de una red con capas posteriores, transportando información de alta resolución que de otro modo se perdería en la compresión. En la U-Net del codificador de vistas preservan los bordes finos de la muestra.

Conjuntos de entrenamiento, validación y prueba (*train/val/test*) Partición disjunta de los datos: el de entrenamiento ajusta los pesos; el de validación selecciona el modelo y vigila el sobreajuste, sin que sus datos entren al ajuste; el de prueba, no visto en ninguna decisión, mide la generalización final. Confundir validación con prueba sobrestima el desempeño reportado.

Convolución (*convolution*, capa convolucional) Operación que aplica un filtro local (núcleo) sobre todos los desplazamientos espaciales de la entrada, detectando el mismo patrón con independencia de su posición. Es análoga a un filtro óptico espacial que responde a una estructura local sin importar dónde aparezca en la imagen.

Descenso de gradiente (*gradient descent*) Algoritmo de optimización que actualiza los pesos en dirección opuesta al gradiente de la función de pérdida; su forma estocástica opera sobre lotes de datos. Para evitar la explosión del gradiente se acota su norma (*gradient clipping*), fijada en 1.0 en este trabajo.

Desenfoque por haz (*beam smearing*) Suavizado de las proyecciones causado por el perfil espacial finito del haz gaussiano: los vóxeles fuera del eje acumulan una fase promediada, lo que subestima el índice de refracción reconstruido. Los métodos clásicos no lo corrigen; el modelo neural aprende a invertirlo.

Dispersión (cromática, *dispersion*) Variación del índice de refracción n —y por tanto de la velocidad de fase— con la frecuencia. En la banda THz los materiales de este trabajo son de baja dispersión: n varía poco entre 0.1 y 1.5 THz, por lo que se modela como un escalár. No debe confundirse con el esparcimiento (*scattering*).

Entrenamiento (*training*) Fase en la que los pesos w de la red se actualizan iterativamente mediante retropropagación del gradiente de la función de pérdida respecto a los pesos, hasta que la pérdida sobre el conjunto de entrenamiento converge.

Epoch (época) Una pasada completa por la totalidad del conjunto de datos de entrenamiento durante el proceso de optimización. El entrenamiento consta de múltiples épocas.

Esparcimiento (*scattering*) Desviación de parte de la radiación de su trayectoria original al encontrar inhomogeneidades o interfaces internas del medio. A diferencia de la absorción, que convierte la energía en calor, el esparcimiento la redistribuye espacialmente. El simulador de este trabajo modela la absorción pero no el esparcimiento, uno de los efectos del modelo directo que quedan fuera.

Fabry-Pérot, etalón de Reflexiones internas múltiples entre dos caras paralelas de una muestra, que introducen oscilaciones en la función de transferencia. El simulador de este trabajo asume una única transmisión y no las modela.

Fantoma (*phantom*) Volumen sintético de geometría y propiedades ópticas conocidas, generado por construcción, que sirve de muestra de referencia para entrenar y evaluar el modelo con verdad terreno exacta en cada vóxel.

Feature map (mapa de características) Tensor de activaciones producido por una capa convolucional; cada canal del mapa representa la respuesta del filtro correspondiente ante la entrada en cada posición espacial.

Fresnel, coeficientes de Factores que cuantifican la fracción de amplitud transmitida y reflejada en una interfaz entre medios de distinto índice de refracción. El modelo directo los evalúa interfaz por interfaz para incidencia oblicua (polarización s), usando los ángulos de incidencia y transmisión que provee el trazado de rayos.

Función de activación Función no lineal aplicada elemento a elemento tras cada capa lineal. Su presencia es imprescindible: sin ella, la composición de capas lineales colapsa en una sola transformación lineal, limitando la capacidad expresiva de la red.

Función de pérdida (*loss function*) Escalar diferenciable que cuantifica la discrepancia entre la predicción de la red y el valor de referencia. Su gradiente respecto a los pesos guía la optimización durante el entrenamiento. La función de pérdida específica de este trabajo se detalla en el Capítulo 3.

Función de transferencia ($H(f)$) Cociente espectral entre el pulso que atraviesa la muestra y el de referencia, $H(f) = E_{\text{muestra}}(f)/E_{\text{ref}}(f)$. Codifica a la vez la atenuación (amplitud) y el retardo (fase) que introduce el material, y es la entrada física de la que se derivan n y $\alpha(f)$.

GELU (*Gaussian Error Linear Unit*) Función de activación definida como $\text{GELU}(x) = x \Phi(x)$, donde Φ es la función de distribución acumulada de la gaussiana estándar. Utilizada como activación en las capas de retroalimentación del *Transformer* (*CrossViewSetAttention*) de la arquitectura propuesta.

Generalización (*generalization*) Capacidad de un modelo de mantener su desempeño sobre datos no vistos durante el entrenamiento. Se estima sobre el conjunto de prueba; su deterioro frente al entrenamiento es síntoma de sobreajuste.

Ground truth (referencia) Valores de salida correctos y verificados que se emplean para supervisar el entrenamiento y evaluar el modelo. En este trabajo, los valores de referencia son los índices de refracción n y coeficientes de absorción $\alpha(f)$ de cada vóxel del fantoma sintético, obtenidos por construcción geométrica.

Haz gaussiano (*Gaussian beam*) Modelo de un haz cuyo perfil transversal de intensidad es una gaussiana, $I \propto \exp(-2r^2/w^2)$. Describe el haz THz real mejor que un rayo infinitesimal y explica el desenfoque dependiente de la profundidad.

- Índice de refracción (n)** Razón entre la velocidad de la luz en el vacío y su velocidad de fase en el material; determina el retardo de fase de la onda transmitida. Es, junto al coeficiente de absorción, la magnitud que el modelo reconstruye por vóxel.
- Inferencia (*inference*)** Fase en la que el modelo, con pesos w fijos tras el entrenamiento, genera predicciones para nuevas entradas no vistas durante el entrenamiento.
- Interpolación bilineal** Método de interpolación que estima el valor de un campo continuo en un punto arbitrario a partir de los cuatro vecinos más cercanos en una cuadrícula discreta, ponderando por distancia bilineal. Se emplea para extraer características del mapa de la vista en la posición exacta de cada punto de consulta.
- Kramers-Kronig, relaciones de** Relaciones de causalidad que vinculan las partes real e imaginaria de la respuesta óptica de un material. Implican que, en el régimen de baja pérdida, n varía poco con la frecuencia y la firma espectral discriminante reside sobre todo en $\alpha(f)$.
- Logit** Valor escalar real sin restricción de rango, producido por una capa lineal antes de aplicar una función de compresión (sigmoide o *softmax*). La sigmoide convierte el *logit* de silueta $\ell_s \in \mathbb{R}$ en la probabilidad $p_s \in (0, 1)$.
- Lote (*batch*)** Subconjunto de muestras procesado en un único paso de actualización de pesos. Su tamaño (*batch size*) fue de 2 fantasmas por paso en este trabajo; las coordenadas de consulta se agruparon además en bloques de 4096 puntos.
- Max pooling** Operación de submuestreo que retiene únicamente el valor máximo dentro de cada ventana local. En redes U-Net reduce la resolución espacial progresivamente, aumentando el campo receptivo de cada capa y permitiendo que el codificador capture estructuras de escala creciente.
- Medio efectivo (*effective medium*)** Material heterogéneo a escala sub-longitud de onda —por ejemplo, un polímero impreso con relleno parcial de aire— que la radiación THz percibe como un medio homogéneo de propiedades ópticas promediadas. El índice y la absorción efectivos resultantes difieren de los del material macizo; el cubo de validación real se comporta como un medio efectivo de bajo índice ($n_{\text{ef}} \approx 1.11$).
- MLP (*Multilayer Perceptron*, *perceptrón multicapa*)** Red neuronal compuesta por una secuencia de capas lineales alternadas con funciones de activación, sin conexiones recurrentes ni convolucionales. Aproxima funciones continuas arbitrarias cuando tiene suficiente capacidad (por el teorema de aproximación universal).
- Neurona (*neuron*, *unidad*)** Unidad computacional elemental de una capa: calcula el producto punto entre sus pesos y la entrada, suma un sesgo, y aplica la función de activación. Cada capa oculta tiene tantas neuronas como su dimensión de salida.
- Normalización de capa (*LayerNorm* y *GroupNorm*)** Operaciones que reescalan las activaciones para estabilizar y acelerar el entrenamiento. *LayerNorm* normaliza sobre las características de cada muestra (usada en el *Transformer*); *GroupNorm* las agrupa por canales (usada en la U-Net del codificador de vistas).
- Optimizador (*AdamW*)** Algoritmo que decide cómo actualizar los pesos a partir del gradiente. AdamW combina momentos adaptativos por parámetro con un decaimiento de pesos desacoplado, que regulariza sin distorsionar la estimación del gradiente.
- Parada temprana (*early stopping*)** Criterio que detiene el entrenamiento cuando la pérdida de validación deja de mejorar durante un número fijo de épocas (paciencia de 15 en este trabajo), conservando el *checkpoint* de menor pérdida de validación para evitar el sobreajuste.
- Pérdida de Huber (*Huber loss*)** Función de pérdida que es cuadrática para errores pequeños y lineal para errores grandes (umbral δ), combinando la suavidad del error cuadrático con la robustez del error absoluto frente a valores atípicos.
- Pre-LN (*Pre-Layer Normalization*)** Variante de normalización de capa en Transformers que aplica la normalización antes de la sublayer (auto-atención o retroalimentación), en lugar de después. Mejora la estabilidad del gradiente y la convergencia en comparación con la configuración *Post-LN* original de Vaswani et al.

Prior inductivo Suposición estructural incorporada en la arquitectura que restringe el espacio de funciones que la red puede aprender, reduciendo la complejidad de la búsqueda. La factorización de silueta es un prior inductivo: impone que el aire tenga $\hat{n} \rightarrow 1$ y $\hat{\alpha} \rightarrow 0$ por construcción, en lugar de requerir que la red lo aprenda desde los datos.

Q, K, V (consulta, clave, valor) Proyecciones lineales de los vectores de entrada en el mecanismo de auto-atención: Q (*query*) representa la consulta de cada posición; K (*key*) la representación consultada; V (*value*) el contenido que se agrega. El producto $QK^\top$ mide la afinidad entre pares y *softmax* lo normaliza a pesos de mezcla sobre V .

Radon, transformada de Operación que asigna a cada par ángulo–desplazamiento la integral de línea de una función a lo largo del rayo correspondiente, modelando la formación del sinograma. Su inversa reconstruye la función a partir de las proyecciones; en este trabajo se reutiliza solo su geometría directa para muestrear características.

Rayleigh, longitud de (z_R) Distancia axial desde el plano focal a la que la sección del haz gaussiano se ensancha de forma apreciable. Crece con la frecuencia ($z_R \propto f$), por lo que a frecuencias altas el haz permanece más colimado a lo largo de la muestra.

Recocido de coseno (*cosine annealing*) Programa que reduce la tasa de aprendizaje siguiendo una curva de coseno, desde un valor inicial hasta un piso, a lo largo de un horizonte de épocas. La parada temprana puede truncarlo antes de que alcance el piso.

ReLU (*Rectified Linear Unit*) Función de activación definida como $f(x) = \max(0, x)$. Utilizada en las capas ocultas de los decodificadores MLP de silueta y regresión de la arquitectura propuesta.

Retropropagación (*backpropagation*) Algoritmo que calcula el gradiente de la función de pérdida respecto a cada peso aplicando la regla de la cadena hacia atrás por la red. Es el cálculo que alimenta al optimizador en cada paso de entrenamiento.

Retroproyección filtrada (**FBP, filtered back-projection**) Método analítico de reconstrucción tomográfica que filtra cada proyección con un filtro de rampa y la retroproyecta sobre el volumen. Exige muestreo angular denso y es sensible al ruido y a la difracción; se emplea como línea base clásica.

SART (reconstrucción algebraica simultánea) Método iterativo de reconstrucción tomográfica que resuelve el sistema de proyecciones por aproximaciones sucesivas. Se usa, junto con FBP, como línea base clásica frente al modelo neural.

Sesgo espectral (*spectral bias*) Tendencia de los MLP a aprender primero las funciones de baja frecuencia y converger lentamente hacia las de alta frecuencia. La codificación posicional de Fourier lo mitiga para preservar bordes nítidos en la reconstrucción.

Sigmoide (σ) Función de compresión $\sigma(x) = 1/(1 + e^{-x})$, con imagen en $(0, 1)$. Convierte un *logit* escalar en una probabilidad. Nunca alcanza exactamente 0 ni 1 en aritmética de precisión finita.

Sinograma Conjunto ordenado de las proyecciones de una muestra a todos los ángulos de adquisición. Aquí es un tensor complejo (N_θ, N_f, Z, X) que reúne amplitud y fase por frecuencia, y constituye la entrada del modelo de reconstrucción.

Snell, ley de Describe el cambio de dirección de un rayo al cruzar una interfaz entre medios de distinto índice de refracción. El trazado de rayos de la simulación la aplica de forma vectorial en cada frontera; cuando no hay solución real, ocurre reflexión total interna.

Sobreajuste (*overfitting*) Fenómeno en que el modelo memoriza el conjunto de entrenamiento y pierde desempeño sobre datos nuevos. Se manifiesta cuando la pérdida de validación empieza a subir mientras la de entrenamiento sigue bajando.

Softmax Generalización de la sigmoide para vectores: dada una secuencia de logits $(z_1, \dots, z_n)$, produce probabilidades $\text{softmax}(z_i) = e^{z_i} / \sum_j e^{z_j}$ que suman 1. En el mecanismo de atención normaliza los productos $QK^\top / \sqrt{d_k}$ a pesos no negativos que suman la unidad.

Tasa de aprendizaje (*learning rate*) Escalar que regula la magnitud de cada actualización de pesos. Demasiado alta hace diverger el entrenamiento; demasiado baja lo estanca. En este trabajo parte de 1×10^{-3} y decae mediante recocido de coseno.

THz-TDS (espectroscopía de THz en el dominio del tiempo) Técnica que mide la forma de onda del campo eléctrico de pulsos de THz de picosegundos transmitidos por una muestra, obteniendo amplitud y fase en función de la frecuencia y, a partir de ellas, sus propiedades ópticas.

Transformer Arquitectura de red basada en capas de auto-atención y subcapas *feed-forward* con conexiones residuales. En este trabajo agrega la información de las 19 vistas angulares de cada punto de consulta, ponderándolas de forma adaptativa.

Vóxel (voxel) Unidad volumétrica elemental de una cuadrícula 3D discreta; el equivalente tridimensional de un píxel. En este trabajo, cada vóxel almacena el índice de refracción n y el coeficiente de absorción α del material presente en ese punto del espacio.



REFERENCIAS

- Andersen, A. H., & Kak, A. C. (1984). Simultaneous Algebraic Reconstruction Technique (SART): A superior implementation of the ART algorithm. *Ultrasonic Imaging*, 6(1), 81-94. <https://doi.org/10.1177/016173468400600107>
- Baillergeau, M., Maussang, K., Nirrengarten, T., Palomo, J., Li, L. H., Linfield, E. H., Davies, A. G., Dhillon, S., Tignon, J., & Mangeney, J. (2016). Diffraction-limited ultrabroadband terahertz spectroscopy. *Scientific Reports*, 6, 24811. <https://doi.org/10.1038/srep24811>
- Berman, M., Rannen Triki, A., & Blaschko, M. B. (2018). The Lovász-Softmax Loss: A Tractable Surrogate for the Optimization of the Intersection-over-Union Measure in Neural Networks. *IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, 4413-4421. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1705.08790>
- Birch, J. R. (1992). The far-infrared optical constants of polypropylene, PTFE and polystyrene. *Infrared Physics*, 33(1), 33-38. [https://doi.org/10.1016/0020-0891\(92\)90052-U](https://doi.org/10.1016/0020-0891(92)90052-U)
- Callister, J., William D., & Rethwisch, D. G. (2020). *Materials science and engineering: an introduction* (10th). John Wiley & Sons.
- Cherkasova, O. P., Serdyukov, D. S., Nemova, E. F., Ratushnyak, A. S., Kucheryavenko, A. S., Dolganova, I. N., Xu, G., Skorobogatiy, M., Reshetov, I. V., Timashev, P. S., Spektor, I. E., Zaytsev, K. I., & Tuchin, V. V. (2021). Cellular effects of terahertz waves. *Journal of Biomedical Optics*, 26(9), 090902. <https://doi.org/10.1117/1.JBO.26.9.090902>
- Dorney, T. D., Baraniuk, R. G., & Mittleman, D. M. (2001). Material parameter estimation with terahertz time-domain spectroscopy. *Journal of the Optical Society of America A*, 18(7), 1562-1571. <https://doi.org/10.1364/JOSAA.18.001562>
- Duvillaret, L., Garet, F., & Coutaz, J.-L. (1996). A reliable method for extraction of material parameters in terahertz time-domain spectroscopy. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 2(3), 739-746. <https://doi.org/10.1109/2944.571775>
- Ferguson, B., Wang, S., Gray, D., Abbot, D., & Zhang, X.-C. (2002). T-ray computed tomography. *Optics Letters*, 27(15), 1312-1314. <https://doi.org/10.1364/OL.27.001312>
- Flores-Mijangos, J., & Beltrán-López, V. (2003). Far-infrared laser measurement of the refractive index of polypropylene. *Applied Optics*, 42(3), 592-596. <https://doi.org/10.1364/AO.42.000592>
- Gershman, S. J., & Goodman, N. D. (2014). Amortized Inference in Probabilistic Reasoning. *Proceedings of the Annual Meeting of the Cognitive Science Society*, 36. <https://escholarship.org/uc/item/34j1h7k5>
- Grischkowsky, D., Keiding, S., van Exter, M., & Fattinger, C. (1990). Far-infrared time-domain spectroscopy with terahertz beams of dielectrics and semiconductors. *Journal of the Optical Society of America B*, 7(10), 2006-2015. <https://doi.org/10.1364/JOSAB.7.002006>
- Helal, S., Sareddeen, H., Dahrouj, H., Al-Naffouri, T. Y., & Alouini, M.-S. (2022). Signal Processing and Machine Learning Techniques for Terahertz Sensing: An Overview. *IEEE Signal Processing Magazine*, 39(5), 42-62. <https://doi.org/10.1109/MSP.2022.3183808>
- Huber, P. J. (1964). Robust Estimation of a Location Parameter. *The Annals of Mathematical Statistics*, 35(1), 73-101. <https://doi.org/10.1214/aoms/1177703732>
- Jaccard, P. (1912). The Distribution of the Flora in the Alpine Zone. *New Phytologist*, 11(2), 37-50. <https://doi.org/10.1111/j.1469-8137.1912.tb05611.x>
- Jepsen, P. U., Cooke, D. G., & Koch, M. (2011). Terahertz spectroscopy and imaging: Modern techniques and applications. *Laser & Photonics Reviews*, 5(1), 124-166. <https://doi.org/10.1002/lpor.201000011>
- Kang, S. B., Chung, D. C., Kim, S.-J., Chung, J.-K., Park, S.-Y., Kim, K.-C., & Kwak, M. H. (2016). Terahertz characterization of Y2O3-added AlN ceramics. *Applied Surface Science*, 388, 741-745. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2016.02.152>

- Klokkou, N., Gorecki, J., Beddoes, B., & Apostolopoulos, V. (2023). Deep neural network ensembles for THz-TDS refractive index extraction exhibiting resilience to experimental and analytical errors. *Optics Express*, 31(26), 44575-44587. <https://doi.org/10.1364/OE.507439>
- Klokkou, N., Gorecki, J., Wilkinson, J. S., & Apostolopoulos, V. (2022). Artificial neural networks for material parameter extraction in terahertz time-domain spectroscopy. *Optics Express*, 30(9), 15583-15595. <https://doi.org/10.1364/OE.454756>
- Koch, M., Mittleman, D. M., Ornik, J., & Castro-Camus, E. (2023). Terahertz time-domain spectroscopy. *Nature Reviews Methods Primers*, 3(1), 48.
- Kronig, R. d. L. (1926). On the Theory of Dispersion of X-Rays. *Journal of the Optical Society of America*, 12(6), 547-556. <https://doi.org/10.1364/JOSA.12.000547>
- Loshchilov, I., & Hutter, F. (2017). SGDR: Stochastic Gradient Descent with Warm Restarts. *International Conference on Learning Representations (ICLR)*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1608.03983>
- Loshchilov, I., & Hutter, F. (2019). Decoupled Weight Decay Regularization. *International Conference on Learning Representations (ICLR)*.
- Lucarini, V., Saarinen, J. J., Peiponen, K.-E., & Vartiainen, E. M. (2005). *Kramers-Kronig Relations in Optical Materials Research* (Vol. 110). Springer. <https://doi.org/10.1007/b138913>
- Mildenhall, B., Srinivasan, P. P., Tancik, M., Barron, J. T., Ramamoorthi, R., & Ng, R. (2020). NeRF: Representing Scenes as Neural Radiance Fields for View Synthesis. *European Conference on Computer Vision (ECCV)*, 405-421. https://doi.org/10.1007/978-3-030-58452-8_24
- Mittleman, D. M., Hunsche, S., Boivin, L., & Nuss, M. C. (1997). T-ray tomography. *Optics Letters*, 22(12), 904. <https://doi.org/10.1364/OL.22.000904>
- Neu, J., & Schmuttenmaer, C. A. (2018). Tutorial: An introduction to terahertz time domain spectroscopy (THz-TDS). *Journal of Applied Physics*, 124(23), 231101. <https://doi.org/10.1063/1.5047659>
- Nsengiyumva, W., Zhong, S., Luo, M., & Wang, B. (2023). Terahertz Spectroscopic Characterization and Thickness Evaluation of Internal Delamination Defects in GFRP Composites. *Chinese Journal of Mechanical Engineering*, 36, 6. <https://doi.org/10.1186/s10033-022-00829-7>
- Nsengiyumva, W., Zhong, S., Zheng, L., Liang, W., Wang, B., Huang, Y., Chen, X., & Shen, Y. (2023). Sensing and Nondestructive Testing Applications of Terahertz Spectroscopy and Imaging Systems: State-of-the-Art and State-of-the-Practice. *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, 72, 1-83. <https://doi.org/10.1109/TIM.2023.3318676>
- Park, H., & Son, J.-H. (2021). Machine Learning Techniques for THz Imaging and Time-Domain Spectroscopy. *Sensors*, 21(4), 1186. <https://doi.org/10.3390/s21041186>
- Piesiewicz, R., Jansen, C., Wietzke, S., Mittleman, D., Koch, M., & Kürner, T. (2007). Properties of Building and Plastic Materials in the THz Range. *International Journal of Infrared and Millimeter Waves*, 28(5), 363-371. <https://doi.org/10.1007/s10762-007-9217-9>
- Poudel, A., Yasin, M. S., Ye, J., Liu, J., Vinel, A., Shao, S., & Shamsaei, N. (2022). Feature-based volumetric defect classification in metal additive manufacturing. *Nature Communications*, 13, 5938. <https://doi.org/10.1038/s41467-022-34122-x>
- Rahaman, N., Baratin, A., Arpit, D., Draxler, F., Lin, M., Hamprecht, F. A., Bengio, Y., & Courville, A. (2019). On the Spectral Bias of Neural Networks. *International Conference on Machine Learning (ICML)*, 5301-5310.
- Recur, B., Balacey, H., Sleight, J., Trofimov, P., Velly, A., MacGrogan, G., & Mounaix, P. (2012). Propagation beam consideration for 3D THz computed tomography. *Optics Express*, 20(6), 5817-5827. <https://doi.org/10.1364/OE.20.005817>
- Ronneberger, O., Fischer, P., & Brox, T. (2015). U-Net: Convolutional Networks for Biomedical Image Segmentation. *Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention (MICCAI)*, 9351, 234-241. https://doi.org/10.1007/978-3-319-24574-4_28
- Rückert, D., Wang, Y., Li, R., Idoughi, R., & Heidrich, W. (2022). NeAT: Neural Adaptive Tomography. *ACM Transactions on Graphics*, 41(4), 1-13. <https://doi.org/10.1145/3528223.3530121>
- Saleh, B. E. A., & Teich, M. C. (2019). *Fundamentals of Photonics* (3.^a ed.). Wiley.
- Sitzmann, V., Martel, J. N. P., Bergman, A. W., Lindell, D. B., & Wetzstein, G. (2020). Implicit Neural Representations with Periodic Activation Functions. *Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)*, 33, 7462-7473.
- Smith, P. R., Auston, D. H., & Nuss, M. C. (1988). Subpicosecond photoconducting dipole antennas. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 24(2), 255-260. <https://doi.org/10.1109/3.121>

- Sommer, S., Raidt, T., Fischer, B. M., Katzenberg, F., Tiller, J. C., & Koch, M. (2016). THz-Spectroscopy on High Density Polyethylene with Different Crystallinity. *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, 37(2), 189-197. <https://doi.org/10.1007/s10762-015-0219-8>
- Tancik, M., Srinivasan, P. P., Mildenhall, B., Fridovich-Keil, S., Raghavan, N., Singhal, U., Ramamoorthi, R., Barron, J. T., & Ng, R. (2020). Fourier Features Let Networks Learn High Frequency Functions in Low Dimensional Domains. *Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)*, 33, 7537-7547.
- Vásárhelyi, L., Kónya, Z., Kukovecz, Á., & Vajtai, R. (2020). Microcomputed tomography-based characterization of advanced materials: A review. *Materials Today Advances*, 8, 100084. <https://doi.org/10.1016/j.mtadv.2020.100084>
- Vaswani, A., Shazeer, N., Parmar, N., Uszkoreit, J., Jones, L., Gomez, A. N., Kaiser, Ł., & Polosukhin, I. (2017). Attention Is All You Need. *Advances in Neural Information Processing Systems (NeurIPS)*, 30.
- Wang, Q., Wang, Z., Genova, K., Srinivasan, P. P., Zhou, H., Barron, J. T., Martin-Brualla, R., Snavely, N., & Funkhouser, T. (2021). IBRNet: Learning Multi-View Image-Based Rendering. *Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*.
- Wilmink, G. J., & Grundt, J. E. (2011). Invited Review Article: Current State of Research on Biological Effects of Terahertz Radiation. *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, 32(10), 1074-1122. <https://doi.org/10.1007/s10762-011-9794-5>
- Withayachumnankul, W., & Naftaly, M. (2014). Fundamentals of Measurement in Terahertz Time-Domain Spectroscopy. *Journal of Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves*, 35(8), 610-637. <https://doi.org/10.1007/s10762-013-0042-z>
- Withers, P. J., Bouman, C., Carmignato, S., Cnudde, V., Grimaldi, D., Hagen, C. K., Maire, E., Manley, M., Du Plessis, A., & Stock, S. R. (2021). X-ray computed tomography. *Nature Reviews Methods Primers*, 1(1), 18.
- Yu, A., Ye, V., Tancik, M., & Kanazawa, A. (2021). pixelNeRF: Neural Radiance Fields from One or Few Images. *Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*.
- Zha, R., Zhang, Y., & Li, H. (2022). NAF: Neural Attenuation Fields for Sparse-View CBCT Reconstruction. *Medical Image Computing and Computer Assisted Intervention – MICCAI 2022*, 13436, 442-452. https://doi.org/10.1007/978-3-031-16446-0_42