

## Entrega # 1

### Título del proyecto:

Identificación y caracterización de materiales 2D usando técnicas de Deep Learning

#### Estudiante 1:

Jhon Jader Caro Sanchez  
Jader.caro@udea.edu.co  
CC: 1.001.137.636

#### Estudiante 2:

Juan Pablo Gómez López  
juan.gomez148@udea.edu.co  
CC: 1.037.665.653

## 1. Contexto del problema

Los materiales bidimensionales (2D) son una clase de sólidos cristalinos que presentan una amplia gama de propiedades electrónicas de interés para aplicaciones en electrónica, almacenamiento de energía, catálisis e incluso medicina. Sin embargo, la obtención de estos no es una labor sencilla, pues requiere de un experto humano que seleccione de manera manual y usando un microscopio, las regiones de interés las cuáles se clasifican en tres: **Monolayer**, **Few Layer**, y **Bulk**. Cada región representa el grosor de la capa de la muestra. Debido a lo anterior, han surgido diversos intentos de automatizar el proceso de segmentación de imágenes para la identificación automática de los materiales 2D para reducir el tiempo requerido en la obtención de estos. El presente trabajo propone la construcción de un modelo de deep learning para la automatización del proceso de identificación de regiones de interés sobre imágenes obtenidas en el Laboratorio de Fotónica de la Universidad de Mackenzie, en Brasil.

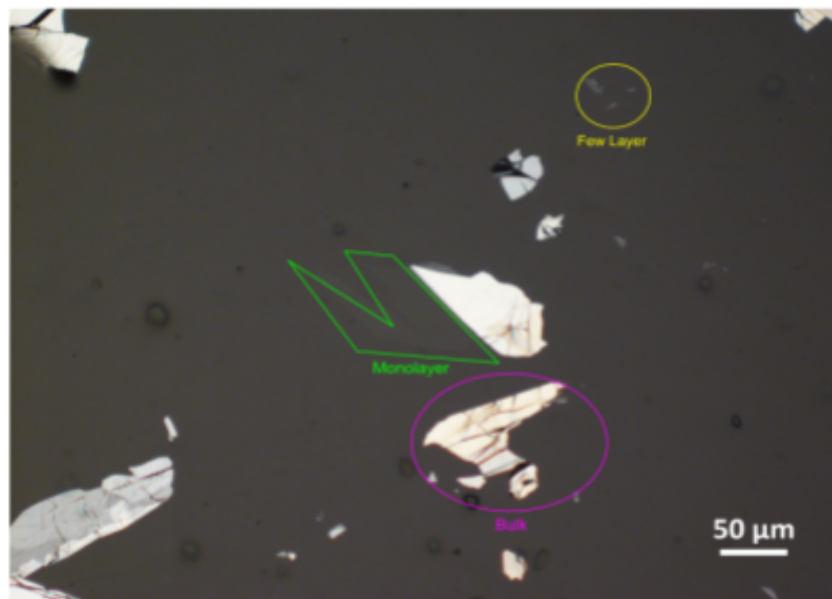


Imagen 1. Imagen de referencia donde se evidencian los tres tipos de clases de interés

El objetivo principal de este proyecto es desarrollar un modelo avanzado de deep learning capaz de realizar la segmentación precisa de imágenes que contienen materiales en distintas configuraciones de capas: *bulk*, *few layer* o *monolayer*. El modelo no solo será capaz de identificar y clasificar cada una de estas clases de manera individual, sino que también será lo suficientemente flexible y robusto como para reconocer y diferenciar la coexistencia de múltiples clases en una misma imagen. Esto implica que una sola imagen podría contener únicamente una de estas clases, dos de ellas, o incluso las tres al mismo tiempo, lo cual representa un desafío significativo en términos de segmentación y clasificación.

## 2. Dataset

El dataset se compone actualmente de 172 imágenes, de 2560x1920 píxeles. Se tienen “paquetes” de imágenes, que corresponden a una muestra, pero con cinco diferentes niveles de zoom: 5x, 10X, 20X, 50X y 100X. Son imágenes de un microscopio con una escala en un rango desde los 100 micrómetros hasta los 10 micrómetros.

De este conjunto de imágenes, las que se usarán principalmente son las que tienen un zoom de 20X, 50X y 100X, dando un total de 102 imágenes utilizables para entrenar y hacer pruebas. La Imagen 1 presenta una muestra a 20X ya segmentada.

Se espera obtener más muestras o utilizar técnicas de “data augmentation” para obtener nuevas imágenes para el proceso de entrenamiento de los modelos.

## 3. Métricas de desempeño

### a. Métricas de Machine Learning:

Para evaluar el desempeño del modelo de segmentación, utilizaremos varias métricas de clasificación, siendo la sensibilidad (recall) la que se priorizará, especialmente para la clase *monolayer* y, en menor medida, para la clase *few layer*. La justificación de esta prioridad radica en que, desde un punto de vista de negocio, la correcta identificación de la clase *monolayer* es de suma importancia. Esta capa es la más valiosa y crítica en términos de sus propiedades únicas y aplicaciones industriales o científicas. Fallar en identificar adecuadamente la presencia de *monolayer* podría tener repercusiones negativas en la toma de decisiones y en el desarrollo de productos basados en estos materiales.

Aunque las otras clases, como *few layer* y *bulk*, también tienen relevancia, el valor diferencial de la clase *monolayer* justifica la necesidad de priorizar su sensibilidad. De este modo, el modelo deberá ser capaz de detectar la presencia de esta clase aun cuando aparezca en pequeñas porciones de la imagen, reduciendo la cantidad de falsos negativos y maximizando la tasa de identificación correcta.

### b. Métricas de Negocio:

Desde la perspectiva del negocio, se ha establecido, en conjunto con el experto en la materia, que el umbral de éxito del modelo estará en una precisión mínima del 70%. Este valor fue determinado a partir de las necesidades prácticas del análisis y de los costos asociados a errores en la clasificación. Una precisión del 70% garantiza que el modelo no solo sea funcional, sino que también ofrezca un equilibrio adecuado entre rendimiento y costo-beneficio, siendo suficiente para la mayoría de las aplicaciones prácticas relacionadas con la caracterización de materiales.

## 4. Referencias y resultados previos

El desarrollo de nanomateriales 2D, como el grafeno y el disulfuro de molibdeno, ha captado gran interés científico debido a sus propiedades y aplicaciones. Sin embargo, su caracterización precisa sigue siendo un desafío. Hu et al. [1] propusieron un método de detección basado en imágenes monocromáticas y segmentación estadística. Lin et al. [2] utilizaron aprendizaje automático, combinando preprocesamiento de imágenes RGB y SVM para clasificar nanoestructuras. Sterbenz et al. [3] emplearon algoritmos no supervisados como Mean Shift y DBSCAN para segmentar materiales, complementando con Mezclas Gaussianas.

Recientemente, se ha dado mayor atención a las redes neuronales. Masubuchi et al. [4] implementaron Mask-RCNN y Saito et al. [5] Una arquitectura U-Net para segmentar nanoestructuras. Además, trabajos como los de Sánchez et al. [6] y Zichi et al. [7] Combinan técnicas de procesamiento de imágenes y aprendizaje profundo. Ramezani et al. [8] presentaron un modelo híbrido con Recursive Feature Pyramid (RFP) y Switchable Atrous Convolution (SAC) [9], destacando la tendencia hacia enfoques más sofisticados en la caracterización de nanomateriales 2D.

- [1] X. Hu, C. Qiu, y D. Liu, «Rapid thin-layer WS<sub>2</sub> detection based on monochromatic illumination photographs», *Nano Res.*, vol. 14, n.º 3, pp. 840-845, mar. 2021, doi: 10.1007/s12274-020-3122-0.
- [2] X. Lin *et al.*, «Intelligent identification of two-dimensional nanostructures by machine-learning optical microscopy», *Nano Res.*, vol. 11, n.º 12, pp. 6316-6324, dic. 2018, doi: 10.1007/s12274-018-2155-0.
- [3] R. M. Sterbenz, K. L. Haley, y J. O. Island, «Universal image segmentation for optical identification of 2D materials», *Sci. Rep.*, vol. 11, n.º 1, p. 5808, mar. 2021, doi: 10.1038/s41598-021-85159-9.
- [4] S. Masubuchi *et al.*, «Deep-learning-based image segmentation integrated with optical microscopy for automatically searching for two-dimensional materials», *Npj 2D Mater. Appl.*, vol. 4, n.º 1, p. 3, mar. 2020, doi: 10.1038/s41699-020-0137-z.
- [5] Y. Saito *et al.*, «Deep-learning-based quality filtering of mechanically exfoliated 2D crystals», *Npj Comput. Mater.*, vol. 5, n.º 1, p. 124, dic. 2019, doi: 10.1038/s41524-019-0262-4.
- [6] J. Sanchez-Juarez, M. Granados-Baez, A. A. Aguilar-Lasserre, y J. Cardenas, «Automated system for the detection of 2D materials using digital image processing and deep learning», *Opt. Mater. Express*, vol. 12, n.º 5, p. 1856, may 2022, doi: 10.1364/OME.454314.
- [7] L. Zichi, T. Liu, E. Drueke, L. Zhao, y G. Xu, «Physically informed machine-learning algorithms for the identification of two-dimensional atomic crystals», *Sci. Rep.*, vol. 13, n.º 1, p. 6143, abr. 2023, doi: 10.1038/s41598-023-33298-6.
- [8] F. Ramezani *et al.*, «Automatic detection of multilayer hexagonal boron nitride in optical images using deep learning-based computer vision», *Sci. Rep.*, vol. 13, n.º 1, p. 1595, ene. 2023, doi: 10.1038/s41598-023-28664-3.
- [9] S. Qiao, L.-C. Chen, y A. Yuille, «DetectoRS: Detecting Objects with Recursive Feature Pyramid and Switchable Atrous Convolution», en *2021 IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, jun. 2021, pp. 10208-10219. doi: 10.1109/CVPR46437.2021.01008.