

**CARACTERIZACIÓN DE PATRONES GEOMÉTRICOS A PARTIR DE  
REPRESENTACIONES EMBEBIDAS EN IMÁGENES MICROSCÓPICAS DE  
NANOESPUMAS METÁLICAS COBRE-NÍQUEL**

**WILLIAM DAVID ROMERO SERRANO**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICOMECÁNICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA DE SISTEMAS E INFORMÁTICA  
BUCARAMANGA**

**2023**

**CARACTERIZACIÓN DE PATRONES GEOMÉTRICOS A PARTIR DE  
REPRESENTACIONES EMBEBIDAS EN IMÁGENES MICROSCÓPICAS DE  
NANOESPUMAS METÁLICAS COBRE-NÍQUEL**

**WILLIAM DAVID ROMERO SERRANO**

**Tesis presentada en cumplimiento de los requisitos para el grado de:  
Ingeniero de Sistemas**

**Director:**

**Fabio Martínez Carrillo**

**Doctor en Ingeniería de Sistemas y Computación**

**Codirector:**

**Cristian Camilo Viáfara**

**Doctor en Ingeniería Mecánica**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE INGENIERÍAS FÍSICOMECÁNICAS  
ESCUELA DE INGENIERÍA DE SISTEMAS E INFORMÁTICA  
BUCARAMANGA**

**2023**

## AGRADECIMIENTOS

Al profesor Fabio Martínez y al profesor Cristian Viáfara por su inmensa dedicación. Sin su apoyo y paciencia no podría haber llevado a término este proyecto. Sus consejos y ajustes emocionales han logrado convertirme en un ingeniero de sistemas más competente, un investigador más capaz y, lo más importante, una mejor persona.

Al grupo de investigación *BIVL<sup>2</sup>ab* por abrirme las puertas y brindarme no solo las herramientas necesarias para llevar a cabo esta investigación, sino también un equipo de personas maravillosas que me han orientado y aconsejado a lo largo de este camino.

A la escuela de ingeniería de sistemas y a su equipo de profesores y profesionales que han aportado su valioso grano de arena en mi camino como ingeniero de sistemas.

A la Universidad Industrial de Santander por el apoyo financiero (Proyecto 3733).

## **DEDICATORIA**

*A Dios por darme vida para seguir luchando por mis sueños.*

*A mi madre por su confianza y amor incondicional. Por ser mi ancla, mi principal soporte, y la persona mas importante en mi vida..*

*A mi familia por creer en mi, por apoyarnos en todas las circunstancias que han pasado y darnos la mano a mi mamá, a mi hermano y a mi, cuando nadie mas lo hizo.*

*Al profesor Fabio Martínez por sus ajustes emocionales, a Brayan, Aleja, Edgar, Franklin, Santi, Olmos, Guaya, Lina, Yesid, y todo el team BIVL<sup>2</sup>ab por su acompañamiento y consejos durante todo el proceso.*

*A mis amigos de toda una vida Patico, Niño, Gio, Pao, Buenito, Gimena, Dersiton, y Wilmer quienes han hecho todo este camino mas ameno de transitar, quienes siempre han estado ahí para escucharme y ayudarme a crecer como persona.*

*A todas las personas que han dejado un aporte, ya sea positivo o negativo en mi vida y me han ayudado a ser lo que soy, desde el agradecimiento y el perdón.*

*A todas las personas que luchan por construir un mejor país.*

**William David Romero Serrano.**

## CONTENIDO

	page
<b>INTRODUCCIÓN</b> . . . . .	<b>12</b>
<b>1. MARCO TEÓRICO</b> . . . . .	<b>17</b>
1.1. NANOESPUMAS METÁLICAS COBRE-NÍQUEL (CU-NÍ) . . . . .	17
1.2. ARQUITECTURAS PARA APRENDIZAJE DE DESCRIPTORES VISUALES . . . . .	18
1.2.1 Arquitecturas Discriminativas . . . . .	18
1.2.2 Arquitectura Codificador Automático . . . . .	20
1.3. REPRESENTACIÓN DE BAJA DIMENSIONALIDAD DE LOS EMBEBIDOS . . . . .	22
1.3.1 Análisis de Componentes Principales (PCA) . . . . .	22
1.3.2 Análisis Discriminativo Lineal (LDA) . . . . .	24
1.4. MODELOS DE EXPLICABILIDAD . . . . .	25
1.4.1 Mapas de Activaciones de Clases (CAM) . . . . .	26
1.4.2 Mapas de Activaciones de Clase Basados en Gradientes (Grad-CAM): . . . . .	26
<b>2. PROBLEMA DE INVESTIGACIÓN</b> . . . . .	<b>28</b>
<b>3. OBJETIVOS</b> . . . . .	<b>29</b>
<b>4. MÉTODO PROPUESTO</b> . . . . .	<b>30</b>
4.1. REPRESENTACIONES PROFUNDAS A PARTIR DE UN CODIFICADOR AUTOMÁTICO VARIACIONAL (VAE) . . . . .	30
4.1.1 Arquitectura de Codificación ( <i>Encoder</i> ) . . . . .	31
4.1.2 Arquitectura de Decodificación ( <i>Decoder</i> ) . . . . .	32
4.2. DESCRIPTORES LATENTES DE LAS NANOESPUMAS Y REPRESENTACIÓN EN BAJA DIMENSIOALIDAD . . . . .	34

4.2.1	Análisis por Componentes Principales (PCA)	34
4.2.2	Análisis Discriminativo Lineal (LDA)	35
4.3.	MAPAS DE EXPLICABILIDAD	35
<b>5.</b>	<b>DISEÑO EXPERIMENTAL</b>	<b>38</b>
5.1.	CONJUNTO DE DATOS	38
5.2.	CONFIGURACIÓN DE LA ARQUITECTURA	39
5.3.	VALIDACIÓN DE RESULTADOS	40
5.3.1	Distancias Entre los Vectores Embebidos	41
<b>6.</b>	<b>EVALUACIÓN Y RESULTADOS</b>	<b>44</b>
<b>7.</b>	<b>CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO</b>	<b>54</b>
	<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	<b>55</b>

## LISTA DE FIGURAS

	page
Figura 1. Ilustración esquemática de la síntesis de nanoespumas . . . . .	18
Figura 2. Arquitectura convencional Encoder-Decoder . . . . .	20
Figura 3. Ejemplo de implementación de PCA para reducción bidimensional. . . . .	23
Figura 4. Mapas de Activación de clases. . . . .	27
Figura 5. Metodología computacional propuesta . . . . .	31
Figura 6. Construcción del vector embebido $z$ . . . . .	33
Figura 7. Aplicación de Grad-CAM para un <i>Autoencoder</i> variacional . . . . .	36
Figura 8. Imágenes microscópicas de espumas metálicas nanoporosas Cobre-Níquel típicas. . . . .	38
Figura 9. Imágenes microscópicas de espumas metálicas nanoporosas Cobre-Níquel típicas después del procesamiento. . . . .	39
Figura 10. Representación gráfica de las métricas WSS y BSS para distancias entre conjuntos de datos . . . . .	42
Figura 11. Representaciones de vectores embebidos para el PCA . . . . .	46
Figura 12. Representaciones de los vectores embebidos para el LDA . . . . .	47
Figura 13. Cuantificación de distancias para el vector embebido de la varianza ( $\sigma$ ) . . . . .	48
Figura 14. Activaciones Grad-Cam para diferentes dimensiones del embebido $\mu$ para nanoespumas CuNi1. . . . .	50
Figura 15. Activaciones Grad-Cam para diferentes dimensiones del embebido $\mu$ para nanoespumas CuNi2. . . . .	51
Figura 16. Activaciones Grad-Cam para diferentes dimensiones del embebido $\mu$ para nanoespumas CuNi3. . . . .	52

Figura 17 Distribución sobre el espacio latente 2D del conjunto de vectores embebidos  
de la varianza para el conjunto de datos de prueba . . . . . 53

## LISTA DE TABLAS

	<b>page</b>
Tabla 1. Modelos de aprendizaje de máquina utilizados para la clasificación de vectores embebidos . . . . .	44

## ABSTRACT

**TITLE:** GEOMETRIC PATTERNS CHARACTERIZATION BASED ON EMBEDDED REPRESENTATIONS IN MICROSCOPIC IMAGES OF COPPER-NICKEL METALLIC NANOFOAMS \*

**AUTHOR:** WILLIAM DAVID ROMERO SERRANO \*\*

**KEYWORDS:** ELECTROCHEMICAL AND MECHANICAL PROPERTIES, METALLIC NANOFOAMS, AUTO-SUPERVISED ARCHITECTURES, DEEP REPRESENTATIONS, EMBEDDED VECTORS

**DESCRIPTION:** Water contamination by mercury is a severe global problem that causes important affectation on the environment and the public health system. The use of nanofoams porous structures has been identified as an efficient mechanism to purify mercury-contaminated water. Such nanofoams allow the transportation of fluids and contribute to chemical reactions for contaminating particle deposition. During the nanofoam design, the optimization of mechanical and electrochemical properties is carried out by geometrical pore characterization. This process is typically carried out from microscopic analysis, counting pores, and generating distribution over observed samples. Nonetheless, such analysis may be biased for human intervention and the geometrical study is reduced to some geometrical distribution properties. This work introduces a computational strategy to carry out a geometrical pore characterization and the corresponding microscopic structures for different nanofoam designs. For doing so, this work adjusted a variational autoencoder, that under a pretext task, allows learning embedding descriptors to represent the geometry of microscopic observations. In such a case, it was used a set of microscopic observations that correspond to Copper-Nickel (Cu-Ni) metallic nanofoams. The embedding vectors correspond to random values sampled from learned distributions, that represent complex relations related to geometrical material structure. These vectors were mapped to a low-dimensional space, showing capabilities to discriminate among different Copper-Nickel (Cu-Ni) nanofoam compositions. Besides, this work included an explainability mechanism that projects over input images the standing out structures that have major support to the embedding representation.

---

\* Research work

\*\* Faculty of Physics-Mechanics Engineering. School of Systems Engineering and Informatics. Advisor: Fabio Martínez Carrillo, PhD. Co-advisor: Cristian Viáfara, PhD.

## RESUMEN

**TÍTULO:** CARACTERIZACIÓN DE PATRONES GEOMÉTRICOS A PARTIR DE REPRESENTACIONES EM-BEBIDAS EN IMÁGENES MICROSCÓPICAS DE NANOESPUMAS METÁLICAS COBRE-NÍQUEL \*

**AUTOR:** WILLIAM DAVID ROMERO SERRANO \*\*

**PALABRAS CLAVE:** PROPIEDADES MECÁNICAS Y ELECTROQUÍMICAS, NANOESPUMAS METÁLICAS, ARQUITECTURAS AUTO-SUPERVISADAS, REPRESENTACIONES PROFUNDAS, VECTORES EMBEBIDOS.

**DESCRIPCIÓN:** La contaminación de agua por mercurio es un problema grave a nivel global por sus afectaciones al medio ambiente y al sistema de salud pública. El uso de nanoespumas con estructuras porosas ha sido identificado como un mecanismo eficaz para la purificación de agua contaminada con mercurio. Estas nanoespumas permiten el transporte de fluidos y contribuyen con reacciones químicas necesarias para la deposición de partículas contaminantes. Durante el diseño de nanoespumas, la optimización de propiedades mecánicas y electroquímicas se realiza mediante la caracterización geométrica de los poros. Generalmente, este proceso se lleva a cabo a partir de análisis de microscopía, de la cuantificación de poros y la construcción de distribuciones de las muestras analizadas. Sin embargo, estos análisis pueden estar sesgados por intervención humana, y además su estudio se reduce a la representación de un número limitado de distribuciones geométricas. Este trabajo introduce una estrategia computacional para realizar la caracterización geométrica de los poros y las estructuras microscópicas que representan diferentes diseños de nanoespumas. Para ello, se ajustó una representación de un *autoencoder* variacional, que bajo una tarea de pretexto, permite aprender descriptores embebidos que representan la geometría de las observaciones microscópicas. En este caso se utilizaron un conjunto de observaciones microscópicas de nanoespumas metálicas cobre-níquel (Cu-Ni). Los vectores embebidos corresponden a muestras de un conjunto de distribuciones normales aprendidas que representan características complejas relacionadas a la estructura geométrica del material. Estos vectores son mapeados a un espacio de baja dimensionalidad demostrando su capacidad para discriminar entre diferentes composiciones de nanoespumas. Además se estableció un mecanismo de explicabilidad que permite incidir en las imágenes de entrada para resaltar las estructuras que más aportan a la representación embebida.

---

\* Trabajo de investigación

\*\* Facultad de Ingenierías Físico-Mecánicas. Escuela de Ingeniería de Sistemas e Informática. Director: Fabio Martínez, Ph.D. Codirector: Cristian Viáfara, Ph.D.

## INTRODUCCIÓN

Industrias como la agrícola y la minería a pequeña escala (ASM por su sigla en inglés *Artisanal and Small-scale Mining*) contribuyen a la contaminación de cuerpos de agua por el uso de metales pesados, lo cual ocasiona daños severos al medio ambiente y a la salud pública de las zonas afectadas<sup>1 2</sup>. Gran parte de la contaminación está asociada con el uso de mercurio para la amalgamación de oro. Es por ello que se requieren mecanismos para la purificación de fuentes de agua<sup>1 3</sup>. Estos mecanismos deben considerar el contexto rural en el cual se desarrollan las industrias agrícolas y ASM, por lo cual, deben ser soluciones de fácil implementación y de bajo costo de desarrollo<sup>4 5</sup>.

Las nanoespumas metálicas han sido desarrolladas como una solución económica para la remoción de mercurio de agua contaminada. Estas nanoespumas presentan una alta porosidad que promueve un transporte rápido del agua contaminada a través del espacio vacío y una alta área superficial que aumenta la cantidad de puntos activos para que generen las

- 
- <sup>1</sup> J. MANTEY et al. “Mercury contamination of soil and water media from different illegal artisanal small-scale gold mining operations (galamsey)”. In: *Heliyon* 6.6 (2020), e04312. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e04312>.
  - <sup>2</sup> Farith A DIAZ; Lynn E KATZ, and Desmond F LAWLER. “Mercury pollution in Colombia: challenges to reduce the use of mercury in artisanal and small-scale gold mining in the light of the Minamata Convention”. In: *Water International* 45.7-8 (2020), pp. 730–745.
  - <sup>3</sup> Nicole M. SMITH et al. “Human health and safety in artisanal and small-scale mining: an integrated approach to risk mitigation”. In: *Journal of Cleaner Production* 129 (2016), pp. 43–52. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2016.04.124>.
  - <sup>4</sup> Asmita A. CHAVAN et al. “Elastomeric Nanocomposite Foams for the Removal of Heavy Metal Ions from Water”. In: *ACS Applied Materials & Interfaces* 7.27 (2015). PMID: 26133912, pp. 14778–14784. DOI: [10.1021/acsami.5b03003](https://doi.org/10.1021/acsami.5b03003). eprint: <https://doi.org/10.1021/acsami.5b03003>.
  - <sup>5</sup> Barbara GWOREK et al. “Mercury in Marine and Oceanic Waters—a Review”. In: *Water, Air, & Soil Pollution* 227.10 (Sept. 2016). DOI: [10.1007/s11270-016-3060-3](https://doi.org/10.1007/s11270-016-3060-3).

reacciones electroquímicas necesarias para la descontaminación del agua <sup>6</sup>. Sin embargo, el diseño y desarrollo de estas nanoespumas presentan un reto debido a los requerimientos de resistencia mecánica que deben cumplir las nanoespumas para soportar el esfuerzo debido al transporte de fluidos durante la remoción de los contaminantes <sup>7 8</sup>. También, algunas características estructurales como el tamaño, la forma y la distribución de los poros debe ser controlada para maximizar la velocidad de transporte de los contaminantes a través de la estructura 3D.

Es así, que el diseño de nanoespumas envuelve el análisis de la microestructura de las nanoespumas para determinar su rendimiento mecánico y electroquímico. Además, a partir de estos análisis, es posible determinar la relación entre las características estructurales, las capacidades mecánicas para soportar esfuerzos de erosión por flujo de agua y la capacidad para remover contaminantes. No obstante, este tipo de análisis requiere una caracterización microestructural exhaustiva de los materiales <sup>9 10</sup>. Este proceso necesita de medidas de

---

<sup>6</sup> François COEURET. "Ingeniería de los procesos electroquímicos, ¿ De dónde viene y en qué consiste?" In: *Educación Química* 18.2 (2007), pp. 120–127.

<sup>7</sup> DoHwan NAM et al. "Effects of (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> and BTA on the nanostructure of copper foam prepared by electrodeposition". In: *Electrochimica Acta* 56.25 (Oct. 2011), pp. 9397–9405. DOI: 10.1016/j.electacta.2011.08.025.

<sup>8</sup> H.-C. SHIN; J. DONG, and M. LIU. "Nanoporous Structures Prepared by an Electrochemical Deposition Process". In: *Advanced Materials* 15.19 (Oct. 2003), pp. 1610–1614. DOI: 10.1002/adma.200305160.

<sup>9</sup> Y REDA et al. "Electrochemical behavior of Ni–Cu foams fabricated by dynamic hydrogen bubble template electrodeposition used for energy applications". In: *Ain Shams Engineering Journal* 13.1 (2022), p. 101532.

<sup>10</sup> S EUGÉNIO et al. "Electrodeposition and characterization of nickel–copper metallic foams for application as electrodes for supercapacitors". In: *Journal of Applied Electrochemistry* 44 (2014), pp. 455–465.

características de poro o estructurales a partir del análisis de imágenes<sup>11 12 13</sup> y de pruebas de laboratorio destructivas<sup>14 15</sup>. Como consecuencia, este es un proceso subjetivo, tedioso y costoso, que puede llevar a análisis geométricos relativamente simplificados en el que se pierdan muchas relaciones complejas codificadas en las observaciones de imágenes microscópicas.

En la literatura, se han usado técnicas de visión por computador que permiten cuantificar propiedades geométricas de los materiales, evitando sesgos subjetivos de observación, y reduciendo costos asociados a la caracterización de los materiales porosos. Por ejemplo, Ching et al. estimó las propiedades mecánicas de muestras de espumas a partir del análisis de imágenes de microtomografía computarizada de (micro-CT)<sup>16</sup>. En estas secuencias se diseñaron descriptores de circularidad de poro y densidad relativa a partir de imágenes binarizadas, los cuales fueron validados con resultados de laboratorio. También, Ran Liu et al. demostró la existencia de una relación entre los parámetros geométricos y las propiedades mecánicas de nanoespumas metálicas, analizando propiedades geométricas

- 
- <sup>11</sup> Chang-Eun KIM; Raheleh M RAHIMI, and David F BAHR. “The structure and mechanical properties of Cu50Ni50 alloy nanofoams formed via polymeric templating”. In: *MRS Communications* 10.2 (2020), pp. 286–291.
- <sup>12</sup> Aliaa ABDELFAH et al. “Electrochemical characterization of electrodeposited Ni–Cu foams and their application as electrodes for supercapacitors”. In: *Frontiers in Mechanical Engineering* (2020), p. 35.
- <sup>13</sup> Francesco BRUN et al. “Pore3D: A software library for quantitative analysis of porous media”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 615.3 (2010), pp. 326–332.
- <sup>14</sup> Jammula KOTESWARARAO et al. “Estimation of structural and mechanical properties of Cadmium Sulfide/PVA nanocomposite films”. In: *Heliyon* 5.6 (2019), e01851.
- <sup>15</sup> Chang-Eun KIM et al. “Synthesis, microstructure, and mechanical properties of polycrystalline Cu nanofoam”. In: *MRS Advances* 3.8-9 (2018), pp. 469–475.
- <sup>16</sup> Sang-Yeop CHUNG et al. “Pore characteristics and their effects on the material properties of foamed concrete evaluated using micro-CT images and numerical approaches”. In: *Applied Sciences* 7.6 (2017), p. 550.

en imágenes binarizadas tomadas por microscopía electrónica de barrido (SEM por su sigla en inglés *Scanning Electron Microscopy*)<sup>17</sup>. Otros trabajos han correlacionado propiedades microestructurales con patrones en imágenes microscópicas a partir de representaciones profundas<sup>18</sup>. Por ejemplo, Hiraide et al<sup>19</sup>. propuso una metodología para predecir el módulo de Young de un polímero (parámetro que caracteriza el comportamiento de un material sometido a esfuerzos) a partir de observaciones de la microestructura. En este trabajo una red generativa adversaria (GAN) aprendió la distribución de la estructura a partir de un espacio latente, mientras una red neuronal convolucional (CNN) estimó el módulo relacionado a la microestructura.

En este proyecto se introduce una representación profunda que codifica patrones microscópicos en nanoespumas metálicas Cobre-Níquel, observados en imágenes de microscopía confocal a un nivel de resolución de 700x. Esta representación fue construida a partir de un codificador automático variacional y es capaz de describir características geométricas ocultas en vectores embebidos aprendidos a partir de una tarea de reconstrucción de imágenes. Para entrenar la representación profunda del codificador, un conjunto de imágenes de nanoespumas metálicas cobre-níquel con diferentes composiciones químicas y propiedades mecánicas son proyectadas a la arquitectura. Estas imágenes son proyectadas a un banco de filtros convolucionales y reducidas hasta un vector embebido que debería preservar las principales características de las imágenes de entrada. Después de esto, una parte decodificadora es entrenada para reconstruir las imágenes a partir del vector embebido. Una vez entrenados los vectores, proyectamos las imágenes y recuperamos vectores embebidos

---

<sup>17</sup> Ran LIU and Antonia ANTONIOU. "A relationship between the geometrical structure of a nanoporous metal foam and its modulus". In: *Acta Materialia* 61.7 (2013), pp. 2390–2402.

<sup>18</sup> Mengshu GE et al. "Deep learning analysis on microscopic imaging in materials science". In: *Materials Today Nano* 11 (2020), p. 100087.

<sup>19</sup> Kazuya HIRAIDE et al. "Application of deep learning to inverse design of phase separation structure in polymer alloy". In: *Computational Materials Science* 190 (2021), p. 110278.

que codifiquen relaciones ocultas entre el tamaño de poro y la estructura geométrica del material. Después, se usa el análisis discriminante lineal (LDA por su sigla en inglés *Linear Discriminant Analysis*) para reducir la dimensión de estos vectores y discriminar entre diferentes aleaciones de nanoespumas. En este trabajo validamos la capacidad de los descriptores geométricos de aportar vectores embebidos sobre un conjunto de observaciones capturadas de nanoespumas metálicas Cobre-Níquel.

## 1. MARCO TEÓRICO

### 1.1. NANOESPUMAS METÁLICAS COBRE-NÍQUEL (CU-NÍ)

Las nanoespumas metálicas Cobre-Níquel son materiales altamente porosos con alta capacidad para el transporte de fluidos y cuya estructura presenta una alta área superficial. Gracias al proceso electroquímico que se da entre el cobre y el mercurio y a su estructura porosa, este tipo de materiales son una gran alternativa para el tratamiento de aguas contaminadas por este metal pesado<sup>20 21 22</sup>. Adicionalmente, debido a la abundancia del cobre y su bajo precio hacen de esta alternativa una opción importante a considerar.

La figura 1 muestra la síntesis de estas nanoespumas, la cual se lleva a cabo a partir de un método denominado plantilla dinámica de burbujas de hidrógeno (DHBT por su sigla en inglés *Dynamic Hydrogen Bubble Template*)<sup>12 23</sup>, en el cual se suministra una densidad de corriente en un electrodo de cobre que se encuentra sumergido en una solución acuosa con iones metálicos  $M^{n+}$  y protones de Hidrógeno  $H^+$ <sup>24</sup>. Esto ocasiona que los iones metálicos en la solución se adhieran a la superficie del electrodo, mientras que los protones

---

<sup>20</sup> O SURUCU. “Electrochemical removal and simultaneous sensing of mercury with inductively coupled plasma-mass spectrometry from drinking water”. In: *Materials Today Chemistry* 23 (2022), p. 100639.

<sup>21</sup> Thien-Khanh TRAN et al. “Electrochemical treatment of wastewater: Selectivity of the heavy metals removal process”. In: *International Journal of hydrogen energy* 42.45 (2017), pp. 27741–27748.

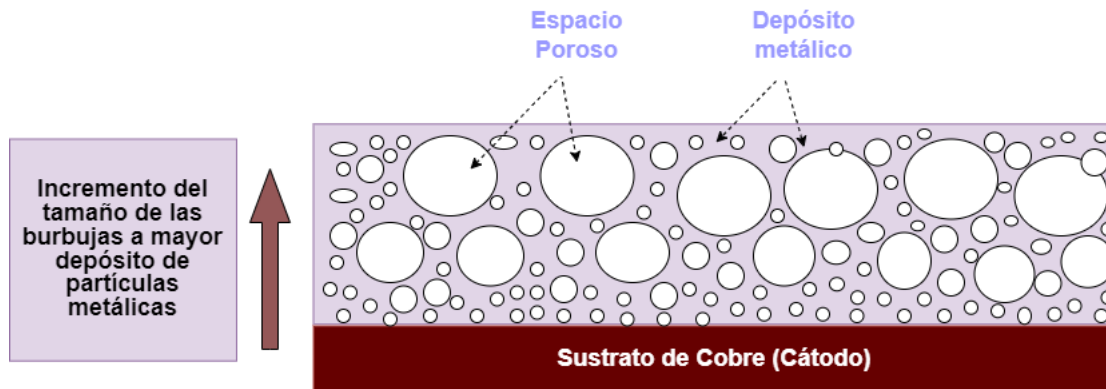
<sup>22</sup> Mattias KO BENGTTSSON; Cristian TUNSU, and Bjorn WICKMAN. “Decontamination of mercury-containing aqueous streams by electrochemical alloy formation on copper”. In: *Industrial & Engineering Chemistry Research* 58.21 (2019), pp. 9166–9172.

<sup>23</sup> R ABDEL-KARIM et al. “Electrochemical performance of porous Ni-Cu anodes for direct methanol fuel cells”. In: *Int. J. Electrochem. Sci* 14 (2019), pp. 3035–3054.

<sup>24</sup> Daniel OPPEDISANO. “Electrodeposited metal nanostructures fabricated by dynamic hydrogen bubble templating”. PhD thesis. RMIT University, 2016.

$H^+$  generan burbujas sobre dicha superficie <sup>25</sup>, lo cual ocasiona que se generen espacios vacíos sobre el depósito metálico dando lugar a la creación de poros.

**Figure 1.** Ilustración esquemática de la síntesis de nanoespumas por el método de plantilla dinámica de hidrógeno. Adaptado de Plowman, et al <sup>26</sup>.



## 1.2. ARQUITECTURAS PARA APRENDIZAJE DE DESCRIPTORES VISUALES

**1.2.1. Arquitecturas Discriminativas** Recientemente, los descriptores visuales aprendidos usando representaciones de redes neuronales profundas se consideran una opción predominante para el modelamiento de patrones en imágenes. Estas representaciones se ajustan en función de las etiquetas de un conjunto de imágenes, siguiendo reglas de orden discriminativo con respecto a las marcaciones brindadas por un experto o las propiedades definidas de un material.

Las representaciones convolucionales son métodos que descomponen la información en múltiples escalas, logrando en las primeras capas una descomposición de las imágenes de entrada en primitivas básicas y, subsecuentemente, modelar patrones visuales más complejos hasta llegar a un nivel semántico. En un esquema supervisado de aprendizaje, es-

---

<sup>25</sup> Blake J PLOWMAN; Lathe A JONES, and Suresh K BHARGAVA. "Building with bubbles: the formation of high surface area honeycomb-like films via hydrogen bubble templated electrodeposition". In: *Chemical Communications* 51.21 (2015), pp. 4331–4346.

tas arquitecturas permiten realizar automáticamente tareas de clasificación y predicción de fenómenos de interés. Para el dominio de imágenes, estos métodos aprenden un conjunto de filtros que transforman la imagen de entrada y logran su descomposición. Las arquitecturas comúnmente usadas parten de una representación en imágenes naturales, las más conocidas son las arquitecturas: VGG-16/19<sup>27</sup>, ResNet<sup>28</sup>, DenseNet<sup>29</sup>, EfficientNet<sup>30</sup> y la ResNeSt<sup>31</sup>. Estas redes han sido ajustadas en problemas de dominio general de imágenes. Durante el entrenamiento de estas redes usando un gran conjunto de imágenes se han podido generalizar conceptos visuales, lo cual resulta atractivo para ser utilizado en otros contextos y aplicaciones.

Una alternativa industrial para el uso y despliegue de estas representaciones convolucionales es el uso de esquemas de transferencia de aprendizaje. En este caso, se aprovecha un entrenamiento previo en un dominio con un amplio número de ejemplos, donde se comparte información visual, por lo menos en los primeros niveles de la red neuronal. Por lo anterior, para el dominio particular se ajusta la red haciendo un reentrenamiento suave, removiendo capas o actualizando ciertos filtros, con respecto al dominio particular. También se han propuesto esquemas de características profundas, las cuales toman las últimas capas de vectores embebidos y los utilizan como modelos de representación de alto nivel de las imágenes. De esta manera, las arquitecturas pueden ser entrenadas para generar discriminación de componentes geométricos observados en las imágenes a partir de los vectores

---

<sup>27</sup> Karen SIMONYAN and Andrew ZISSERMAN. *Very Deep Convolutional Networks for Large-Scale Image Recognition*. 2015. arXiv: 1409.1556 [cs.CV].

<sup>28</sup> Kaiming HE et al. *Deep Residual Learning for Image Recognition*. 2015. arXiv: 1512.03385 [cs.CV].

<sup>29</sup> Gao HUANG et al. *Densely Connected Convolutional Networks*. 2018. arXiv: 1608.06993 [cs.CV].

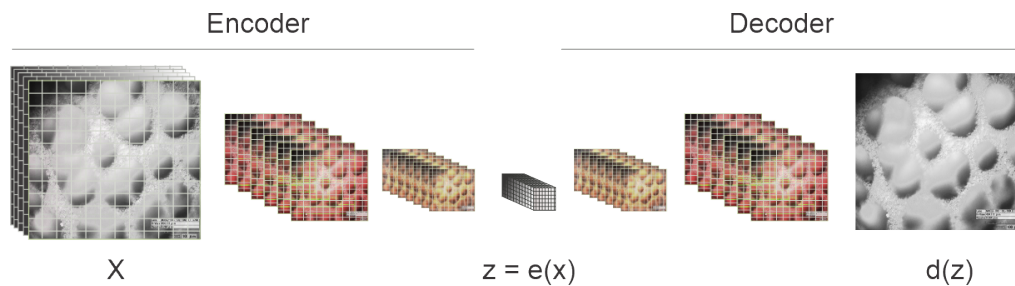
<sup>30</sup> Mingxing TAN and Quoc V. LE. *EfficientNet: Rethinking Model Scaling for Convolutional Neural Networks*. 2020. arXiv: 1905.11946 [cs.LG].

<sup>31</sup> Hang ZHANG et al. *ResNeSt: Split-Attention Networks*. 2020. arXiv: 2004.08955 [cs.CV].

embebidos extraídos de las últimas capas que pueden ser usados como descriptores visuales de baja dimensionalidad.

**1.2.2. Arquitectura Codificador Automático** La arquitectura Autoencoder es un tipo de red neuronal entrenada para aprender una representación embebida de los datos de entrada con el objetivo de reducir dimensionalmente la información o para la extracción de características. Esta arquitectura está compuesta por dos partes. La primera es el *encoder* o codificador; su función es reducir la información de entrada a una representación numérica dimensionalmente reducida denominada vector latente ( $z$ ). La segunda parte es el *Decoder* o decodificador, el cual se encarga de tomar como dato de entrada la variable latente y reconstruirla a su imagen original.

**Figure 2.** Arquitectura convencional *Encoder-Decoder* para reducción de dimensionalidad y reconstrucción de imágenes.



Lo que busca una arquitectura Encoder-Decoder es que la imagen de salida del decoder ( $y = d(z)$ ) sea igual a la imagen original ( $x_i$ ). Para esto, durante el entrenamiento la red utiliza una métrica para cuantificar la diferencia entre  $x_i$  y  $y_i$  denominada pérdida por reconstrucción  $L_R$ . Esta diferencia se cuantifica por medio de la función de pérdida de la red neuronal durante el proceso de entrenamiento. La ecuación 1 muestra el error cuadrático medio ( $MSE$ ), la métrica más común para cuantificar la diferencia entre las dos imágenes, donde  $M$  es la cantidad total de píxeles en ambas imágenes.

$$L_{mse} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M |x_i - y_i|^2 \quad (1)$$

Además, cuando las funciones de activación de las redes convolucionales son funciones sigmoideas, y los datos de entrada están normalizados entre 0 y 1 es común utilizar como función de pérdida por reconstrucción la entropía cruzada binaria<sup>32</sup>. En la ecuación 2 se muestra la función de pérdida mencionada, la cual es máxima cuando  $x = y$ .

$$L_{BC} = -\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^n [x_{j,i} \log(y_{j,i}) + (1 - x_{j,i}) \log(1 - y_{j,i})] \quad (2)$$

En la literatura se ha logrado avanzar en la construcción de diferentes arquitecturas auto-supervisadas, con diversas tareas de entrenamiento y también incluyendo nuevos análisis en los vectores embebidos proyectados de la representación. Particularmente, los codificadores automáticos variacionales han llamado la atención recientemente por la capacidad de crear un espacio latente que aprende y conserva las características espaciales de las imágenes a partir del ajuste de distribuciones paramétricas que tiene un mayor carácter interpretativo de la representación<sup>33 34 35 36</sup>. En este trabajo se ahondará en el análisis, implementación y ajuste de este tipo de arquitecturas.

---

<sup>32</sup> Umberto MICHELUCCI. “An introduction to autoencoders”. In: *arXiv preprint arXiv:2201.03898* (2022).

<sup>33</sup> Paulino CRISTOVAO et al. “Generating in-between images through learned latent space representation using variational autoencoders”. In: *IEEE Access* 8 (2020), pp. 149456–149467.

<sup>34</sup> Christopher VOGELSANGER and Christian FEDERAU. “Latent space analysis of vae and intro-vae applied to 3-dimensional mr brain volumes of multiple sclerosis, leukoencephalopathy, and healthy patients”. In: *arXiv preprint arXiv:2101.06772* (2021).

<sup>35</sup> Daniel O’MALLEY; John K GOLDEN, and Velimir V VESSELINOV. “Learning to regularize with a variational autoencoder for hydrologic inverse analysis”. In: *arXiv preprint arXiv:1906.02401* (2019).

<sup>36</sup> Carl DOERSCH. “Tutorial on variational autoencoders”. In: *arXiv preprint arXiv:1606.05908* (2016).

### 1.3. REPRESENTACIÓN DE BAJA DIMENSIONALIDAD DE LOS EMBEBIDOS

Una vez obtenidos los descriptores visuales como vectores embebidos que dan respuestas particulares a imágenes de entrada, su posterior análisis se puede realizar haciendo una reducción de dimensionalidad. Esta reducción de dimensionalidad permite, entre otras, reconocer la geometría de los datos, observar posibles patrones que se correlacionen con propiedades de los materiales, y además pueden servir como mapas de activaciones para recuperar la información más sobresaliente de los vectores aprendidos. De esta manera, técnicas como el análisis de componentes principales o el análisis discriminante lineal pueden ser implementados para solventar los problemas expuestos anteriormente.

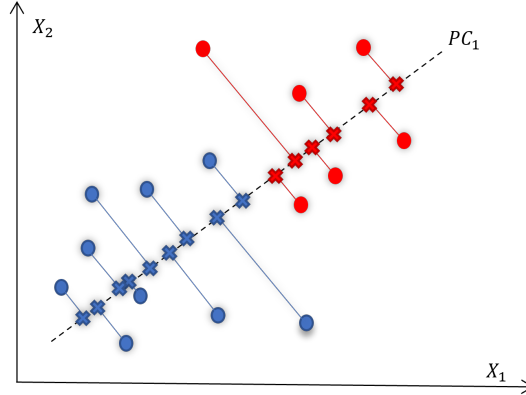
**1.3.1. Análisis de Componentes Principales (PCA)** El análisis de componentes principales (PCA, por su sigla en inglés *Principal Component Analysis*) es un procedimiento que busca identificar las bases más representativas de un conjunto de datos para encontrar nuevas estructuras o relaciones entre los datos y eliminar el ruido generado por la información menos relevante. Este procedimiento se usa para reducción dimensional de información y extracción de características. Para hacer esto, el PCA calcula las nuevas bases, también llamadas componentes principales como combinaciones lineales de las variables iniciales<sup>37</sup>. La imagen 3 presenta un ejemplo de lo que puede hacer la reducción dimensional a partir de componentes principales. En ella, se encuentra la primera componente principal ( $PC_1$ ) y los datos son proyectados sobre esta componente, logrando así una mejor separación de los datos respecto las bases  $(B_1, B_2)$  originales.

La implementación del PCA inicia por la construcción de la matriz de covarianzas  $\Sigma$ . Supongamos que se tiene un conjunto de datos  $X = [x_1, x_1, \dots, x_N]$ , donde  $N$  es el número máximo de observaciones, las cuales están descritas por  $M$  variables o dimensiones. Entonces, la

---

<sup>37</sup> Takio KURITA. "Principal component analysis (PCA)". in: *Computer Vision: A Reference Guide* (2019), pp. 1–4.

**Figure 3.** Ejemplo de implementación de PCA para reducción bidimensional.



matriz de covarianza se representa como se muestra en la ecuación 3, donde  $\bar{x}$  es la media del conjunto completo de observaciones.

$$\Sigma = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})(x_i - \bar{x})^T = \frac{1}{N} \tilde{X} \tilde{X}^T \quad (3)$$

Como se mencionó antes, cada componente principal ( $PC_n$ ) es una combinación lineal de las dimensiones originales como se muestra en la ecuación 4 para la primera componente, donde  $a_1 = [a_{11}, a_{21}, \dots, a_{M1}]$  representa el conjunto de componentes de la combinación lineal.

$$y_{1i} = a_1^T (x_i - \bar{x}), (i = 1, \dots, N) \quad (4)$$

Los pesos óptimos son aquellos en los cuales se logra la mayor varianza de los puntos al ser proyectados sobre la componente principal mientras se mantiene la restricción de  $a_1^T a_1 = 1$ . Para calcular estas componentes se hace una descomposición por autovectores como se puede observar en la ecuación 5, donde  $\lambda_1$  es el autovalor correspondiente al autovector  $a_1$ :

$$\Sigma a_1 = \lambda_1 a_1 \quad (5)$$

Este proceso se repite para cada una de las componentes principales. La ecuación 6 presenta una forma generalizada para el cálculo de las componentes principales a partir de un

único vector  $A \in \mathbb{R}^{N \times M}$  que contiene los componentes de los autovectores de cada una de las dimensiones originales. De la misma manera,  $\lambda$  es una matriz diagonal con todos los autovalores correspondientes a cada uno de los autovectores.

$$A\Sigma = \lambda A \quad (6)$$

**1.3.2. Análisis Discriminativo Lineal (LDA)** El análisis discriminativo lineal (LDA, por su sigla en inglés *Linear Discriminant Analysis*) es un método supervisado para reducción de dimensionalidad. Esta técnica es usada para encontrar nuevas bases que permitan obtener una mejor discriminación entre las clases a partir de la cuantificación de la varianza entre los datos <sup>38</sup>. Para esto, se tienen en cuenta dos tipos diferentes de varianzas: la varianza entre los datos de una misma clase denominada varianza intra-clase ( $S_{wi}$  o *within-class variance* en inglés). Así, la varianza intra-clase total para todo el sistema de datos  $S_w$  es la suma de todos los  $S_{wi}$  de todas las clases como se muestra en la ecuación 7 donde  $x_{ij}$  es un dato  $i$  de la clase  $j$  y  $\mu_j$  es la media de los datos de clase  $j$ .

$$S_w = \sum_{j=1}^C \sum_{i=1}^{n_j} (x_{ij} - \mu_j)(x_{ij} - \mu_j)^T = \sum_{j=1}^C S_{wj} \quad (7)$$

La segunda varianza es la varianza inter-clase ( $S_{bi}$ , o *Between-class variance* en inglés), la cual es una medición de la dispersión entre los datos de diferentes clases. Para esto, se calcula la media de cada conjunto de datos de diferente etiqueta  $\mu_i$  y la media del conjunto global de datos  $\mu$ . Posteriormente se calcula  $S_b$  como se muestra en la ecuación 8, donde  $n_i$  es la cantidad de datos por cada clase.

$$S_B = \sum_{i=1}^C n_i (\mu_i - \mu)(\mu_i - \mu)^T \quad (8)$$

---

<sup>38</sup> Aleix M MARTINEZ and Avinash C KAK. "Pca versus lda". In: *IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence* 23.2 (2001), pp. 228–233.

La matriz transformación  $W$  del LDA, también llamada "*Fisher's Criterion*", se puede entonces calcular resolviendo la ecuación 9. A partir de este parámetro es posible maximizar la separación entre los datos de diferentes clases, mientras se minimiza la de los datos con la misma etiqueta.

$$S_W W = \lambda S_B W \quad (9)$$

Donde  $\lambda$  representa los autovalores de la matriz transformación  $W$ . Al seleccionar los  $k$  autovalores más importantes podemos construir una matriz  $V_k$  que contiene los autovectores asociados a dichos autovalores seleccionados. A partir de esta nueva matriz es entonces posible proyectar los puntos originales  $X$  a un nuevo espacio dimensionalmente más pequeño  $Y$  tal como se muestra en la ecuación 10.

$$Y = X * W_K \quad (10)$$

#### **1.4. MODELOS DE EXPLICABILIDAD**

Un problema asociado a las arquitecturas de aprendizaje profundo es la forma en que reportan sus resultados, ya que carecen de explicabilidad e interpretabilidad. Estas dos características son muy importantes porque dan soporte a la toma de decisiones en diferentes áreas del conocimiento. Por este motivo, existen múltiples métodos que ofrecen una explicación visual de los resultados obtenidos por los modelos de aprendizaje profundo. A continuación se presentan brevemente dos de los métodos más comunes para suplir la explicabilidad de las arquitecturas profundas:

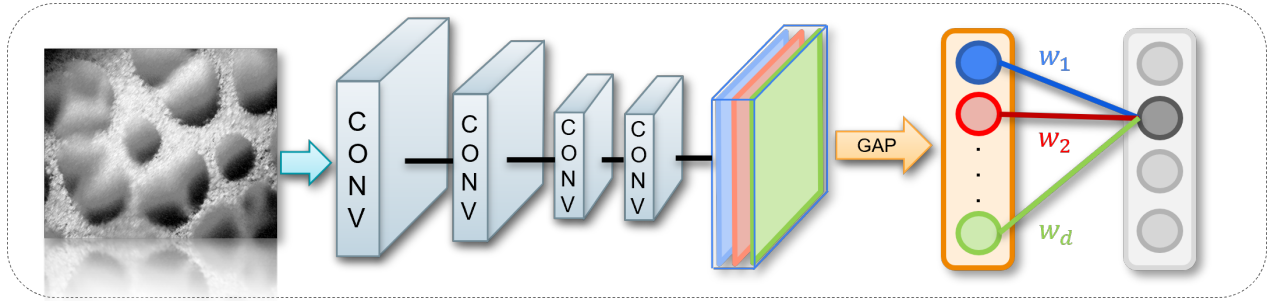
**1.4.1. Mapas de Activaciones de Clases (CAM)** Los mapas de activación de clase <sup>39</sup> (CAM por su sigla en inglés *Class Activation Map*) es una técnica que busca construir mapas de saliencia utilizando los mapas de activación dentro de la arquitectura para identificar las zonas que presentan un mayor aporte o relevancia respecto a una predicción final de probabilidad. Para esto se aplica un "*Global Average Pooling*" (GAP por su sigla en inglés) sobre los mapas de activación de la capa convolucional seleccionada, lo cual permite obtener un promedio global de todo el conjunto de activaciones. El mapa de características obtenido a partir de la aplicación del GAP al conjunto de activaciones de las capas convolucionales es el dato de entrada para una capa densa con activación ReLU que permite obtener un único vector de probabilidades de clase como salida. Entonces, es posible identificar las regiones más importantes de una imagen proyectando hacia atrás los pesos de la capa densa de salida hacia los mapas de características obteniendo así una activación por cada clase <sup>39</sup>. Matemáticamente, podemos decir que si  $f^k(x, y)$  representa la activación de la capa convolucional  $k$  en la localización espacial  $(x, y)$ . Entonces,  $F^k$  es el resultado de aplicar un GAP sobre el conjunto de mapas de activación en la capa tal que  $F^k = \sum_{x,y} f_k(x, y)$ . Así, cada clase  $c$  tiene una salida de probabilidad  $y^c = \sum_k w_k^c F^k$  tal que  $w_k$  indica la importancia o peso de  $F_k$  para la respectiva clase  $c$  como se puede observar en la figura 4.

**1.4.2. Mapas de Activaciones de Clase Basados en Gradientes (Grad-CAM):** Los mapas de activaciones de clase ponderados por gradientes (Grad-CAM por su siglas en inglés *Gradient-Based Class Activation Map*) permite obtener mapas de explicabilidad visual para cualquier arquitectura convolucional CNN. A diferencia del CAM, Grad-CAM no requiere modificar la arquitectura para que la última capa de la red sea convolucional, evitando así modificar y reentrenar las redes que presentan capas densas en sus últimos niveles antes

---

<sup>39</sup> Bolei ZHOU et al. "Learning deep features for discriminative localization". In: *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*. 2016, pp. 2921–2929.

**Figure 4.** Mapas de Activación de clases.



de la capa softmax<sup>40</sup>. Para esto, se calcula el gradiente  $\frac{\delta y^c}{\delta A_{ij}^k}$  de la salida  $y^c$  respecto al mapa de características  $A^k$  de cualquiera de las capas convolucionales de la red. Posteriormente, se aplica un GAP a los gradientes para obtener el conjunto de pesos  $\alpha_k^c$ , tal como se muestra en la ecuación 11.

$$\alpha_k^c = \frac{1}{Z} \sum_i \sum_j \frac{\delta y^c}{\delta A_{ij}^k} \quad (11)$$

Donde  $\alpha_k^c$  representa la importancia del mapa de características  $A^k$  para una clase  $c$ . Una característica importante es que  $y^c$  no tiene que ser necesariamente una probabilidad, si no que puede ser una activación cualquiera. Finalmente, el mapa de saliencia obtenido es una combinación lineal ponderada de los pesos obtenidos de los mapas de características dentro de una activación ReLU que permite conservar las zonas de mayor relevancia y convertir en ceros aquellas cuyo valor es negativo, tal como se muestra en la ecuación 12.

$$L_{Grad-CAM}^c = ReLU\left(\sum_k \alpha_k^c A^k\right) \quad (12)$$

<sup>40</sup> Ramprasaath R SELVARAJU et al. "Grad-CAM: Why did you say that?" In: *arXiv preprint arXiv:1611.07450* (2016).

## 2. PROBLEMA DE INVESTIGACIÓN

El diseño y desarrollo de nanoespumas para la remoción de mercurio en flujos de agua contaminados es un tema de vital importancia para la salud pública. La capacidad para remover las partículas contaminantes y su resistencia mecánica al flujo de agua son criterios importantes para el desarrollo y la implementación de las nanoespumas. A pesar de esto, no existe una metodología que permita estimar estas características desde el diseño de las nanoespumas, por lo que su desarrollo es un proceso de prueba y error. Por lo cual se requieren pruebas de laboratorio y ensayos destructivos que pueden resultar demorados y costosos. Estas características están vinculadas a factores como la geometría y distribución de poro de las nanoespumas, las cuales determinan su capacidad de transporte y almacenamiento de fluidos, como también el área superficial disponible para que ocurran las reacciones químicas necesarias para la deposición de las partículas contaminantes. Sin embargo, el análisis convencional de estas propiedades suele llevarse a cabo en laboratorios bajo metodologías de inspección visual. dado que el análisis puede estar sesgado y ser subjetivo, además de que es un proceso tedioso y lento. Por otra parte, existen técnicas de aprendizaje de máquina que pueden dar soporte en estas tareas de inspección visual eliminando así el sesgo humano y localizando relaciones que a simple vista no son evidentes. Algunas de estas arquitecturas permiten la construcción de descriptores embebidos que contienen las características geométricas de las imágenes de entrada. Estos descriptores podrían ser claves para caracterizar patrones texturales y cuantificar características de las nanoespumas. Por este motivo, la implementación de arquitecturas profundas para la construcción de descriptores visuales que capturen los patrones texturales y características geométricas en las imágenes puede ayudar durante el diseño y desarrollo de las nanoespumas.

### **3. OBJETIVOS**

#### **OBJETIVO GENERAL**

Caracterizar geoméricamente superficies de nanoespumas metálicas utilizando representaciones embebidas de aprendizaje profundo

#### **OBJETIVOS ESPECÍFICOS**

- Realizar un preprocesamiento computacional a las imágenes de nanoespumas metálicas con el fin de realzar sus características estructurales y texturales.
- Implementar una arquitectura con una tarea pretexto de reconstrucción para validar descriptores visuales embebidos y su relación con propiedades del material.
- Construir modelos de explicabilidad que resalten las características de mayor relevancia en la clasificación de imágenes de nanoespumas.
- Validar la metodología propuesta en cuanto a la capacidad de representar diferentes tipos de configuraciones de nano-espumas en un espacio de baja dimensión.

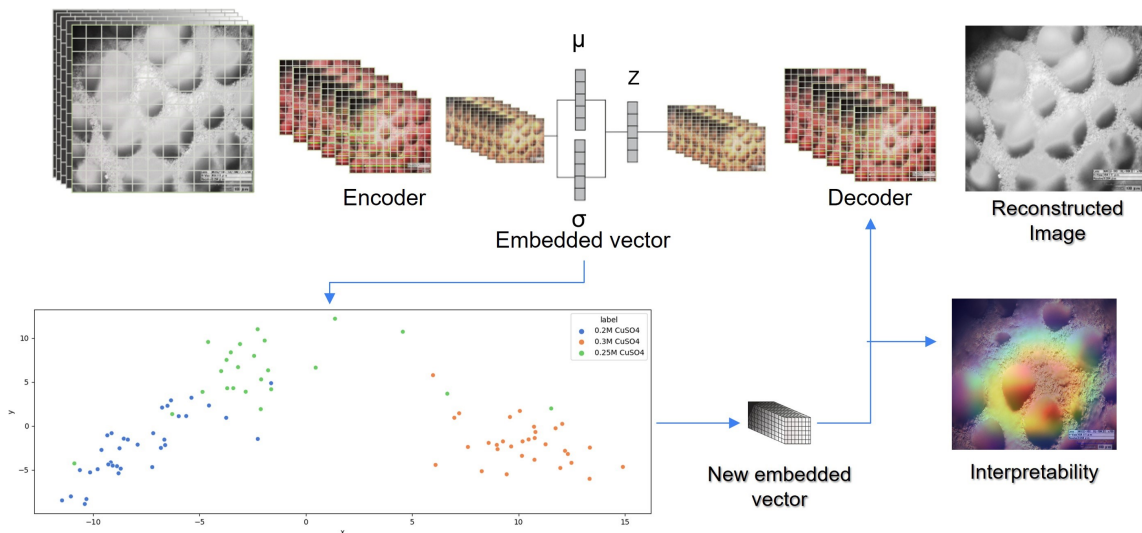
## 4. MÉTODO PROPUESTO

Este trabajo presenta una metodología para la caracterización geométrica de nanoespumas metálicas cobre-níquel (Cu-Ni) basada en el uso de un codificador automático variacional (VAE por su sigla en inglés *Variational Autoencoder*). El enfoque propuesto comienza ajustando un VAE a partir de una tarea de pretexto de reconstrucción de imágenes. A partir de este entrenamiento se busca reducir la dimensionalidad de las imágenes de las nanoespumas hasta una representación embebida o latente que contenga las características de cada clase de forma compacta. Posteriormente, para encontrar las dimensiones de mayor relevancia del conjunto de vectores embebidos se implementa un LDA que permite construir un espacio latente bidimensional sobre el cual se proyectan todas las imágenes como puntos de dos dimensiones. Esta distribución de las imágenes presenta una organización de acuerdo con la estructura, geometría y distribución de sus poros. Es decir, el vector embebido responde a un descriptor estructural de las imágenes que puede soportar tareas de análisis de conformación y síntesis de las nanoespumas. De forma complementaria, se obtuvieron mapas de saliencia que permiten brindar un apoyo observacional de la geometría y variables aprendidas, durante la tarea de reconstrucción. En la figura 5 se muestra el flujo de trabajo propuesto en este proyecto.

### 4.1. REPRESENTACIONES PROFUNDAS A PARTIR DE UN CODIFICADOR AUTOMÁTICO VARIACIONAL (VAE)

Uno de los principales objetivos de este trabajo es la construcción de un descriptor de la geometría de nanoespumas, observadas desde imágenes microscópicas. En este trabajo se decidió entonces aproximar este descriptor como un vector embebido que proviene de un codificador automático. Teniendo en cuenta que las características responden a distribuciones sobre variables geométricas de las observaciones, el tipo de codificador utilizado en

**Figure 5.** Flujo de trabajo propuesto. Metodología computacional para el análisis estructural de observaciones de imágenes que responden a la síntesis de nanoespumas. Primero se entrena un VAE. Luego los vectores embebidos son proyectados para explorar su conformación en un espacio latente de baja dimensionalidad. Además, un conjunto de mapas de explicabilidad apoyan la tarea de inspección visual sobre las características geométricas aprendidas.



este trabajo es el VAE. Las arquitecturas variacionales regularizan el espacio latente ajustando los vectores embebidos generados por el *encoder* para que se aproximen a una distribución normal estándar  $\mathcal{N}(O, I)$  con  $\mu = 0$  y  $\sigma$  igual a la matriz identidad  $I$ <sup>41 42 43</sup>. A continuación, se detallan los componentes de un VAE.

**4.1.1. Arquitectura de Codificación (*Encoder*)** Esta componente de la arquitectura se encarga de proyectar una observación microscópica de una nanoespuma a un banco

<sup>41</sup> Licheng JIAO and Jin ZHAO. “A survey on the new generation of deep learning in image processing”. In: *IEEE Access* 7 (2019), pp. 172231–172263.

<sup>42</sup> Diederik P KINGMA; Max WELLING, et al. “An introduction to variational autoencoders”. In: *Foundations and Trends® in Machine Learning* 12.4 (2019), pp. 307–392.

<sup>43</sup> Gregory P WAY and Casey S GREENE. “Extracting a biologically relevant latent space from cancer transcriptomes with variational autoencoders”. In: *PACIFIC SYMPOSIUM on BIOCOMPUTING 2018: Proceedings of the Pacific Symposium*. World Scientific. 2018, pp. 80–91.

de filtros que descomponen jerárquicamente la información en diferentes capas de procesamiento. Estas capas son convolucionales que permiten extraer información estructural de la imagen y proyectando la información a una representación embebida de dos vectores independientes  $(\mu_i, \sigma_i)$ . Para hacer esto es necesario que las activaciones de la última capa convolucional pasen por dos capas densas diferentes. En la figura 5 se ilustra este componente. En este sentido, el objetivo de la arquitectura VAE es proyectar cada imagen de entrada a un conjunto vector de distribuciones normales, las cuales en cada uno de sus componentes se ajusta a una característica estructural observada en la imagen.

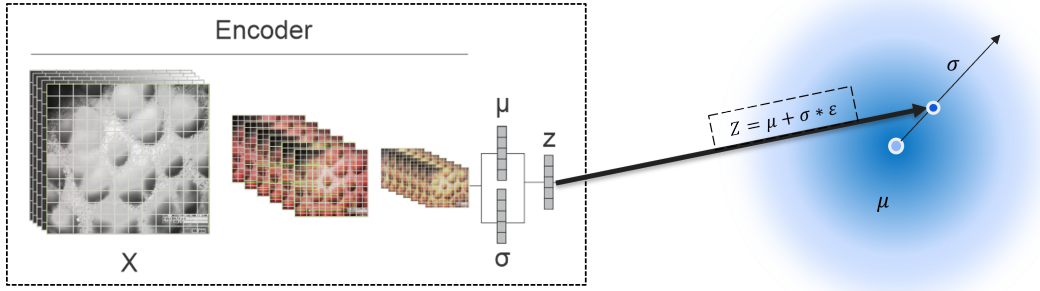
Para poder hacer el ajuste de extremo a extremo en el VAE, estos vectores independientes que representan la media deben ser unificados para seguir la propagación por gradiente desde el *decoder*. Es así que los vectores de media y en la varianza se representen como una única variable latente que sirve como dato de entrada a la arquitectura *Decoder*. Por este motivo, se aplica el método de reparametrización<sup>36 42</sup>, el cual es una combinación lineal de ambas variables tal como se muestra en la ecuación 13.

$$z = \mu + \log(\sigma) * \epsilon \quad \forall \epsilon \in \mathcal{N}(0, I) \quad (13)$$

La regularización del espacio embebido es posible debido al factor aleatorio  $\epsilon \in [0, 1]$  por el cual se multiplica la varianza en cada iteración. Este factor permite que para una misma imagen, se tomen un conjunto de puntos alrededor de la media de forma aleatoria tal cual como se muestra en la figura 6. construyendo así una distribución de puntos para una misma imagen.

**4.1.2. Arquitectura de Decodificación (*Decoder*)** En la arquitectura de decodificación se proyecta el vector de reparametrización  $z$  a un conjunto de operaciones seriales de sobremuestreo y convolución, organizado en capas consecutivas, para lograr obtener una estimación de la imagen de entrada. Este segmento de decodificación opera de forma conjunta con el codificador, permitiendo ajustar la representación embebida de distribuciones nor-

**Figure 6.** Para construir un vector embebido único  $z$  a partir de los dos vectores embebidos producidos por el *Encoder* se realiza una combinación lineal tal que  $z = \mu + \sigma \times \epsilon$ . Donde la variable aleatoria  $\epsilon \in [0, 1]$  permite que para una misma imagen se mapeen un conjunto de puntos alrededor de la media.



males  $(\mu, \sigma)$ .

Entonces, el ajuste de la arquitectura debe realizarse en términos del grado de reconstrucción obtenido como respuesta a las imágenes de entrada (como un codificador automático típico, realizando un ajuste de entropía cruzada como el que se presenta en la ecuación 2), pero además con respecto al ajuste de las distribuciones que representan el descriptor  $(\mu, \sigma)$ . Para lograr esto, los VAE incorporan una nueva métrica de entrenamiento denominada divergencia de Kull-Back Leibler ( $L_{KL}$ ) que se presenta en la ecuación 14. Esta divergencia mide la diferencia entre la distribución de los embebidos  $z$  y  $\mathcal{N}(O, I)$ . Por lo tanto, al minimizar esta función se está logrando que las medias y varianzas de los vectores embebidos tiendan a los valores de una distribución normal estándar.

$$L_{KL} = -0.5 * \sum_{i=1}^K (1 + \log(\sigma^2) - \mu^2 - \sigma^2) \quad (14)$$

Así, un VAE es entonces entrenado con una métrica de error total que es la combinación lineal de los dos errores presentados anteriormente, como se muestra en la ecuación 15.

$$ELBO = L_{KL} + L_{BC} \quad (15)$$

## 4.2. DESCRIPTORES LATENTES DE LAS NANOESPUMAS Y REPRESENTACIÓN EN BAJA DIMENSIONALIDAD

La regularización del espacio latente obtenida a partir del VAE permite la creación de un descriptor que codifica las propiedades geométricas y estructurales de las imágenes de nanoespumas de entrada. El conjunto de distribuciones normales aprendidas forma un espacio latente que puede ser explorado para la distinción de propiedades en los materiales, buscar elementos que estructuralmente comparten propiedades mecánicas o que pueden medir el grado de aleación entre los elementos que ayudan a sintetizar las nanoespumas. Además, la generación de embebidos sintéticos en este espacio latente pueden simular la conformación y síntesis de nuevas nanoespumas, pudiéndose a partir de estos obtener una reconstrucción de la imagen más cercana<sup>34</sup>.

Como salida para el soporte en el análisis de nanoespumas, en este trabajo se construyó un espacio de baja dimensionalidad que permite observar la dispersión de las nanoespumas observadas y las características geométricas que se comparten, según la distancia encontrada en este espacio. Para poder visualizar este conjunto de embebidos se realizó una proyección de baja dimensionalidad, siguiendo dos técnicas, las cuales se describen a continuación.

**4.2.1. Análisis por Componentes Principales (PCA)** La primera técnica propuesta es el PCA. Esta es una técnica no supervisada que busca encontrar nuevas bases linealmente independientes para el conjunto de datos. Estas nuevas bases son combinaciones lineales de las bases originales, por lo que se lleva a cabo un proceso de extracción de características. Para llevar a cabo este proceso, inicialmente se calcula la matriz de covarianza  $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times m}$  entre las  $m$  dimensiones del espacio latente original. A partir de esta matriz de covarianza se realiza una descomposición por autovalores  $\Sigma * V = \lambda * V$  donde  $V$  es la matriz de autovectores de  $\Sigma$ . Tomando las dos dimensiones asociadas a los autovalores  $\lambda$  de mayor valor obtenemos la matriz de transformación  $V_2$  tal que la varianza entre los valores

en el nuevo espacio latente bidimensional sea mayor. Estas dos nuevas dimensiones son las dimensiones en las que los datos presentan una mayor dispersión respecto a la media. Un mayor detalle de esta técnica se encuentra en la sección 1.3.1

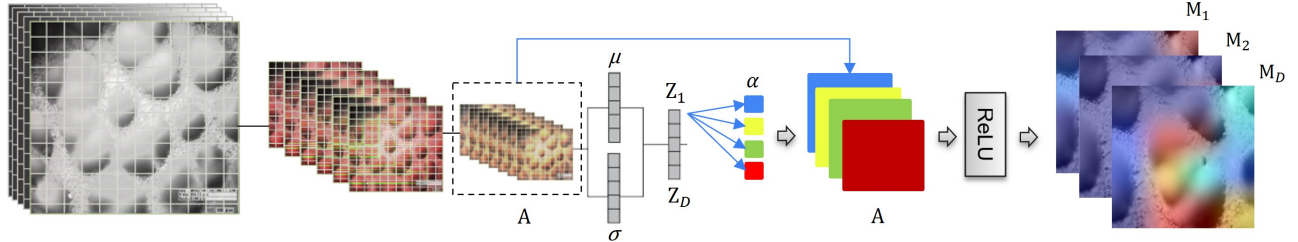
**4.2.2. Análisis Discriminativo Lineal (LDA)** De forma alternativa, en este trabajo se realizó la reducción de la dimensionalidad de los vectores embebidos, utilizando información supervisada de los tipos de nanoespumas observados, y construyendo una representación a partir de un LDA. Esta metodología busca disminuir la dispersión entre los datos que pertenecen a una misma clase ( $S_w$ ) mientras se aumenta la separación entre las medias de cada una de las clases ( $S_b$ ). Esta técnica logra discriminar completamente las tres clases de nanoespumas, creando un espacio latente bidimensional en el cual sus características están distribuidas a lo largo del espacio embebido. Un mayor detalle de esta técnica se encuentra en 1.3.2.

### **4.3. MAPAS DE EXPLICABILIDAD**

De forma alternativa, como esquema de soporte al análisis geométrico de las observaciones de nanoespumas, en este trabajo se consideró obtener mapas de explicabilidad que permitieran visualizar las principales regiones que están codificadas en las distribuciones aprendidas de los vectores embebidos. Para obtener una interpretación visual se implementó un Grad-CAM. Sin embargo, estos mapas de atención típicamente operan sobre arquitecturas discriminativas y se obtienen a partir de la probabilidad de cada clase, lo cual no está disponible en un codificador automático variacional. Por este motivo es necesario realizar una modificación a la metodología del Grad-CAM como se ve en la figura 7

En el Grad-CAM convencional las probabilidades de salida son propagadas hacia la última capa convolucional para calcular los gradientes de las probabilidades respecto a los mapas de características de dicha capa  $A$ . Sin embargo, un VAE lleva a cabo una tarea de reconstrucción de imágenes por lo que no existen probabilidades de salida. Por este motivo,

**Figure 7.** La aplicación de Grad-CAM a un VAE es diferente respecto a la aplicación a redes de clasificación comunes como la ResNet. En este caso, al no tener como salida una activación de una capa softmax, la predicción del Grad-CAM no se basa en probabilidad de clases. En cambio, lo que busca es encontrar las zonas de interés que aprende cada dimensión del vector embebido  $Z$ .



Wenqian et al<sup>44</sup>. proponen tomar como valor de probabilidad cada una de las dimensiones del vector embebido. Entonces para cada elemento  $z_i$  se propagan los gradientes respecto al mapa de características  $A \in \mathbb{R}^{N \times H \times W}$ , para así obtener el mapa de activación  $M^i$  como muestra la ecuación 16

$$M^i = ReLU\left(\sum_{k=1}^n \alpha_k A_k\right) \quad (16)$$

Donde el escalar  $\alpha_k$  es el promedio global  $GAP\left(\frac{\delta z_i}{\delta A_k}\right)$  de cada elemento  $z_i$  respecto al canal  $k^{th}$  del mapa de características  $A$  de la capa convolucional seleccionada calculado como se muestra en la ecuación 17.

$$\alpha_k = \frac{1}{w \times h} \sum_{p=1}^h \sum_{q=1}^w \left(\frac{\delta z_i}{\delta A_k^{pq}}\right) \quad (17)$$

Donde  $A_k^{pq}$  es el valor de un pixel en la posición  $(p, q)$ . Entonces este proceso se repite para cada uno de los elementos del vector embebido  $[z_1, z_2, \dots, z_D]$ , lo cual, nos permite obtener un mapa de activación por cada elemento en el vector embebido. Además, también es

<sup>44</sup> Wenqian LIU et al. "Towards visually explaining variational autoencoders". In: *Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*. 2020, pp. 8642–8651.

posible obtener un mapa de saliencia total a partir de cualquier combinación lineal entre los mapas de saliencia individuales. Por ejemplo, como nos muestra la ecuación 18 podemos obtener un único mapa de saliencia  $M$  a partir de la media de todos los mapas individuales.

$$M = \frac{1}{D} \sum_{i=1}^D M^i \quad (18)$$

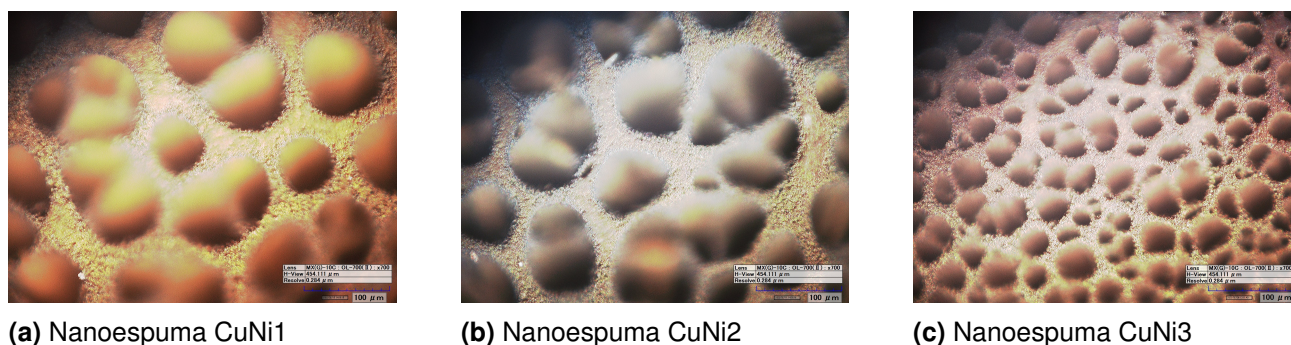
Estos mapas de explicabilidad prestan mayor atención a las regiones o estructuras que están codificadas en el vector embebido. En la aplicación de análisis de nanoespumas, puede ser una herramienta importante para determinar la importancia y contribución de cada una de las distribuciones aprendidas, usando como aproximación cada valor de media de cada distribución. También los expertos pueden determinar relaciones diferenciales en la geometría y estructura de las nanoespumas que los puedan conducir a hipotetizar sobre nuevas síntesis de nanoespumas e indagar sobre diferentes composiciones químicas.

## 5. DISEÑO EXPERIMENTAL

### 5.1. CONJUNTO DE DATOS

Tres tipos de nanoespumas metálicas Cu-Ni fueron sintetizadas:  $CuNi1$ ,  $CuNi2$ ,  $CuNi3$ . Para esto se usaron tres diferentes soluciones acuosas con 1.5 M  $H_2SO_4$  y diferentes concentraciones de  $CuSO_4 \cdot 5H_2O$  y  $NiSO_4 \cdot 6H_2O$  para tener concentraciones de a)  $0.3MCu^{2+} : 0.1MNi^{2+}$ , b)  $0.25MCu^{2+} : 0.15MNi^{2+}$  y c)  $0.2MCu^{2+} : 0.2MNi^{2+}$ . Estos tres tipos de nanoespumas fueron depositadas sobre un sustrato de cobre plano con un área de  $1cm^2$ . Cada tipo de nanoespuma fue caracterizada usando un microscopio estereoscópico confocal con una magnificación de 700x. Finalmente, se capturaron un total de 600 imágenes de  $1600 \times 1200$  pixeles constituyendo así un dataset balanceado con 200 imágenes por clase. Algunas muestras típicas de las imágenes microscópicas de nanoespumas capturadas se pueden ver en la figura 8.

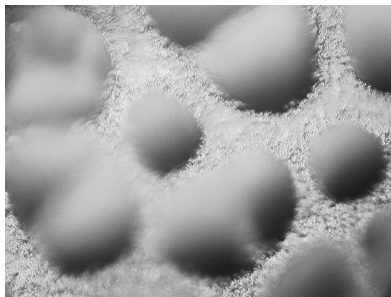
**Figure 8.** Imágenes microscópicas de espumas metálicas nanoporosas Cobre-Níquel típicas.



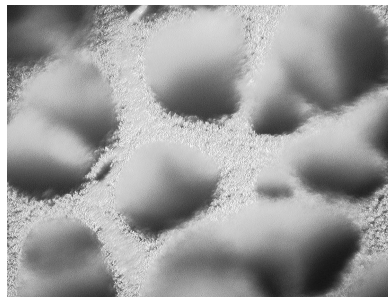
Para poder entrenar la red de tal manera que aprenda las características geométricas de los poros fue necesario hacer un procesamiento de los datos para realzar las características texturales y de poro de las nanoespumas. Primero, las imágenes se consideraron en escala de grises, forzando a la red a concentrarse en características visuales diferentes al color de las nanoespumas, evitando así un posible sesgo. Posteriormente, se hizo un recorte de 15%

a cada lado de las imágenes para eliminar las zonas sin iluminación que representaban un espacio en memoria sin relevancia. Además, las imágenes fueron escaladas a un tamaño de  $128 \times 128$  píxeles. En la figura 9 podemos observar algunos ejemplos de las imágenes después del procesamiento.

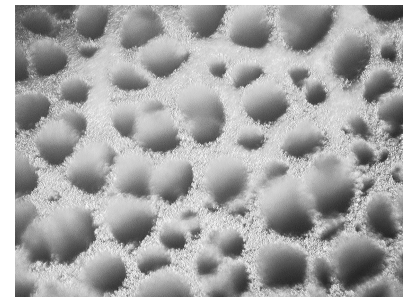
**Figure 9.** Imágenes microscópicas de espumas metálicas nanoporosas Cobre-Níquel típicas después del procesamiento.



(a) Nanoespuma CuNi1



(b) Nanoespuma CuNi2



(c) Nanoespuma CuNi3

Finalmente, para evitar el sobre entrenamiento y obtener una mayor convergencia de la red se implementó aumento de datos. Para esto, se aplicaron transformaciones de reflexión vertical y horizontal, y rotaciones de  $90^\circ$  al conjunto de imágenes de forma aleatoria. De esta manera, se logró aumentar el tamaño del dataset de 600 a 3520 imágenes.

## 5.2. CONFIGURACIÓN DE LA ARQUITECTURA

En este trabajo se implementó una arquitectura VAE convolucional para generar descriptores latentes que codifiquen la geometría de las nanoespumas. Esta arquitectura fue ajustada con respecto a la tarea de pretexto de reconstrucción de imágenes. Particularmente, el codificador (*Encoder*) recibe como dato de entrada imágenes de  $128 \times 128$  y sigue una arquitectura de cuatro capas convolucionales 2D, todas con un tamaño de *kernel* de  $3 \times 3$  y activaciones ReLU. Las tres primeras capas de la red tienen asociados una operación de *MaxPooling2D*, y de normalización de las activaciones (*BatchNormalization*). El número de filtros asociados a cada capa están configurados en el siguiente orden  $\{512, 256, 128, 64\}$ .

La última capa es proyectada a los vectores embebidos que representan las distribuciones  $[\mu, \sigma]$ , con 64 unidades para cada parámetro. También, se realiza una combinación lineal de las últimas dos capas densas para obtener un único vector de salida  $z$  de 64 elementos.

El codificador recibe entonces 64 elementos, los cuales son convolucionados progresivamente (tres capas con filtros  $3 \times 3$ ) utilizando capas de sobremuestreo (*Upsampling 2D*) y capa *BatchNormalization*. La última capa está dedicada a recuperar la representación original (imágenes de  $128 \times 128$ ), con una capa de activación sigmoide. Para el entrenamiento extremo a extremo (*end-to-end*) del VAE, se usaron un total de 2400 imágenes, utilizando como regla de minimización, un optimizador Adam, ajustado con una tasa de aprendizaje de 0.000001, durante 2000 épocas (*epochs*) y un tamaño de batch de 16 imágenes.

Una vez entrenada la arquitectura, se obtuvieron vectores embebidos de 64 valores escalares los cuales son tomados como descriptores compactos que relacionan la estructura de las imágenes observadas. Estos vectores embebidos se tomaron desde el vector de respuesta de las medias, de las varianzas, pero también se utilizó la respuesta brindada por el vector latente  $z$ . Además, estos vectores embebidos fueron proyectados a un espacio de baja dimensionalidad, bajo un esquema supervisado utilizando el LDA. También se obtuvieron mapas de explicabilidad, como instrumento para realizar una inspección observacional sobre las principales regiones y las características estructurales que se codifican en los vectores embebidos. Por cada imagen proyectada al VAE se obtuvieron 64 mapas de saliencia, que son respuesta al vector de medias.

### 5.3. VALIDACIÓN DE RESULTADOS

Para evidenciar la capacidad de los embebidos proyectados de discriminar entre los tipos de nanoespumas, se obtuvieron vectores embebidos resultantes y se entrenaron algoritmos de aprendizaje de máquina, bajo un esquema supervisado. En este análisis se analizaron tanto los tamaños de los embebidos, como el tipo de descriptor, tomado desde la proyección de la media, la varianza y el vector  $z$ . El espacio métrico que resulta del espacio embebido fue

caracterizado midiendo las distancias entre clases y las distancias inter-clases (BSS y WSS respectivamente). En la siguiente subsección se detalla el esquema de funcionamiento de estas métricas, en particular.

También se hizo un análisis de la geometría resultante del espacio embebido, haciendo proyecciones de baja dimensionalidad a partir del PCA y LDA. Finalmente, se calcularon mapas de saliencia basados en el Grad-CAM a la red VAE para visualizar las zonas más relevantes de las nanoespumas.

**5.3.1. Distancias Entre los Vectores Embebidos** Dentro del espacio latente de alta dimensionalidad construido por el VAE se espera que la distribución de las imágenes permita discriminar entre las tres clases. Para cuantificar este carácter discriminativo se midieron las distancias entre los conjuntos de vectores embebidos. Para ello, una métrica común para evaluar el agrupamiento de los datos de acuerdo a su clase, se utilizó la distancia euclidiana a partir de la cual se calcula la distancia entre dos vectores embebidos  $[z^1, z^2]$ , como se muestra en la ecuación 19.

$$d_{z^1, z^2} = \sqrt{(z_1^1 - z_1^2)^2 + \dots + (z_D^1 - z_D^2)^2} = |z^1 - z^2| \quad (19)$$

Existen dos tipos de distancias al momento de evaluar conjuntos de datos: la primera es la distancia intra-clase (*WSS* por su sigla en inglés *Within Cluster Sums of Squares*) que presenta las distancias entre todos los puntos de una misma clase. Para calcular esta métrica se compara cada punto con todos sus vecinos pertenecientes a la misma clase y se guardan estas medidas en un arreglo numérico que permita proyectar la distribución como un histograma de distancias. La segunda es la distancia inter-clase (*BSS* por su sigla en inglés *Between Cluster Sums of Squares*) que representa la separación existente entre todos los puntos de dos grupos de datos diferentes.

Entonces, a partir de la distancia euclidiana es posible calcular ambas métricas. La ecuación 20 presenta la forma de estimar el *BSS*, donde se mide la distancia para cada punto en la

clase ( $c_1$ ) contra todos los puntos de la clase ( $c_2$ ).

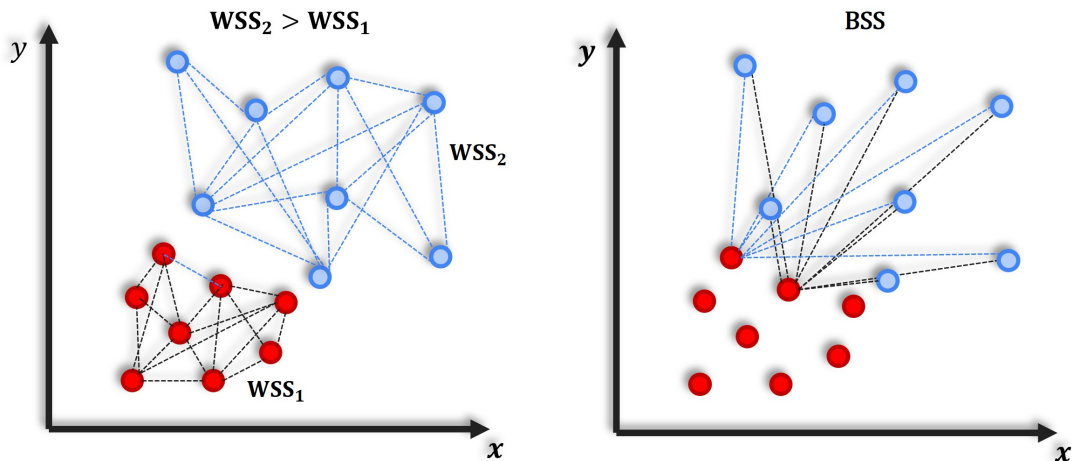
$$BSS = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |z^{c_1} - z^{c_2(i)}| \quad (20)$$

De la misma forma se calcula WSS, cuantificando la distancia de cada uno de los vectores en la clase ( $c_1$ ) contra todos los demás puntos de la misma clase, como se puede observar en la ecuación 21

$$WSS = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |z^{c_1} - z^{c_1(i)}| \quad (21)$$

Así, para un conjunto de vectores de la clase  $c_1$  obtenemos un vector que contiene las distancias medias de todos los embebidos a cada uno de los embebidos de la clase ( $c_2$ ) como con su misma clase. Por lo tanto, es posible construir distribuciones de distancias para cada uno de los puntos pertenecientes a cada clase, como se muestra en la figura 10.

**Figure 10.** Diferencias entre el WSS y el BSS para dos conjuntos de datos distintos. La gráfica de la izquierda presenta la diferencia entre las distancias WSS de dos conjuntos de datos diferentes. Por su parte, la gráfica de la derecha presenta la forma de cauntificación de el BSS entre dos conjuntos de datos distintos.



Sin embargo, es necesario verificar que los clústeres de diferentes clases se encuentren lo más alejados posibles mientras que los datos pertenecientes al mismo clúster estén los

más cercanos que se pueda. Es decir, es necesario maximizar  $BSS$  y minimizar  $WSS$ . Por este motivo, se presenta la tasa de separación  $R$ . La cual es la relación entre la distancias y se presenta como se ve en la ecuación 22. Esta tasa oscila entre 0 y 1, siendo 0 cuando  $BSS = 0$  y no existe separación entre los clústeres, y 1 cuando  $WSS = 0$ , es decir, los datos de un mismo clúster están totalmente unidos y separados de los demás clústeres vecinos.

$$R = \frac{BSS}{BSS + WSS} \quad (22)$$

## 6. EVALUACIÓN Y RESULTADOS

Para la validación de estos resultados se llevó a cabo dos tipos de mediciones a partir de los embebidos generados por la arquitectura *encoder*. El análisis de cada uno de los componentes evidencia la capacidad para caracterizar geoméricamente nanoespumas metálicas cobre-níquel a partir de la distribución de características dentro de un espacio embebido. Inicialmente, se utilizaron tres arquitecturas de aprendizaje de máquina convencional: *KNN*, *Random Forest* y *Decision Tree* para clasificar los vectores embebidos generados por un VAE y un codificador automático convencional (*conv*). El *autoencoder* de referencia tiene la misma configuración de capas e hiperparámetros que la arquitectura VAE, y un tamaño de embebido de 128 dimensiones. Para esta evaluación se tomó la arquitectura mencionada anteriormente y se cambió el tamaño del vector embebido tres veces, para 512, 256 y 128 dimensiones. Con cada uno de estos modelos se evaluó la precisión para clasificar entre nanoespumas utilizando la media  $\mu$ , la varianza  $\sigma$  y el vector latente  $z$  generados por el VAE. También se evaluó la capacidad de discriminar los vectores embebidos de la arquitectura convencional. Los resultados obtenidos se pueden visualizar en la tabla 1.

**Table 1.** Modelos de aprendizaje de máquina utilizados para la clasificación de los vectores embebidos de diferentes arquitecturas codificadoras variacionales y tres arquitecturas convencionales de la misma configuración. En este caso,  $\mu$  corresponde al vector de la media,  $\sigma$  al de la varianza, y  $z$  es la combinación lineal de ambos. Estos tres vectores son generados por la arquitectura codificadora del VAE. En este caso *conv* se refiere al vector embebido obtenido a partir de un *autoencoder* convencional con la misma configuración de capas.

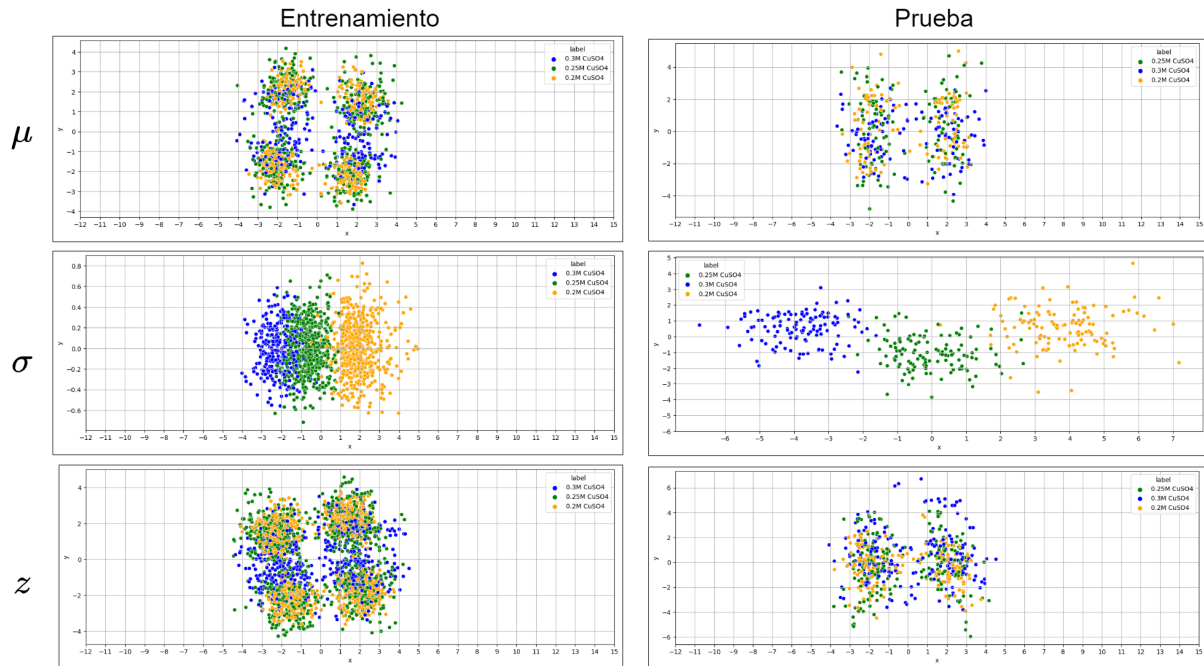
Modelos de aprendizaje de máquina	128				256				512			
	$\mu$	$\sigma$	$z$	<i>conv</i>	$\mu$	$\sigma$	$z$	<i>conv</i>	$\mu$	$\sigma$	$z$	<i>conv</i>
<b>Decision Tree</b>	0.82	0.9	0.59	0.81	0.8	0.87	0.52	0.79	0.8	0.86	0.44	0.8
<b>KNN</b>	0.66	0.92	0.66	0.44	0.65	0.8	0.63	0.52	0.62	0.69	0.58	0.49
<b>Random Forest</b>	0.88	<b>0.98</b>	0.86	0.83	0.87	<b>0.94</b>	0.76	<b>0.93</b>	0.87	<b>0.92</b>	0.63	0.83

Como se puede observar en la tabla 1, los mejores resultados de clasificación se obtuvieron para el vector embebido de la varianza  $\sigma$ . Este carácter discriminativo puede estar asociado a la diferencia entre distribuciones aprendidas, fundada en la dispersión de sus datos.

Es decir, que las distribuciones entre clases pueden ser separadas por su dispersión, pero entre ellas comparten valores medios similares. También podemos observar como a menor tamaño del embebido se presenta un aumento en la precisión para clasificarlos de acuerdo a sus clases. Con esto, vectores de poca dimensión son suficientes para representar los problemas en el espacio embebido. Por lo tanto, podemos decir que el embebido de la varianza con un tamaño de 128 dimensiones es la arquitectura que presenta mayor capacidad de discriminación de clases entre las tres arquitecturas probadas.

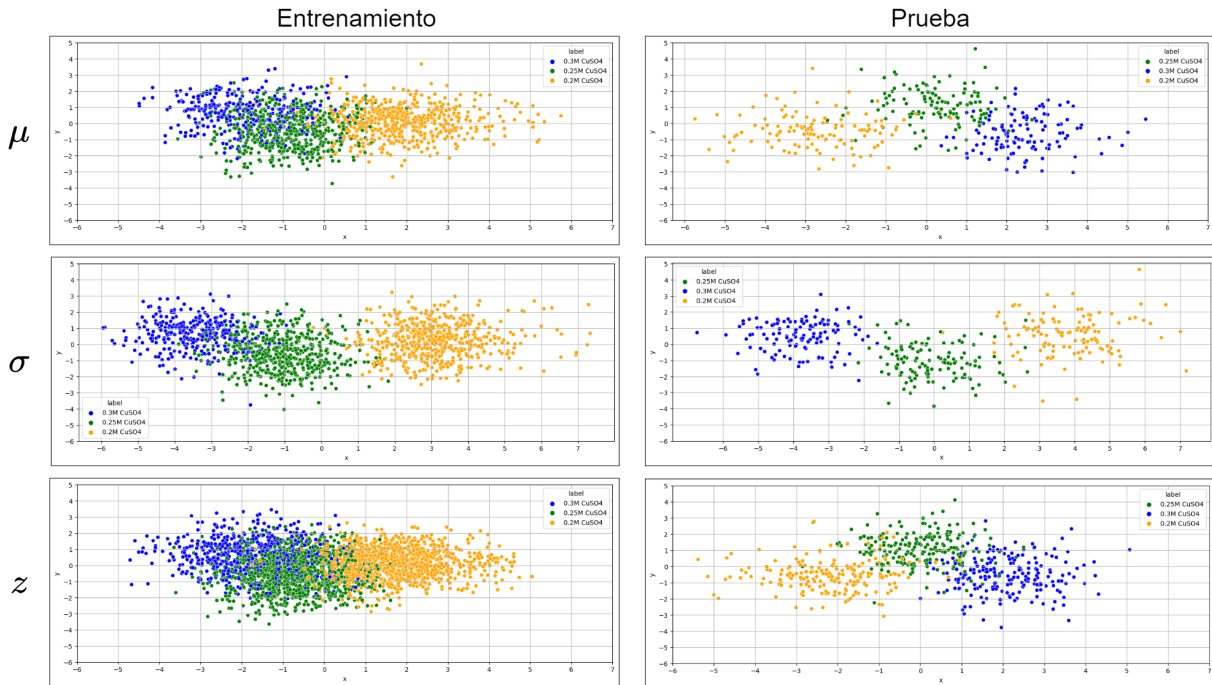
Posteriormente, los vectores embebidos resultantes (de dimensión 128) fueron proyectados a un espacio de baja dimensionalidad, en un esquema no supervisado, utilizando un PCA. En la figura 11 se ilustran las representaciones de cada tipo de vector embebido ( $\mu, \sigma, z$ ), y el espacio geométrico tanto en entrenamiento (columna de la derecha), como en evaluación (columna a la izquierda). Como se puede observar, el vector  $\sigma$  tiene una mejor representación geométrica, logrando una separación más clara entre las tres diferentes composiciones de las nanoespumas. Además, cabe resaltar que esta proyección no tiene el componente de etiquetas, lo cual resulta sobresaliente para la representación basada únicamente en una tarea de reconstrucción. Así, las características geométricas pueden ser bien codificadas en estos vectores. En contraste, la proyección de los vectores de  $\mu$  y  $z$ , no resultan discriminativos en ninguno de los grupos, tanto entrenamiento como evaluación.

**Figure 11.** Representaciones de cada tipo de vector embebido  $(\mu, \sigma, z)$ , y el espacio geométrico tanto en entrenamiento (columna de la derecha), como en evaluación (columna a la izquierda) para el PCA.



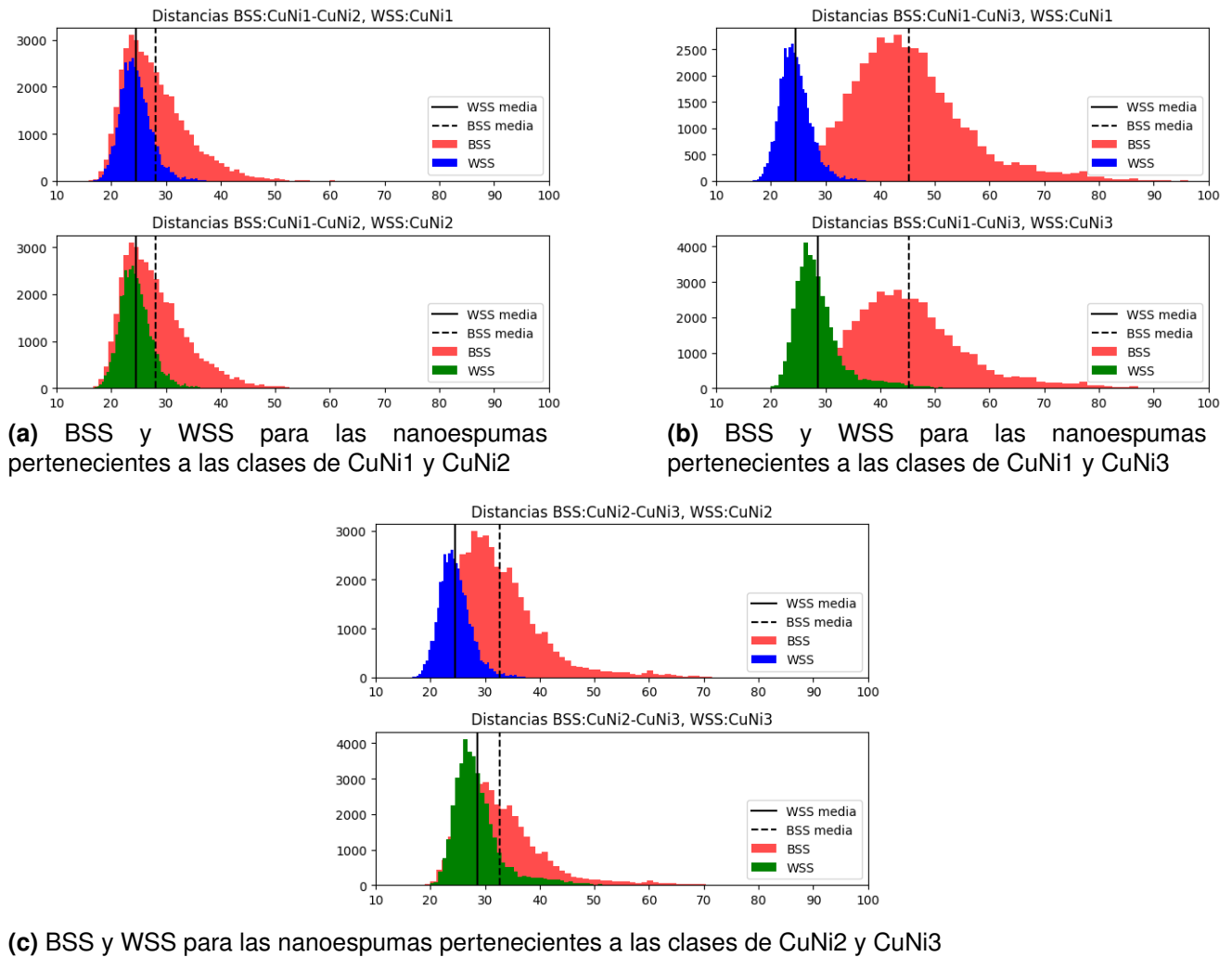
También, en un experimento de baja dimensionalidad, los vectores embebidos fueron proyectados a un espacio de dos dimensiones, pero siguiendo un esquema supervisado, a través del vector LDA. En la Figura 12 se puede observar los espacios embebidos resultantes para cada proyección, tanto en entrenamiento como en evaluación. En este caso, las etiquetas del tipo de nanoespuma inciden directamente en la discriminación del espacio embebido, resultando en geometrías con características bien separadas. En este caso, la incidencia en la minimización tiene un componente alto, lo cual puede hacer a la representación dependiente de las observaciones en el dataset, más que en la caracterización propia de las geometrías de las imágenes.

**Figure 12.** Representaciones de cada tipo de vector embebido ( $\mu$ ,  $\sigma$ ,  $z$ ), y el espacio geométrico tanto en entrenamiento (columna de la izquierda), como en evaluación (columna a la derecha) para el LDA



Luego, la cuantificación del espacio embebido original (de 128 dimensiones) se implementó mediante las métricas WSS, BSS entre las clases de nanoespumas. La figura 13 presenta los histogramas de distancias obtenidos para  $\sigma$ , teniendo en cuenta, que los resultados previos evidencian un mejor comportamiento de discriminación para estos vectores. Como se esperaba, en la figura 13 podemos observar como la media de la distancia BSS para todas las clases es mayor en comparación a la distancia media del WSS de cada clase. Esto indica que en general la distancia entre los dos conjuntos de datos es mayor a la distancia a la cual se encuentran los datos dentro de su misma clase.

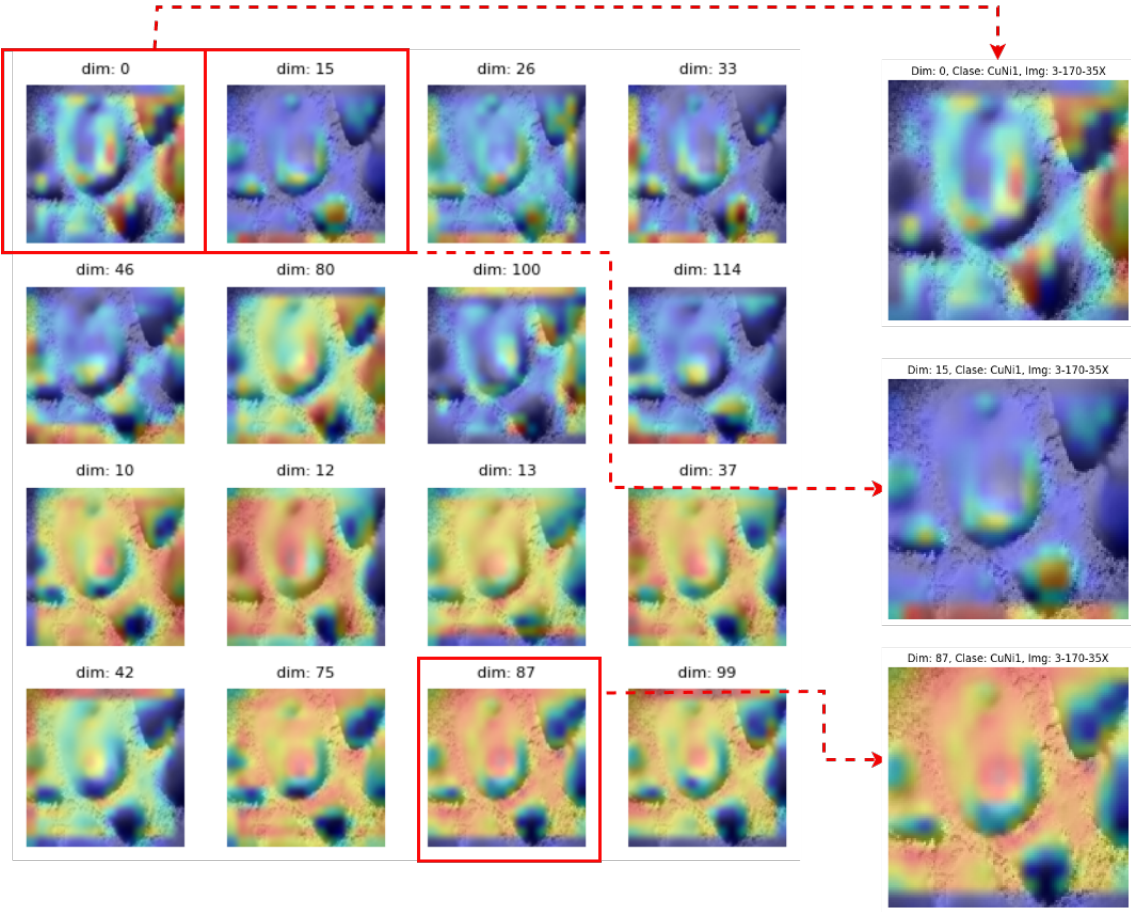
**Figure 13.** Cuantificación de distancias para el vector embebido de la varianza ( $\sigma$ ). Cada histograma representa un conjunto de distancia entre dos puntos en el espacio embebido. Los histogramas *BSS* contienen las distancias entre todos los puntos de dos clases de nanoespumas diferentes. Por su parte, los histogramas *WSS* representan todas las distancias entre los puntos de una misma clase de nanoespuma.



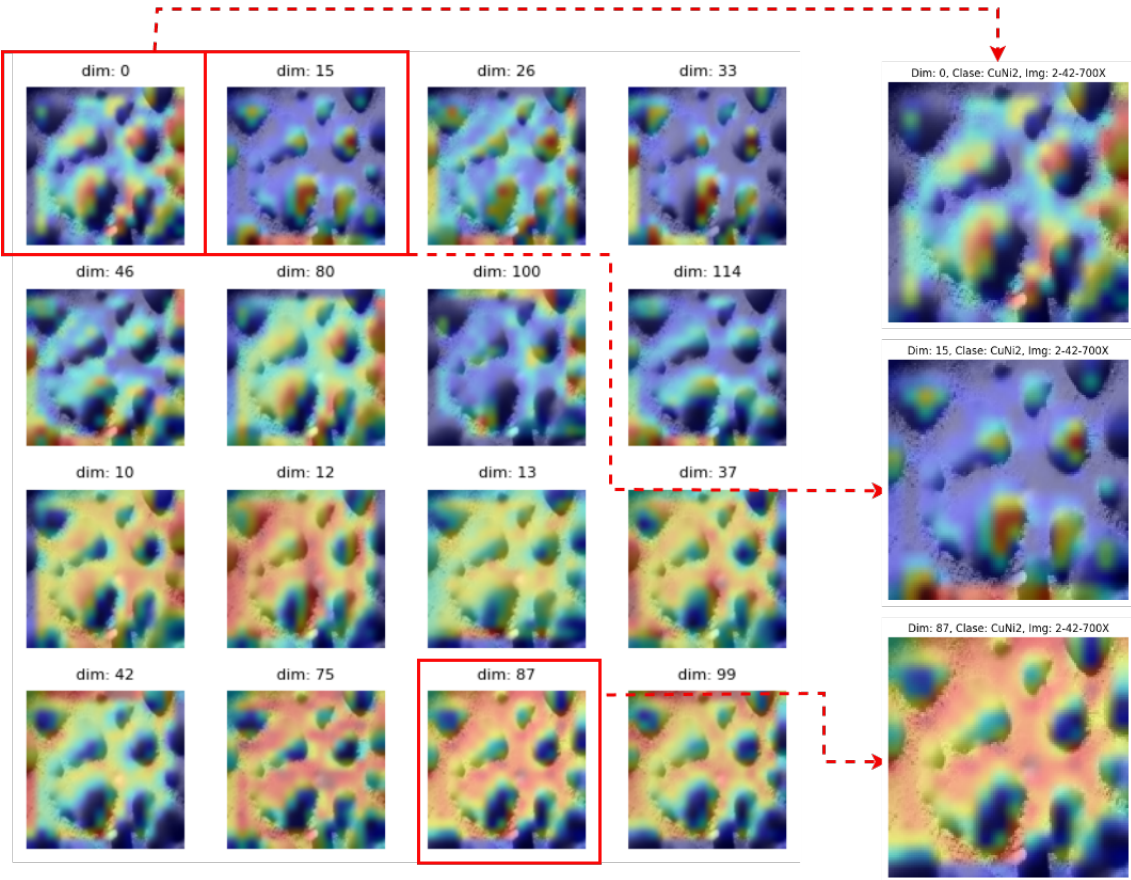
A partir de lo que podemos apreciar en la figura 13 es posible decir que existe una mayor diferencia entre la clase de nanoespumas *CuNi1* y la clase *CuNi3*, respecto las otras combinaciones de nanoespumas. Esto tiene coherencia experimental ya que son las clases de nanoespumas con mayor diferencia en su composición química, mientras que la clase *CuNi2* que presenta una composición intermedia no presenta una separación tan marcada

respecto a las otras dos clases, presentando incluso gran similitud con la clase *CuNi1*. Con el propósito de identificar visualmente las zonas de las nanoespumas más importantes a la hora de construir el conjunto de vectores embebidos se implementó la técnica de mapas de saliencia Grad-CAM. Las figuras 14, 15 y 16 presentan algunos ejemplos de los mapas de saliencia obtenidos para las clases *CuNi1*, *CuNi2* y *CuNi3* respectivamente. Para la visualización de mapas se tuvo en cuenta la reconstrucción desde el vector de valores esperados, es decir, el vector de medias, el cual contiene una aproximación más cercana a la reconstrucción. En otro caso, el vector varianza monitorea la dispersión de la reconstrucción, lo cual es indicativo en la clasificación, pero no es consecuente con la información de reconstrucción. En estas imágenes podemos observar que dentro del conjunto de dimensiones del vector embebido existen elementos que contienen las características correspondientes a diferentes componentes de la nanoespumas como los poros y la matriz. Finalmente, a partir del conjunto de vectores embebidos de la varianza se buscó analizar si la distribución espacial de los vectores contiene las características visuales de las nanoespumas dentro del espacio latente, así como también, la posibilidad de crear imágenes artificiales de nuevas configuraciones de nanoespumas a partir de la reconstrucción de nuevos vectores embebidos. La figura 17 muestra la distribución de los vectores embebidos de la varianza en dos dimensiones (PCA) para el conjunto de prueba de los datos. A partir de este conjunto de datos proyectamos las imágenes correspondientes a algunos de los vectores dentro del espacio observando así una transformación en el tamaño y cantidad de poros a medida que nos movemos sobre el espacio latente.

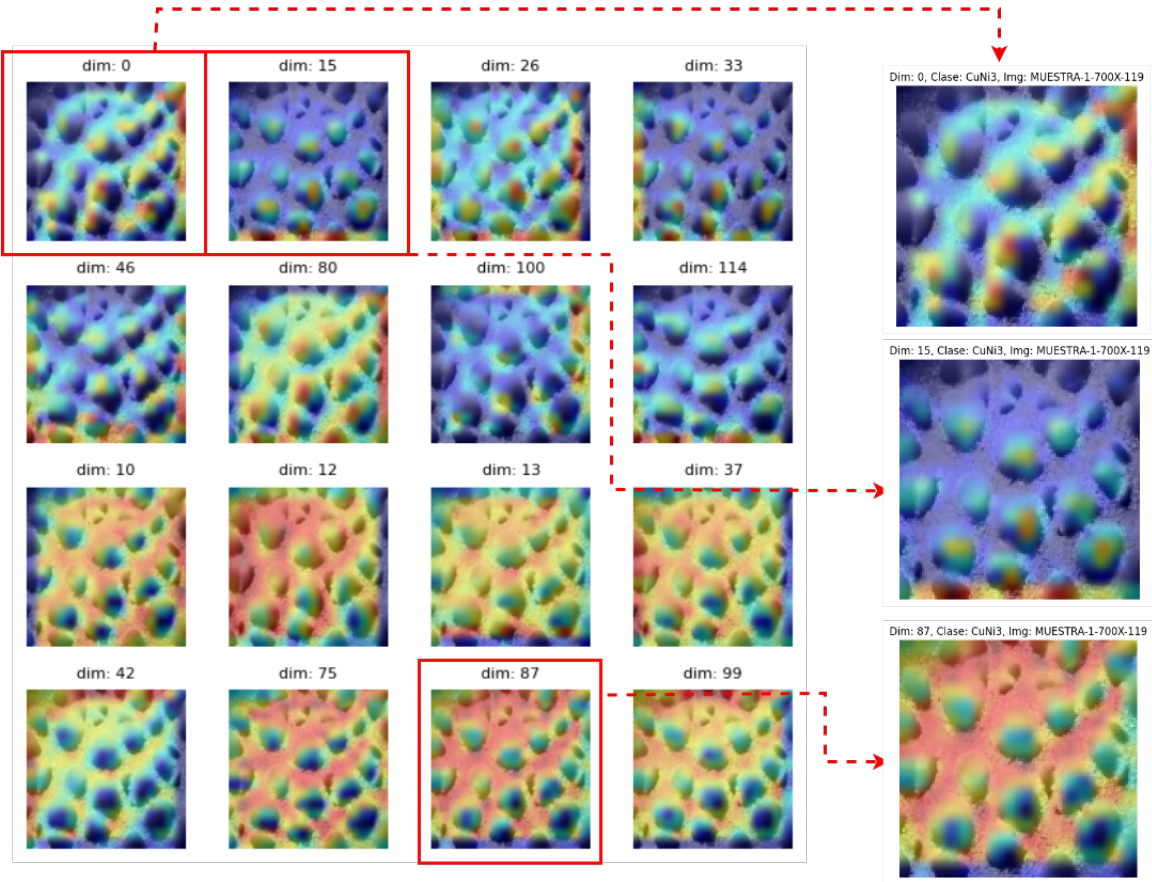
**Figure 14.** Activaciones Grad-Cam para diferentes dimensiones del embebido  $\mu$  para nanoespumas CuNi1.



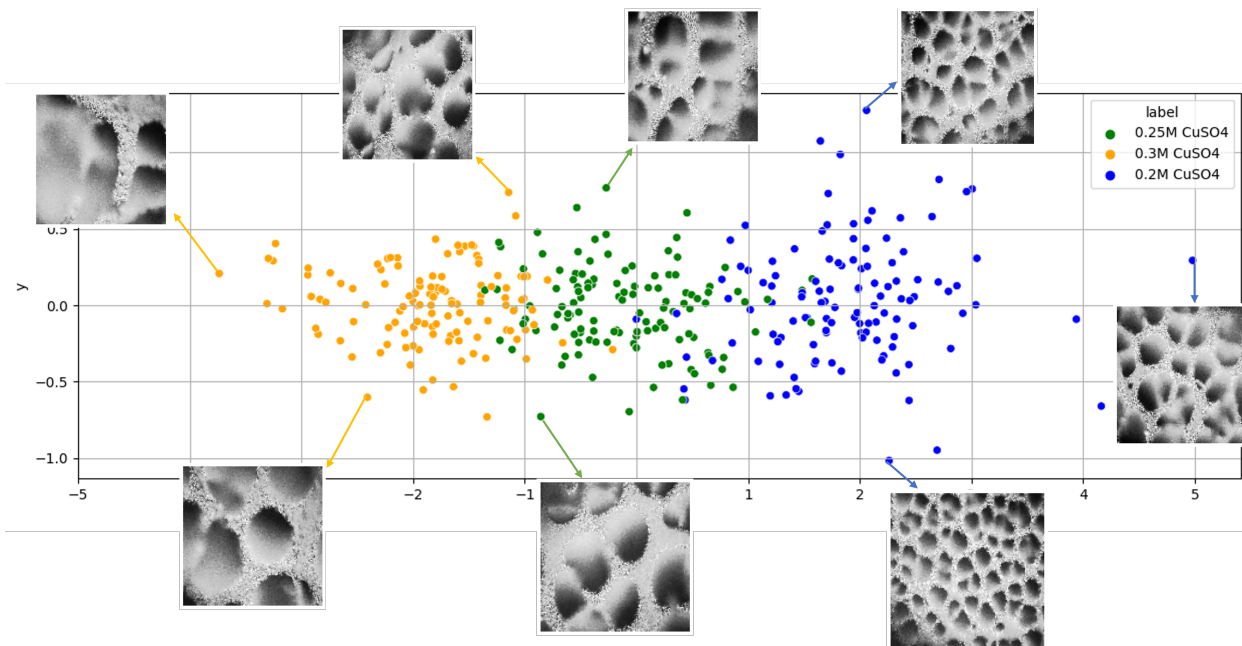
**Figure 15.** Activaciones Grad-Cam para diferentes dimensiones del embebido  $\mu$  para nanoespumas CuNi2.



**Figure 16.** Activaciones Grad-Cam para diferentes dimensiones del embebido  $\mu$  para nanoespumas CuNi3.



**Figure 17.** Distribución sobre el espacio latente 2D del conjunto de vectores embebidos de la varianza para el conjunto de datos de prueba. También se seleccionaron algunos de los datos en los extremos de cada clase para observar la distribución de las características de las nanoespumas



## 7. CONCLUSIONES Y TRABAJO FUTURO

En este trabajo se implementó y adaptó un *autoencoder* variacional para codificar patrones geométricos que correspondan a la síntesis de nanoespumas con diferentes composiciones. El autoencoder fue ajustado, siguiendo una tarea de reconstrucción de imágenes, y logrando codificar vectores embebidos con la capacidad de discriminación entre diferentes geometrías de las nanoespumas.

En este trabajo, utilizando observaciones de un microscopio confocal, se lograron observar patrones codificados en los vectores embebidos para representar patrones geométricos de las nanoespumas. Este hecho constituye un potencial de las herramientas computacionales para la caracterización y cuantificación de la geometría sin dedicarse a análisis tediosos y bajo medidas simplificadas de los poros. Estos modelos son discriminables a partir del uso de herramientas de aprendizaje de máquina como *Random Forest*, *KNN* y *decision tree*, logrando niveles de precisión por encima del 90%.

Además, los resultados evidencian que se pueden simular entornos experimentales para la construcción de nanoespumas, siendo este hecho de gran potencial en los expertos del área, para validar el comportamiento geométrico, frente a diferentes composiciones de cobre-níquel. Como herramienta alternativa, también se obtuvieron mapas de explicabilidad que pueden dar evidencia de los componentes geométricos que se codifican en el vector embebido. Así, logrando enfocarse en características como el espacio entre los poros y la geometría del poro, características usadas por los expertos durante el análisis.

Como trabajo futuro se esperan continuar indagando en nuevas arquitecturas que tengan la capacidad de representar la distribución de características geométricas, además que tengan el carácter discriminativo entre diferentes composiciones del material. También se pretende investigar el comportamiento con observaciones en otras magnificaciones, para que las herramientas computacionales puedan suplir requerimientos experimentales que pueden llegar a ser costosos o tomar tiempos prolongados en la síntesis de las nanoespumas.

## BIBLIOGRAFÍA

ABDEL-KARIM, R et al. “Electrochemical performance of porous Ni-Cu anodes for direct methanol fuel cells”. In: *Int. J. Electrochem. Sci* 14 (2019), pp. 3035–3054 (cit. on p. 17).

ABDELFATAH, Aliaa et al. “Electrochemical characterization of electrodeposited Ni–Cu foams and their application as electrodes for supercapacitors”. In: *Frontiers in Mechanical Engineering* (2020), p. 35 (cit. on pp. 14, 17).

BENGTSSON, Mattias KO; TUNSU, Cristian, and WICKMAN, Bjorn. “Decontamination of mercury-containing aqueous streams by electrochemical alloy formation on copper”. In: *Industrial & Engineering Chemistry Research* 58.21 (2019), pp. 9166–9172 (cit. on p. 17).

BRUN, Francesco et al. “Pore3D: A software library for quantitative analysis of porous media”. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 615.3 (2010), pp. 326–332 (cit. on p. 14).

CHAVAN, Asmita A. et al. “Elastomeric Nanocomposite Foams for the Removal of Heavy Metal Ions from Water”. In: *ACS Applied Materials & Interfaces* 7.27 (2015). PMID: 26133912, pp. 14778–14784. DOI: 10.1021/acsami.5b03003. eprint: <https://doi.org/10.1021/acsami.5b03003> (cit. on p. 12).

CHUNG, Sang-Yeop et al. “Pore characteristics and their effects on the material properties of foamed concrete evaluated using micro-CT images and numerical approaches”. In: *Applied Sciences* 7.6 (2017), p. 550 (cit. on p. 14).

COEURET, François. “Ingeniería de los procesos electroquímicos¿ De dónde viene y en qué consiste?” In: *Educación Química* 18.2 (2007), pp. 120–127 (cit. on p. 13).

CRISTOVAO, Paulino et al. “Generating in-between images through learned latent space representation using variational autoencoders”. In: *IEEE Access* 8 (2020), pp. 149456–149467 (cit. on p. 21).

DIAZ, Farith A; KATZ, Lynn E, and LAWLER, Desmond F. “Mercury pollution in Colombia: challenges to reduce the use of mercury in artisanal and small-scale gold mining in the light of the Minamata Convention”. In: *Water International* 45.7-8 (2020), pp. 730–745 (cit. on p. 12).

DOERSCH, Carl. “Tutorial on variational autoencoders”. In: *arXiv preprint arXiv:1606.05908* (2016) (cit. on pp. 21, 32).

EUGÉNIO, S et al. “Electrodeposition and characterization of nickel–copper metallic foams for application as electrodes for supercapacitors”. In: *Journal of Applied Electrochemistry* 44 (2014), pp. 455–465 (cit. on p. 13).

GE, Mengshu et al. “Deep learning analysis on microscopic imaging in materials science”. In: *Materials Today Nano* 11 (2020), p. 100087 (cit. on p. 15).

GWOREK, Barbara et al. “Mercury in Marine and Oceanic Waters—a Review”. In: *Water, Air, & Soil Pollution* 227.10 (Sept. 2016). DOI: 10.1007/s11270-016-3060-3 (cit. on p. 12).

HE, Kaiming et al. *Deep Residual Learning for Image Recognition*. 2015. arXiv: 1512.03385 [cs.CV] (cit. on p. 19).

HIRAIDE, Kazuya et al. “Application of deep learning to inverse design of phase separation structure in polymer alloy”. In: *Computational Materials Science* 190 (2021), p. 110278 (cit. on p. 15).

HUANG, Gao et al. *Densely Connected Convolutional Networks*. 2018. arXiv: 1608.06993 [cs.CV] (cit. on p. 19).

JIAO, Licheng and ZHAO, Jin. “A survey on the new generation of deep learning in image processing”. In: *IEEE Access* 7 (2019), pp. 172231–172263 (cit. on p. 31).

KIM, Chang-Eun; RAHIMI, Raheleh M, and BAHR, David F. “The structure and mechanical properties of Cu<sub>50</sub>Ni<sub>50</sub> alloy nanofoams formed via polymeric templating”. In: *MRS Communications* 10.2 (2020), pp. 286–291 (cit. on p. 14).

KIM, Chang-Eun et al. “Synthesis, microstructure, and mechanical properties of polycrystalline Cu nano-foam”. In: *MRS Advances* 3.8-9 (2018), pp. 469–475 (cit. on p. 14).

KINGMA, Diederik P; WELLING, Max, et al. “An introduction to variational autoencoders”. In: *Foundations and Trends® in Machine Learning* 12.4 (2019), pp. 307–392 (cit. on pp. 31, 32).

KOTESWARARAO, Jammula et al. “Estimation of structural and mechanical properties of Cadmium Sulfide/PVA nanocomposite films”. In: *Heliyon* 5.6 (2019), e01851 (cit. on p. 14).

KURITA, Takio. “Principal component analysis (PCA)”. In: *Computer Vision: A Reference Guide* (2019), pp. 1–4 (cit. on p. 22).

LIU, Ran and ANTONIOU, Antonia. “A relationship between the geometrical structure of a nanoporous metal foam and its modulus”. In: *Acta Materialia* 61.7 (2013), pp. 2390–2402 (cit. on p. 15).

LIU, Wenqian et al. “Towards visually explaining variational autoencoders”. In: *Proceedings of the IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*. 2020, pp. 8642–8651 (cit. on p. 36).

MANTEY, J. et al. “Mercury contamination of soil and water media from different illegal artisanal small-scale gold mining operations (galamsey)”. In: *Heliyon* 6.6 (2020), e04312. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e04312> (cit. on p. 12).

MARTINEZ, Aleix M and KAK, Avinash C. “Pca versus lda”. In: *IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence* 23.2 (2001), pp. 228–233 (cit. on p. 24).

MICHELUCCI, Umberto. “An introduction to autoencoders”. In: *arXiv preprint arXiv:2201.03898* (2022) (cit. on p. 21).

NAM, DoHwan et al. “Effects of  $(\text{NH}_4)_2\text{SO}_4$  and BTA on the nanostructure of copper foam prepared by electrodeposition”. In: *Electrochimica Acta* 56.25 (Oct. 2011), pp. 9397–9405. DOI: [10.1016/j.electacta.2011.08.025](https://doi.org/10.1016/j.electacta.2011.08.025) (cit. on p. 13).

O’MALLEY, Daniel; GOLDEN, John K, and VESSELINOV, Velimir V. “Learning to regularize with a variational autoencoder for hydrologic inverse analysis”. In: *arXiv preprint arXiv:1906.02401* (2019) (cit. on p. 21).

OPPEDISANO, Daniel. “Electrodeposited metal nanostructures fabricated by dynamic hydrogen bubble templating”. PhD thesis. RMIT University, 2016 (cit. on p. 17).

PLOWMAN, Blake J; JONES, Lathe A, and BHARGAVA, Suresh K. “Building with bubbles: the formation of high surface area honeycomb-like films via hydrogen bubble templated electrodeposition”. In: *Chemical Communications* 51.21 (2015), pp. 4331–4346 (cit. on p. 18).

REDA, Y et al. "Electrochemical behavior of Ni–Cu foams fabricated by dynamic hydrogen bubble template electrodeposition used for energy applications". In: *Ain Shams Engineering Journal* 13.1 (2022), p. 101532 (cit. on p. 13).

SELVARAJU, Ramprasaath R et al. "Grad-CAM: Why did you say that?" In: *arXiv preprint arXiv:1611.07450* (2016) (cit. on p. 27).

SHIN, H.-C.; DONG, J., and LIU, M. "Nanoporous Structures Prepared by an Electrochemical Deposition Process". In: *Advanced Materials* 15.19 (Oct. 2003), pp. 1610–1614. DOI: 10.1002/adma.200305160 (cit. on p. 13).

SIMONYAN, Karen and ZISSERMAN, Andrew. *Very Deep Convolutional Networks for Large-Scale Image Recognition*. 2015. arXiv: 1409.1556 [cs.CV] (cit. on p. 19).

SMITH, Nicole M. et al. "Human health and safety in artisanal and small-scale mining: an integrated approach to risk mitigation". In: *Journal of Cleaner Production* 129 (2016), pp. 43–52. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2016.04.124> (cit. on p. 12).

SURUCU, O. "Electrochemical removal and simultaneous sensing of mercury with inductively coupled plasma-mass spectrometry from drinking water". In: *Materials Today Chemistry* 23 (2022), p. 100639 (cit. on p. 17).

TAN, Mingxing and LE, Quoc V. *EfficientNet: Rethinking Model Scaling for Convolutional Neural Networks*. 2020. arXiv: 1905.11946 [cs.LG] (cit. on p. 19).

TRAN, Thien-Khanh et al. "Electrochemical treatment of wastewater: Selectivity of the heavy metals removal process". In: *International Journal of hydrogen energy* 42.45 (2017), pp. 27741–27748 (cit. on p. 17).

VOGELSANGER, Christopher and FEDERAU, Christian. “Latent space analysis of vae and intro-vae applied to 3-dimensional mr brain volumes of multiple sclerosis, leukoencephalopathy, and healthy patients”. In: *arXiv preprint arXiv:2101.06772* (2021) (cit. on pp. 21, 34).

WAY, Gregory P and GREENE, Casey S. “Extracting a biologically relevant latent space from cancer transcriptomes with variational autoencoders”. In: *PACIFIC SYMPOSIUM on BIO-COMPUTING 2018: Proceedings of the Pacific Symposium*. World Scientific. 2018, pp. 80–91 (cit. on p. 31).

ZHANG, Hang et al. *ResNeSt: Split-Attention Networks*. 2020. arXiv: 2004.08955 [cs.CV] (cit. on p. 19).

ZHOU, Bolei et al. “Learning deep features for discriminative localization”. In: *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*. 2016, pp. 2921–2929 (cit. on p. 26).