

Software de Inteligencia Artificial para el Análisis Automático de Moldes Nanoestructurados

F. Meneses, A. M. Ottaviano, J. Lezama, E. Druetta, L. Biedma

1. Introducción

Las membranas de óxido de aluminio poroso (AAO, por sus iniciales en inglés) son utilizadas en numerosas aplicaciones, tales como biosensores para la determinación de concentración de glucosa (1) e identificación de DNA (2), sensores ópticos de índices de refracción (3), y moldes ordenados para la síntesis de nanopartículas y nanohilos (4, 5). Los moldes AAO se caracterizan por su orden de largo rango obtenido a través de un proceso de auto-ensamblaje y un alto grado de control de sus características geométricas (6-8).

Desde el punto de vista de las aplicaciones prácticas, la geometría de los moldes AAO es fundamental, caracterizada principalmente por el diámetro de los poros, la porosidad (definida como la fracción de volumen ocupada por los poros) y la calidad del orden de largo alcance. Si bien las condiciones de fabricación fijan un rango específico para estos parámetros (7-9), la geometría final de los moldes debe ser determinada mediante el análisis estadístico de imágenes, usualmente obtenidas con microscopía electrónica de barrido (SEM, por sus siglas en inglés). En la mayoría de los casos, este proceso se realiza manualmente, y a veces con algoritmos semi-automáticos como ImageJ (10). A pesar de que los resultados informan valores promedio del diámetro y la porosidad que son normalmente representativos del molde (11-13), la calidad estadística es usualmente pobre (1, 14) y algunos trabajos ni siquiera explican la metodología utilizada para determinar los parámetros geométricos (15, 16).

Hasta ahora, los métodos manuales y semi-automáticos para la determinación de los parámetros geométricos de los moldes AAO han demostrado ser suficientes para el desarrollo de investigación y tecnología actuales. Sin embargo, dado el continuo desarrollo y avance de las aplicaciones que utilizan moldes AAO, es previsible que en el futuro se requieran mayores estándares de calidad y métodos que permitan escalar los procesos de producción. En este sentido, automatizar el análisis de los parámetros geométricos de los moldes y brindar resultados precisos se convertirá en una prioridad central tanto en la industria como en las investigaciones científicas.

Problema:

La falta de un método automático y preciso que determine las características geométricas de moldes AAO a partir de imágenes SEM.

Solución propuesta:

Diseñar un modelo de aprendizaje automático supervisado (AAS) que prediga el diámetro medio, la porosidad y la calidad del orden de moldes AAO a partir de imágenes SEM, con un error relativo menor al 10 % en cada parámetro. El modelo será entrenado con un set de datos simulado de imágenes y evaluado en un set de imágenes SEM experimentales. Una vez que el algoritmo haya sido entrenado, generaremos un software que permita a los y las usuarias proveer al modelo con una imagen SEM e información de sus dimensiones (ancho y alto), y como resultado obtener la predicción de los parámetros geométricos, sin necesidad de realizar calibraciones previas ni gastar tiempo en análisis manuales. Para acotar el alcance de esta investigación, el modelo será entrenado en un rango de diámetros de 10 nm a 200 nm, y porosidades entre 15 % y 55 %, los cuales son valores usuales para los moldes AAO.

2. Objetivos

Objetivo general:

Determinar el diámetro promedio de los poros, la porosidad y el parámetro de orden de moldes AAO a partir de imágenes SEM utilizando un modelo de aprendizaje automático supervisado, con un error relativo menor al 10 %.

Objetivos específicos:

1. Simular imágenes SEM de los moldes AAO con las siguientes condiciones: valores de píxel en escala de grises; red de poros de orden hexagonal; diámetro de poro promedio d y distancia promedio entre poros dcc con variaciones aleatorias de hasta un 20 %. Los rangos para d y P serán $R_d = [10, 200]$ nm y $R_P = [15, 55]$ %, respectivamente.
2. Definir un parámetro geométrico O_h que cuantifique el grado de orden del molde AAO, con respecto a la red hexagonal ideal, a través de un análisis de la transformada de Fourier.
3. Generar un set de 5.000 imágenes SEM experimentales en los rangos R_d y R_P . La distribución de imágenes debe ser equitativa en los intervalos $[x, x + 10]$ para d , con $x = 10, 20, 30, 40$, y $[y, y + 10]$ para P , con $y = 15, 25, 35, 45$.
4. Diseñar modelos de AAS programados en TensorFlow, que deben tomar como input una imagen en escala de grises y entregar como output los parámetros d , P y O_h . Los modelos serán entrenados con 1.000.000 de imágenes simuladas como máximo, y evaluados en el set experimental. El error promedio en las predicciones deberá ser menor al 10 % en cada una de las variables d , P y O_h .
5. Diseñar modelos alternativos basados en la librería OpenCV, en las mismas condiciones descritas anteriormente. Estos modelos servirán de referencia para comparar el rendimiento con aquellos basados en AAS.
6. Elaborar un software en código Python que contenga el mejor modelo de inteligencia artificial ya entrenado. El programa debe recibir como input una imagen de un molde AAO junto a sus dimensiones (por ejemplo: ancho 500 nm y alto 600 nm), y obtener las predicciones sobre los valores d , P y O_h .

3. Metodología

El proyecto puede dividirse en las secciones de **Simulaciones**, **Experimentos**, **Inteligencia Artificial** y **Producción de Software**. Todas estas secciones pueden desarrollarse íntegramente por nuestro equipo, en las instalaciones de la Universidad Nacional de Córdoba.

3.1. Simulaciones

Los códigos para las simulaciones serán escritos en el lenguaje Python, con control de los parámetros d , dcc , P ; variaciones aleatorias de d , dcc y posiciones de los poros; y ruido artificial en la imagen, simulando condiciones experimentales como se aprecian en la [Figura 1A](#). Como resultado preliminar, y demostrando nuestra capacidad para llevar a cabo simulaciones de buena calidad, incluimos la emulación de una red cuadrada en la [Figura 1B](#).

Uno de los grandes desafíos será simular imágenes con múltiples *granos*, definidos como regiones en las que la red hexagonal tiene una misma orientación. Para esta tarea utilizaremos la plataforma Atomsk ([17](#)), que genera las coordenadas de redes con múltiples granos y luego podrá ser adaptada en Python para incluir distorsiones, ver [Figura 1C](#) para un ejemplo de una imagen con 3 granos de orden hexagonal.

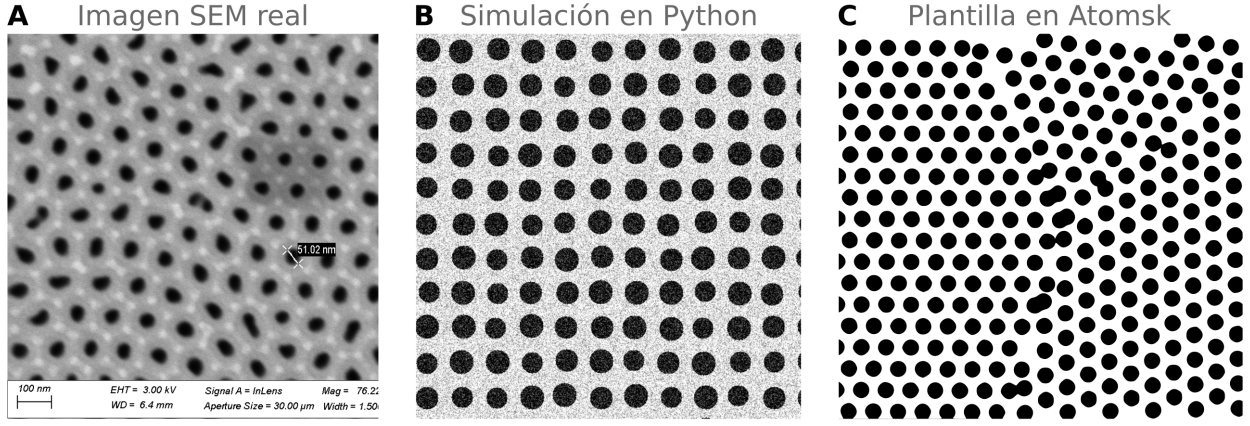


Figura 1: Imágenes reales y simuladas de moldes AAO. A Imagen SEM experimental de una red hexagonal, diámetro de poro aproximadamente 50 nm. B Simulación en código Python para una red cuadrada con un único grano. C Plantilla generada en la plataforma Atomsk para una red hexagonal con tres granos.

3.2. Experimentos

Los moldes AAO serán fabricados por el proceso de doble anodizado, bien establecido en el grupo Ciencia de Materiales de FAMAF (5, 18-20), partiendo de aluminio ultrapuro (99,997 %) GoodFellowTM y con posibilidad de variar la solución electrolítica y el voltaje de anodizado para acceder a distintos rangos de d , dcc y P , para $d < 150$ nm. Adicionalmente, utilizaremos la técnica de anodizado fuerte en un solo paso (21), que permite generar los moldes con parámetros similares para d y P , pero con bajo orden de largo alcance, es decir un parámetro O_h de menor calidad. Por último, disponemos de moldes comerciales WhatmanTM (ya fabricados), con diámetros entre 100 nm y 250 nm. En todos los casos, es posible realizar un tratamiento químico posterior (*etching*) para agrandar los poros, dejando dcc constante y aumentando d y P .

3.3. Inteligencia Artificial

Los modelos de AAS serán programados en el lenguaje Python, utilizando el entorno TensorFlow y empleando elementos como capas de convolución bidimensional, reducción (*max-pooling*), abandono (*dropout*), aplanamiento (*flattening*), activación no lineal, entre otros.

Los modelos alternativos, a los cuales llamamos “modelos de visión programada” (VP), se basarán en la librería OpenCV (22), e incluyen operaciones como filtrado por umbral adaptativo, cómputo de centroides y operaciones estadísticas.

Para entrenar ambos tipos de modelos AAS y VP se utilizarán computadoras personales en las etapas iniciales, en las que el volumen de datos simulados sea relativamente pequeño y los tiempos de entrenamiento no superen las pocas horas. Esto nos permitirá realizar operaciones dinámicas y facilitar la toma de decisiones ágiles para ajustar las simulaciones y las arquitecturas de los modelos.

A medida que los tiempos de entrenamiento se prolonguen debido a set de datos de mayor tamaño, y/o aumentos en la complejidad de los modelos (especialmente en el caso de AAS), utilizaremos recursos computacionales de gran escala, como la supercomputadora Clementina XXIII (23), o el Centro de Cómputos de Alto Desempeño (CCAD) de la Universidad Nacional de Córdoba (24).

3.4. Plan de investigación progresivo

La investigación se llevará a cabo en etapas, aumentando progresivamente los tamaños de los sets de datos y la complejidad de los modelos computacionales. La Tabla 1 resume las características de cada etapa, en las cuales se fija una meta para el desempeño de los modelos, cuantificada como el error promedio relativo de las predicciones de las variables d , P y O_h , la cantidad máxima N de imágenes de entrenamiento (simulaciones), y la cantidad de imágenes M del set de evaluación (experimentales).

Tabla 1: Plan de investigación dividido en etapas progresivas. Cada etapa posee un número máximo N de imágenes de entrenamiento, un número M de imágenes de evaluación y objetivos para los errores relativos máximos en las predicciones del diámetro (e_d), la porosidad (e_P) y el parámetro de orden (e_O).

Etapas	N entrenamiento	M evaluación	e_d [%]	e_P [%]	e_O [%]
1	10,000	200	30	20	40
2	50,000	500	25	18	35
3	100,000	1,000	20	16	30
4	200,000	2,000	17.5	14	25
5	400,000	3,000	15	12	20
6	700,000	4,000	12.5	11	15
7	1,000,000	5,000	10	10	10

3.5. Producción de Software

El software final se elaborará como un paquete de Python, que permitirá a los y las usuarias ejecutar un comando para ingresar una imagen en formato .png, .jpeg, .jpg o .tiff, junto a las dimensiones de la imagen expresadas en nanómetros, y obtener como resultado los parámetros geométricos promedio d , P y O_h . El diseño de este software se enfoca en su funcionalidad, y en la medida de lo posible se implementará una interfaz que mejore la experiencia de usuario.

4. Cronograma de actividades

En este proyecto, las tareas experimentales de producción de moldes AAO, de simulaciones y de inteligencia artificial corren en paralelo, ya que se han planteado etapas progresivas para los sets de datos y la complejidad de los modelos computacionales. El desarrollo de software, en cambio, se desarrollará en la etapa final del proyecto, para tener una visión más amplia de las necesidades técnicas.

5. Importancia del proyecto - Impacto

Este proyecto ofrecerá una contribución novedosa y eficiente para el tratamiento de imágenes y la determinación de parámetros geométricos, en el campo particular de los moldes porosos, y también podrá extenderse a aplicaciones similares. En la industria creciente de la nanotecnología, el desarrollo de métodos de inteligencia artificial para un control de calidad preciso y automatizado es una tarea esencial que aporta beneficios tanto en la utilización eficiente del tiempo como en la calidad de los resultados. Este proyecto es pionero en el área de moldes AAO y supondrá una gran ventaja para usuarios que van desde la academia hasta el sector industrial.

6. Facilidades disponibles

Tareas experimentales: el Grupo Ciencia de Materiales cuenta con laboratorios equipados para la producción de moldes AAO. Se incluyen fuentes de voltaje, equipos de anodizado, almacén de reactivos y campana para tratamientos químicos. Por otro lado, las imágenes SEM pueden obtenerse en los equipos del LAMARX - FAMAF.

Tareas computacionales: los investigadores de este proyecto cuentan con computadoras personales de FAMAF, y también se dispone de acceso a la supercomputadora Clementina XXIII y el Centro de Cómputos de Alto Desempeño (CCAD).

7. Justificación del presupuesto solicitado

Se destinará el presupuesto obtenido principalmente al desarrollo de tareas experimentales, incluyendo la compra de aluminio ultrapuro y reactivos para los procesos de anodizado y tratamiento

químico. También se prevé utilizar fondos para pagar los servicios de microscopía electrónica del LAMARX, y las tarifas del CCAD. Por otro lado, durante el transcurso del proyecto se planea la asistencia a congresos y actividades científicas para la promoción de nuestro proyecto y para mantenernos informados con las últimas novedades en Inteligencia Artificial.

8. Referencias

1. L. M. Ferro *et al.*, *Sensors and Actuators B: Chemical* **248**, 718-723 (2017).
2. S. Pan *et al.*, *Nano letters* **3**, 811-814 (2003).
3. J. Lee *et al.*, *Rsc Advances* **5**, 71770-71777 (2015).
4. T. Lednický *et al.*, *ACS applied materials & interfaces* **12**, 4804-4814 (2020).
5. F. Meneses *et al.*, *Journal of Science: Advanced Materials and Devices* **7**, 100469 (2022).
6. H. Masuda *et al.*, *Chemistry letters* **19**, 621-622 (1990).
7. A. Ruiz-Clavijo *et al.*, *Nanoscale* **13**, 2227-2265 (2021).
8. G. Sriram *et al.*, *Journal of Nanomaterials* **2016**, 1753574 (2016).
9. C.-A. Ku *et al.*, *Nanomaterials* **13**, 2853 (2023).
10. ImageJ, *ImageJ. Image Processing and Analysis in Java* (2025; <https://imagej.net/ij/index.html>).
11. C. Chung *et al.*, *Journal of The Electrochemical Society* **164**, C121 (2017).
12. C. Chung *et al.*, *Microsystem technologies* **20**, 1827-1832 (2014).
13. C. Chung *et al.*, *Thin Solid Films* **520**, 1554-1558 (2011).
14. M. A. Tabrizi *et al.*, *Biosensors and Bioelectronics* **149**, 111828 (2020).
15. W. Yan *et al.*, *Electrochimica Acta* **134**, 266-271 (2014).
16. J. Zhang *et al.*, *Materials Chemistry and Physics* **122**, 295-300 (2010).
17. U. de Lille, *Atomsk. The Swiss-army knife of atomic simulations* (2025; <https://atomsk.univ-lille.fr/>).
18. F. Meneses *et al.*, Available at <https://drive.google.com/drive/folders/14G7YtKs9L1--VpN00lIMveMVX2rnMpoY>, PhD thesis, Universidad Nacional de Córdoba, 2020.
19. F. Meneses *et al.*, *Materials Science and Engineering: B* **261**, 114669 (2020).
20. F. Meneses *et al.*, *Current Applied Physics* **18**, 1240-1247 (2018).
21. J. Liu *et al.*, *Thin Solid Films* **552**, 75-81 (2014).
22. OpenCV, *Open CV. Open Computer Vision Library* (2025; <https://opencv.org/>).
23. G. de Argentina, *Clementina XXI: descubrí la supercomputación* (2025; <https://www.argentina.gob.ar/clementina-xxi-descubri-la-supercomputacion>).
24. U. N. de Córdoba, *UNC - supercómputo* (2025; <https://supercomputo.unc.edu.ar/>).