





La dimensión fractal como parte de un modelo computacional para predecir el espesor de películas delgadas de ZnO

Fractal dimension as part of a computational model to predict ZnO thin films' thickness

H. D. Molina-Ruiz ^{a,*}, O. Pérez-Cortez ^a, H. Gómez-Pozos ^a, H. Castillejos-Fernández ^a

^aÁrea Académica de Computación y Electrónica, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 42184, Pachuca, Hidalgo, México.

Resumen

Propósito: El objetivo del presente trabajo consiste en predecir el espesor de películas delgadas de ZnO, con base en el cálculo de su dimensión fractal, a través del uso de una red neuronal del módulo Keras[®] perteneciente a la librería TensorFlow[®], con el optimizador “adam”, para crear una relación aparentemente biunívoca entre ambas variables, la cual contribuya en la generación de un modelo computacional para predecir una propiedad física de las películas delgadas.

Metodología: En principio, se obtuvieron imágenes SEM de la literatura científica que reportan el espesor de la película; posteriormente, estas imágenes se procesaron y segmentaron a través del método de Chan-Vese; seguido, se calculó la dimensión fractal de las imágenes segmentadas; y, entonces, los datos extraídos se llevaron a una red neuronal con el objetivo de predecir el espesor no conocido y arbitrario, de una película delgada.

Hallazgos: La intención del trabajo es generar una relación biunívoca entre el espesor de películas de óxido de zinc y su dimensión fractal. Al respecto de trabajos previos en la literatura científica, no existen estudios que aborden la relación entre una variable medida y una calculada. Los resultados aseveran que se puede crear una relación aparentemente biunívoca entre el espesor y la dimensión fractal de películas delgadas.

Limitaciones de la investigación: La propuesta utiliza una red neuronal para predecir el espesor de películas delgadas a través de su dimensión fractal calculada, sin embargo, la poca disponibilidad de imágenes requiere de un mayor acceso a este tipo de imágenes.

Implicaciones prácticas: La propuesta, puede extenderse al cálculo de otras métricas, que, en conjunto, ayuden a la creación de un modelo computacional para predicción del espesor de películas delgadas.

Originalidad:

En el real entender de los autores, el trabajo presentado es original para la propuesta de predicción del espesor de películas delgadas a través de la dimensión fractal calculada.

Palabras Clave: Dimensión fractal, Espesor de películas delgadas, Red neuronal, SEM (scanning electron microscopy), Tensor Flow.

Abstract

Purpose: The aim of this research is to predict the thickness of ZnO thin films, based on the fractal dimension, thorough a neural network which uses Keras[®] module, from TensorFlow[®] library, with adam's optimization solver to create an apparently biunique relationship between thickness and fractal dimension, which contributes to the generation of a computer model to predict a physic characteristic in the field of think films.

Design/methodology/approach: First, SEM images, which reported their thickness, were obtained from literature; then they were processed and segmented by Chan-Vese segmentation's method; fractal dimension were calculated over the segmented images; and, then the extracted data were set in to a neural network to predict the unknown and arbitrary thin film' thickness.

Findings: The main attention of this paper is state a biunique relation between ZnO thin films' thickness and fractal dimension. Concerning the looking of previous researches, which state or rough out the relation between a measured and a

*Autor para la correspondencia: hmolina@uaeh.edu.mx; m_en_i_molina_ruiz@engineer.com

Correo electrónico: hmolina@uaeh.edu.mx (Héctor Daniel Molina-Ruiz), obed_perez@uaeh.edu.mx (Obed Pérez-Cortez), gpozos@uaeh.edu.mx (Heberto Gómez-Pozos), heydy_castillejos@uaeh.edu.mx (Heydy Castillejos-Fernández)

calculated variable in the field of thin films, it seems they do not exist. The result ensures that a biunique relationship between thin films thickness and fractal dimension can be stated.

Research limitations/implications: The approach has used a neural network to predict thin films' thickness through its calculated fractal dimension, however, the lack of a data base images' availability, encourage the need for extend this images' availability.

Practical implications: The proposed approach could be extended to other calculated metrics, which assembled, can help stating a computational model to predict the thin films' thickness.

Originality/value: To the best of the authors' knowledge, the research presented is fully original for the approach to predict thin films' thickness through their calculated fractal dimension.

Keywords: *Fractal dimension, Neural network, SEM (scanning electron microscopy), TensorFlow®, Thin film's thickness.*

1. Introducción

Hoy en día, las aplicaciones, herramientas y métodos informáticos, cambian constantemente y mejoran los contextos de la humanidad. Los algoritmos, herramientas y métodos computacionales se pueden aplicar en la mayoría de las áreas de conocimiento, como las relacionadas con escalas nanométricas, en particular el contexto de películas delgadas (utilizadas para detección de gases). Al hablar de la predicción de una propiedad física, cabe hacer mención que no se ha detectado la existencia de un modelo que vincule alguna propiedad de la morfología de las películas delgadas con su espesor.

El presente estudio, forma parte de una propuesta para relacionar la dimensión fractal de películas delgadas de óxido de zinc (ZnO) con el espesor de las mencionadas películas delgadas, con objeto de crear una relación aparentemente biunívoca entre ambas variables, la cual contribuya en la generación de un modelo computacional para predecir una propiedad física de las películas delgadas, con base en una o más variables de entrada.

La morfología para nuestro caso, se interpreta como una serie de métricas calculadas a partir de imágenes SEM (por sus siglas en inglés *scanning electron microscopy*). En particular, en el presente documento, se aborda la relación aparentemente biunívoca que existe entre la dimensión fractal, obtenida de imágenes SEM ya segmentadas y su espesor.

2. Referente teórico

Una imagen es un subconjunto de una señal, siendo, además, una función que transporta información y puede representarse de varias formas. En este contexto, la señal que conforma una imagen, puede sintetizarse y manipularse a través de algoritmos computacionales, para emular un fenómeno físico y utilizarse en el procesamiento de imágenes, para extraer sus características, con el consecuente uso o integración de esquemas que permitan generar relaciones entre dichas características.

Debido a que se puede crear una relación biunívoca entre variables; un modelo computacional para predecir el espesor de la película delgada, basado en su morfología o alguna de sus características morfológicas, puede tener aplicación, en diferentes campos de estudio, p.ej. en la calidad de aplicación de pinturas en el sector automotriz, las propiedades mecánicas de metales forjados, o alguna otra que pueda relacionar características de la superficie con algún cálculo (como lo es la dimensión fractal).

2.1. Películas delgadas

Como se menciona en Godse *et al.* (2020), en los últimos años, los óxidos semiconductores atrajeron un gran interés en aplicaciones tales como la fotónica, la óptica y la electrónica debido a su rendimiento superlativo. Para Chaabouni, Abaab & Rezig (2004), una cuestión crítica en los óxidos semiconductores, como dispositivos sensores de gas, es controlar las propiedades superficiales y estructurales para modificar las propiedades de detección. Los óxidos semiconductores nanocristalinos son muy importantes como material sensor ya que la reducción de tamaño y el control de la difusión de gases son los principales factores que mejoran las propiedades de detección de gases (Sarala Devi *et al.*, 2006).

El óxido de zinc (ZnO) es un material único que exhibe múltiples propiedades semiconductoras, piezoeléctricas y piroeléctricas (Wang, 2004). De acuerdo con Li *et al.* (2013), entre varios nanomateriales semiconductores, los basados en ZnO han atraído un gran interés debido a su amplia brecha de banda directa (direct band gap - 3,37 eV) y la gran cantidad de energía de unión (60 meV). El presente estudio se calcula la dimensión fractal de imágenes SEM de películas delgadas de ZnO; se hace uso de estas imágenes, debido a la importancia de las películas delgadas de ZnO como material de detección de gases (Zubair & Akhtar, 2019; Yuan *et al.*, 2019; Lorwongtragool, Boonyopakorn & Kladsomboon, 2019; Godse *et al.*, 2020; Han, 2020; Khatibani, 2020); esta dimensión fractal se toma como base para predecir el espesor de películas delgadas.

Algunas aplicaciones de películas delgadas son: sensores de monóxido de carbono (CO) (Al-Kuhaili, Durrani & Bakhtiari, 2008); detección de n-butilamina (Kaneti *et al.*, 2016); detección de acetona en el gas de aliento humano (biomarcador para la diabetes tipo 1 (T1D)) (Fan & Jia, 2011).

2.2. Espesor de películas delgadas

Como se hace mención en Thirumoorthi & Thomas Joseph Prakash (2019), la morfología superficial influye en sus propiedades mecánicas, eléctricas y ópticas de las películas delgadas. De allí la importancia de contar con una herramienta computacional que permita determinar la morfología superficial.

El espesor se puede definir como una diferencia de distancia, altura y profundidad de una superficie. Cuando existe una superficie de referencia, se puede medir si existen algunas diferencias o cambios en la medición de distancia de la altura con referencia a la profundidad. En el caso de películas delgadas, el espesor se puede establecer, como la diferencia

de altura, con referencia a la superficie del sustrato. Marotti (2004), usa la variable “d” para referirse al espesor de la película; y, Vetelino & Reghu (2011) usa la variable “t” para referir el espesor de la película.

En Ennaceri *et al.* (2019), se expone que existe una relación entre la morfología y el espesor de películas delgadas de ZnO. Hassan *et al.* (2019), encontraron que el tamaño de grano para películas delgadas de ZnO sin impurificar es de 43.53 nm , al considerar un espesor de $300 \pm 30 \text{ nm}$, depositadas mediante el método de spray pirólisis. Rebollar-Rivera, Maldonado-Álvarez & Olvera-Amador (2019), reportan que el tamaño de grano se incrementa de 17 nm a 60 nm , conforme el espesor de la película delgada aumenta de 50 nm a 400 nm . Liu *et al.* (2019), reportan para muestras de ZnO sin impurificar, superficies densamente pobladas y uniformes, con un espesor de $2.6 \mu\text{m}$.

2.3. Dimensión fractal

Un fractal es, por definición, un conjunto para el cual la dimensión de Hausdorff Besicovitch excede estrictamente la dimensión topológica (Mandelbrot, 1983). Esos excedentes se pueden ajustar al teorema de Szpilrajn. Según Szpilrajn (1930), existe una relación entre un par de números que establecen un orden o un pre-orden.

La dimensión fractal es el parámetro fundamental para esbozar las características fractales en el contexto de la geometría fractal (Wei & Tang, 2008). La dimensión *Hausdorff Besicovitch* o dimensión fractal de un conjunto A restringido en \mathbb{R}^n , es un número real usado para caracterizar la complejidad geométrica de A ; en la cual el conjunto A se denomina un fractal si su dimensión *Hausdorff Besicovitch* estrictamente mayor que su dimensión topológica (Chaudhuri & Sarkar, 1995).

La dimensión fractal es una expresión lógica de la complejidad espacial que mide la complejidad espacial y codifica el número (a menudo fraccionario) de grados de libertad necesarios para describir una curva o conjunto de datos en particular (Zhang *et al.*, 2019b). La dimensión fractal, como caracterización cuantitativa y parámetro básico del fractal, es un principio importante de la teoría fractal (Bi *et al.*, 2015).

De forma general la dimensión fractal objeto geométrico, por ejemplo: un punto es de dimensión 0, línea (dimensión 1), plano (dimensión 2), un volumen (dimensión 3). En este contexto, una forma sencilla de medir una curva, es a través de un proceso de rectificación, mediante el ajuste de rectas a una curva determinada; para lo cual entre más pequeñas sea las rectas, mejor será el ajuste (Figura 1).

Al hacer referencia a la dimensión fractal, por ejemplo, una dimensión fractal de 2.1 se interpreta como que las propiedades de la figura, se encuentran entre las propiedades de un plano y un volumen.

Uno de los métodos para calcular la dimensión fractal es el método de la dimensión Minkowski-Bouligand que, según Zhang *et al.* (2016), estima la dimensión fractal, suponiendo que un tipo de red o patrón se encuentra sobre una cuadrícula igualmente espaciada, en la cual se cuenta una cantidad de cajas (cuadros) a cubrir, siendo el método de conteo de cajas una herramienta que puede obtener la

curva de las cajas requeridas con la escala correspondiente a la cuadrícula.



Figura 1: Ejemplo de estimación de la dimensión de Hausdorff-Besicovitch para la costa de Gran Bretaña. Imagen bajo licencia CC BY-SA 3.0.

3. Metodología

Por un lado, los métodos de regresión, en el contexto estadístico, permiten relacionar una o más variables independientes, con una variable dependiente, la cual se puede pronosticar con base en la información de la cual se disponga. Por otro, es claro que los avances tecnológicos y la capacidad computacional hacen posible la aplicación de métodos o técnicas computacionales complejas para realizar diferentes tareas, como el uso de redes neuronales que actúan como métodos de pronóstico más potentes y complejos, aumentando la eficiencia del pronóstico.

A través del avance computacional, en el campo del software, han surgido diferentes algoritmos para la implementación de redes neuronales. En específico, entre los algoritmos de optimización de descenso de gradiente estocástico (por sus siglas en inglés – Stochastic Gradient Descent Optimisation Algorithms) se puede hacer mención de: Adagrad, RMSprop, ADdelta, Adadelta, Adam, AdaMax, entre otros.

La optimización por medio de Adam, consiste de un método estocástico de optimización de descenso, basado en estimaciones adaptativas de momentos de primer y segundo orden. De acuerdo con Kingma & Ba (2015), Adam es un algoritmo simple y computacionalmente eficiente para optimización basada en gradientes de funciones objetivo estocásticas; combina la habilidad del AdaGrad (Adaptive Gradient Algorithm) para tratar con gradientes escasos y RMSProp (Root Mean Square Propagation) para trabajar con objetivos no estacionarios. En este estudio se utiliza la función Adam, del módulo Keras® perteneciente a la librería de TensorFlow® (desarrollada por Google® LLC) como herramienta de predicción, vinculando las mediciones de la dimensión fractal a partir de imágenes SEM ya segmentadas, para películas de óxido de zinc (ZnO), en las cuales se reconocen las partículas o granos presentes, resultado de la deposición de la película delgada. Cabe hacer mención que la programación del código utilizado se realiza en Colab® de Google®, el cual utiliza la versión de Python® 3.6.9.

Para el desarrollo de la presente investigación, se esboza una metodología general, que se siguió para la concreción de proceso de investigación:

1.- Construcción de una base de datos de imágenes SEM: Mendonça *et al.* (2013), destacan que la disponibilidad y la generación de una base de datos de imágenes es de vital importancia. Para la presente investigación, una base de datos que incluye imágenes SEM encontradas en la literatura científica (que reporten su espesor), para su posterior procesamiento, genera el sustento del cálculo de la dimensión fractal en las imágenes ya procesadas, además del registro de la variable de interés, la cual será predicha. En este sentido, cabe hacer mención que no se ha podido determinar la existencia de una base de datos para el tipo de imágenes utilizadas en esta propuesta; es por ello que se recurre al uso de imágenes reportadas en la literatura científica.

2.- Procesamiento de imágenes: Basavaprasad & Ravi (2014), realizan un estudio sistemático sobre la importancia del procesamiento de imágenes y sus aplicaciones en el campo de la visión computacional, encontrando un gran alcance para su aplicación. El procesamiento de imágenes ayuda en la investigación actual, ya que contribuye en la adecuación y extracción información valiosa de las diferentes imágenes que se utilizaron en el proceso de investigación, particularmente en el cálculo de la dimensión fractal. Una vez obtenidas las imágenes de películas delgadas, se realizó el procesamiento de dichas imágenes para la obtención de una imagen binarizada, a la cual se le realizó el cálculo de su dimensión fractal.

3.- Cálculo de la dimensión fractal: Se realizó el cálculo de la dimensión fractal para diferentes imágenes SEM ya procesadas y segmentadas. Con ello se integra una base de datos que fuge como variable de entrada para el modelo de predicción.

4.- Registro de espesores: Se recuperaron los datos correspondientes a los espesores reportados en literatura científica. Estos espesores, integran los datos de la variable a predecir, o variable de salida.

5.- Aplicación de una red neuronal y predicción: Se aplicó la red neuronal, particularmente el algoritmo “Adam”, de la librería “TensorFlow®”, para que, al seleccionar arbitrariamente una medición desconocida o que no forma parte de los registros vinculados a las dimensiones fractales calculadas, a partir de las imágenes ya segmentadas, se efectúe la predicción del espesor, con base en la relación aparentemente biunívoca entre ambas variables.

3.1. Proceso de predicción

Las imágenes utilizadas en el presente estudio se retoman de la literatura científica, a partir de lo cual se recuperan los espesores (medidos) de películas delgadas, reportados en diferentes estudios (Figura 2).

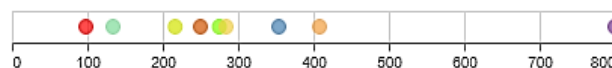


Figura 2: Representación de espesores recuperados de la literatura y adaptados al contexto del estudio. Fuente: Elaboración propia

A pesar de que existen diferentes bases de datos de imágenes SEM (ver Apéndice I), no se ha podido determinar la existencia de una base de datos específica para imágenes SEM, correspondientes a películas delgadas de óxido de zinc.

A continuación, se muestra una imagen seleccionada del banco de datos generado (Figura 3).

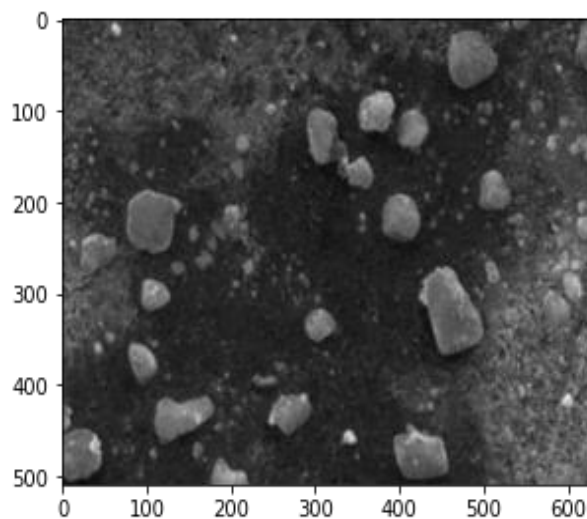


Figura 3: Imagen SEM recuperada de la revisión de la literatura. Fuente: Amutha *et al.* (2014)

Para el procesamiento de imágenes SEM y segmentación de las mismas se utilizó el algoritmo de segmentación propuesto por Chan-Vese (ver Chan & Vese, 1999). Este algoritmo de segmentación ofrece buenos resultados, dado que omite la referencia orillas con gradientes.

En el presente estudio el proceso de segmentación, permite generar una imagen binarizada, bajo los siguientes pasos: importar las librerías y módulos seleccionados (matplotlib, skimage & cv2); lectura de la imagen y conversión a escala de grises; aplicación del método de segmentación de Chan – Vese; y despliegue de imágenes resultantes y grafica de evolución de energía para las diferentes iteraciones. En la Figura 4, se muestra el ejemplo para la aplicación del método de Chan –Vese, para una imagen seleccionada.

Dado que el método de segmentación de Chan–Vese se basa en la minimización de energía; la evolución de energía para las diferentes iteraciones, indica el ajuste de la segmentación para las regiones de interés en la imagen de referencia. Para el caso de la Figura 3, la curva de evolución de energía indica que el ajuste para el proceso de segmentación muestra cierta eficiencia, dado su patrón de reducción energética

A continuación, se presenta la imagen seleccionada, ya segmentada, a la cual se calculará su dimensión fractal (Figura 5).

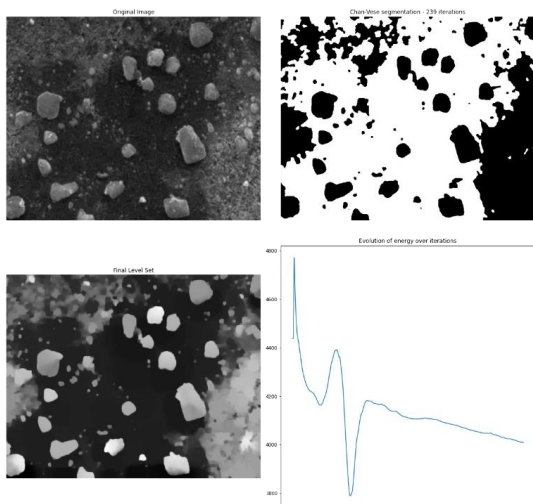


Figura 4: Ejemplo de los resultados del proceso de segmentación mediante el método de Chan – Vese, en el cual se presenta: (a) la imagen original convertida a escala de grises (arriba a la izquierda); (b) imagen segmentada con $\mu= 0.05$ y 2000 iteraciones (arriba a la derecha); (c) nivel final de ajuste (abajo a la izquierda); y, (d) la evolución de energía para las diferentes iteraciones (abajo a la derecha). Fuente: Elaboración propia.

Una vez segmentada la imagen SEM, se realiza el cálculo de la dimensión fractal, en la figura 6, se grafican las dimensiones fractales obtenidas, por el método de conteo cajas, con lo cual se alimenta a la variable independiente o capa de entrada, la cual brida los datos a la red neuronal o herramienta de predicción. Dado que la dimensión fractal es un índice adimensional, para el presente estudio, se omite el ajuste de las imágenes recuperadas, a dimensiones específicas para su procesamiento; además, se omite la restricción de tomar la misma amplificación, para las imágenes recuperadas de la literatura científica. Cabe hacer mención que previamente se tienen registrados los espesores para cada imagen SEM seleccionada, los cuales corresponden con la capa de salida.

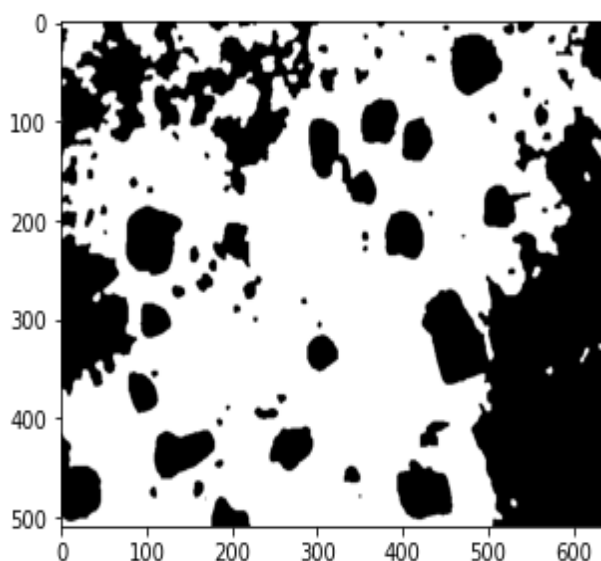


Figura 5: Imagen segmentada por el método de Chan-Vese. Fuente: Elaboración propia.

Al contar con los pares de datos, se puede realizar la aplicación de la red neuronal para predecir el espesor de

una película delgada con base en una dimensión fractal arbitraria. Cabe reiterar que la dimensión fractal calculada a partir de las imágenes segmentadas, corresponde a la capa de entrada de la red neuronal y, por su parte, los espesores, corresponden a la capa de salida de la red.

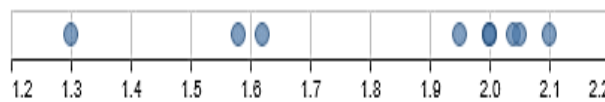


Figura 6: Representación de dimensiones fractales calculadas. Fuente: Elaboración propia

La aplicación de la red neuronal consta de los siguientes pasos: Importe de las librerías a utilizar (tensorflow, numpy & matplotlib); definición de las capas de entrada y salida; definición de las capas de trabajo (pueden incluirse capas intermedias); optimización del modelo pre-entrenado; entrenamiento del modelo con las capas de entrada y salida, propias; despliegue del gráfico correspondiente al proceso de aprendizaje de la red neuronal; predicción de la variable de salida (espesor), para una dimensión fractal seleccionada; y, determinación de los valores internos del modelo de predicción.

4. Resultados

La segmentación de imágenes SEM, proveyó de la base para el cálculo de la dimensión fractal. Esta dimensión fractal es el sustento que alimenta los datos utilizados en la capa de entrada. En la siguiente figura (figura 7) se muestran las curvas de evolución energética para el proceso de segmentación de imágenes (seleccionadas), para estas, el eje vertical representa el nivel de energía y el eje horizontal representa el número de iteración en el cual se calcula dicho nivel energético.

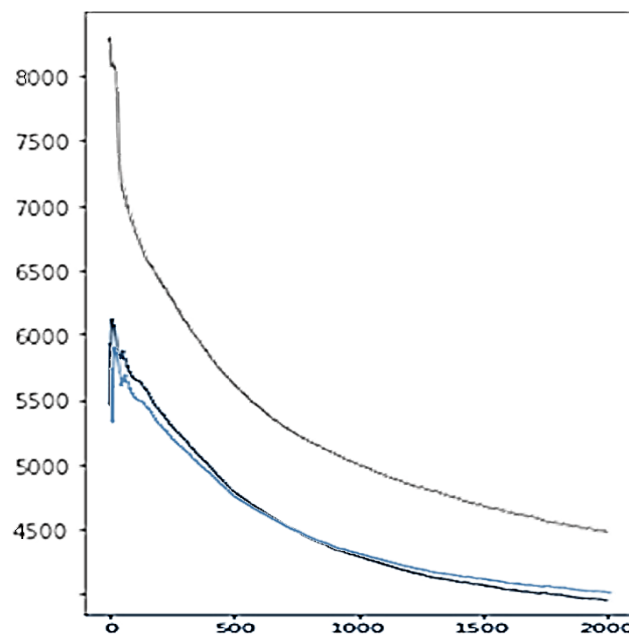


Figura 7: Curvas de evolución de energía para las imágenes SEM seleccionadas, durante el proceso de segmentación por el método de Chan – Vese. Fuente: Elaboración propia, con base en la revisión de la literatura y la segmentación de imágenes seleccionadas.

Para la figura anterior, en color gris se encuentra la curva de evolución energética para la imagen SEM ya sementada, cuyo espesor es de 354 nm con una dimensión fractal de 1.58 y en color azul se muestra la curva de evolución energética para la imagen SEM ya segmentada, cuyo espesor es de 366 nm y dimensión fractal de 2.06. En comparación con la figura 3(d), las gráficas presentadas en la figura 5, indican que el ajuste a la región de interés (segmentada) es mejor calidad, dado la energía para cada iteración tiende a minimizarse.

Las gráficas de evolución de energía para las imágenes seleccionadas, muestran una pendiente negativa, es decir, se aproximan al nivel de energía en mínimos, cuando avanzan las iteraciones del proceso de segmentación por el método de Chan – Vese.

Con el uso de Colab® de Google®, a través de la librería TensorFlow®, y particularmente el algoritmo Adam del módulo Keras®, se generó un modelo de predicción para la relación aparentemente biunívoca entre la dimensión fractal y el espesor de películas delgadas.

En primera instancia, una vez cargadas las librerías correspondientes y definidos los valores de las capas de entrada y salida, se definen las capas de trabajo (densas) y el modelo (secuencial) que será compilado a través del algoritmo Adam con un parámetro de pérdida por “error cuadrado medio”.

En este estudio, se procesaron 16 imágenes SEM, localizadas en la literatura científica, para las cuales se reporta el espesor de la película delgada (Figura 8), cabe hacer mención que, al realizar el cálculo de las dimensiones fractales para las diferentes imágenes, se obtuvieron dimensiones fractales coincidentes para diferentes espesores, por ello se optó por presentar los datos a través del promedio de espesores para las dimensiones fractales coincidentes.

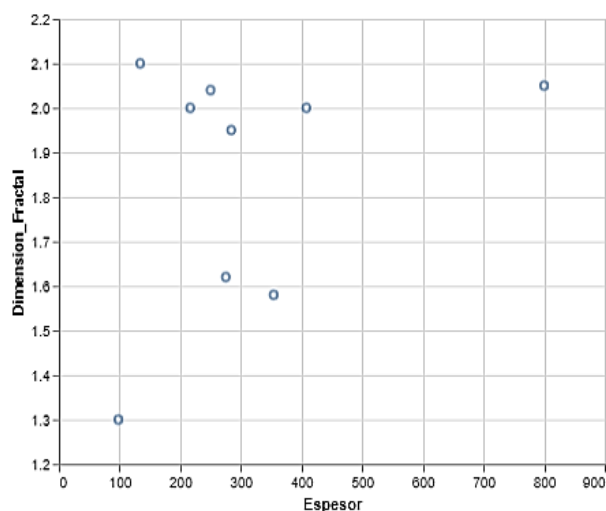


Figura 8: Representación de dimensiones fractales calculadas a partir de imágenes SEM, reportadas en la literatura científica y que contienen o informan el espesor de la película delgada correspondiente. Fuente: Elaboración propia, con base en la revisión de la literatura y el cálculo de la dimensión fractal para las imágenes seleccionadas.

En el modelo entrenado se definen arbitrariamente 5000 épocas o fases de ajuste. En el ajuste del modelo se pudo observar que, alrededor de la época 1500, dicho modelo, encuentra su grado de convergencia o ajuste (Figura 7).

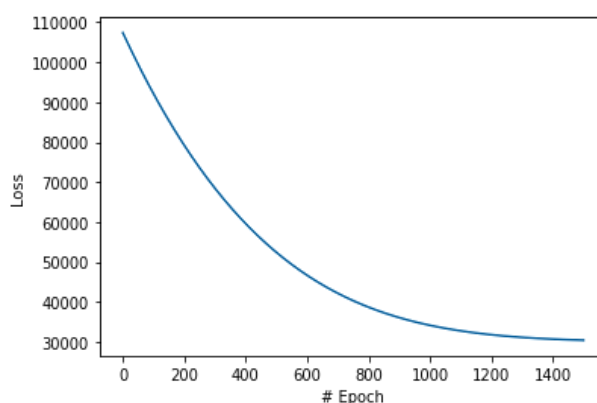


Figura 9: Función de pérdida para el modelo de predicción a través de la red neuronal. Fuente: Elaboración propia.

Una vez ajustado el modelo, al realizar la predicción para una dimensión fractal arbitraria (i.e. 1.99) se obtiene la predicción para el espesor de la película delgada (i.e. 259.7962 [nm]). Aunado a lo anterior, los coeficientes para las variables internas del modelo se establecen 86.4897 y 87.681694.

La importancia en la predicción del espesor, a través de la dimensión fractal, se enmarca en la posibilidad de generar un marco de trabajo para la descripción cuantitativa de las películas delgadas, a través de sus imágenes SEM, teniendo aplicación en los diferentes campos para los cuales se hace uso de imágenes SEM. Esta descripción puede coadyuvar con los procesos de descripción de características para imágenes SEM, que se realizan actualmente de forma cualitativa, por parte de cada uno de los expertos que realiza investigaciones y trabajo de laboratorio, en este campo de estudio.

5. Conclusiones

Las herramientas computacionales, proveen de instrumentos útiles para la solución de problemas, interpretación de resultados o integración de métodos que coadyuven con la mejor comprensión de los fenómenos de la naturaleza, e incluso, de aquellos entes abstractos, creados por el hombre.

Es posible afirmar que no hay evidencia de un algoritmo, método o herramienta, que utilice métricas (dimensión fractal, tamaño de grano, separación de grano promedio y densidad de grano), como parte de un modelo de predicción de características o propiedades físicas en el contexto de las películas delgadas.

En el presente documento se abordó una herramienta de predicción del espesor a partir de la dimensión fractal, calculada con base en el uso de imágenes SEM, ya segmentadas, con objeto de crear una relación aparentemente biunívoca entre ambas variables, la cual contribuya en la generación de un modelo computacional para predecir una propiedad física de las películas delgadas, con base en una o más variables de entrada.

Con lo anterior se generan las capas de entrada y salida que alimentan a una red neuronal, la cual fue como herramienta o modelo de predicción. La red neuronal utilizada, basa su código en la librería de TensorFlow® (desarrollada por Google® LLC), particularmente se usa

el algoritmo Adam, debido a que es un algoritmo simple y computacionalmente eficiente.

Este trabajo permite avanzar en la integración de un modelo computacional, que permita predecir el espesor de películas delgadas, con base en una serie de métricas seleccionadas, y que se sume como una alterativa cuantitativa para la caracterización de películas delgadas.

El siguiente paso, consiste en el desarrollo de un modelo computacional de predicción; dado que un modelo de predicción crea la oportunidad de pronosticar una propiedad física seleccionada. La presente investigación contribuye en la integración de un modelo computacional, que genere la oportunidad de predecir el espesor de películas delgadas de ZnO, en función de su morfología, caracterizada a través de ciertas métricas seleccionadas, i.e. dimensión fractal, densidad de grano, separación promedio y tamaño de grano.

Agradecimientos

Los autores agradecen a la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, al Área Académica de Computación y Electrónica (ICBI-UAEH) y al programa de Doctorado en Ciencias Computacionales, por las facilidades en el desarrollo de los estudios de posgrado, que permitieron la integración de la presente investigación.

Referencias

- Abraham, M. R. (2008). Importance of a Theoretical Framework for Research. In: Bunce, D.M. & Cole, R.S. (eds.), *Nuts and Bolts of Chemical Education Research*, 47–66, DOI: [10.1021/bk-2008-0976.ch005], URL: [https://pubs.acs.org/doi/10.1021/bk-2008-0976.ch005].
- Al-Kuhaili, M. F., Durrani, S. M. A. & Bakhtiari, I. A. (2008). Carbon monoxide gas-sensing properties of CeO₂-ZnO thin films *Applied Surface Science*, 255(5), 3033–3039, DOI: [10.1016/j.apsusc.2008.08.058], URL: [https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0169433208019235].
- Arif, M., Shkir, M., AlFaify, S., Ganesh, V., Sanger, A., Algarni, H., Vilarinho, P.M. & Singh, A. (2019). A structural, morphological, linear, and nonlinear optical spectroscopic studies of nanostructured Al-doped ZnO thin films: An effect of Al concentrations, *Journal of Materials Research*, 34(8), 1309 – 1317, DOI: [10.1557/jmr.2018.506], URL: [https://www.cambridge.org/core/journals/journal-of-materials-research/article/structural-morphological-linear-and-nonlinear-optical-spectroscopic-studies-of-nanostructured-aldoped-zno-thin-films-an-effect-of-al-concentrations/460787FD52D6C5C9BB0BE09467AA1B8A].
- Basavaprasad, B., & Ravi, M. (2014). A study on the importance of image processing and its applications, *IJRET: International Journal of Research in Engineering and Technology*, 3, 1, URL: [http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.676.3819&rep=rep1&type=pdf].
- Bi, X., Ren, A. Li, S., Han, M. & Li, Q. (2015). An Advanced Partial Discharge Recognition Strategy of Power Cable, *Journal of Electrical and Computer Engineering*, DOI: [10.1155/2015/174538], URL: [https://downloads.hindawi.com/journals/jece/2015/174538.pdf] & [https://dl.acm.org/doi/pdf/10.1155/2015/174538].
- Chaabouni, F., Abaab, M. & Rezig, B. (2004). Metrological Characterization of ZnO Oxygen Sensor at Room Temperature, *Sensors and Actuators B: Chemical*, Vol. 100, No. 1-2, pp. 200-204, DOI: [10.1016/j.snb.2003.12.059], URL: [https://www.researchgate.net/publication/245083491_Metrological_characteristics_of_ZNO_oxygen_sensor_at_room_temperature].
- Chan, T.F. & Vese, L.A. (1999) An active contour model without edges,” *Lecture Notes in Computer Science*, vol. 1682, pp. 141–151, DOI: [10.1007/3-540-48236-9_13], URL: [http://dx.doi.org/10.1007/3-540-48236-9_13].
- Chaudhuri, B.B. & Sarkar, N. (1995). Texture segmentation using fractal dimension, *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 17(1), URL: [https://www.researchgate.net/profile/Bidyut_Chaudhuri/publication/3192358_Texture_Segmentation_Using_Fractal_Dimension/links/56fb7b9508ae3c0f264c0fe2.pdf].
- Ennaceri, H., Boujnah, M., Erfurt, D., Rappich, J., Lifei, X., Khaldoun, A., Benyoussef, A., Ennaoui, A. & Taleb, A. (2019). Influence of stress on the photocatalytic properties of sprayed ZnO thin films, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 201, 110058, DOI: [10.1016/j.solmat.2019.110058], URL: [https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927024819303873].
- Fan, H. & Jia, X. (2011). Selective detection of acetone and gasoline by temperature modulation in zinc oxide nanosheets sensors. *Solid State Ionics*, 192(1), 688–692, DOI: [10.1016/j.ssi.2010.05.058], URL: [https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167273810003024].
- Godse, P.R., Navale, Y.H., Mulik, R.N. & Patil, V.B. (2020). Toxic NO₂ Gas Sensing Potential of Hydrothermally Prepared ZnO Nanorods. In: Pawar P., Ronge B., Balasubramaniam R., Vibhute A., Apte S. (eds) *Techno-Societal 2018*, DOI: [10.1007/978-3-030-16848-3_89], URL: [https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-030-16848-3_89].
- Han, D. (2020). Sol-gel autocombustion synthesis of zinc oxide foam decorated with holes and its use as acetic acid gas sensor at sub-ppm level, *Ceramics International*, 46(3), 3304–3310, DOI: [10.1016/j.ceramint.2019.10.036], URL: [https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0272884219328871].
- Hassan, E. S., Mubarak, T. H., Abass, K. H., Chiad, S. S., Habubi, N. F., Rahid, M. H., Khadayeir, A.A., Dawod, M.O. & Al-Baidhany, I. A. (2019). Structural, Morphological and Optical Characterization of Tin Doped Zinc Oxide Thin Film by (SPT), *Journal of Physics: Conference Series*, 1234(1), DOI: [10.1088/1742-6596/1234/1/012013], URL: [https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1234/1/012013/pdf].
- Kaneti, Y. V., Zhang, X., Liu, M., Yu, D., Yuan, Y., Aldous, L. & Jiang, X. (2016). Experimental and theoretical studies of gold nanoparticle decorated zinc oxide nanoflakes with exposed {1 0 1⁻ 0} facets for butylamine sensing, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 230, 581–591, DOI: [10.1016/j.snb.2016.02.091], URL: [https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925400516302404].
- Khan, Z.R., Shkir, M., Ganesh, V., AlFaify, S., Yahia, I.S. & Zahran, H.Y. (2018). Linear and Nonlinear Optics of CBD Grown Nanocrystalline F Doped CdS Thin Films for Optoelectronic Applications: An Effect of Thickness, *Journal of Electronic Materials*, 47, 5386–5395, DOI: [10.1007/s11664-018-6437-9], URL: [https://link.springer.com/article/10.1007%2Fs11664-018-6437-9].
- Khatibani, A. B. (2020). Investigation of gas sensing property of zinc oxide thin films deposited by Sol-Gel method: effects of molarity and annealing temperature, *Indian Journal of Physics*, DOI: [10.1007/s12648-020-01689-4], URL: [https://link.springer.com/article/10.1007/s12648-020-01689-4].
- Kingma, D. P., & Ba, J. (2014). Adam: A method for stochastic optimization, *arXiv preprint arXiv:1412.6980*, DOI: [10.48550/arXiv.1412.6980], URL: [https://arxiv.org/abs/1412.6980].
- Kumar, S., Jeon, H.C., Kang, T.W., Seth, R., Panwar, S., Shinde, S.K., Waghmode, D.P., Saratale, R.G. & Choubey, R.K. (2019a). Variation in chemical bath pH and the corresponding precursor concentration for optimizing the optical, structural and morphological properties of ZnO thin films, *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 30, 17747–17758, DOI: [10.1007/s10854-019-02125-y], URL: [https://link.springer.com/article/10.1007/s10854-019-02125-y].
- Kumar, V., Gupta, R., Ram, J., Singh, P., Kumar, V., Sharma, S. K., Katiyar, R.S. & Kumar, R. (2019b). High energy 120 MeV Ti⁹⁺ ion beam induced modifications in optical, structural and surface morphological properties of titanium dioxide thin films, *Vacuum*, 166, 323 – 334, DOI: [10.1016/j.vacuum.2018.10.029], URL: [https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0042207X18312193].
- Li, X. B., Ma, S. Y., Li, F. M., Chen, Y., Zhang, Q. Q., Yang, X. H., Wang, C. Y. & Zhu, J. (2013). Porous spheres-like ZnO nanostructure as sensitive gas sensors for acetone detection. *Materials Letters*, 100, 119–123, DOI: [10.1016/j.matlet.2013.02.117], URL: [https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167577X13003170].
- Liu, Y. (2019). Controlled Modification of Generated (Style) GAN Latent Vectors, URL: [https://pdfs.semanticscholar.org/6af8/6e7d68f18b61af4ed18decaef9de2e0ff85.pdf].
- Lorwongtragool, P., Boonyopakorn, N. & Kladsomboon, S. (2019). Optical Gas Sensor based on Al-doped ZnO/ZnTPP hybrid thin film, *Journal of Physics: Conference Series*, 1259(1) 1-8, DOI: [10.1088/1742-6596/1259/1/012014], URL: [https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/1259/1/012014/pdf].
- Mandelbrot, B. B. (1983). *The fractal geometry of nature*, ISBN-13: 978-0-7167-1186-5, ISBN-10: 0-7167-1186-9, W. H. Freeman & Co., New York.

- Moratti, R. (2004). Bandgap energy tuning of electrochemically grown ZnO thin films by thickness and electrodeposition potential, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 82(1-2), 85–103. DOI: [10.1016/j.solmat.2004.01.008], URL: [https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927024804000091].
- Mendonça, T., Ferreira, P. M., Marques, J. S., Marcal, A. R. S. & Rozeira, J. (2013). PH2 - A dermoscopic image database for research and benchmarking, 2013 35th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC), DOI: [10.1109/embc.2013.6610779], URL: [ieeexplore.ieee.org/document/6610779].
- Morales, C., Leinen, D., del Campo, A., Ares, J. R., Sánchez, C., Flege, J. I., Gutiérrez, A., Prieto, P. & Soriano, L. (2021). Growth and characterization of ZnO thin films at low temperatures: From room temperature to -120 C. *Journal of Alloys and Compounds*, 884, 161056, URL: [https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925838821024658].
- Piegari, A., & Masetti, E. (1985). Thin film thickness measurement: A comparison of various techniques, *Thin Solid Films*, 124(3-4), 249–257, DOI: [10.1016/0040-6090(85)90273-1], URL: [https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0040609085902731].
- Rebollar Rivera, Z., Maldonado Alvarez, A. & Olvera Amador, M.L. (2019). Effect of thickness on photocatalytic properties of ZnO thin films deposited by RF magnetron sputtering. In 2019 16th International Conference on Electrical Engineering, Computing Science and Automatic Control (CCE), 1-6, URL: [https://cce.cinvestav.mx/images/archivos/papers-19/CCE_2019_paper_72.pdf].
- Sarala Devi, G., Bala Subrahmanyam, V., Gadkari, S. C. & Gupta, S. K. (2006). NH₃ gas sensing properties of nanocrystalline ZnO based thick films, *Analytica Chimica Acta*, 568(1-2), 41–46. DOI: [10.1016/j.aca.2006.02.040], URL: [https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003267006004314].
- Shkir, M., Khan, M. T. & AlFaify, S. (2019). Novel Nd-doping effect on structural, morphological, optical, and electrical properties of facily fabricated PbI₂ thin films applicable to optoelectronic devices, *Applied Nanoscience*, 9, 1417–1426, DOI: [10.1007/s13204-019-00983-w], URL: [https://link.springer.com/article/10.1007/s13204-019-00983-w].
- Szpilrajn, E. (1930). Sur l'extension de l'ordre partiel, *Fundamenta Mathematicae*, 16(1), 386–389, URL: [http://eudml.org/doc/212499].
- Thirumoorthi, M. & Thomas Joseph Prakash, J. (2019). Doping effects on physical properties of (1 0 1) oriented tin zinc oxide thin films prepared by nebulizer spray pyrolysis method, *Materials Science and Engineering: B*, 248, 114402, DOI: [10.1016/j.mseb.2019.114402], URL: [https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0921510719302053].
- Vetelino, J. & Reghu, A. (2011). Chapter 2: Electrochemical sensors, In: Vetelino, J. & Reghu, A. (eds.), *Introduction to sensors*, ISBN: 978-1-4398-0852-8, CRC Press, Taylor & Francis Group.
- Wang, Z. L. (2004). Nanostructures of zinc oxide. *Materials today*, 7(6), 26–33, DOI: [https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S136970210400286X], URL: [10.1016/S1369-7021(04)00286-X].
- Wei, G. & Tang, J. (2008). Study of Minimum Box-Counting Method for image fractal dimension estimation, 2008 China International Conference on Electricity Distribution, DOI: [10.1109/ciced.2008.5211829], URL: [https://ieeexplore.ieee.org/document/5211829].
- Wen, L., Sahu, B.B., Kim, H.R. & Han, J.G. (2019). Study on the electrical, optical, structural, and morphological properties of highly transparent and conductive AZO thin films prepared near room temperature, *Applied Surface Science*, 473, 649–656, DOI: [10.1016/j.apsusc.2018.11.250], URL: [https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0169433218333282?casa_token=GA0flqiame4AAAAA:ELoUVr-HiCjIxU6d_k1c71Fn1FXM-XxjNnDfbyu60kjEWS-BCMaUzk60o7GCK6ziDd2wNpF22Jby].
- Yuan, H., Aljneibi, S. A. A., Yuan, J., Wang, Y., Liu, H., Fang, J., Tang, C., Yan, X., Cai, H., Gu, Y., Pennycook, S. J., Tao, J. & Zhao, D. (2019). ZnO Nanosheets Abundant in Oxygen Vacancies Derived from Metal-Organic Frameworks for ppb-Level Gas Sensing, *Advanced Materials*, 1807161, DOI: [10.1002/adma.201807161], URL: [https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/adma.201807161].
- Zhang, R., Stanley, K.G., Fuller, D. & Bell, S. (2019b). Differentiating Population Spatial Behavior using Representative Features of Geospatial Mobility (ReFGem), *ACM Transactions on Spatial Algorithms and Systems*, 1(1), DOI: [10.1145/3362063], URL: [https://arxiv.org/pdf/2002.08168.pdf].
- Zhang, Y.D., Chen, X.Q., Zhan, T.M., Jiao, Z.Q., Sun, Y., Chen, Z.M., Yao, Y., Fang, L.T., Lv, Y.D. & Wang, S.H. (2016). Fractal dimension estimation for developing pathological brain detection system based on Minkowski-Bouligand method, *IEEE Access*, 4, 5937–5947 DOI: [10.1109/ACCESS.2016.2611530], URL: [https://ieeexplore.ieee.org/document/7572925].
- Zubair, N. & Akhtar, K. (2019). High performance room temperature gas sensor based on novel morphology of zinc oxide nanostructures, *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 29(1), 143–156, DOI: [10.1016/s1003-6326(18)64923-4], URL: [https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1003632618649234].

Apéndice A. Bases de datos para imágenes SEM de diversos materiales. Fuente: elaboración propia con base en la consulta de bases de datos de imágenes SEM

Base de datos	Escala	Número de imágenes	URL
Región CA1 del hipocampo	Micrómetros	165 x 4	https://www.epfl.ch/labs/cvlab/data/data-em/
Reconstrucción de imágenes 3D	Micrómetros	17	https://dataverse.harvard.edu/dataset.xhtml?persistentId=doi:10.7910/DVN/HVBW0Q
Imágenes reales y artificiales de materiales granulares	Micrómetros	100	https://dataservice.s.gfz-potsdam.de/panmetanetworks/showshort.php?id=escidoc:1423021
Imágenes artificiales de materiales pulverizados	Nanómetros	2048	https://data.mendeley.com/datasets/tj4syyj9mr/1
Biopelículas y minerales	Milímetros	454	https://www.bco-dmo.org/dataset/756152
Especímenes biológicos	Micrómetros	19	https://www.utoledo.edu/nsm/ic/instruments/ICenter/SEM_Image_Database.html
Materiales y especímenes diversos	Nanómetros	21,169	https://b2share.eu/dat.eu/records/80df8606fcd4b2bae1656f0dc6db8ba
Microestructuras	No determinado	7868	https://metadb.riken.jp/metadb/db/clstMultimodalMicrostruct
Células humanas	No determinado	273	http://www.cellimagelibrary.org/pages/project_20269