

Predicción de propiedades mecánicas de metamateriales obtenidos por Manufactura aditiva

Prediction of mechanical properties in 3D printed metamaterials using neural networks

J.A. Hernández Medina^a, C.G. Flores Hernández^a, V. González Huitrón^a, G. Pineda Chacon^a, J. López Barroso^a

^a Tecnológico Nacional de México / Campus Querétaro, División de Estudios de Posgrado e Investigación, Querétaro, México.

Resumen

Los metamateriales mecánicos son materiales diseñados artificialmente con la finalidad de presentar un mejor desempeño gracias a los cambios en la estructura que los conforma y no en su composición química. En algunos casos este tipo de estructuras están basadas en la naturaleza, por ejemplo, el interior de los huesos, panales de abejas. Actualmente, gracias a los avances tecnológicos tanto en software y hardware ha facilitado el diseño y fabricación de estos materiales. La determinación de las propiedades de los metamateriales es realizada por medio de simulación por computadora, pruebas de estrés mecánico o ambos. Para la fabricación de estos metamateriales, en la mayoría de los casos se recurre a la manufactura aditiva. Recientemente, las investigaciones han mostrado interés en predecir el comportamiento mecánico de estos metamateriales usando diferentes técnicas entre las cuales destacan las redes neuronales.

Palabras Clave: Metamateriales, Redes Neuronales Artificiales, Perceptrón Multicapa, Manufactura aditiva.

Abstract

Mechanic Metamaterials are artificially designed materials intended to achieve superior performance through changes in their structure rather than their chemical composition. In some cases, these types of structures are inspired by nature, such as the interior of bones or honeycombs. Nowadays, advancements in both software and hardware have facilitated the design and manufacturing of these materials. The determination of metamaterial properties is carried out through computer simulations, mechanical stress tests, or both. Additive manufacturing is used for the fabrication of these metamaterials. Recently, researchers have shown interest in predicting the mechanical behaviour of these metamaterials using various techniques, among which neural networks stand out.

Keywords: Metamaterials, Artificial Neural Networks, Multilayer Perceptron, Additive Manufacturing.

1. Introducción

Los materiales convencionales se caracterizan por sus propiedades mecánicas, térmicas, entre otras. Las cuales están determinadas por composición molecular o atómica. En contraste, las propiedades de los metamateriales dependen de su arreglo espacial. Esto quiere decir que cualquier material convencional con un arreglo espacial puede ser ensamblado en un metamaterial (Zheng et al., 2023)

El análisis de elemento finito (AEF) ha sido una herramienta clave para entender, optimizar y predecir el comportamiento mecánico y diseño de este tipo de materiales (Iqbal S, 2024).

Este tipo de análisis suele ser un proceso que es arduo y demanda una inversión de tiempo considerable. Por ejemplo, la modificación de alguna de las dimensiones en la estructura, involucra un análisis diferente. En la actualidad, los avances en la inteligencia artificial (IA) han captado la atención de los investigadores que buscan formas de acelerar los procesos de creación y predicción de metamateriales usando redes neuronales artificiales (RNA) (Zheng et al., 2023).

La presente revisión se enfoca en especial en las investigaciones relacionadas a la red neuronal del tipo Perceptrón multicapas (PMC) y su utilidad en la predicción de

*Autor para la correspondencia: villafuerte@uaeh.edu.mx

Correo electrónico: jhernan6.m@gmail.com (José Alberto Hernández-Medina), cynthiagraciela84@gmail.com (Cynthia Graciela Flores Flores-Hernández), victor.gh@queretaro.tecnm.mx (Víctor Alejandro González-Huitrón), gabbypch@gmail.com (Gabriela Pineda-Chacón), jbarroso69@gmail.com (Juventino López-Barroso)

Historial del manuscrito: recibido el 26/09/2024, última versión-revisada recibida el 20/11/2024, aceptado el 25/11/2024, publicado el 12/12/2024. DOI: <https://doi.org/10.29057/icbi.v12iEspecial5.13824>

diferentes parámetros mecánicos, aplicaciones y estructuras reticulares.

2. Metamateriales mecánicos

Los metamateriales mecánicos son estructuras construidas artificialmente, las cuales se componen de un arreglo de celdas unitarias llamadas estructuras reticulares, la cual lo provee de propiedades contraintuitivas estáticas/dinámicas que no poseen los materiales naturales (Yu et al., 2018).

(Barchiesi et al., 2019) indica que generalmente se les asocia con 4 constantes principales:

- Módulo de compresibilidad (K), es la medida de la resistencia del material a la compresión.
- Módulo de Young (E), es la relación entre la fuerza por unidad de área aplicada sobre un eje y el porcentaje de la deformación del material.
- Modulo de elasticidad transversal (G), es medida de la capacidad del material a resistirse deformaciones transversales.
- Coeficiente de Poisson (ν), es la razón de la deformación transversal y la deformación axial

El valor de estas constantes es definido por el tipo de la geometría celular. A continuación, se describen algunos ejemplos.

2.1 Geometría de Estructuras celulares

La geometría celular del tipo superficie mínima triplemente periódica (SMTP) es usada para crear estructuras complejas exhiben características mecánicas que exceden significativamente las estructuras celulares clásicas (Shevchenko et al., 2023). En la Figura 1 se muestran algunos ejemplos: Giroide, Diamante, Schwarts primitiva.

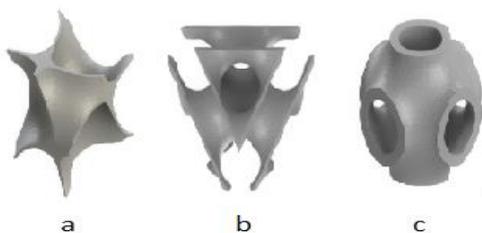


Figura 1. Geometrías de celdas unitarias. a) Giroide, b) Diamante, c) Schwarz primitivo adaptado de (Kladovasilakis et al., 2021)

Una de estas estructuras clásicas es la llamada honeycomb (Figura 2), la cual intenta emular el diseño de un panal de abejas. De acuerdo con (Shen et al., 2024) este tipo de

estructura es usada ampliamente la industria aeroespacial, ingeniería automotriz y en equipo de protección personal ya que presenta propiedades tales como un peso ligero, alta fuerza y excelente absorción de energía

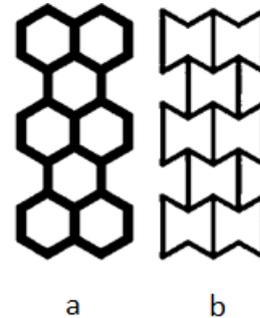


Figura 2. Geometrías tipo (a) honeycomb y (b) honeycomb reentrante

Las estructuras de geometría auxética presentan un coeficiente de Poisson negativo. Esto implica que el material se expande transversalmente bajo una tensión uniaxial y se contrae bajo compresión uniaxial (Oladipo et al., 2023). Los siguientes son ejemplos de geometrías de este tipo

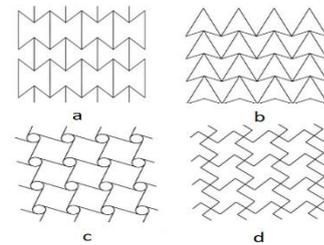


Figura 3. (a) Honeycomb reentrante, (b) Punta de Flecha, (c) tetra-quiral, (d) Hound tooth's, adaptado de (Cuan-Urquizo & Guerra Silva, 2023)

3. Aprendizaje profundo.

En la actualidad el campo de la IA está experimentando un gran auge gracias a los avances tecnológicos en hardware y software. A la capacidad de extraer información de datos crudos y “generar conocimiento” para el sistema de IA se le conoce como aprendizaje automático (AA) o machine learning en inglés (ML), el cual es considerado como un campo de la IA. Uno de sus subcampos llamado aprendizaje profundo (AP) ha generado un gran interés en diversos campos de la investigación. Entre ellos se encuentra el campo de materiales, donde se están implementando diferentes algoritmos para la creación de materiales, predicción de su comportamiento mecánica. (Ian Goodfellow and Yoshua Bengio and Aaron Courville, 2016).

En general el aprendizaje profundo se divide en 3 categorías: supervisado, no supervisado y por refuerzo. La siguiente tabla muestra algoritmos usados en metamateriales y sus características principales.

Tabla 1. Categorías de aprendizaje profundo, algoritmos más usados y características.

Categoría de aprendizaje	Algoritmo	Características
Supervisado	Perceptrón multi capa (MLP)	Aproximarse a una función f , como clasificador o regresión
	Redes neuronales convolucionales (CNN)	Usadas generalmente para visión por computadora para problemas de clasificación
	Redes neuronales recurrentes (RNN)	Usadas para datos secuenciales como texto, series de tiempo, audio
	Redes neuronales de grafos (GNN)	Usadas para datos estructurados en forma de grafos como por ejemplo redes sociales, estructuras moleculares
No supervisado	Autoencoders Variacionales (VAE)	Usado para generar datos basados en un set de datos de entrada
	Redes generativas Antagónicas (GAN)	De la misma forma que las VAE son usadas para generar datos, pero están basadas en un generador de datos y discriminador
Por refuerzo	Redes Q profundas	Las entradas para este tipo de redes son presentadas como estado y Acción, buscando que la toma de decisiones genere los mejores resultados

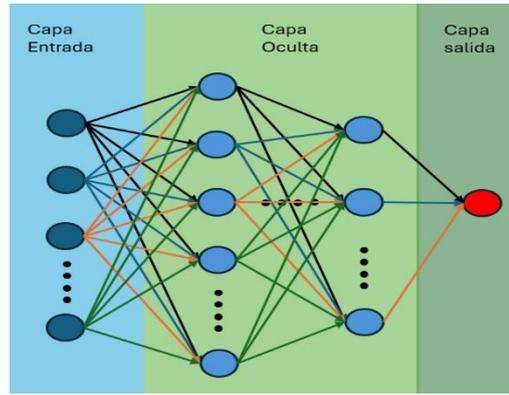


Figura 5. Perceptrón multicapa

(Pahlavani et al., 2024) presenta una investigación cuyo propósito es el usar modelos computacionales y de aprendizaje profundo para predecir las propiedades mecánicas metamateriales con el fin de descubrir diseños que exhiban combinaciones de propiedades elásticas altamente deseables. Usando retículas planares basadas en celdas tipo cubica, honeycomb y reentrante. A continuación, los modelos RNA implementados:

3.1 Perceptrón multicapa (PMC)

El perceptrón es el modelo matemático más simple que representa a una neurona, consiste de una capa de entrada y una de salida. Por ejemplo, se tienen un perceptrón de 2 entradas (Figura 4). Cada uno de los datos de entrada (i) es ponderado por un peso (W) y se suma su resultado. El término bias (b) es usado para ajustar el modelo y se suma al resultado anterior. La capa de salida consta de la función de activación, que para el caso del perceptrón se conoce como *hardlim* o umbral. Esta función entrega en la salida o un resultado binario. Este ejemplo permite clasificar las dos entradas.

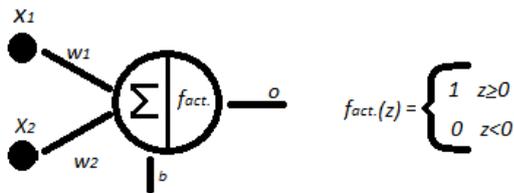


Figura 4. Perceptrón de dos entradas

Como su nombre lo indica el PMC está formado de varias capas. En general consiste en una capa de entrada, capa escondida y la capa de salida. Hay que resaltar que la capa escondida contiene de 1 a N capas. La Figura 5 muestra de forma gráfica el PMC en su forma general.

- ‘Modelo de una celda’ (Figura 6). Este modelo predice las propiedades mecánicas de estructuras reticulares con 3 ángulos de las celdas (60° , 90° y 120°) y un amplio rango de valores de la razón de fase rígida y fase suave llamada $ph\%$ ($= 5, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90$ y 95).

El modelo tiene 151 parámetros de entrada y 4 salidas. Este modelo fue entrenado con 18,150,000 estructuras reticulares (16,500,000 estructuras como set de datos de entrenamiento y 1,650,000 como set de datos de prueba).

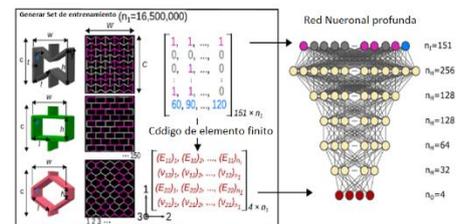


Figura 6. Modelo de una celda adaptado de (Pahlavani et al.,

2024).

- ‘Modelo de 4 mosaicos’ (Figura 7). Este es usado para el estudio de las propiedades elásticas de varias combinaciones de las propiedades mecánicas en 4 mosaicos.

Este modelo usa el mismo set de datos que modelo de una sola celda, pero tiene solo 16 parámetros de entrada y 4 salidas

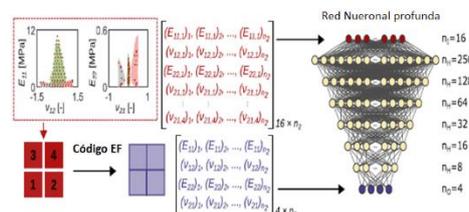


Figura 7. Modelo de 4 mosaicos adaptado de (Pahlavani et al.,

2024)

Los resultados obtenidos después de 200 épocas de entramiento de acuerdo con los errores de predicción error absoluto medio (EAM) y error cuadrático medio (ECM) indican que ambos modelos tienen alta precisión al predecir las propiedades mecánicas.

El estudio presentado por (Grozav et al., 2023) busca el crear y entrenar un modelo predictivo basado en redes neuronales usando los datos de fuerza tensora obtenidos de partes de material PLA creadas por medio de modelado por deposición fundida (MDF). Para este estudio se fabricaron 48 muestras de prueba de acuerdo con el estándar ISO527-2.

Para obtener las mediciones de fuerza tensora y deformación se usó un equipo Instron 3366 para realizar la prueba de tensión donde se midió la longitud de 50 mm a la velocidad de 6.6 m/s. El modelo de predicción es una RNA donde los parámetros de entrada son velocidad, temperatura y orientación. La salida es la fuerza tensora obtenida de las pruebas físicas, como se muestra en la Figura 8. La red neuronal está formada por 3 capas escondidas con 8 neuronas cada una, además se usaron 2 configuraciones de entradas diferentes, una donde la orientación de la capa de impresión es dada como variable categórica y como salida la fuerza tensora. La otra configuración no usa la orientación como entrada y se obtiene la fuerza tensora en los ejes X y Y. El set de datos fue dividido en 80 % para entrenamiento y 20 % para validación, la red fue entrenada hasta que el porcentaje de error absoluto medio llegó a su punto más bajo.

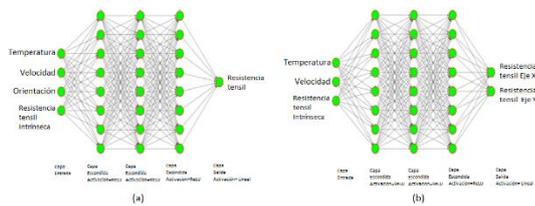


Figura 8. Configuraciones de red neuronal en el estudio de (Grozav et al., 2023)

En otras investigaciones se propone el diseño de estructuras reticulares basadas en escudos de cocodrilos y tortugas. (Doodi & Gunji, 2023) presentan una estructura para aplicaciones de absorción energía donde combinan la estructura de un árbol de bambú, escamas de peces y escudos de reptiles (Figura 9).

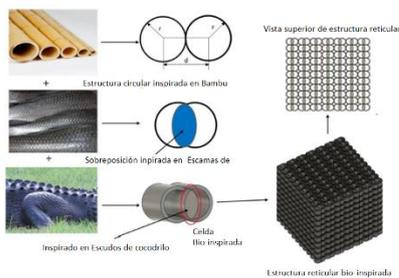


Figura 9. Estructura reticular celular basada en árbol de bambú, escamas de peces y escudos de cocodrilos adaptado de (Doodi & Gunji, 2023)

Para esta investigación se desarrollaron 16 tipos de retículas variando parámetros como tamaño de círculos, ancho de paredes, la región donde se sobreponen círculos. Se

construyeron cubos de 40x40x40 mm en un software de diseño asistido por computadora 3D (CAD) y el método de fotopolimerización para la impresión 3D. Este método consiste en una tina llena de resina líquida donde cada una de las capas del modelo 3D es curada al exponerse a luz UV.

Los modelos 3D fueron probados mediante compresión cuasi estática. La respuesta fuerza-desplazamiento fue medida a 2.5 mm/min y se guardó la curva esfuerzo (σ)-deformación (ϵ)

Usando esta información se obtiene la absorción de energía total mediante la siguiente fórmula:

$$TEA = \int F_{av} ds = F_{av} * [d_f - d_i] \quad (1)$$

Donde F_{av} es la fuerza medio de compresión, d_f es la distancia final de compresión y d_i es la distancia inicial de compresión.

Para la predicción del TEA usa una red neuronal cuyo modelo esta conformado por 3 entradas (tamaño de la celda, área de sobreposición de los círculos y el ancho de la pared de la celda), 10 capas escondidas y una salida TEA (Figura 10). La red es entrenada con el algoritmo Levenberg-Marquardt usando 75 % del set de datos para entrenamiento y 25 % para verificación.

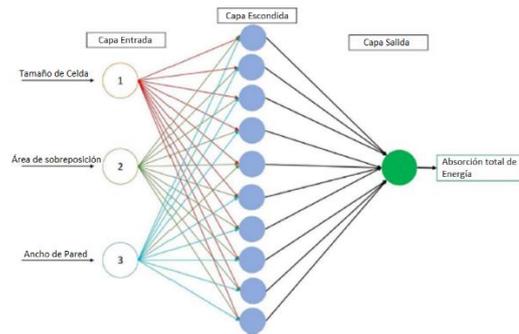


Figura 10. Modelo de red neuronal adaptado de (Doodi & Gunji, 2023)

En la siguiente gráfica se muestra el resultado de la predicción de la red neuronal después del entrenamiento y los valores experimentales medidos.

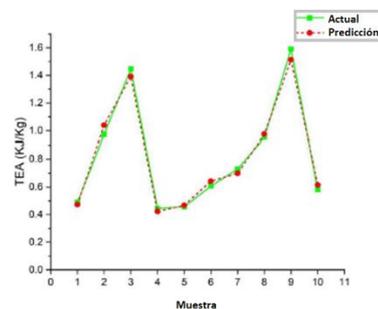


Figura 7. Comparación de predicción y valores experimentales adaptado de (Doodi & Gunji, 2023)

Una investigación (Oladipo et al., 2023) se enfoca en el desarrollo de 8,096 estructuras del tipo honeycomb reentrante variando características geométricas para obtener las razones de Poisson. Las diferentes geometrías fueron creadas usando un script de Python.

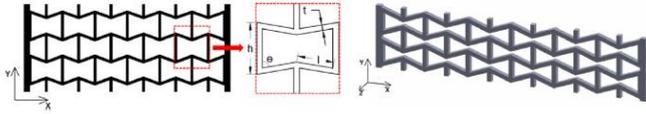


Figura 8. Estructura auxética de (Oladipo et al., 2023)

Las partes impresas fueron sometidas a pruebas de tensión y se utilizó una cámara FLIR para capturar a 1 frame por segundo. Las imágenes fueron usadas en el software VIC 2D DIC para analizar el desplazamiento y deformación. Para obtener la razón de Poisson se usó la siguiente fórmula:

$$\nu = \frac{-\varepsilon(T)}{\varepsilon(L)} \quad \text{--- Ecuación (2)}$$

Donde $\varepsilon(T)$ es la deformación en el eje transversal y $\varepsilon(L)$ es la deformación en el eje longitudinal

Los modelos de estas partes fueron usados para realizar AEF, en esta simulación se aplicó una tensión para desplazar 20 mm, usando Matlab se post procesó para obtener la deformación y la razón de Poisson

La razón de Poisson de la simulación AEF se comparó contra los datos experimentales y se observó que tienen una correlación adecuada. Gracias a esto, se continuó expandiendo la cantidad de simulaciones para generar un set de datos más grande.

Para la predicción se usó un PMC entrenado por medio del algoritmo de Backpropagation. Para todas las neuronas se usó unidad lineal rectificadora (ReLU) como función de activación y el ECM como función de pérdida. Se usaron 2 capas escondidas con 5 neuronas cada una, 80 % del set de datos para entrenamiento y 20 % para prueba. Los resultados se ajustaron con precisión en las predicciones.

4. Conclusiones

De acuerdo con las investigaciones revisadas las redes neuronales tipo perceptrón multicapas de una arquitectura simple presentan un desempeño aceptable según las funciones de pérdida ECM, EAM utilizadas para la predicción de diferentes parámetros mecánicos. Para esto es fundamental contar con un set de datos obtenido de pruebas físicas y/o simulaciones por computadora que contenga la información de

los parámetros mecánicos a predecir y la representación del metamaterial.

5. Agradecimientos

Los autores agradecen la colaboración del Mtro. Gerardo Fonseca Hernández del Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada de la UNAM campus Juriquilla en la realización de ese proyecto de investigación.

6. Declaraciones

Los autores declaran no tener conflicto de intereses.

7. Referencias

Barchiesi, E., Spagnuolo, M., & Placidi, L. (2019). Mechanical metamaterials: a state of the art. *Mathematics and Mechanics of Solids*, 24(1). <https://doi.org/10.1177/1081286517735695>

Cuan-Urquiza, E., & Guerra Silva, R. (2023). Fused Filament Fabrication of cellular, lattice and porous mechanical metamaterials: a review. In *Virtual and Physical Prototyping* (Vol. 18, Issue 1). <https://doi.org/10.1080/17452759.2023.2224300>

Doodi, R., & Gunji, B. M. (2023). Prediction and experimental validation approach to improve performance of novel hybrid bio-inspired 3D printed lattice structures using artificial neural networks. *Scientific Reports*, 13(1). <https://doi.org/10.1038/s41598-023-33935-0>

Grozav, S. D., Sterca, A. D., Kočiško, M., Pollák, M., & Ceclan, V. (2023). Artificial Neural Network-Based Predictive Model for Finite Element Analysis of Additive-Manufactured Components. *Machines*, 11(5). <https://doi.org/10.3390/machines11050547>

Ian Goodfellow and Yoshua Bengio and Aaron Courville. (2016). *Deep Learning*. MIT Press.

Iqbal S, K. M. (2024). Review Study on Mechanical Properties of Cellular Materials. *Materials (Basel)*.

Kladovasilakis, N., Tsongas, K., & Tzetzis, D. (2021). Mechanical and feasibility characterization of fused filament fabricated triply periodic minimal surface structures. *Journal of Composites Science*, 5(2). <https://doi.org/10.3390/jcs5020058>

Oladipo, B., Matos, H., Krishnan, N. M. A., & Das, S. (2023). Integrating experiments, finite element analysis, and interpretable machine learning to evaluate the auxetic response of 3D printed re-entrant metamaterials. *Journal of Materials Research and Technology*, 25. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2023.06.038>

Pahlavani, H., Tsifoutis-Kazolis, K., Saldívar, M. C., Mody, P., Zhou, J., Mirzaali, M. J., & Zadpoor, A. A. (2024). Deep Learning for Size-Agnostic Inverse Design of Random-Network 3D Printed Mechanical Metamaterials. *Advanced Materials*, 36(6). <https://doi.org/10.1002/adma.202303481>

Shen, X., Hu, Q., Zhu, D., Qi, S., Huang, C., Yuan, M., Qian, X., & Guo, R. (2024). Dynamic mechanical response prediction model of honeycomb structure based on machine learning method and finite element method. *International Journal of Impact Engineering*, 184. <https://doi.org/10.1016/j.ijimpeng.2023.104825>

Shevchenko, V., Balabanov, S., Sychoy, M., & Karimova, L. (2023). Prediction of Cellular Structure Mechanical Properties with the Geometry of Triply Periodic Minimal Surfaces (TPMS). *ACS Omega*, 8(30). <https://doi.org/10.1021/acsomega.3c01631>

Yu, X., Zhou, J., Liang, H., Jiang, Z., & Wu, L. (2018). Mechanical metamaterials associated with stiffness, rigidity and compressibility: A brief review. *Progress in Materials Science*, 94, 114–173. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2017.12.003>

Zheng, X., Zhang, X., Chen, T. Te, & Watanabe, I. (2023). Deep Learning in Mechanical Metamaterials: From Prediction and Generation to Inverse Design. In *Advanced Materials* (Vol. 35, Issue 45). <https://doi.org/10.1002/adma.202302530>