



Proyecto terminal I

Métodos de inteligencia artificial para el reconocimiento de defectos topológicos en simulaciones de medio continuo de cristales líquidos.

Huerta Escobar J. Gerardo

Asesor: Orlando Guzmán López.

Departamento de Física

Universidad Autónoma Metropolitana

Unidad Iztapalapa

10 de marzo 2021

Estructura

Primera parte

Cristales líquidos

Defectos topológicos

Inteligencia artificial

Redes neuronales

Segunda parte

Objetivo del proyecto

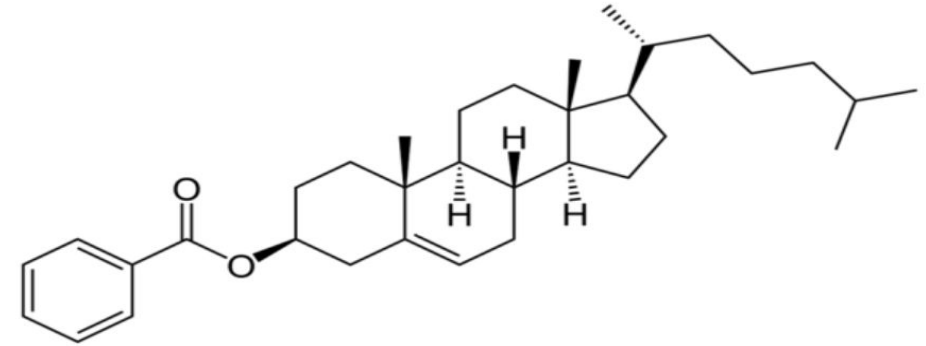
Empleo de Mask RCNN

Resultados

Primera parte

Cristales Líquidos

Se suele atribuir su descubrimiento a Friedrich Reinitzer (1888).



Benzoato de colesterilo.

Los cristales líquidos son un estado de agregación de la materia.

Exhiben algunos comportamientos intermedios de las fases sólida (orden orientacional) y líquida (flujo).

Están formados por mesógenos: moléculas con formas no esféricas.

Distintos tipos de cristales líquidos

Se clasifican principalmente por tres características: ordenamiento posicional, la variable que controla su transición de fase (temperatura, concentración, etc) y su geometría.



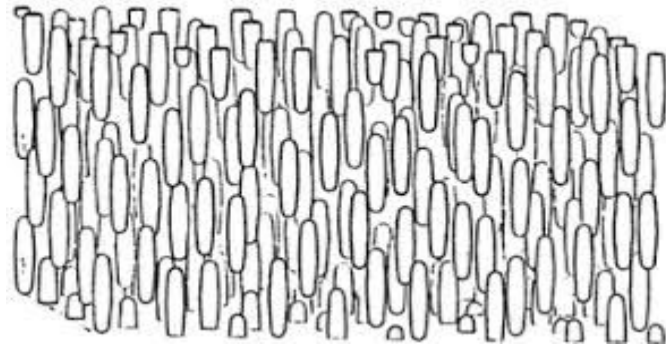
Geometría en forma de disco
(discóticos).



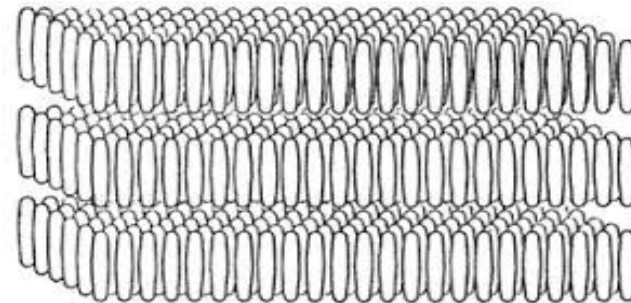
Cristal líquido termotrópico.

Algunos ejemplos caracterizados por su ordenamiento posicional, son:

Nemáticos: tiene las orientaciones definidas, pero no las posiciones.

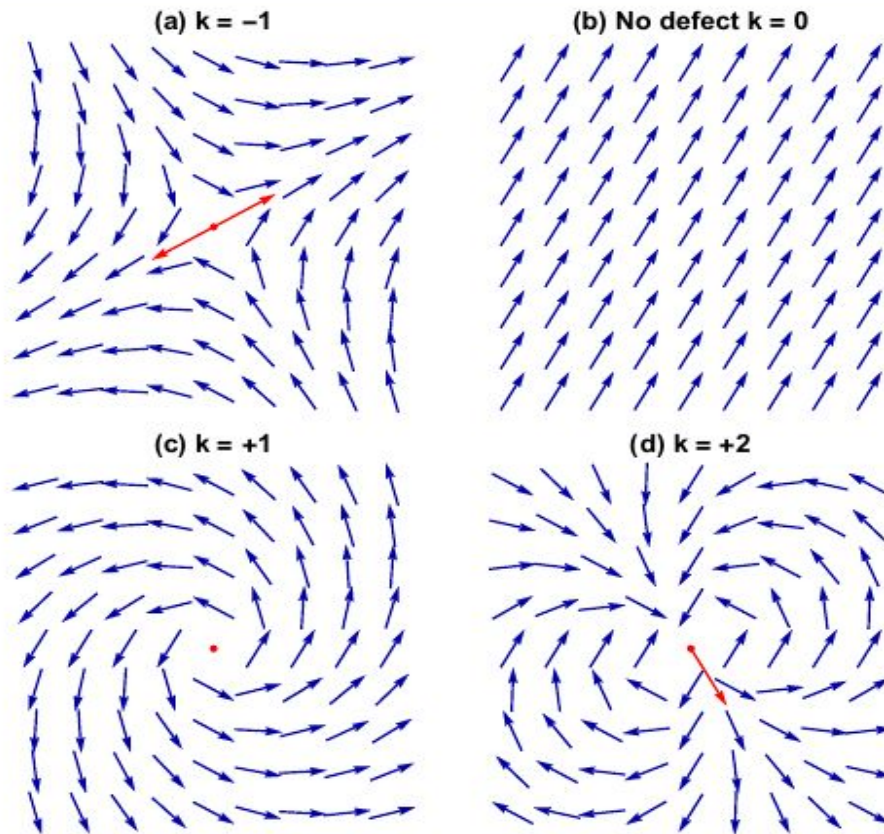


Esmécticos: Sus moléculas están orientadas en dirección y ordenadas en capas. Pero aún hay aleatoriedad en el centro de masa de las moléculas pertenecientes a cada capa.



Defectos topológicos en cristales líquidos.

En la fase nemática existen defectos topológicos los cuales son disclinaciones, entendidas como defectos o cambios abruptos de orientación local en el eje director.



Xingzhou Tang y Jonathan Selinger [3].

En general se sabe que la identificación de los defectos topológicos en cristales líquidos no es una tarea trivial.

[3] Xingzhou Tang y Jonathan V. Selinger. Orientation of topological defects in 2D nematic liquid crystals. Royal society of chemistry (2017).

Defectos tipo fronteras de dominio

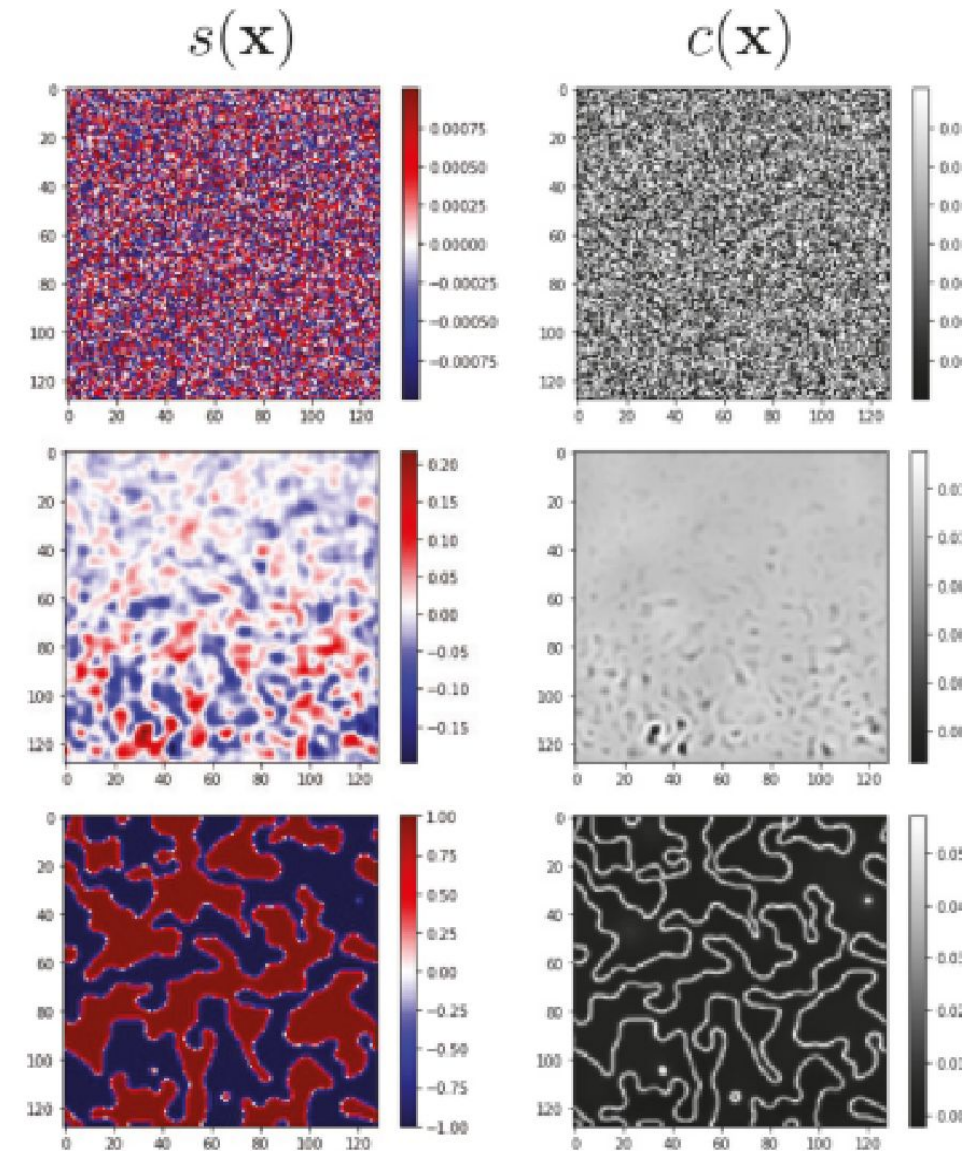
- Energía libre de una mezcla de nanopartículas y mesógenos

$$\mathcal{F}[S, C] = \int d\mathbf{x}' \left(\frac{K}{2} (\nabla' S)^2 + \frac{r}{2} S^2 - w S^3 + u S^4 + \frac{\omega}{2} C^2 + \frac{\alpha}{2} C S^2 \right).$$

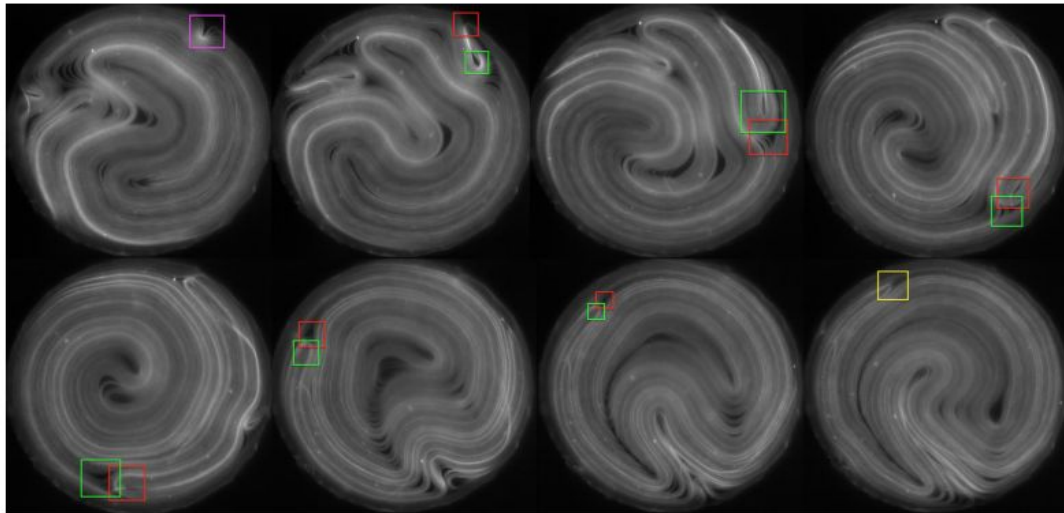
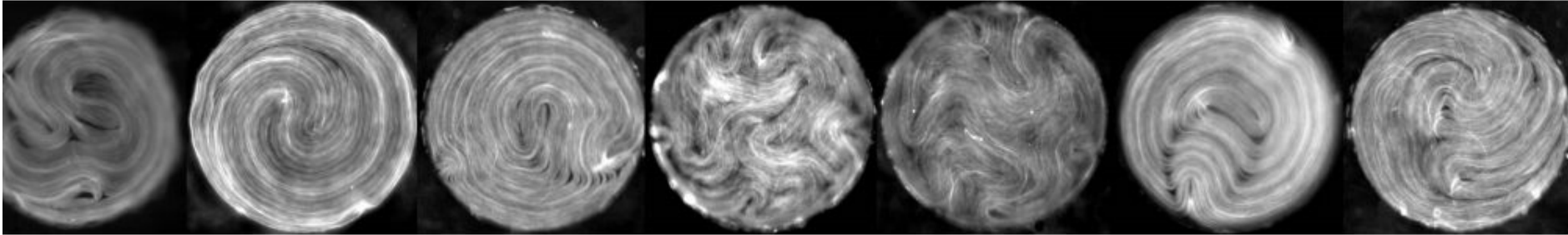
- Ecuaciones dinámicas para un parámetro de orden nemático escalar

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \nabla^2 s - (\text{sgn}(r) + c)s - s^3,$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = R \nabla^2 (c + g s^2),$$



Retos en la identificación de defectos



Generalmente son sistemas:

- Caóticos
- Impredecibles por medio de las técnicas comúnmente empleadas.
- Alta variabilidad de un sistema a otro (se requiere un modelo distinto para estudiar cada sistema).

Ruoshi Liu, Michael Norton, Seth Fraden, Pengyu Hong [2]

[2] Ruoshi Liu, Michael M. Norton, Seth Fraden, Pengyu Hong. *Detecting topological defects in 2D active nematics using convolutional neural networks*. Preprint sometido a la *International Conference on Learning Representations*, (2019).

Método alternativo de detección: Inteligencia Artificial

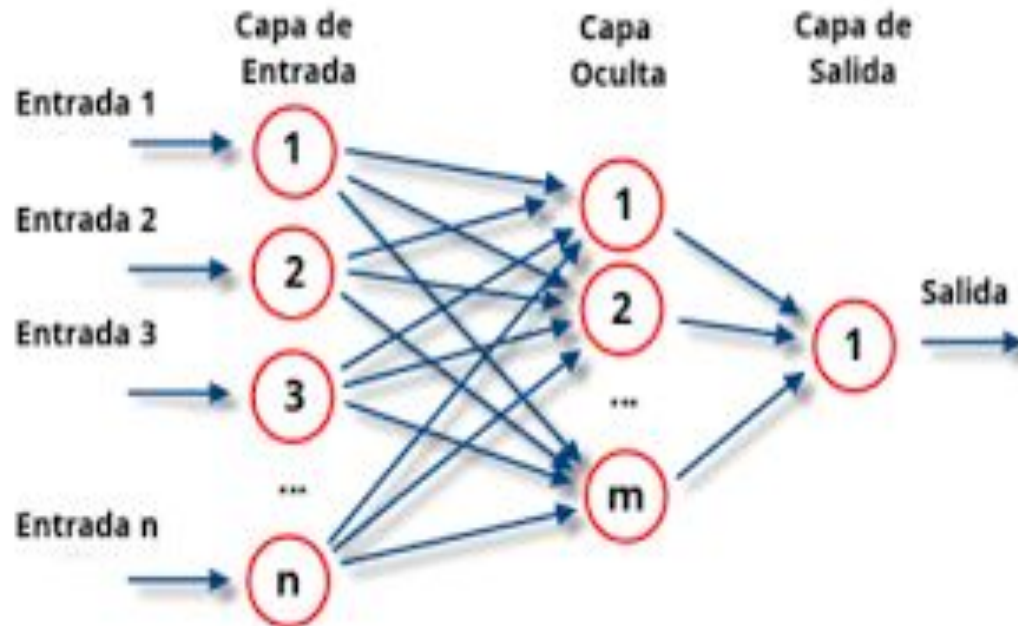
Es un área de la informática enfocada en la teoría y el desarrollo de sistemas informáticos capaces de realizar tareas que normalmente requieren inteligencia humana, como la percepción visual, el reconocimiento de voz, la toma de decisiones y la traducción entre idiomas.



Redes neuronales

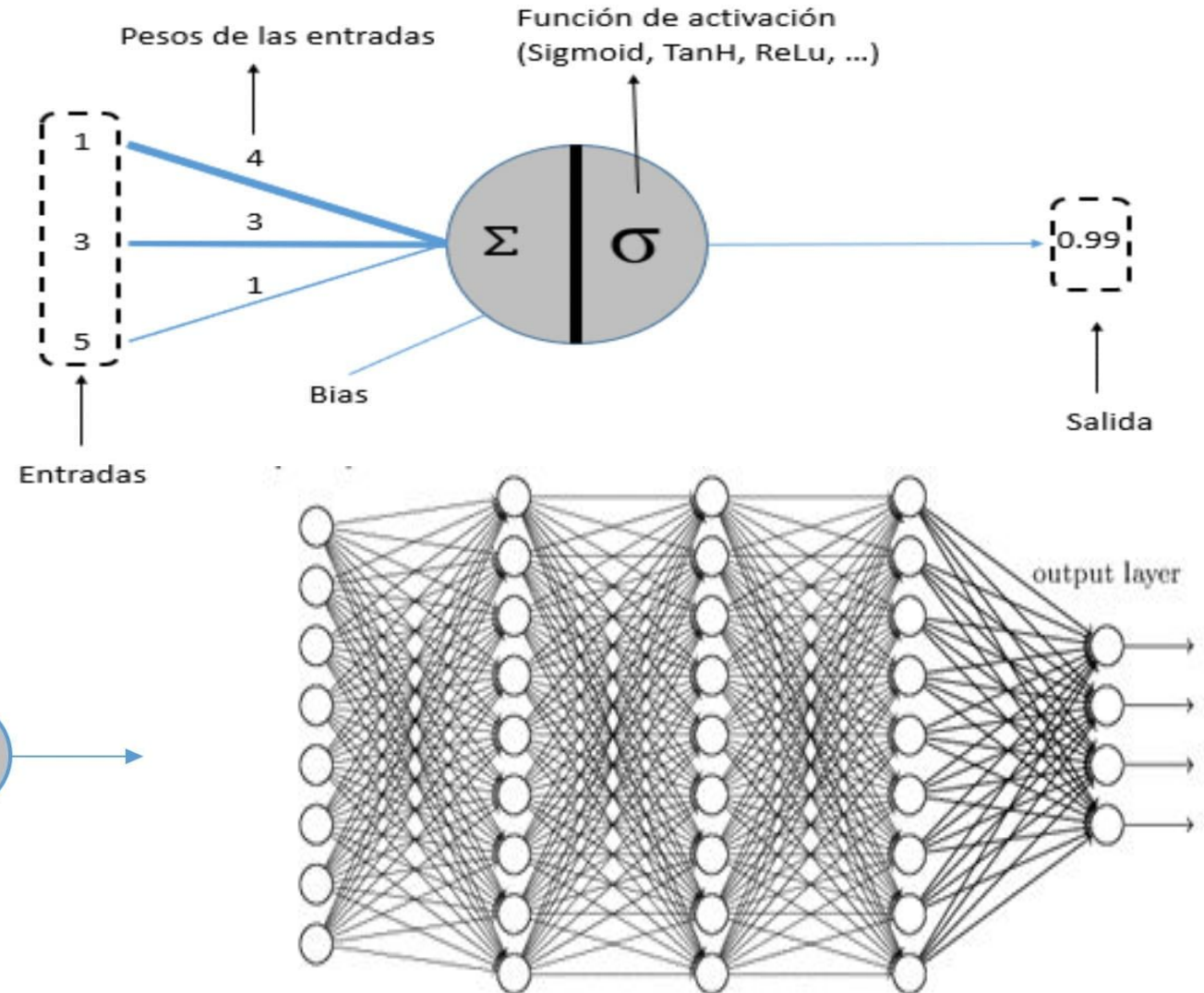
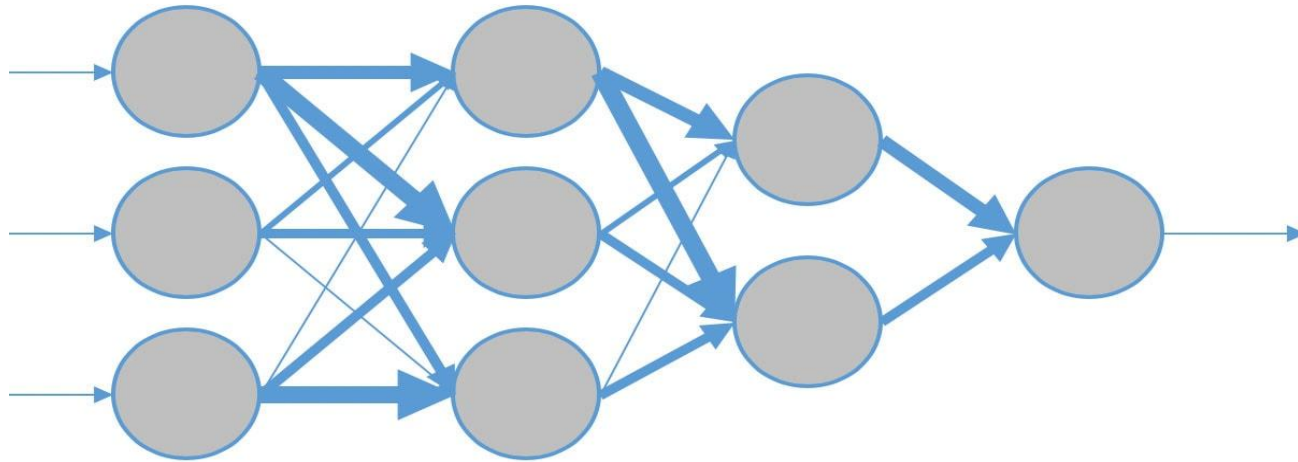
Las redes neuronales son un modelo computacional inspirado en el funcionamiento de las redes neuronales biológicas.

Estructura típica de la red



Neuronas

La neurona es una función matemática que utiliza los valores de entrada para realizar una suma ponderada de estos valores, esto definirá con qué intensidad cada variable de entrada afecta a la neurona. Estos valores son denominados los **pesos de la red**. En el **entrenamiento** se ajustan estos pesos de la red.



Estructura típica de una red profunda usada en el aprendizaje profundo (Deep Learning).

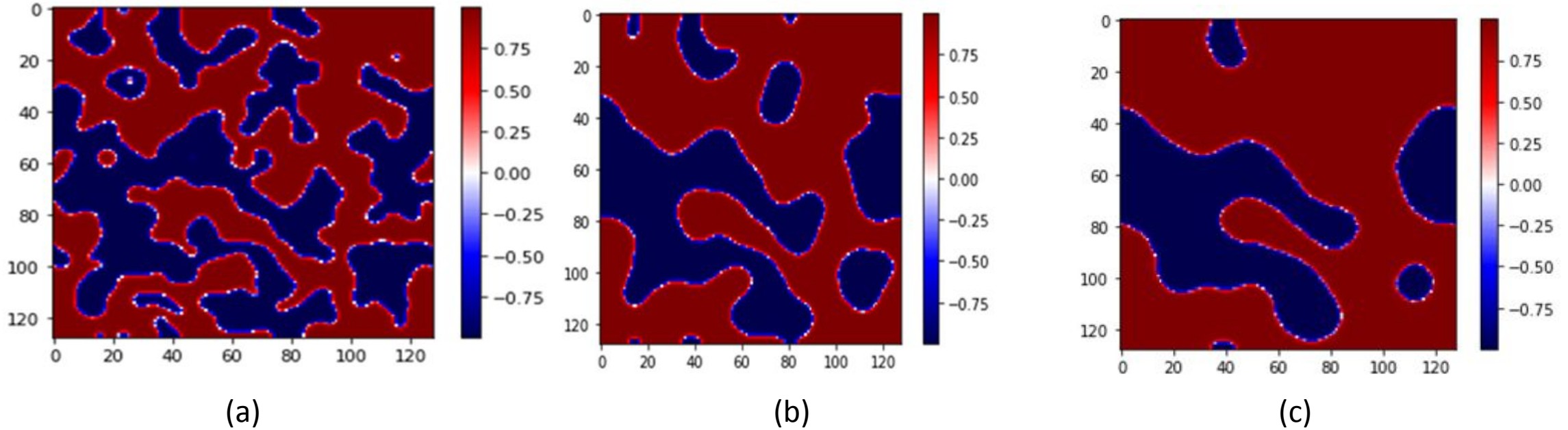
Segunda parte

Objetivo del proyecto

La detección de defectos topológicos generados en la simulación de la evolución temporal de la nematización $S(\mathbf{x})$, cuando el cristal líquido se describe únicamente por su parámetro de orden de nematización escalar [1].

[1] F. Gael Segura-Fernández, Erick F. Serrato-García, J. Emmanuel Flores-Calderón, Orlando Guzmán. *Dynamics of nanoparticle self-assembly on 2D by liquid crystal sorting*. Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana. Preprint (2021).

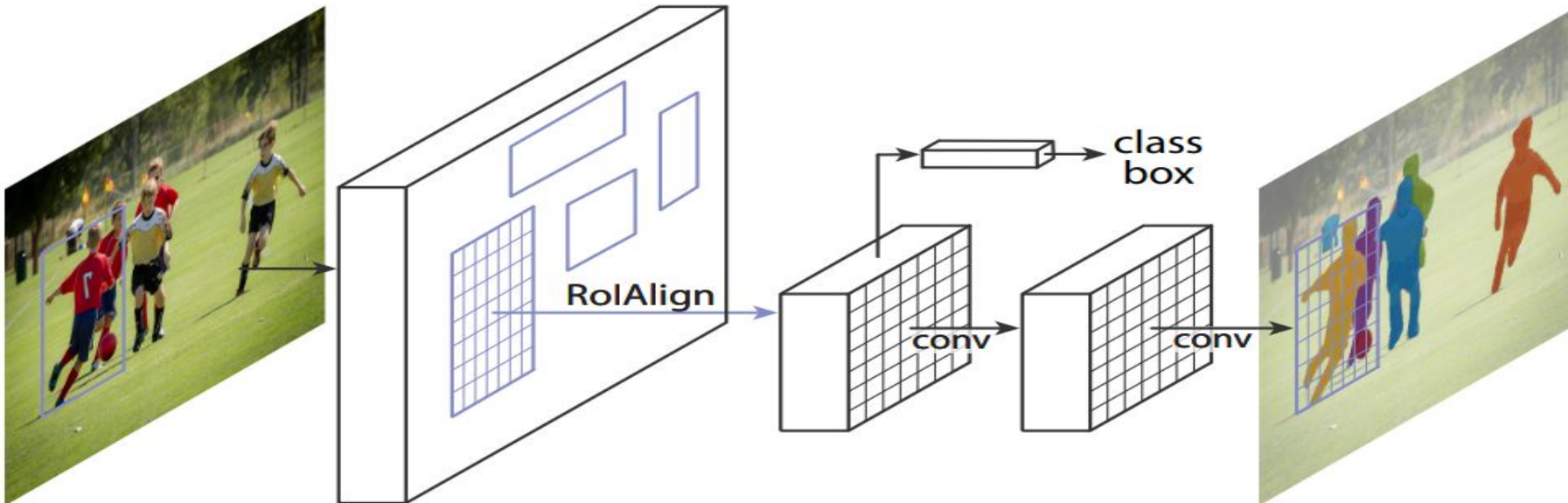
Objetivos de detección



(a-c) Resultados obtenidos de la solución de ecuaciones dinámicas de medio continuo [1], para la evolución temporal de la nematización $S(\mathbf{x})$. En azul y rojo se observan dominios de nematización con valores negativos y positivos, respectivamente. El **conjunto de datos** está formado por 1000 imágenes como estas.

Red neuronal empleada

La detección fue llevada a cabo mediante una Red Neuronal Convolutiva basadas en Regiones, específicamente *Mask Region Based Convolutional Neural Network* (**RCNN**).



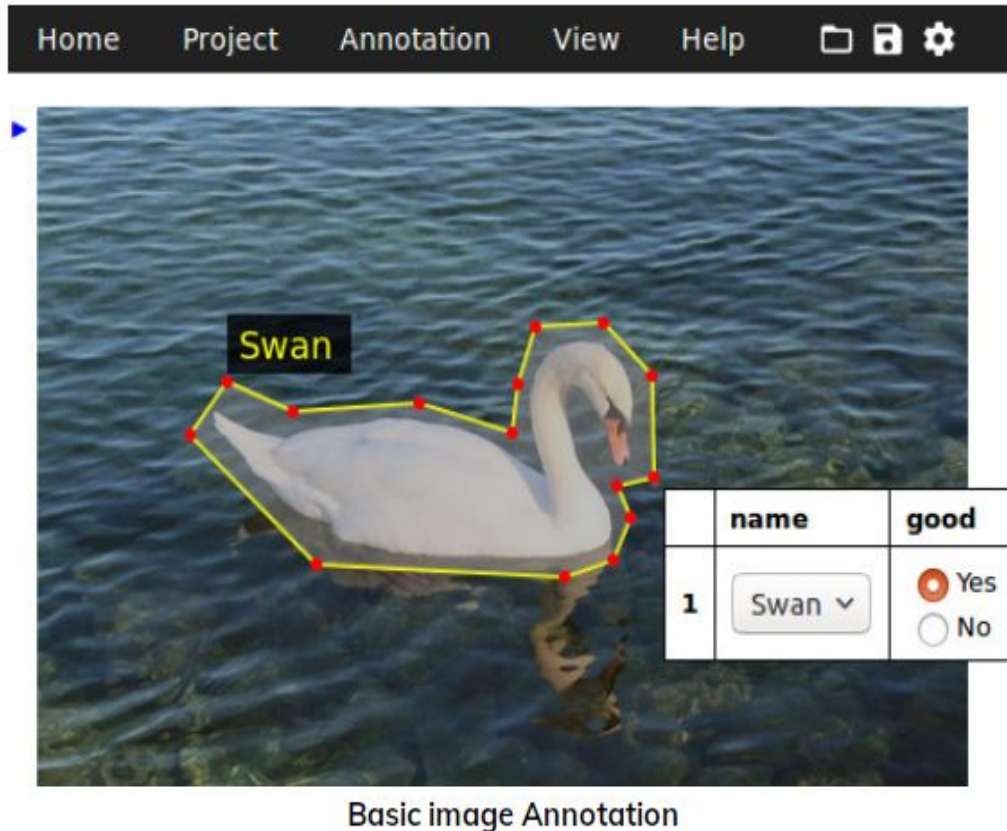
Estructura de la red

Metodología

- Etiquetado del conjunto de datos
- Entrenamiento de la red neuronal
- Validación de la red

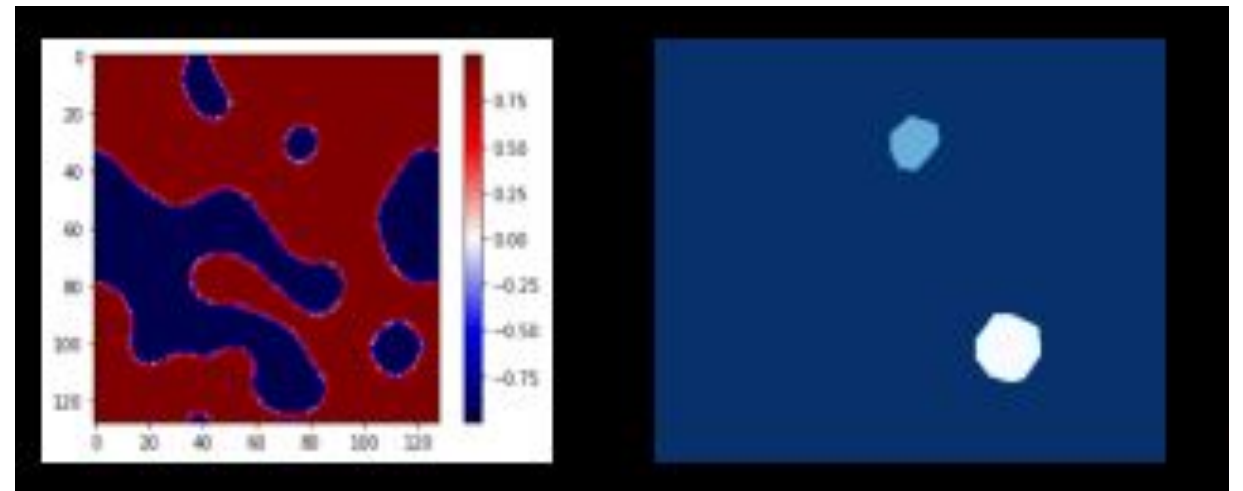
Etiquetado del conjunto de datos

Se etiquetó a todo el conjunto de imágenes de entrenamiento compuesta por 800 elementos. Proporción 80%-20% de entrenamiento vs validación.



VGG Image Annotator es un software de anotación manual simple e independiente para imágenes, audio y video. VIA se ejecuta en un navegador web y no requiere ninguna instalación o configuración. VIA es un proyecto de código abierto.

Se etiquetó con la letra S a los dominios azules con frontera cerrada.



Entrenamiento

En el **entrenamiento** se ajustan estos pesos de la red

- Compuesto por 10 ciclos de entrenamiento (épocas)
- Ejecutado en la GPU de Google Colab

Permite ejecutar y programar en Python en el propio navegador con las siguientes ventajas: No requiere configuración. Da acceso gratuito a GPUs. Permite compartir contenido fácilmente.

Configuración del cuaderno

Acelerador por hardware

GPU 

Para sacar el máximo partido a Colab, evita usar una GPU si no es necesario para tu trabajo. [Más información](#)

☐ Omitir resultado de las celdas de código al guardar este cuaderno

CANCELAR

GUARDAR

Resultados del entrenamiento

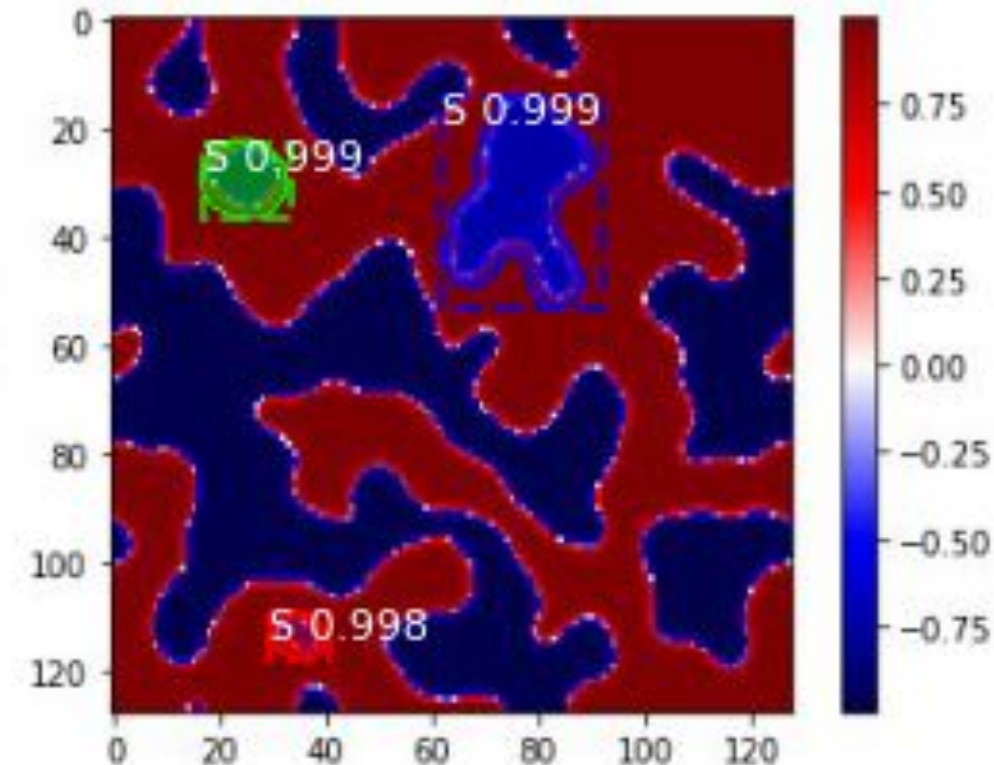
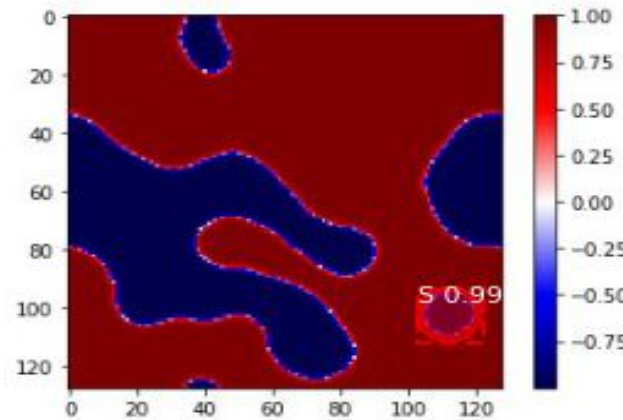
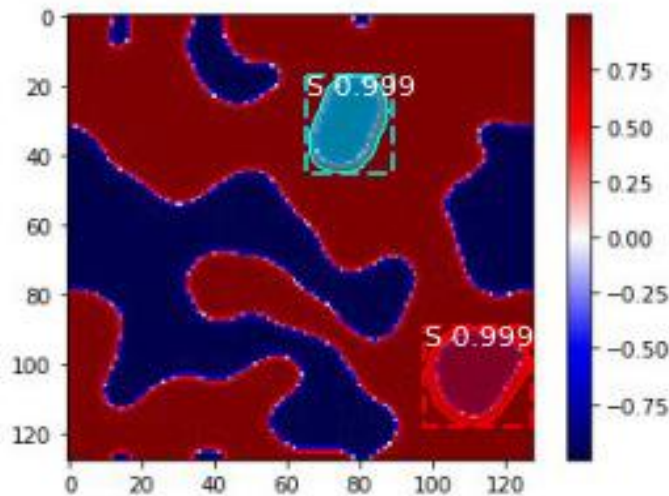
El tiempo promedio de entrenamiento para 10 ciclos de entrenamiento fue aproximadamente de 72 segundos.

```
500/500 [=====] - ETA: 0s - batch:
  warnings.warn('~Model.state_updates~ will be removed in a
500/500 [=====] - 90s 156ms/step -
Epoch 2/10
500/500 [=====] - 72s 145ms/step -
Epoch 3/10
500/500 [=====] - 72s 144ms/step -
Epoch 4/10
500/500 [=====] - 72s 145ms/step -
Epoch 5/10
500/500 [=====] - 72s 144ms/step -
Epoch 6/10
500/500 [=====] - 72s 144ms/step -
Epoch 7/10
500/500 [=====] - 72s 144ms/step -
Epoch 8/10
500/500 [=====] - 72s 144ms/step -
Epoch 9/10
500/500 [=====] - 72s 144ms/step -
Epoch 10/10
500/500 [=====] - 72s 144ms/step -
```

La red neuronal
generada pesa más de
100MB.

Validación (Resultados)

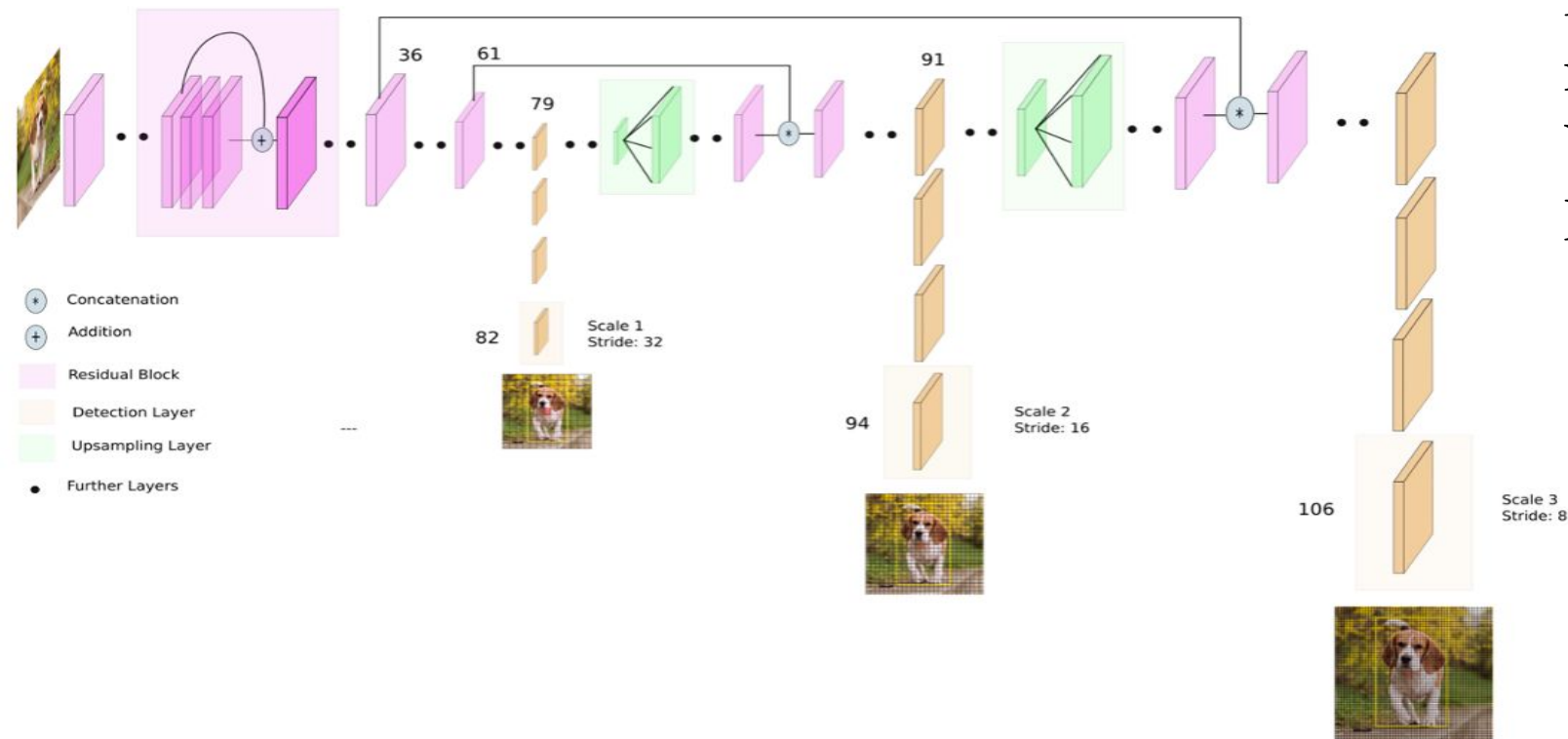
Etapa en la que se emplea el modelo obtenido para la detección de los objetivos en el conjunto de datos de validación.



El éxito de detección para las 200 imágenes de validación está en 99%. La probabilidad promedio del error de detección dada por el algoritmo es de 0.001.

Comentarios finales

Se empleó una segunda red neuronal: *You Only Look Once* versiones YOLOv1, YOLOv2 y YOLOv3. Al igual que Mask RCNN, YOLO una red neuronal convolucional.



Arquitectura de YOLOv3

El sistema operativo Windows resulto incompatible con YOLOv3 (diseñado para Linux).

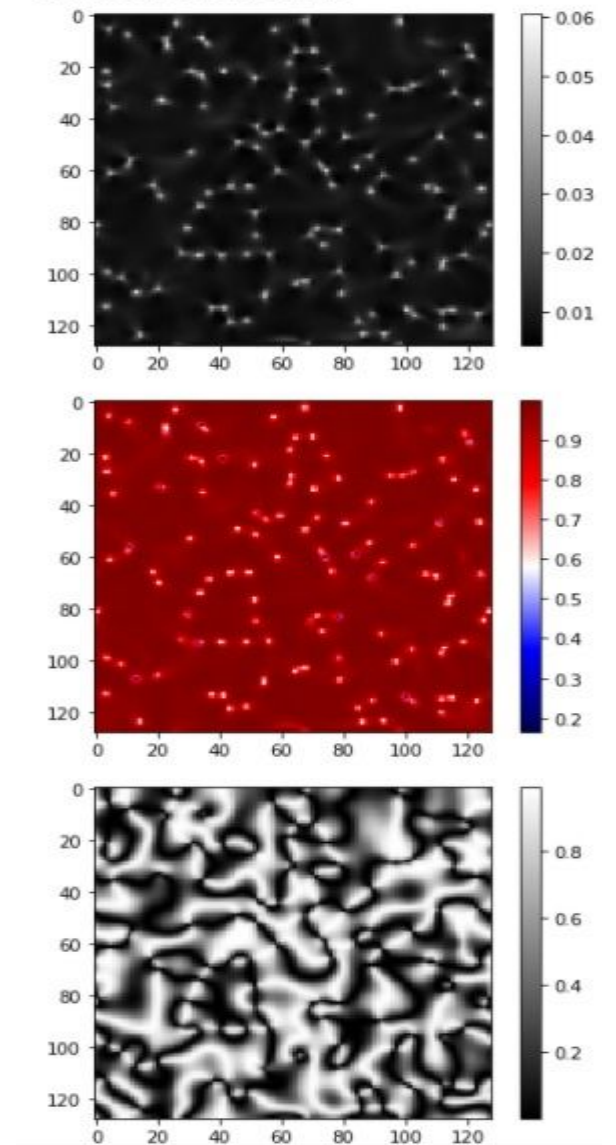
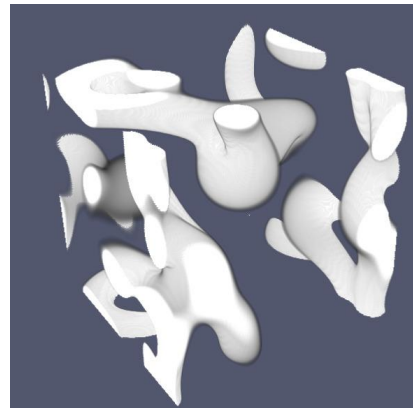
YOLOv1 y YOLOv2 tuvieron un bajo índice de detección. Debido a los problemas encontrados a la hora de efectuar la implementación de YOLOv3 aún no se han obtenido resultados satisfactorios con este método.

Conclusiones

- El resultado obtenido en la búsqueda de una técnica de inteligencia artificial para la detección de defectos topológicos en cristales líquidos fue exitoso: se seleccionaron dos métodos de aprendizaje automático de los cuales uno dio resultados satisfactorios.
- Contamos con suficiente evidencia de que Mask RCNN presenta la suficiente robustez frente al problema de detección presentado.
- La implementación de YOLOv3 en el análisis de nuestro sistema aún está en período de ajuste, específicamente la parte del entrenamiento.

Futuras implementaciones

- Para el Proyecto Terminal II se tiene pensado extender el método aquí estudiado para el caso de defectos topológicos puntuales correspondientes al parámetro de orden tensorial $\mathbf{Q} = S(\mathbf{nn}-\mathbf{I}/2)$.
- También se pretende intentar extender el método de detección al caso de 3D



¡Gracias!