



Proyecto terminal II

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

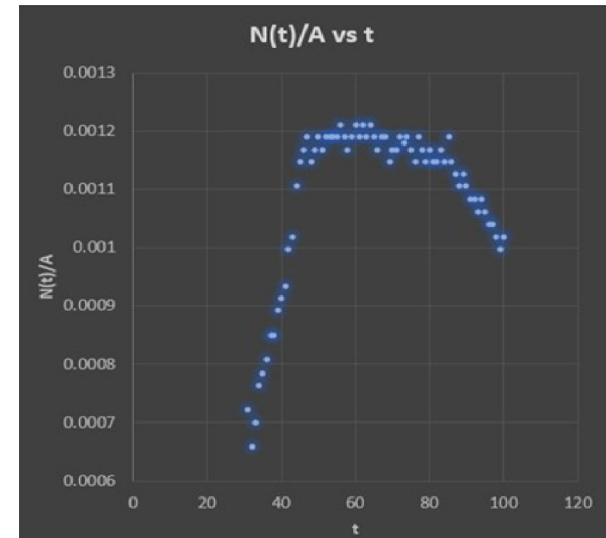
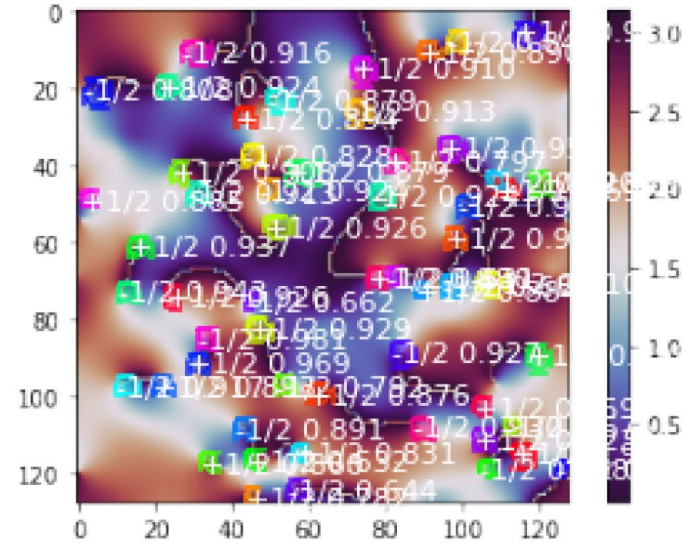
Universidad Autónoma Metropolitana

Unidad Iztapalapa

17 de junio 2021

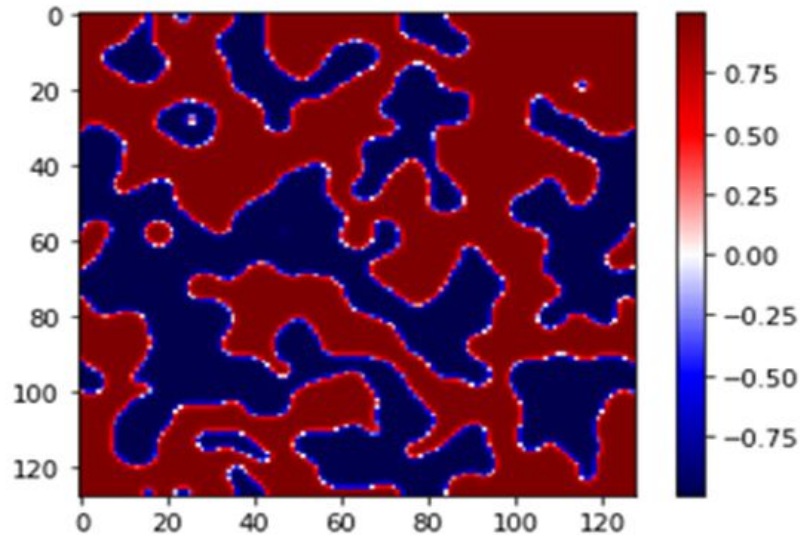
Contenido

- Antecedentes.
- Cristales líquidos.
 - Defectos topológicos en nemáticos.
 - Carga topológica.
- Retos en la identificación de defectos.
 - Redes neuronales como un método alternativo de detección.
- Objetivos del proyecto
- Metodología.
 - Redes neuronales artificiales.
 - Implementación y arquitectura de la red neuronal.
- Resultados.
- Comentarios finales.
- Conclusiones.

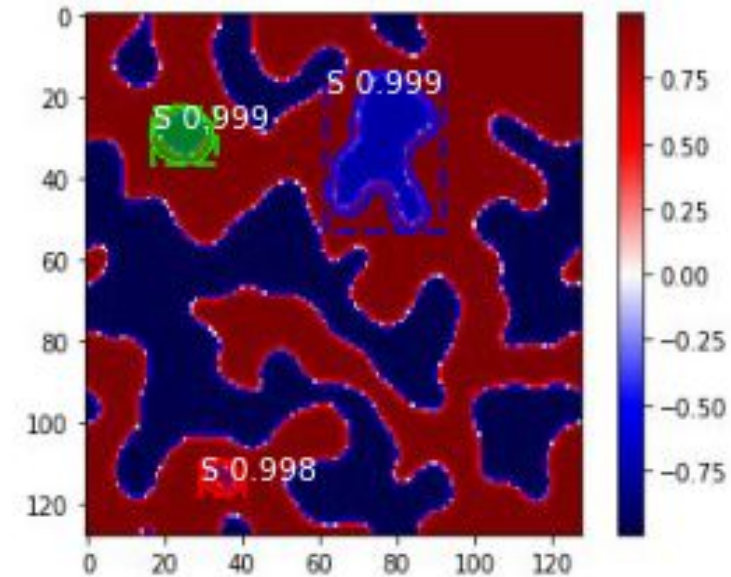


Antecedentes

El objetivo en la primera parte de este proyecto fue realizar una 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. Los datos fueron obtenidos de la solución de ecuaciones dinámicas de medio continuo [1].



La detección se realizó en 200 imágenes.



El éxito de detección para las 200 imágenes de validación fue del 99%.

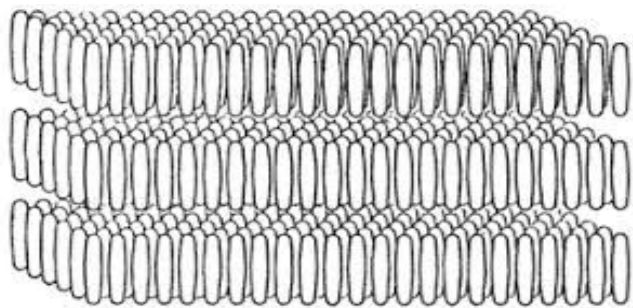
[1] Segura-Fernández FG, Serrato-García EF, Flores-Calderón JE and Guzmán O (2021) Dynamics of Nanoparticle Self-Assembly by Liquid Crystal Sorting in Two Dimensions. Front. Phys. 9:636288. doi: 10.3389/fphy.2021.636288.

El modelo utilizado para realizar las detecciones fue Mask R-CNN, una red neuronal convolucional.

Del uso de este modelo se pudo concluir que se contaba con suficiente evidencia de que Mask R-CNN presentaba suficiente robustez frente al problema de detección presentado.

Cristales líquidos.

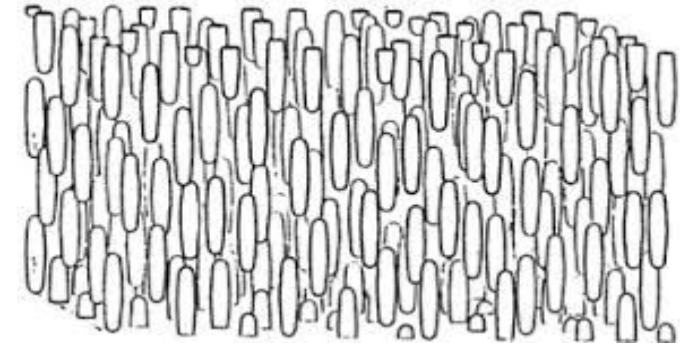
Los cristales líquidos son un estado de agregación de la materia. Exhiben algunos comportamientos intermedios de las fases sólida y líquida.



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.

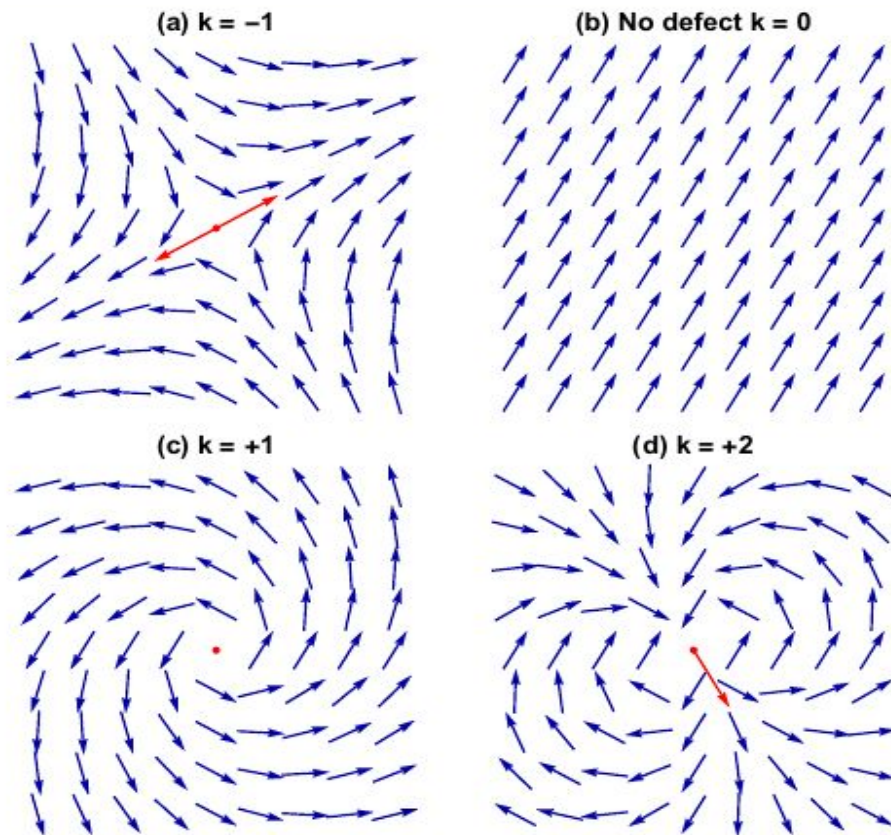
Ejemplos caracterizados por su ordenamiento posicional:

Nemáticos: tienen orientaciones definidas, pero no las posiciones.



Defectos topológicos en nemáticos.

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 [1].

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

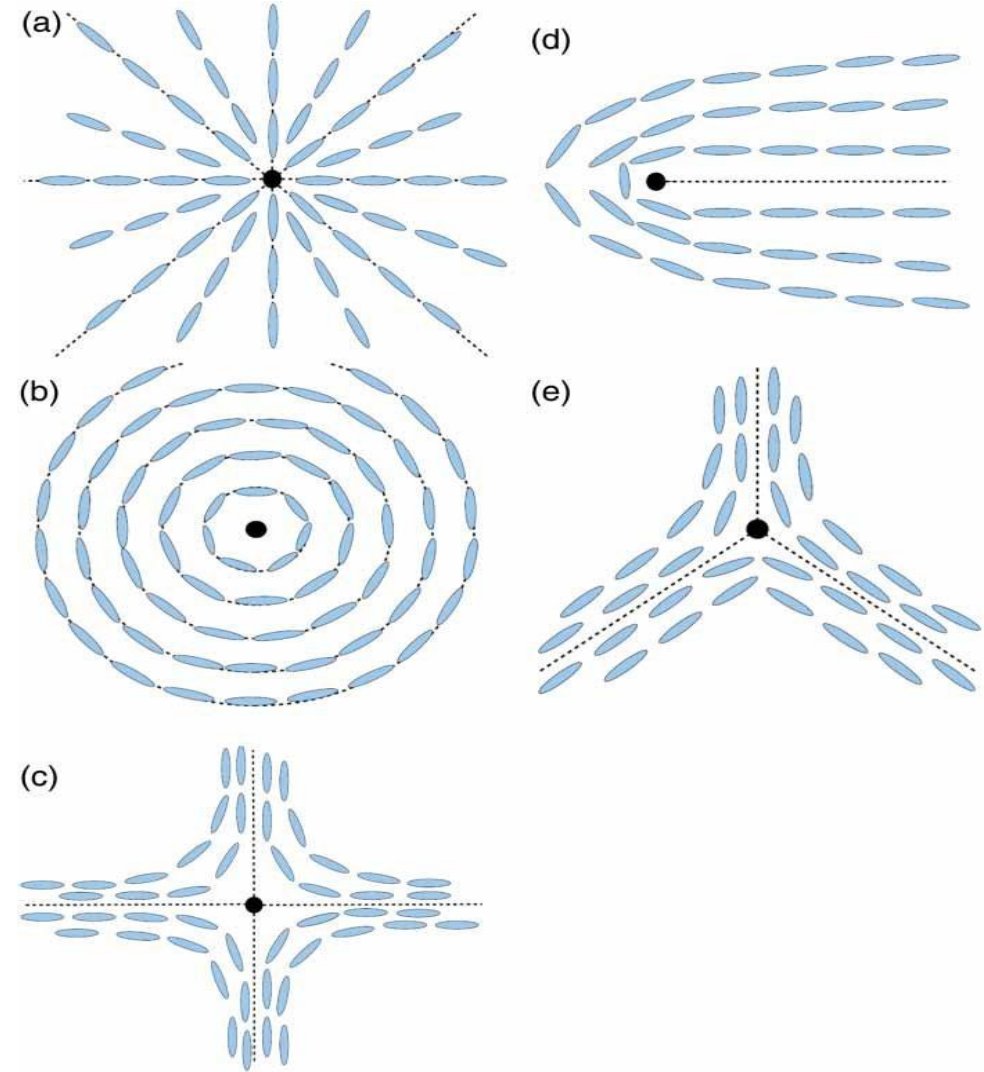
[1] Xingzhou Tang y Jonathan V. Selinger. Orientation of topological defects in 2D nematic liquid crystals. Royal society of chemistry (2017).

Carga topológica

En cada defecto, hay una carga topológica asociada, definida como el número de veces que el campo vectorial se enrolla alrededor de un bucle que rodea el defecto en sentido contrario a las agujas del reloj.

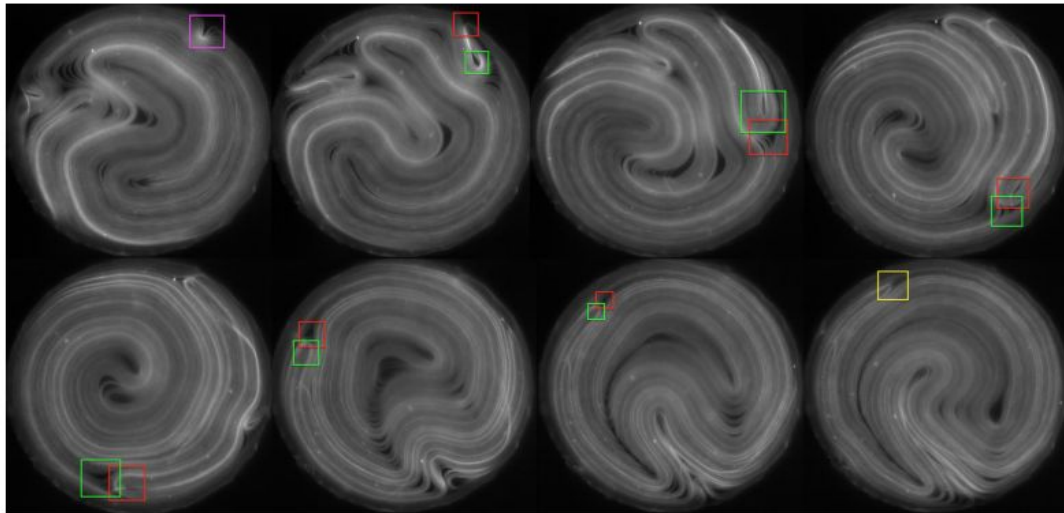
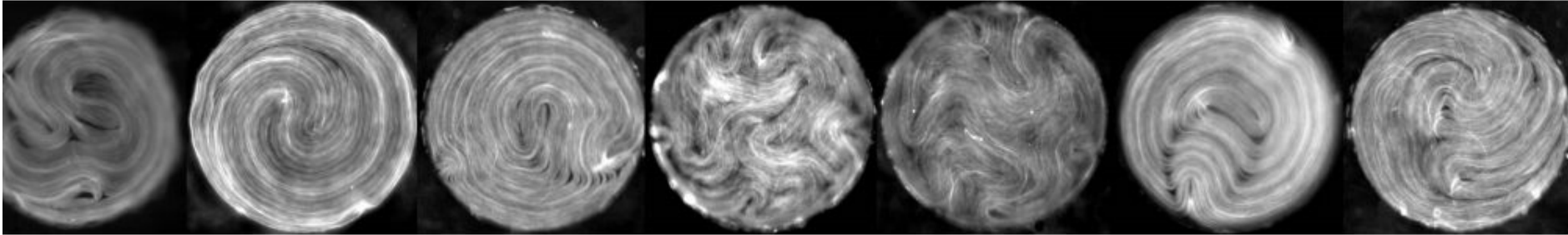
Por ejemplo, en (a) se tiene carga topológica $+1$, de manera similar en (b) y (c) se tienen cargas topológicas $+1$ y -1 , respectivamente.

En los cristales líquidos existen defectos de carga topológica $+1/2$ (d) y $-1/2$ (e). Estos fueron los estudiados en este trabajo.



G. Foffano, J.S. Lintuvuori, A. Tiribocchi & D. Marenduzzo. [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).

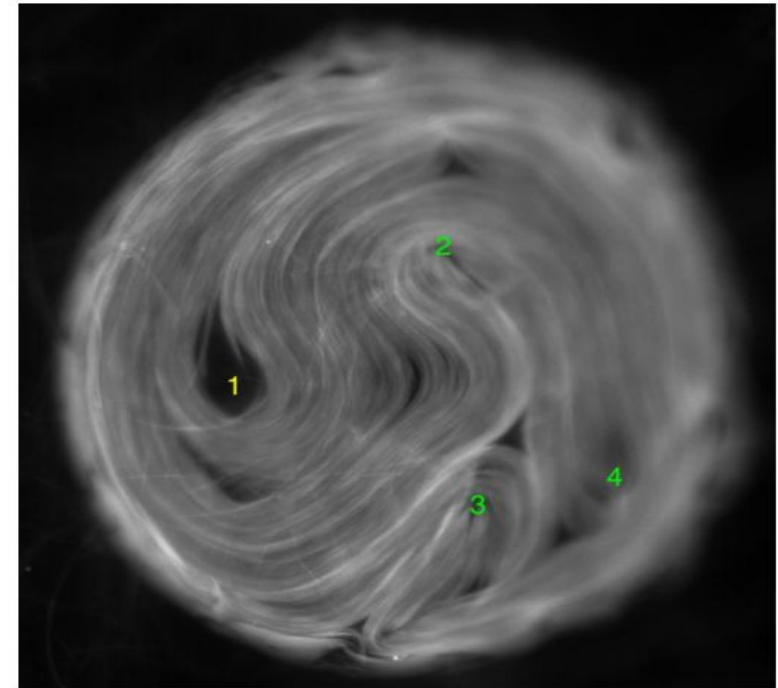
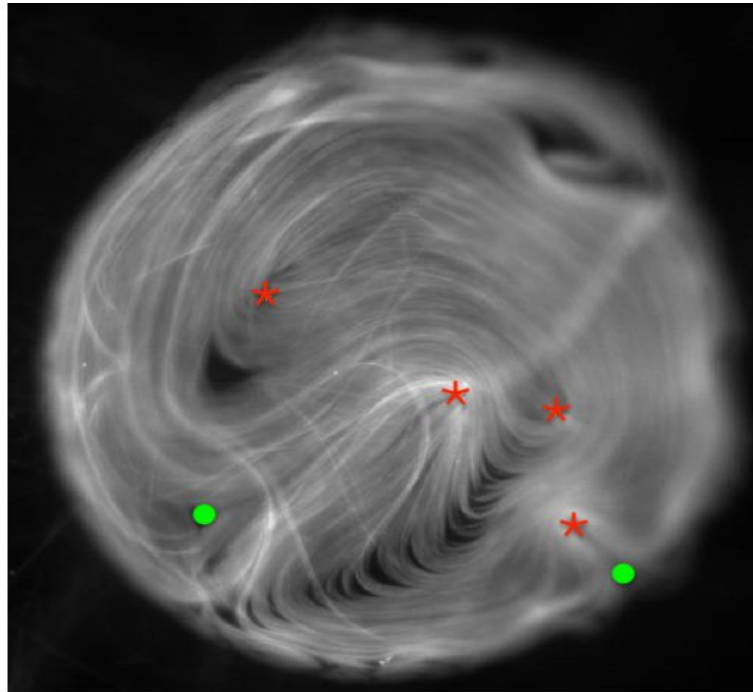
Ruoshi Liu, Michael Norton, Seth Fraden, Pengyu Hong [3]

[3] 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).

Redes neuronales como un método alternativo de detección

Las redes neuronales surgen del 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.

(Izquierda: muestra con $+1/2$ y $-1/2$ defectos etiquetados; Derecha: muestra que contiene $+1/2$ defectos con 2 configuraciones y tamaños drásticamente diferentes). [3]

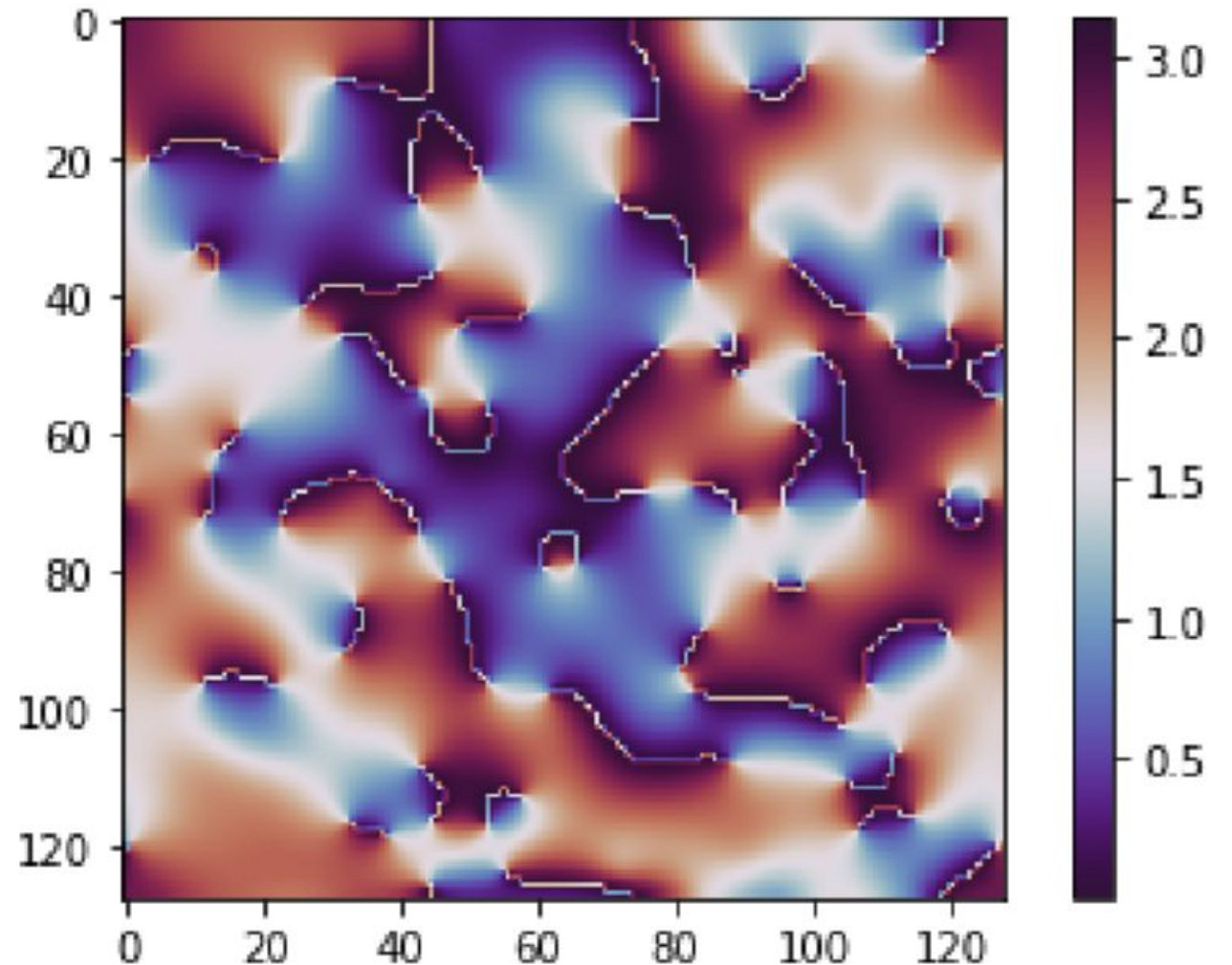


Objetivos del proyecto

- Realizar detección sobre los defectos topológicos en simulaciones de medio continuo tomando en cuenta la carga topológica, mediante la mejora del modelo estudiado en la parte I de este proyecto.
- Llevar a cabo un análisis de los datos obtenidos de la detección mediante el algoritmo empleado .

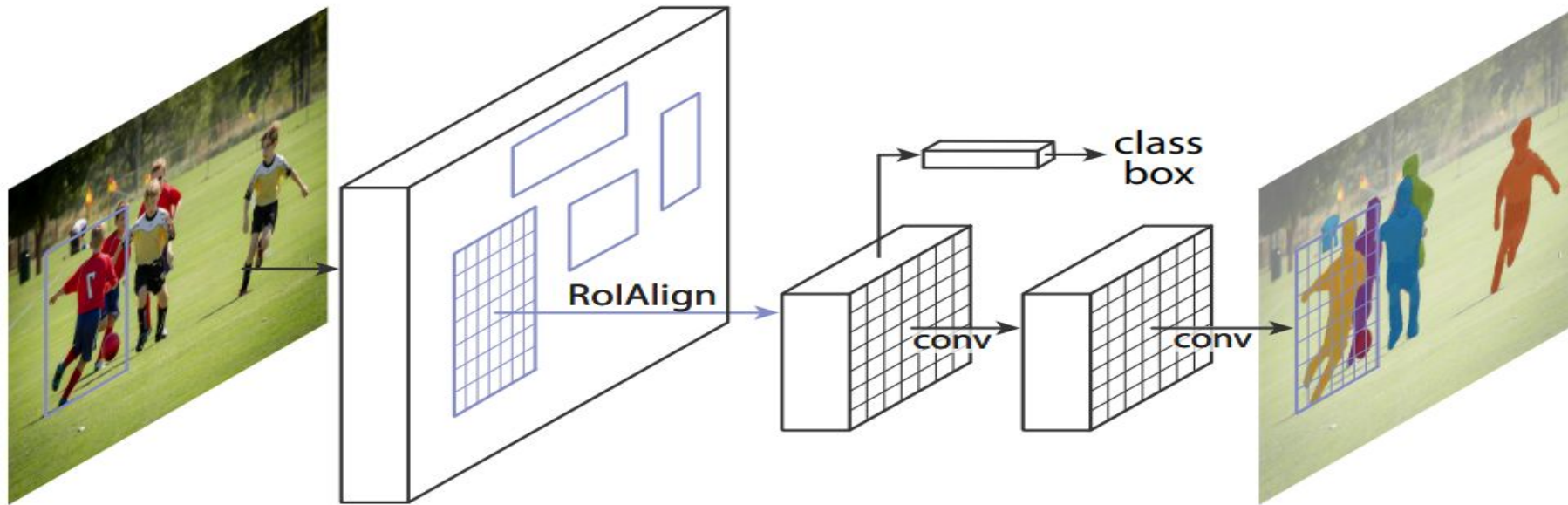
Objetivos de detección

La detección de los defectos topológicos y su carga se hizo en la simulación de la evolución temporal de la orientación del director $\theta(\mathbf{x})$, para el parámetro de movilidad relativo entre las nanopartículas y el cristal líquido, $R = 0,1$, en una mezcla de nanopartícula-mesógeno. Obtenida mediante solución numérica de ecuaciones dinámicas de medio continuo [1].



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**).



[4] Kaiming He, Georgia Gkioxari, Piotr, Ross Girshick: “Mask R-CNN”, 2017;
[<http://arxiv.org/abs/1703.06870> arXiv:1703.06870].

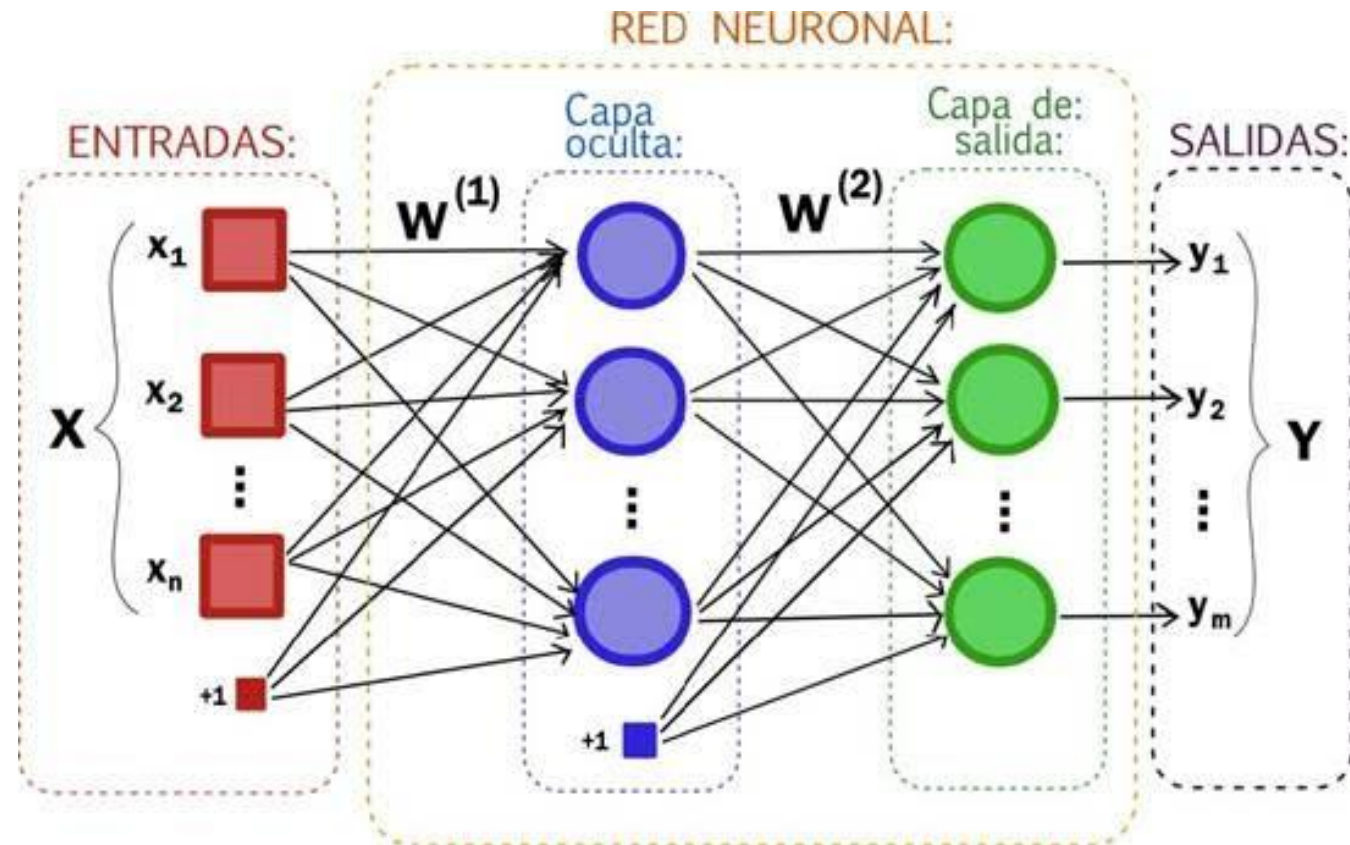
Metodología

- Redes neuronales artificiales.
- Implementación y arquitectura de la red neuronal.

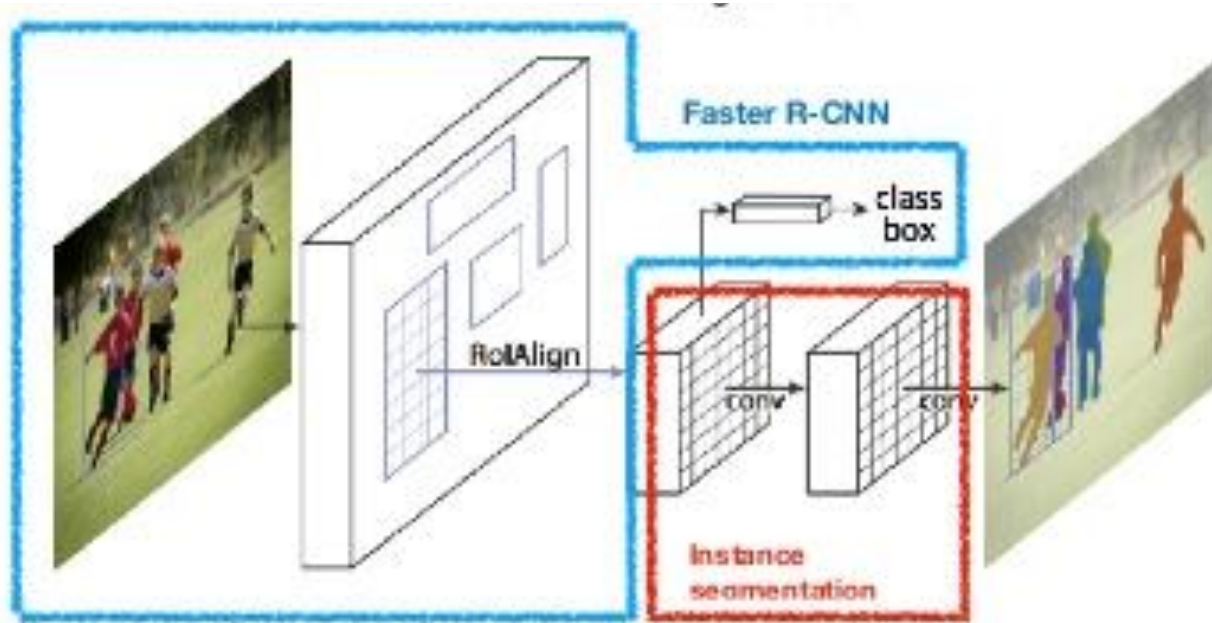
Redes Neuronales Artificiales

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

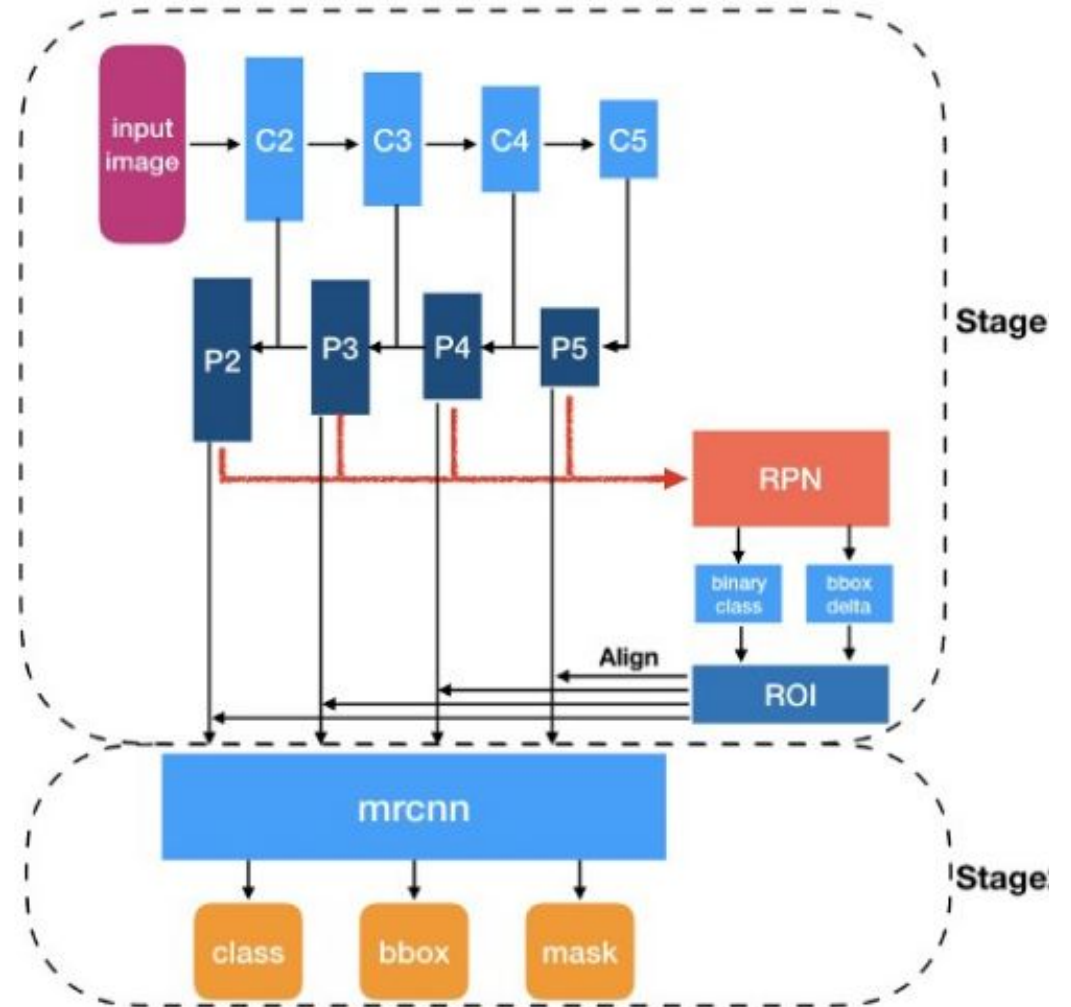
Estructura típica de una red neuronal artificial.



Implementación y arquitectura de la red

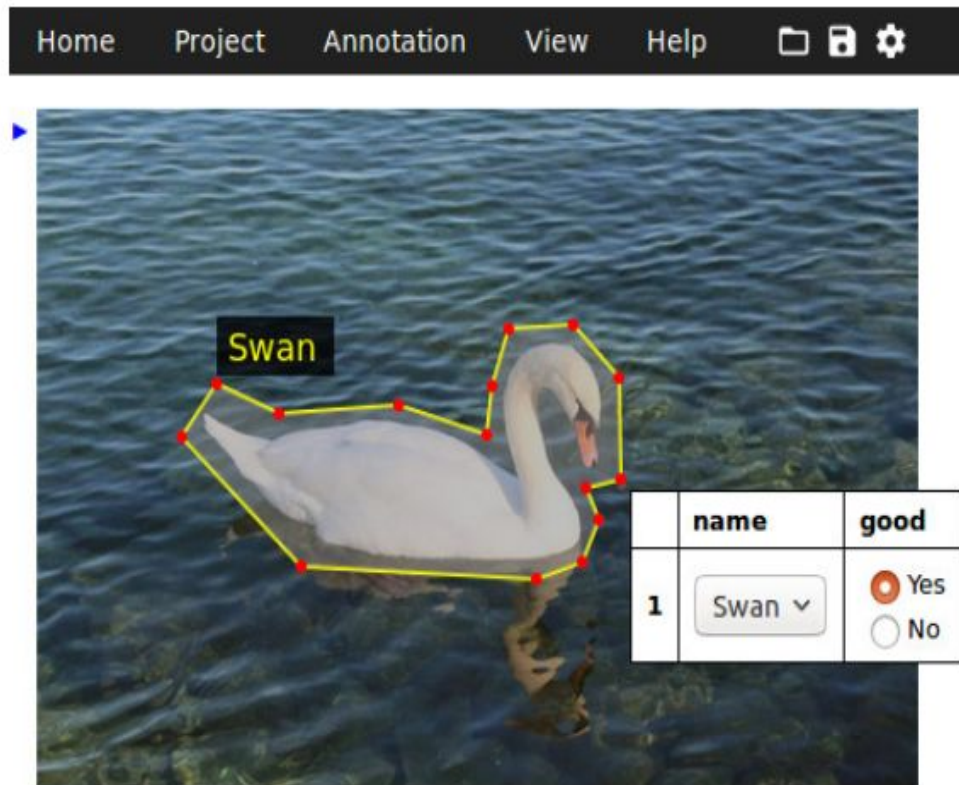


Estructura de Mask R-CNN.



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.



Basic image Annotation

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 etiquetaron a los defectos con el signo de su carga $+1/2$ y $-1/2$.



Visualización del etiquetado para la imagen 70.

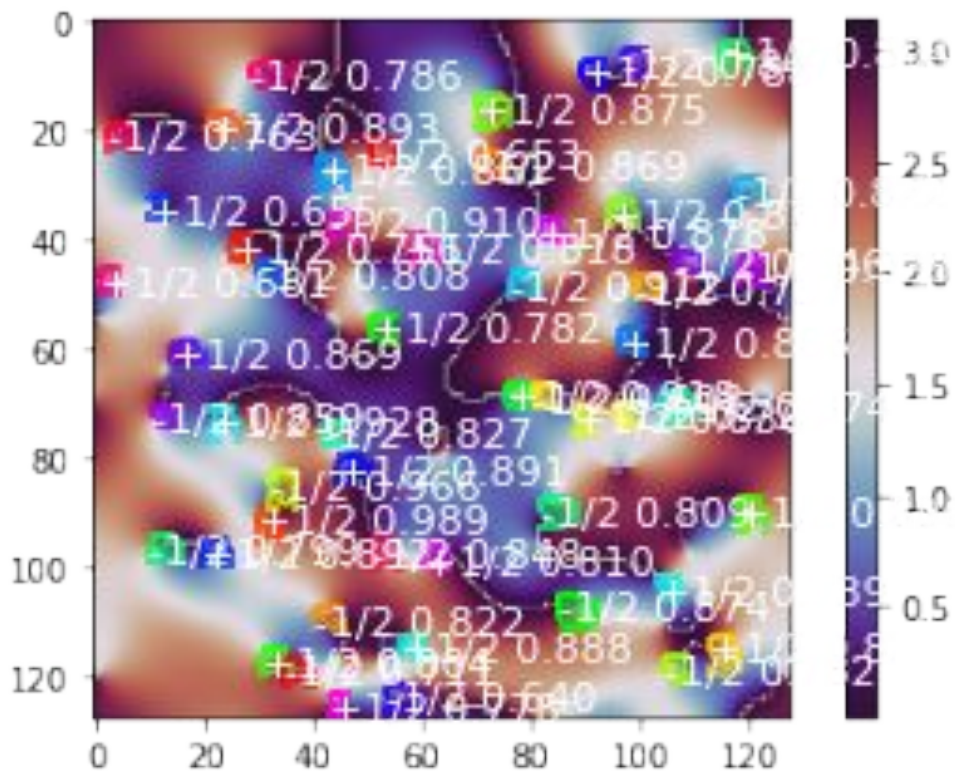
Resultados del entrenamiento

El tiempo promedio de entrenamiento en Colab para 10 ciclos de fue aproximadamente de 158 segundos.

```
Cuaderno
/usr/local/lib/python3.7/dist-packages/tensorflow
"shape. This may consume a large amount of mem
500/500 [=====] - ETA:
warnings.warn("`Model.state_updates` will be r
500/500 [=====] - 165s
Epoch 3/10
500/500 [=====] - 162s
Epoch 4/10
500/500 [=====] - 161s
Epoch 5/10
500/500 [=====] - 159s
Epoch 6/10
500/500 [=====] - 157s
Epoch 7/10
500/500 [=====] - 157s
Epoch 8/10
500/500 [=====] - 157s
Epoch 9/10
500/500 [=====] - 156s
Epoch 10/10
500/500 [=====] - 154s
```


Resultados de la detección

Se empleó el modelo obtenido en la etapa 10 de entrenamiento, para realizar la detección de los objetivos, en las imágenes 30 a 100.



Detección realizada en la imagen 95.

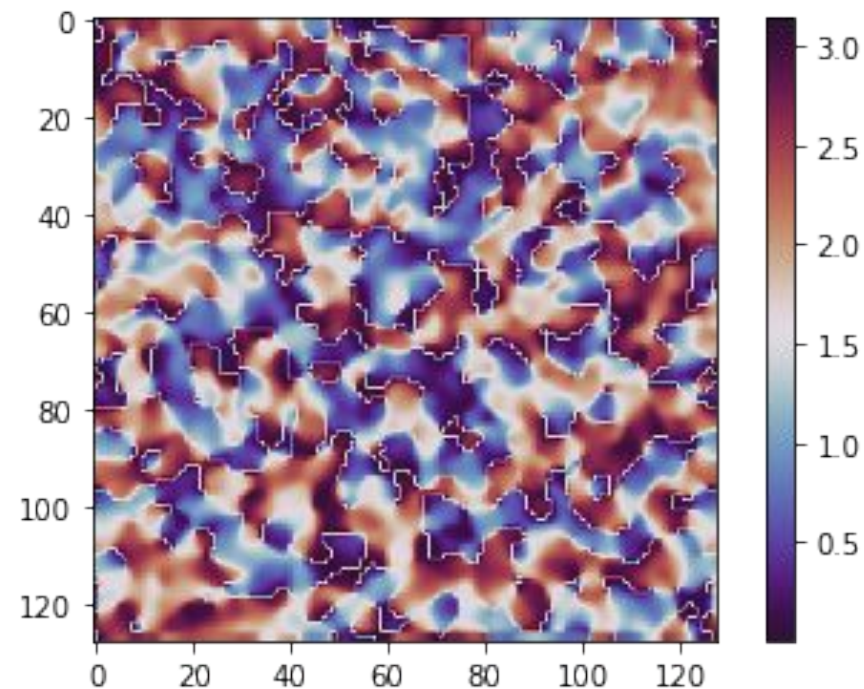
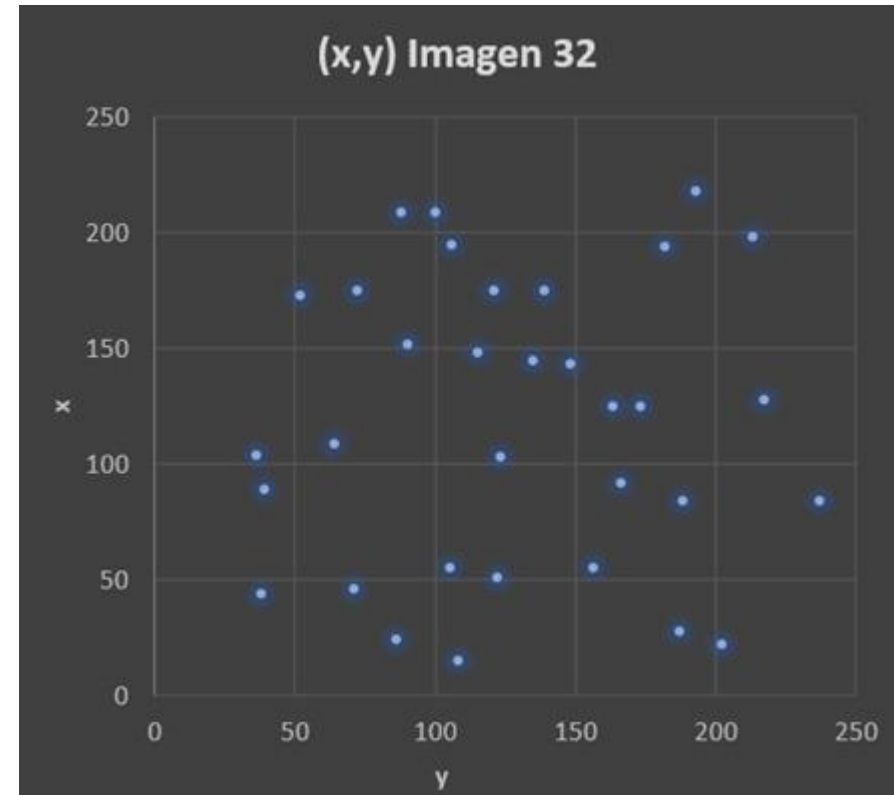
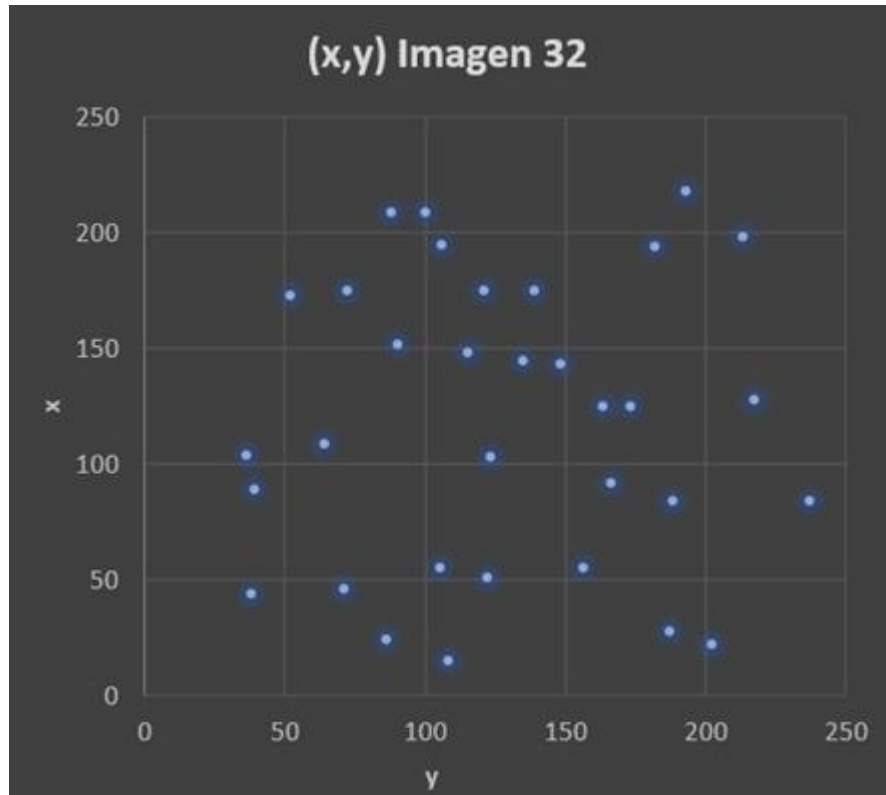


Imagen 10.

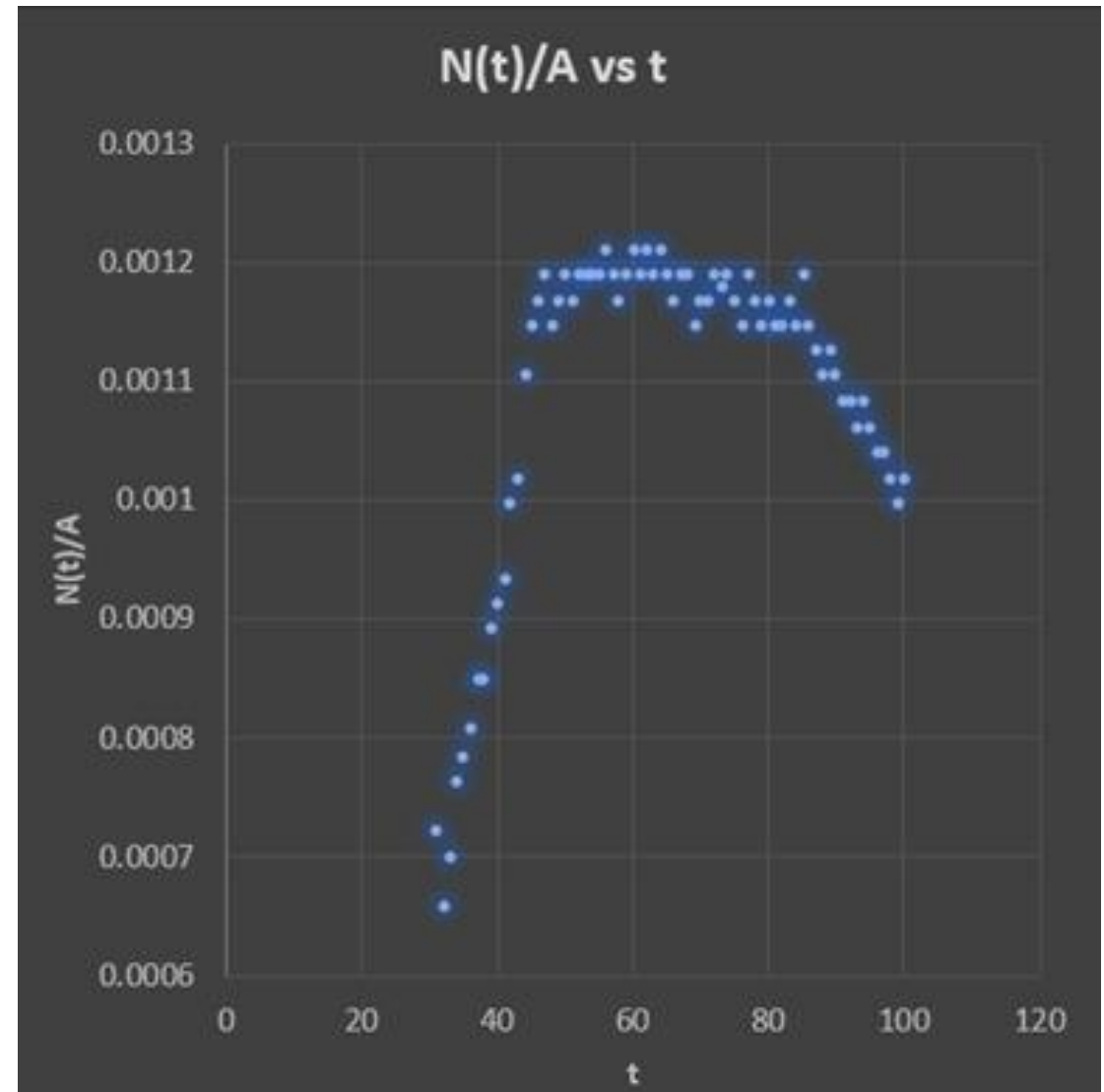
Análisis de los datos



Con la obtención de coordenadas de los defectos topológicos en cada imagen generadas con el algoritmo se pueden graficar la distribuciones espaciales de los defectos topológicos para cada imagen.

Número de defectos topológicos en el tiempo $N(t)$.

Para obtener el comportamiento de la densidad de defectos se graficó la densidad $\rho(t) = N(t)/A$, con respecto al número de pasos de la simulación (30-100).



Dinámica reportada de los defectos topológicos

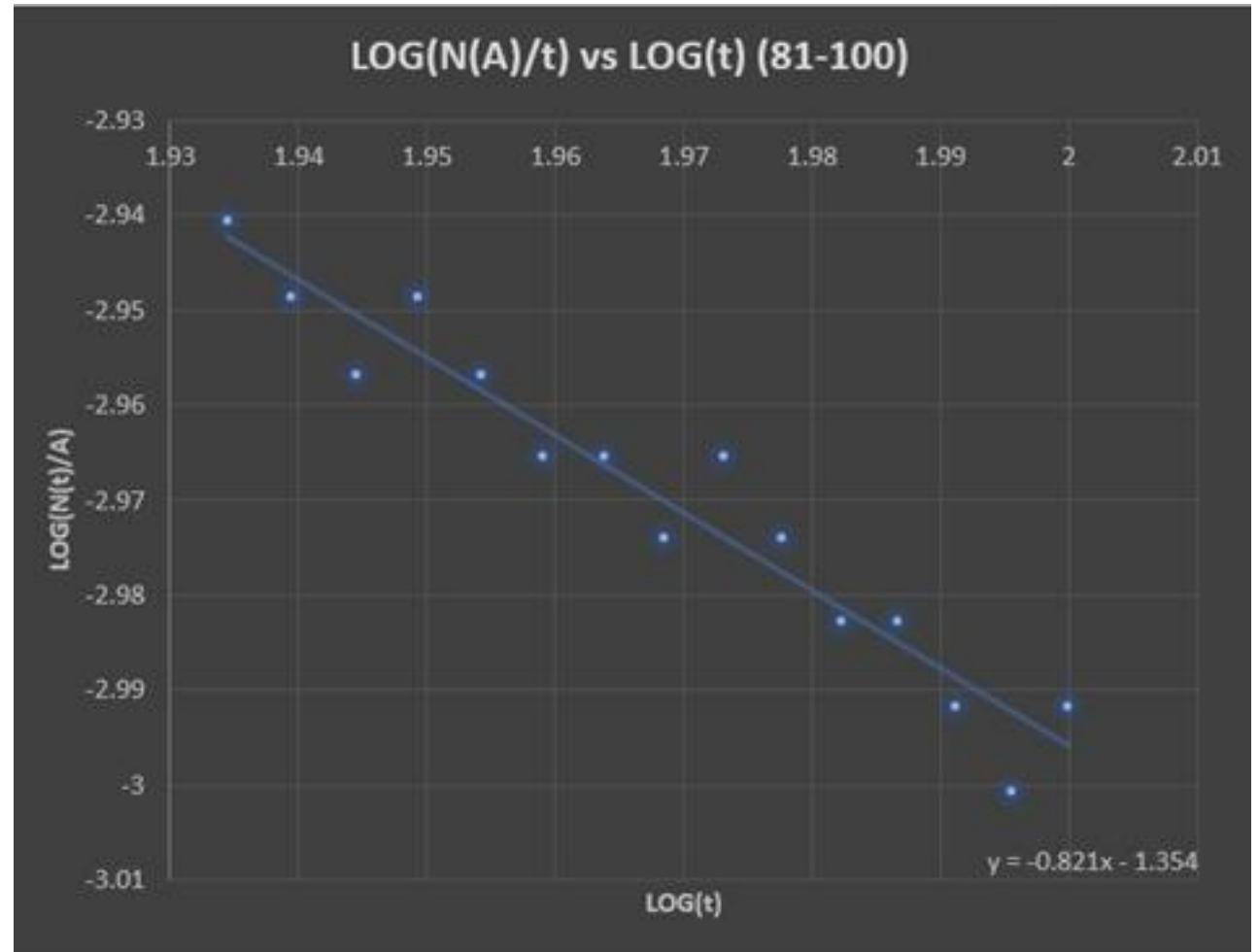
En una revisión bibliográfica sobre la dinámica de los defectos topológicos [5], se encontró que el comportamiento teórico esperado y experimentalmente confirmado de la densidad como función del tiempo en 2D es $\rho(t) \propto t^{-1}$.

Lo que, en una escala logarítmica, para los datos obtenidos de $\rho(t)$, significaría una pendiente de -1 en la ecuación de su ajuste lineal.

[5] Harth K and Stannarius R (2020) Topological Point Defects of Liquid Crystals in Quasi-Two-Dimensional Geometries. *Front. Phys.* 8:112. doi: 10.3389/fphy.2020.00112

Ajuste logarítmico para los pasos 81 a 100.

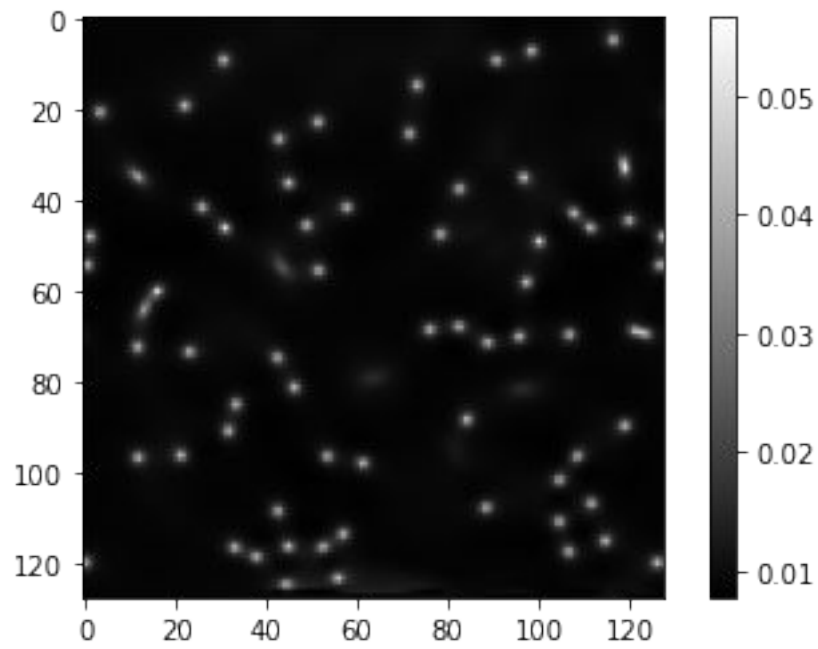
Debido a lo anterior, se analizaron los datos en la última región de la curva. La pendiente resultante de los datos en escala logarítmica fue de -0.821 . La pendiente obtenida es cercana al valor reportado en [5], lo cual es esperable dado que la simulación no fue muy larga.



Datos ajustados a un modelo lineal que corresponden a la cantidad de defectos topológicos detectados en los pasos 81 a 100.

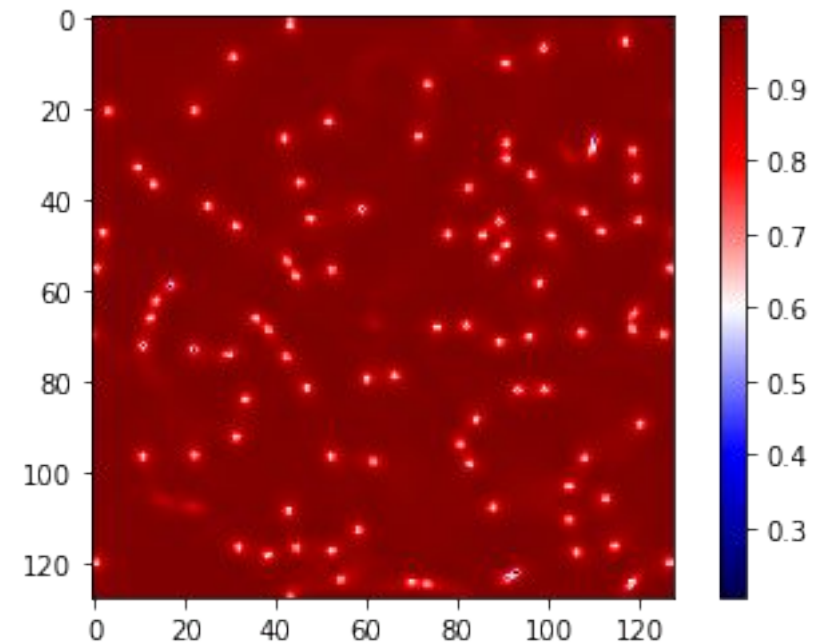
Comentarios finales

Inicialmente se intentó emplear un conjunto de datos constituido por los resultados de la simulación para el campo $C(X)$. Falló debido al bajo contraste y a la configuración de la red.



La concentración de las nanopartículas está dado por el campo $C(X)$.

El segundo conjunto de datos a analizar fue el campo de la evolución temporal de la nematización $S(X)$. Que, por medio del campo $\theta(X)$ se identificó la carga topológica y pudo realizarse el eti-quetado. El modelo falló en la identificación de un patrón diferenciable de las cargas topológicas.



Conclusiones

- Realizar una detección en simulaciones con un número de pasos más largos beneficiaría el estudio de la evolución de la concentración de los defectos topológicos, debido a que en tal caso la detección se realizaría en regiones con poco ruido, obteniéndose una mejor detección.
- Con el modelo neuronal empleado se pueden obtener datos cercanos a los reportados en la literatura de una manera eficiente.

¡Gracias!