




Optimización de la configuración de materiales compuestos laminados mediante redes neuronales y templado simulado

Optimization of laminated composite materials configuration using neural networks and simulated annealing

Julio César Galvis Chacón¹ , Alejandro E. Rodríguez-Sánchez² , Elías Rigoberto Ledesma Orozco¹ 

¹Universidad de Guanajuato, Departamento de Ingeniería Mecánica, División de Ingenierías Campus Irapuato-Salamanca, México

²Universidad Panamericana, Facultad de Ingeniería, Zapopan, Jalisco, México

RESUMEN

La optimización de materiales compuestos laminados es uno de los principales desafíos en el diseño de componentes o sistemas estructurales debido a la influencia de múltiples parámetros en su desempeño y respuesta mecánica ante la deformación. Esta investigación utiliza un metamodelo basado en redes neuronales artificiales para predecir índices de desempeño, específicamente el índice de falla de Tsai-Wu, a partir de la configuración del laminado de un material compuesto sujeto a cargas considerando espesores y orientaciones de sus fibras. El metamodelo alimenta una función objetivo diseñada para mejorar la configuración de una pieza mediante la optimización de las orientaciones de las fibras. Se combina un algoritmo de templado simulado adaptado para materiales compuestos laminados con redes neuronales, generando un espacio de soluciones que ofrece al diseñador una amplia gama de opciones para abordar el análisis del problema. El método reportado es una alternativa eficiente al método tradicional de análisis de materiales compuestos laminados, agilizando el proceso y ampliando las posibilidades de configuración disponibles para su selección.

PALABRAS CLAVE: materiales compuestos, redes neuronales artificiales, optimización, templado simulado, función objetivo.

ABSTRACT

The optimization of laminated composite materials is one of the main challenges in the design of structural components or systems due to the influence of multiple parameters on their performance and mechanical response to deformation. This research uses a metamodel based on artificial neural networks to predict performance indices, specifically the Tsai-Wu failure index, from the configuration of a laminated composite material subject to loads, considering thicknesses and fiber orientations. The metamodel feeds an objective function designed to improve the configuration of a part by optimizing fiber orientations. A simulated annealing algorithm adapted for laminated composite materials is combined with neural networks, generating a solution space that offers the designer a wide range of options to approach the analysis of the problem. The reported method is an efficient alternative to the traditional method of analyzing laminated composite materials, streamlining the process, and expanding the configuration possibilities available for selection.

KEYWORDS: composite materials, artificial neural networks, optimization, simulated annealing, objective function.

Correspondencia:

DESTINATARIO: Alejandro E. Rodríguez-Sánchez
INSTITUCIÓN: Universidad Panamericana / Facultad de Ingeniería

DIRECCIÓN: Álvaro del Portillo 49, Zapopan, Jalisco, C. P. 45010, México

CORREO ELECTRÓNICO: aerodriguez@up.edu.mx

Fecha de recepción: 29 de julio de 2024. **Fecha de aceptación:** 18 de octubre de 2024. **Fecha de publicación:** 28 de octubre de 2024.



I. INTRODUCCIÓN

Los materiales compuestos tienen una presencia relevante en el campo de la ingeniería, principalmente por la relación de rigidez y resistencia en relación con su baja densidad, y además se caracterizan por un bajo peso y al mismo tiempo una alta resistencia [1]. Como tal, esta clase de materiales son una combinación de fibras embebidas en una matriz y modificar la dirección de las primeras puede ser una opción versátil para los diseñadores de componentes mecánicos y estructurales, ya que, a través de ello, se pueden establecer direcciones que beneficien la resistencia de una pieza [2].

En el mercado, los materiales compuestos están presentes en el sector automotriz [3], en estructuras civiles y también en el sector aeronáutico [4]. De hecho, en la actualidad, debido a la amplia expansión de las energías alternativas, estos materiales han logrado posicionarse al alza en el mercado internacional, ya que su uso permite, entre otros, la reducción del consumo de combustible en aeronaves, pues gracias a sus propiedades, es posible generar componentes resistentes, pero más ligeros en comparación de aleaciones metálicas como el aluminio, y una buena capacidad de resistencia a la corrosión. Estas características también son importantes en sectores como el de producción de energía limpia, donde se utilizan, por ejemplo, en las palas de materiales compuestos en aerogeneradores [5], así como en el almacenamiento de hidrógeno [6].

El diseño de materiales compuestos para componentes estructurales se centra en la mejora de la resistencia y rigidez de las piezas fabricadas [7]. En concreto, el índice de falla de Tsai-Wu [8] es una relación entre los tensores de resistencias de un material compuesto y los esfuerzos en las direcciones principales que se dan ante una carga, el cual permite obtener una referencia de la posible falla del componente, reflejando con su magnitud la resistencia que posee una pieza. Otro parámetro de análisis es la energía de deformación volumétrica, que es una cantidad que se considera almacenada por un cuerpo cuando este se ve sometido a cambios de geometría debido a tensiones, siendo establecida como una relación de los esfuerzos que sufre una pieza y las deformaciones unitarias. Así, la energía de deformación permite establecer una medida de la rigidez de una pieza o estructura sometida a una carga [9].

En función del tipo de estructura o elemento de máquina, así como sus configuraciones topológicas, el obte-

ner el mejor diseño para materiales compuestos es un proceso que puede llegar a ser desafiante, especialmente porque no resulta sencillo determinar explícitamente cómo los cambios en las direcciones de las fibras y los espesores de las láminas de un material modifican la resistencia y rigidez. En el pasado, esto se ha abordado implementado diversos métodos [10], [11], algunos de los cuales establecen una serie de restricciones que permiten expresar como funciones analíticas la relación de la energía debido a la configuración del laminado de un material [12], mientras que otros definen la dirección de las fibras como una función de curvas específicas del tipo B-Spline [13]. En los últimos avances, también se ha postulado el uso de redes neuronales artificiales (RNA) para el análisis de los materiales compuestos, como lo demuestran los trabajos de Chen y Gu [14], [15], [16], en donde se reporta el uso de arquitecturas convolucionales [14] y generativas [17] para evaluar la energía en un laminado entretejido. La principal estrategia en estas investigaciones consiste en discretizar el dominio del material en pequeñas regiones cuyo módulo de elasticidad es variable y específico para cada sección.

Las metodologías anteriores se centran en materiales compuestos considerados como de rigidez variable [10] (fibras continuas o entretejidos). Por su parte, para el caso de laminados con rigidez constante, es decir, aquellos cuyo apilamiento es el mismo en todo el dominio [11], las alternativas se enfocan en tratar de encontrar arquitecturas RNA que permitan realizar regresiones de las propiedades a partir de parámetros del laminado, tales como orientaciones, espesores, módulos de elasticidad o fracciones volumétricas. Un ejemplo de ello es el trabajo de Chen *et al.* [18], donde se establece una RNA del tipo *feed-forward*, en forma de clasificador, cuyas entradas corresponden a los esfuerzos internos del laminado y su salida es un porcentaje de pertenencia a la zona de falla utilizando el índice de Tsai-Wu. También, en Liao *et al.* [19] se propone una metodología en la que para una barra cilíndrica sometida a torsión o flexión se presentan dos conjuntos de arquitecturas, cada uno con dos RNA, que permiten predecir, usando las direcciones de las fibras y el módulo de elasticidad en la dirección principal, el valor de la rigidez y la resistencia.

Finalmente, en un estudio reciente [20], el uso de metamodelos para la predicción del índice máximo de Tsai-Wu reportó una metodología alternativa para el diseño de materiales compuestos. Partiendo de este enfoque, la presente investigación hizo uso de un metamodelo para

la creación de una función objetivo en el análisis de materiales compuestos laminados, así como la implementación del algoritmo de optimización de templado simulado (SA, del inglés, Simulated Annealing), con el fin de evaluar el rendimiento de la implementación de redes neuronales en la mejora de piezas fabricadas con esta clase de materiales.

II. METODOLOGÍA

A. DESCRIPCIÓN MATEMÁTICA DE LA MECÁNICA DE MATERIALES COMPUESTOS LAMINADOS

El análisis de los materiales compuestos laminados en la teoría clásica y del cortante de deformación de primer orden, parten de establecer una matriz de rigidez $\mathbf{Q}_p^{(i)}$, que relaciona los esfuerzos $\boldsymbol{\sigma}_p^{(i)}$ y deformaciones $\boldsymbol{\epsilon}_p^{(i)}$, en la i -ésima lámina como sigue:

$$\boldsymbol{\sigma}_p^{(i)} = \mathbf{Q}_p^{(i)} \boldsymbol{\epsilon}_p^{(i)} \quad (1)$$

A partir de la Ecuación (1), se puede establecer el aporte estructural de cada lámina a un material laminado. De esta manera, se definen tres matrices de rigidez: \mathbf{A} , \mathbf{B} y \mathbf{D} , que describen cómo el apilamiento de láminas puede comportarse a extensión y flexión. En conjunto con las matrices y ecuación anteriores, se desarrolla una relación entre las cargas \mathbf{N} y momentos \mathbf{M} , ambos por unidad de longitud, la cual permite determinar las deformaciones $\boldsymbol{\epsilon}_{x,y}^0$ y curvaturas \mathbf{k} de un plano medio de referencia en el laminado.

En la Ecuación (1), p corresponde al sistema de coordenadas relativo a la lámina, el cual posiciona la dirección principal orientada de forma paralela al sentido de la fibra y una segunda dirección dentro del plano y perpendicular a esta dirección longitudinal. Al momento de establecer el laminado de un material, es necesario transformar los esfuerzos y deformaciones al sistema global $\{x,y\}$ del empaquetado de láminas. Para esto se usa una matriz de rotación \mathbf{T} :

$$\boldsymbol{\sigma}_p^{(i)} = \mathbf{T} \boldsymbol{\sigma}_{x,y}^{(i)} \boldsymbol{\epsilon}_p^{(i)} = \mathbf{T} \boldsymbol{\epsilon}_{x,y}^{(i)} \quad (2)$$

Entonces, la expresión general en el sistema $\{x,y\}$, para la i -ésima lámina es la siguiente:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}_{x,y}^{(i)} &= \mathbf{T}^{-1} \mathbf{Q}_p^{(i)} \mathbf{T} \boldsymbol{\epsilon}_{x,y}^{(i)} \\ \boldsymbol{\sigma}_{x,y}^{(i)} &= \bar{\mathbf{Q}}^{(i)} \boldsymbol{\epsilon}_{x,y}^{(i)} \end{aligned} \quad (3)$$

De las expresiones anteriores, y en notación de índices, se pueden establecer los componentes de las matrices de rigidez extensional $A_{m,n}$, de acople $B_{m,n}$ y de flexión $D_{m,n}$. Cada una de estas se presentan en las siguientes ecuaciones en notación indicial:

$$A_{m,n} = \sum_{i=1}^N \bar{Q}_{m,n}^{(i)} (h_i - h_{i-1}) \quad (4)$$

$$B_{m,n} = \sum_{i=1}^N \bar{Q}_{m,n}^{(i)} (h_i^2 - h_{i-1}^2) \quad (5)$$

$$C_{m,n} = \sum_{i=1}^N \bar{Q}_{m,n}^{(i)} (h_i^3 - h_{i-1}^3) \quad (6)$$

donde para la i -ésima lámina, $\bar{Q}_{m,n}^{(i)}$ es una componente de la matriz de rigidez en el sistema del laminado, y h_i , h_{i-1} corresponden al inicio y fin de la lámina medida respecto al plano de referencia del laminado.

El conjunto de soluciones para el análisis de un material laminado compuesto se describe mediante las deformaciones para el plano medio de referencia y bajo la consideración de una perfecta adherencia entre capas:

$$\mathbf{N} = \mathbf{A} \boldsymbol{\epsilon}_{x,y}^0 + \mathbf{B} \mathbf{k} \quad (7)$$

$$\mathbf{M} = \mathbf{B} \boldsymbol{\epsilon}_{x,y}^0 + \mathbf{D} \mathbf{k} \quad (8)$$

Así, las matrices de rigidez \mathbf{A} , \mathbf{B} y \mathbf{D} describen el apilado completo de las láminas de un material y se establece una relación entre las cargas \mathbf{N} , momentos \mathbf{M} por unidad de longitud, las deformaciones $\boldsymbol{\epsilon}_{x,y}^0$ y las curvaturas \mathbf{k} de un plano medio de referencia en el laminado de un material compuesto. Las Ecuaciones (1) a (8) describen el esfuerzo de un material laminado compuesto. Además, los lectores del presente artículo pueden encontrar el desarrollo matemático con mayor profundidad, así como la validación pertinente de estas descripciones en los trabajos de Mallick [1] y Reddy [21].

B. METAMODELOS PARA MATERIALES COMPUESTOS LAMINADOS: CASO DE ESTUDIO

En la presente investigación se tomó como caso de estudio el desarrollado por Ledesma-Orozco *et al.* [20], referente a una placa con agujero fijo y con un extremo empotrado y una carga de 7200 Nm aplicada sobre el semicírculo del agujero (Figura 1). El material de esta placa está considerado de un nylon reforzado con fibra de vidrio, presente en la impresión 3D, y sus propiedades se presentan en la Tabla 1.

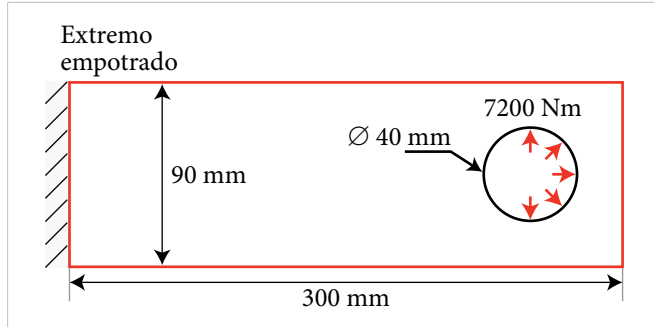


Figura 1. Placa con agujero fijo.

TABLA 1 [20], [22], [23]
PROPIEDADES MECÁNICAS DEL NYLON REFORZADO

MÓDULOS ELÁSTICOS	
PROPIEDAD	VALOR (GPa**)
E_1	21
$E_2 = E_3$	1.13
$G_{12} = G_{13}$	0.88
G_{23}	0.71
COEFICIENTE DE POISSON	
$\nu_{12} = \nu_{13}$	0.36
ν_{23}	0.3
RESISTENCIAS	
F_{1t}^*	574 a 590
F_{1c}^*	-130 a -82
$F_{2t} = F_{3t}$	9.84
$F_{2c} = F_{3c}$	-12.73
$F_4 = F_5 = F_6$	67.77

* c: compresión, t: tensión. **GPa: gigapascales.

Para el caso de estudio, el laminado se considera uniforme en todo el dominio, así como simétrico, ya que esto reduce los efectos que pueden surgir en los esfuerzos internos debido a la dirección de las fibras de un material, por lo tanto, dadas las Ecuaciones (7) y (8), se reducen a 0 los componentes de la matriz de rigidez de acople B . En resumen, la configuración del material del caso de estudio de este trabajo se presenta en la Figura 2.

La configuración se establece al dividir el empaquetado en tres regiones laminadas, cuyo espesor se modifica en espacios discretos que van de los 0.1 mm a los 0.3 mm, cuyos aumentos corresponden a 0.1 mm, la cual es una medida que se toma con base en el espesor de una capa en impresión 3D estándar. Por otra parte, para las orientaciones en cada lámina, estas se establecen en el rango de los -90° a los 90° , con aumentos de 1° .

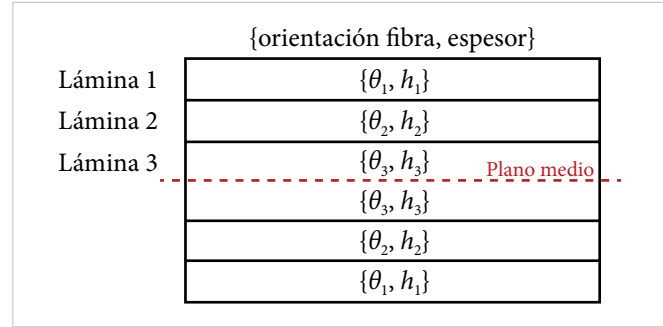


Figura 2. Esquema del laminado

Para entrenar el metamodelo de RNA encargado de predecir el índice de falla máximo Tsai-Wu, es necesario crear un conjunto de datos S , cuyas columnas correspondan a los valores de los espesores h y orientaciones θ , con su respectivo valor de I_F . Este conjunto de datos se obtuvo de un modelo discreto de elementos finitos de la placa que se muestra en la Figura 1 a partir de los parámetros de material de la Tabla 1 y el cual fue creado en el programa ANSYS Mechanical APDL [24]:

$$S = \{[\theta_i, h_i], I_F\} \quad (9)$$

Para este propósito, se usan las Ecuaciones (10), (11) y (12), que relacionan los esfuerzos internos con las resistencias a tensión, compresión y cortante en el material compuesto, así como su índice de falla I_F de Tsai-Wu:

$$C_1 = \frac{\sigma_1^2}{F_{1t}F_{1c}} + \frac{\sigma_2^2}{F_{2t}F_{2c}} + \frac{\sigma_3^2}{F_{3t}F_{3c}} + \frac{\sigma_4^2}{F_4^2} + \frac{\sigma_5^2}{F_5^2} + \frac{\sigma_6^2}{F_6^2} + c_4 \frac{\sigma_2\sigma_3}{F_{2t}F_{2c}F_{3t}F_{3c}} + c_5 \frac{\sigma_1\sigma_3}{F_{1t}F_{1c}F_{3t}F_{3c}} + c_6 \frac{\sigma_1\sigma_2}{F_{1t}F_{1c}F_{2t}F_{2c}} \quad (10)$$

$$C_2 = (F_{1t}^{-1} - F_{1c}^{-1})\sigma_1 + (F_{2t}^{-1} - F_{2c}^{-1})\sigma_2 + (F_{3t}^{-1} - F_{3c}^{-1})\sigma_3 \quad (11)$$

$$I_F = \left[-\frac{C_2}{2C_1} + \sqrt{\frac{C_2^2}{4C_1^2} + C_1^{-1}} \right]^{-1} \quad (12)$$

donde C_1 y C_2 son relaciones entre las resistencias y los esfuerzos en las láminas, los valores F_{ij} corresponden a los componentes del tensor de resistencias, mientras que σ_i son los esfuerzos en las direcciones principales de la lámina.

En ANSYS Mechanical APDL se establecieron las simulaciones a partir de las restricciones y condiciones de carga que se presentan en la Figura 1. Además, la configuración del laminado se creó en el elemento tipo SHELL 281, ya que este es el adecuado para el problema

analizado [20], [25]. De esta manera, se organizó un conjunto de datos con un tamaño de 6194 ejemplares de carga para el problema de la pieza que se modelará con redes neuronales artificiales.

C. METAMODELOS DE REDES NEURONALES PARA MATERIALES COMPUESTOS LAMINADOS

Las redes neuronales artificiales del tipo *feed-forward* son modelos basados en el comportamiento de las redes neuronales biológicas, las cuales, a través de la sinapsis, establecen vínculos que se adaptan mejor a la ejecución de una tarea [26].

La estructura de la RNA, utilizada para desarrollar el metamodelo que predice el valor de I_F , se describe de la siguiente manera: posee un conjunto de entradas (espesores y orientaciones del material compuesto del caso de estudio), que ingresan a una capa inicial, para luego pasar sucesivamente a una serie de arreglos de neuronas (capas ocultas), cuyas entradas en cada una de ellas corresponden a una combinación lineal de pesos, sesgos y respuestas de las neuronas de la capa previa. La salida de cada neurona de la capa oculta corresponde al resultado de la función de activación que la define y todas estas salidas convergen finalmente en la capa cuya respuesta corresponde al valor de regresión para el índice máximo de Tsai-Wu I_F . Este proceso se ilustra en la Figura 3.

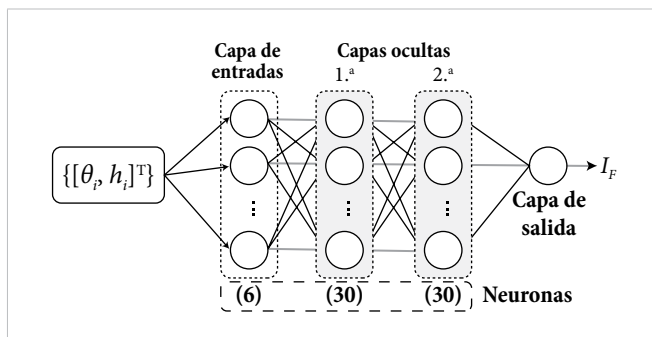


Figura 3. Topología red neuronal.

En la creación del metamodelo fue necesario entrenar, validar y evaluar los resultados generados por la RNA. Para este proceso, se tomó un total de 2477 muestras (40% del total de la base de datos) para el entrenamiento y validación, mientras que se utilizaron 3717 datos restantes (60%) para evaluación de la RNA. Es importante mencionar que, en una RNA, la evaluación corresponde al conjunto de datos que se encuentra fuera del entre-

namiento y validación, y se utiliza para diagnosticar el rendimiento del modelo cuando realiza la regresión de valores desconocidos o nuevos.

La topología de la RNA y los hiperparámetros definidos son cruciales para obtener los mejores resultados en las regresiones. En el metamodelo (véase la Figura 3), la capa de entrada consta de 6 neuronas y está seguida por dos capas ocultas, cada una con 30 neuronas, utilizando la función de activación ReLU (Rectified Linear Unit). El objetivo del entrenamiento es ajustar los pesos y sesgos de la RNA para minimizar el error o la función de costo, que resulta de comparar los valores predichos con los valores reales. En este caso, se utilizó la función de pérdida Error Absoluto Medio (MAE, por sus siglas en inglés) y el algoritmo de entrenamiento RMSprop. Para una descripción más detallada de los algoritmos de entrenamiento y la formulación de una RNA como el metamodelo empleado, se pueden consultar las fuentes [20] y [27].

La arquitectura de RNA del metamodelo se programó utilizando la biblioteca TensorFlow [28], empleando la clase Sequential y capas Dense, que se refieren a neuronas que están completamente conectadas entre sí desde la entrada hasta la neurona de salida.

Finalmente, los datos de entrada de los conjuntos de entrenamiento, validación y prueba fueron normalizados y para el uso adecuado de los espesores y orientaciones fue necesario escalarlos antes de ingresarlos a la RNA. Para esto, en cuanto a los espesores, se asume como unidad el valor mínimo, que corresponde a 0.1 mm, y se dividió por este valor para obtener un número entero en la entrada. En cuanto a las orientaciones de la Ecuación (9), estas se expresaron en radianes. Los lectores pueden consultar dichos datos de entrenamiento en el enlace adjunto al final de este trabajo.

D. FUNCIÓN OBJETIVO EN LA OPTIMIZACIÓN DE MATERIALES COMPUESTOS LAMINADOS

Una de las dificultades a las que se enfrentan los diseñadores de materiales compuestos laminados es la elección de la función objetivo. Si se elige una cuya entrada corresponda únicamente al índice de Tsai-Wu regulado por un factor de seguridad [29]. El resultado final de optimizar dicha función corresponderá al laminado, cuya cantidad de capas distribuye la carga lo suficiente para alcanzar el valor de falla.

En la presente investigación se alimentó un metamodelo con los parámetros del laminado. Luego, con esta información, se obtuvo el índice de falla de Tsai-Wu máximo, el cual forma parte de una función objetivo, cuya estructura busca favorecer la mejora del material compuesto principalmente por la orientación de las fibras (Figura 4).

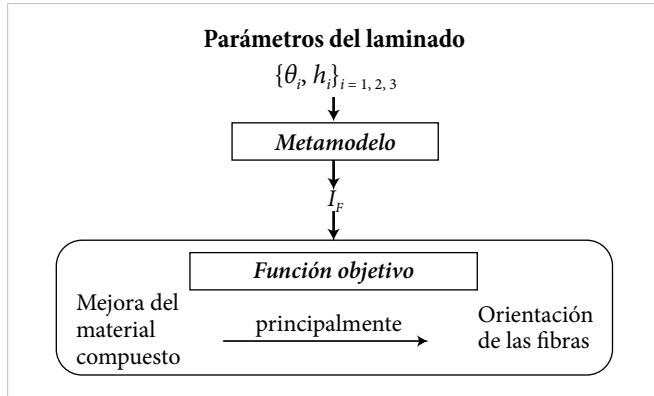


Figura 4. Función objetivo: análisis y desarrollo.

Para determinar la función objetivo, se empleó el principio del error en estado estable en los sistemas de control [30]. Así, en analogía a este principio, la función objetivo en este trabajo fue elegida para tener convergencia y estabilizarse hacia un valor cercano a 0 con el tiempo. Se espera entonces que, al utilizarla en un algoritmo de optimización, el aumento de iteraciones conduzca a un punto de convergencia donde, a pesar de que el índice de falla del laminado disminuya debido a la adición de capas, el cambio en la función objetivo sea mínimo, lo que permitirá su estabilización.

El primer paso para el desarrollo de la función objetivo es reconocer que, para evitar la falla, al diseñar y optimizar una estructura fabricada con materiales compuestos laminados el valor del índice de Tsai-Wu debe ser menor a 1 y, en su punto óptimo, se sitúe lo más cercano a 0. En un proceso de optimización, si se gráfica la evolución de este índice I_F respecto al avance en el número de iteraciones, manteniendo constante el espesor y solo reorientando las direcciones de las fibras, la naturaleza descrita sería similar a la ilustrada en la Figura 5.

Basado en el efecto anteriormente descrito, se optó por normalizar el espesor (dividiéndolo por su valor mínimo) de tal manera que, al realizar el producto con el valor del índice Tsai-Wu, se amplificarán los efectos.

Siguiendo la naturaleza esperada de la Figura 5 y que el valor del índice de Tsai-Wu, será menor a la unidad, se

puede entender que, al aproximarse a posiciones óptimas, se alcanzará un estado en el cual a pesar de que el espesor aumente, este ya no tendrá mayor repercusión en el valor de la función objetivo.

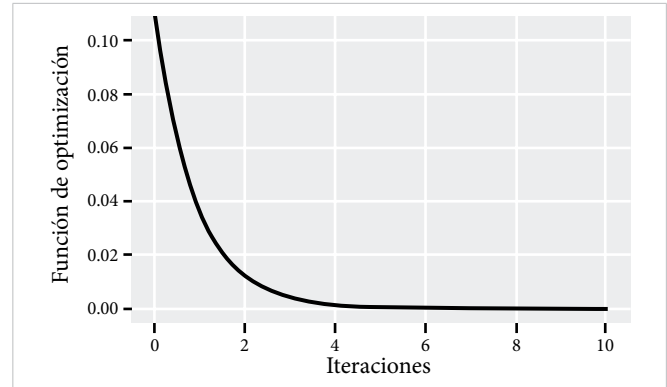


Figura 5. Naturaleza del I_F para un proceso de optimización.

Por lo anteriormente descrito, la función objetivo que se propone es la siguiente:

$$f(I_F, \text{espesor}) = \left(\frac{\text{espesor}}{\text{espesor}_{\min}} \right) I_F \quad (13)$$

$$\text{espesor} = \sum h_i \quad (14)$$

donde espesor y espesor_{\min} corresponden a la suma de los espesores de las secciones y al ancho mínimo.

La Ecuación (13) es la función objetivo resultado del presente estudio y es evaluada usando un algoritmo optimización de templado simulado. El objetivo de esta es encontrar la región o el punto límite donde inicia la mejora de una pieza fabricada con material compuesto y solo debido al aumento del espesor, es decir, que a partir de esas regiones la orientación de las fibras perdería relevancia en el diseño del material, pues el espesor se convierte en el factor más preponderante en la resistencia de un material laminado.

E. TEMPLADO SIMULADO APLICADO A MATERIALES COMPUESTOS

El templado es un proceso mecánico que consiste en calentar un sólido para después enfriarlo de forma controlada a fin de generar una estructura cristalina fuerte [31]. El templado simulado, como método de optimización, es propuesto inicialmente por Kirkpatrick *et al.* [32]. Similar a lo que sucede en el proceso físico, los átomos del material a altas temperaturas poseen una

mayor movilidad y, al enfriarse, esta energía disminuye, provocando que estos se estructuren en una forma particular, sin embargo, si el enfriamiento no es el adecuado se presentarán fisuras en la pieza.

Para el proceso de optimización, se parte de la distribución de probabilidad de Boltzmann [31], de la Ecuación (15), donde se expresa la probabilidad de que un sistema se encuentre en un estado de energía E , dada una temperatura T . La constante k se conoce como la constante de Boltzmann.

$$P(E) \propto e^{[-E/(kT)]} \quad (15)$$

A diferencia de otros algoritmos, donde las soluciones aceptadas son aquellas que presentan un mejor comportamiento, el templado simulado, a través del algoritmo propuesto por Metropolis *et al.* [33], establece de forma aleatoria un nivel de aceptación sobre soluciones que no necesariamente aportan una mejora, permitiendo al algoritmo una mejor exploración con el fin de evitar los mínimos locales.

En el algoritmo de Metropolis se establece una diferencia entre la energía obtenida con la solución actual propuesta $E_{current}$ y la mejor energía global obtenida E_{best} [Ecuación (16)].

$$\Delta E = E_{current} - E_{best} \quad (16)$$

La solución es aceptada bajo dos condiciones: cuando la diferencia es negativa, siendo mejor la energía encontrada con la solución actual, o cuando la diferencia es positiva, si esta es mayor, al valor aleatorio δ generado entre 0 y 1:

$$\delta < \Delta E \quad (17)$$

Como se mencionó previamente, la forma en que disminuye la temperatura es un proceso crucial y en el SA se establece un calendario de enfriamiento. Existen diferentes formulaciones para modificar la temperatura, como las lineales y las exponenciales, entre otras. En la presente investigación, se usó una regla geométrica de enfriamiento [34]. Aquí, para obtener la nueva temperatura es necesario obtener el producto de la temperatura anterior por un factor de enfriamiento $C_{cooling}$, Ecuación (18), donde $C_{cooling} = 0.8$.

$$T_{i+1} = C_{cooling} T_i \quad (18)$$

Se establece para cada temperatura un número específico de iteraciones, de ellas se obtiene la mejor solución, este proceso se repite hasta que la temperatura llegue a su valor final T_f .

Un parámetro importante para considerar en el templado simulado corresponde al cómo obtener la solución actual, utilizada para determinar $E_{current}$. El proceso consiste en perturbar una solución propuesta, generando así la aleatoriedad en la búsqueda de soluciones. Existen diferentes formas de crear este efecto [34]. En el presente desarrollo, se parte de lo postulado por Ledesma *et al.* [35]. Para ello, se crea una nueva función de perturbación adaptada a los parámetros del laminado. Así, el vector de solución perturbado es el resultado de un vector inicial propuesto (en este caso, la mejor solución encontrada) modificado por una relación entre la temperatura actual T y la inicial T_o , adicionado con el factor de perturbación:

$$R_{temp} = \frac{T_i}{T_o} \quad (19)$$

La forma de trabajo del SA, propuesto se presenta en el esquema de la Figura 6.

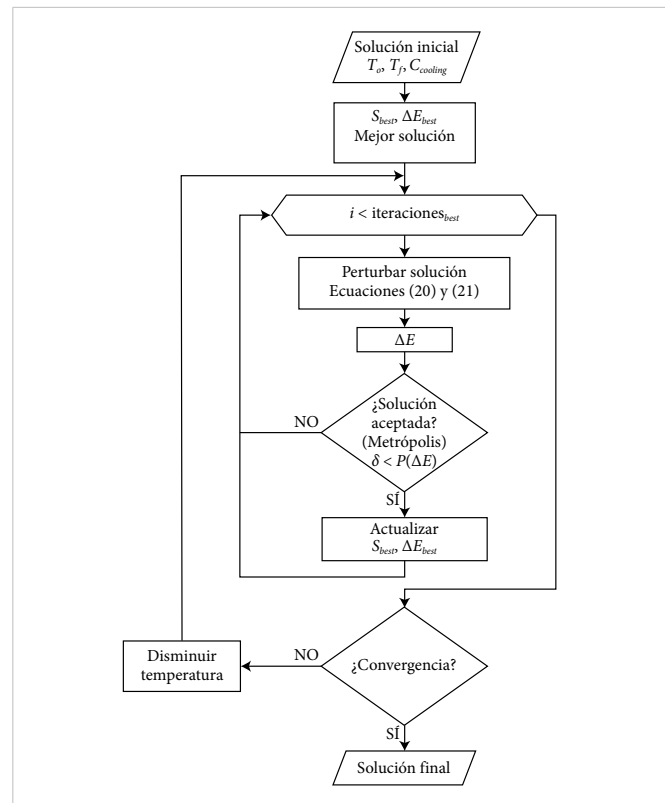


Figura 6. Algoritmo del templado simulado.

Debido a la diferencia que existe en los componentes que forman el vector solución del laminado (espesores y orientaciones), es necesario establecer dos estructuras diferentes para la perturbación; cuando se trabaje con el componente asociado a las orientaciones, el nuevo componente se describe por la Ecuación (20), donde la sección de perturbación obedece a un valor aleatorio entre -90° y 90° ($\mu[-90^\circ, 90^\circ]$), mientras que para los factores asociados a los espesores, la parte aleatoria se acota a una elección entre los espesores posibles para cada región ($\lambda[\text{espesor}]$) como se describe en la Ecuación (21):

$$\theta_{\text{perturbado}} = (1 - R_{\text{temp}})\theta_{\text{best}} + R_{\text{temp}}(\mu[-90^\circ, 90^\circ]) \quad (20)$$

$$h_{\text{perturbado}} = (1 - R_{\text{temp}})h_{\text{best}} + R_{\text{temp}}(\lambda[\text{espesor}]) \quad (21)$$

A fin de evaluar el rendimiento del algoritmo SA, antes de ser aplicado sobre la función objetivo-propuesta para los laminados, se examina para dos funciones de dos variables cuyos valores mínimos son fácilmente conocidos.

Caso 1: Función $f(x,y)=(x-3)^2+(y+2)^2$

Se usa el algoritmo SA, propuesto en esta función. Los resultados se ilustran en la Figura 7, donde se muestra cómo se parte de un punto inicial (triángulo verde) y finaliza en el vértice (triángulo azul) más bajo, ubicado en las coordenadas (3,-2).

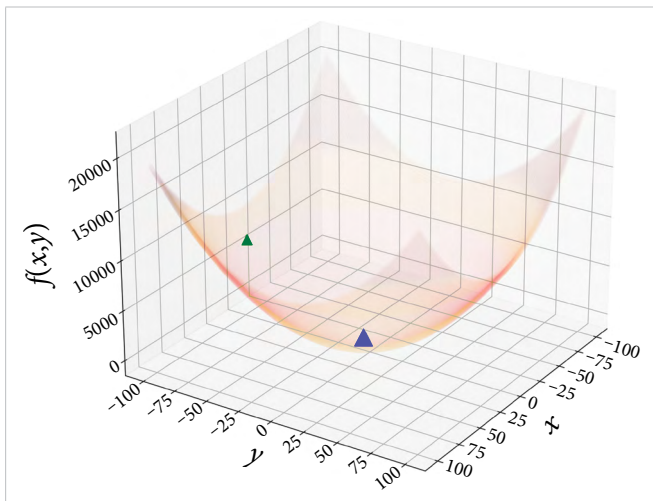


Figura 7. Caso 1.

Caso 2: Función $f(x,y) = -\cos(x - \pi/2) \cos(y)$

Esta función es particularmente especial, ya que posee varios puntos máximos y mínimos, pues permite, como

se muestra en la Figura 8, que el algoritmo SA inicie en un punto aleatorio (triángulo verde) y salte entre los diferentes puntos mínimos (triángulos grises), lo que demuestra la capacidad de evitar quedarse en los mínimos locales y encontrar el mínimo global (triángulo azul).

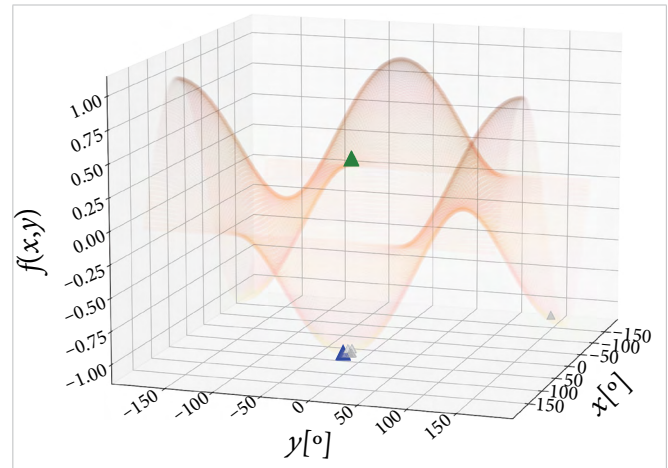


Figura 8. Caso 2.

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Para evaluar el rendimiento de la RNA en la regresión del I_F , se realizaron 35 ciclos de entrenamiento y evaluación de la red. En el conjunto de datos, los valores mínimo y máximo para el I_F son [0.1559, 2.2371].

A partir del conjunto de evaluación, se compararon los resultados obtenidos de la regresión contra los esperados. En la Figura 9 se puede observar que se distribuyen alrededor del comportamiento ideal esperado para un modelo de predicción (línea punteada).

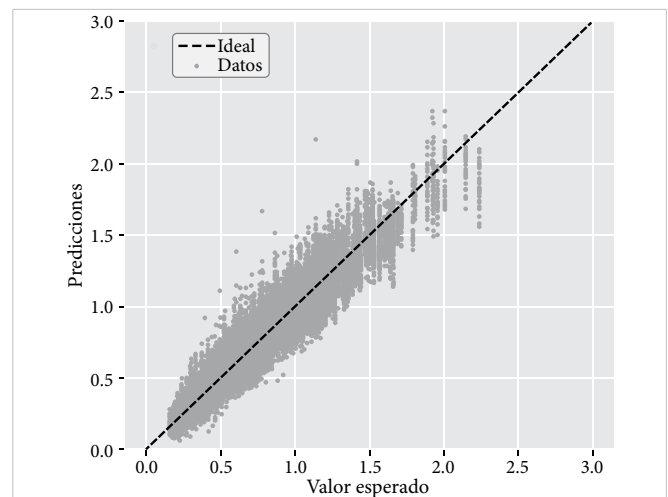


Figura 9. Gráfica de predicciones: índice de Tsai-Wu.

Para ampliar el análisis del rendimiento de la RNA, se usaron tres métricas (Figura 10).

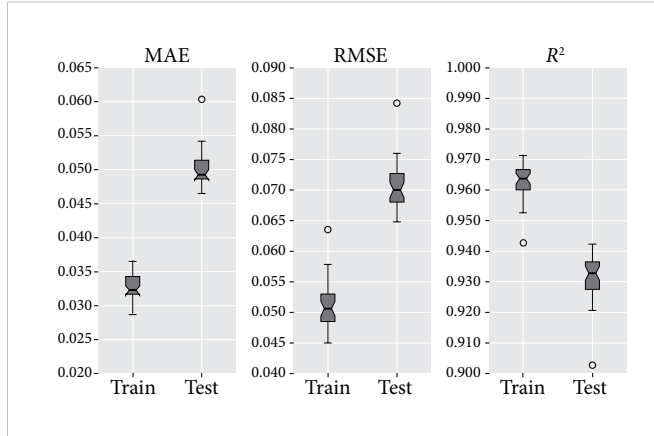


Figura 10. Rendimiento RNA (diagramas de cajas).

De los diagramas de caja (Figura 10), de izquierda a derecha, el primero corresponde al MAE:

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i|}{n} \quad (22)$$

donde y_i representa los datos que se ajustan con la red neuronal (en este trabajo, el índice de falla de Tsai-Wu I_F) y \hat{y}_i corresponde a la salida que se obtiene con la red neuronal. En dicha Figura 10 se observa que los valores obtenidos en el entrenamiento, y la evaluación, se encuentran por debajo del valor mínimo, registrado en la base de datos.

El segundo diagrama de la Figura 10 representa a la raíz del error cuadrático medio (RMSE):

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n}} \quad (23)$$

Esta medida brinda una referencia de la máxima sensibilidad que pueden tener las regresiones. En la Figura 10, al igual que el MAE, estos valores para el modelo se sitúan por debajo del valor mínimo.

Finalmente, la tercera métrica corresponde al coeficiente de determinación R^2 :

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (24)$$

donde \bar{y} es la media de los valores con los que se entrena la red neuronal. Para la RNA, tanto en el entrenamiento

como en la evaluación los valores se encuentran entre 0.93 y 0.96, verificando un desempeño eficiente de la red neuronal, para predecir los valores de I_F .

Una vez confirmada la capacidad de predicción del metamodelo, esta se usa para encontrar I_F en la función objetivo (Ecuación 13), la cual se optimiza usando el algoritmo SA.

Los parámetros del SA se presentan en la Tabla 2.

TABLA 2
PARÁMETROS SA

PROPIEDAD	VALOR
T_o	100
T_f	0.0001
$C_{cooling}$	0.8
Parámetro de convergencia	0.0001
Iteraciones por temperatura	50
Cantidad de temperaturas	100

El desempeño del algoritmo SA se refleja en la Figura 11, donde se observa que se estabiliza a partir de las 150 iteraciones.

El uso del metamodelo permite presentar de forma gráfica el comportamiento de la función objetivo, pues permite calcular, en un tiempo muy corto, una gran cantidad de soluciones. Esto es muy importante en el proceso de diseño, ya que brinda de forma explícita la interacción entre las variables de diseño y la propiedad estudiada.

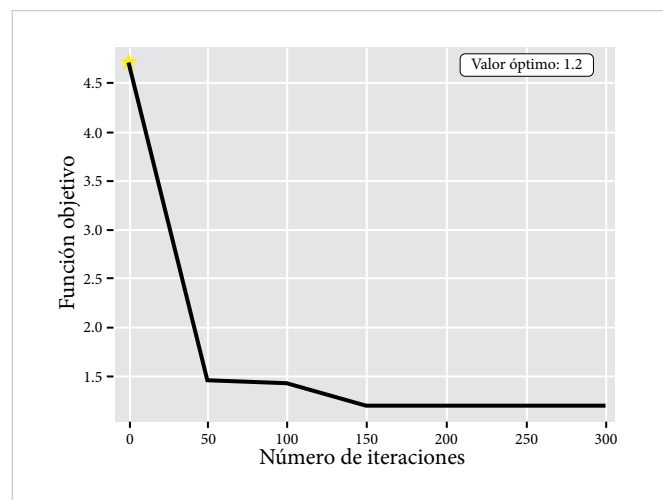


Figura 11. Rendimiento SA en materiales compuestos.

En la Figura 12 se representa de forma parcial el valor de la función objetivo respecto al cambio en los ángulos de las láminas 1 y 2 (Figura 2). Se incluye el recorrido que hace el algoritmo SA, partiendo de un punto aleatorio (triángulo verde), para llegar a la solución final (triángulo azul).

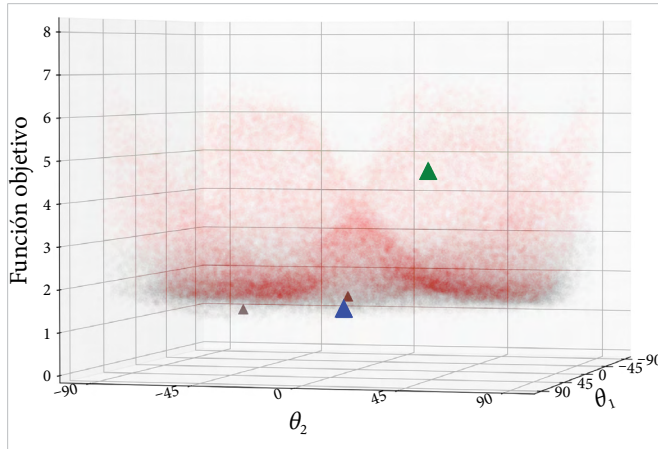


Figura 12. Función objetivo y SA.

Se realizó el proceso de optimización 15 veces, encontrando una región como se ve en las zonas de puntos grises cercanas a la unidad en el eje de valores de la función objetivo de la Figura 12. De esta región, es relevante analizar el valor del I_F y el peso en el laminado.

En la Figura 13 se presentan las optimizaciones realizadas, estipulando los valores de I_F para los mejores resultados de la función objetivo, a la que además se agrega un segundo eje, el cual corresponde a la relación entre el mínimo espesor óptimo obtenido y el dado en la solución analizada.

El espacio de soluciones descrito (véase la Figura 13) presenta una oportunidad para los diseñadores de materiales compuestos. Los puntos ubicados a la izquierda corresponden a situaciones en las que el valor óptimo se logra principalmente por el efecto de las direcciones de las fibras. En los puntos situados a la derecha se observa que el índice de falla disminuye debido al efecto de un espesor más grueso, lo que se refleja en relaciones mayores a 1 en el segundo eje. En esta imagen se observa que cuando el índice de Tsai-Wu, para valores de función objetivo de 1.124 y 1.206, donde la relación del espesor es mayor que 2.5, el material está sometido a esfuerzos que, en comparación con su capacidad de resistencia, lo ubicaría lejos de la falla. En otras palabras, el material se encuentra en un estado de esfuerzo seguro y está trabajando bien dentro de sus límites de

resistencia. Es importante observar que otras relaciones de espesor (que supondrían una composición del material más delgado), aun así, implicaría seguridad de este ante las cargas.

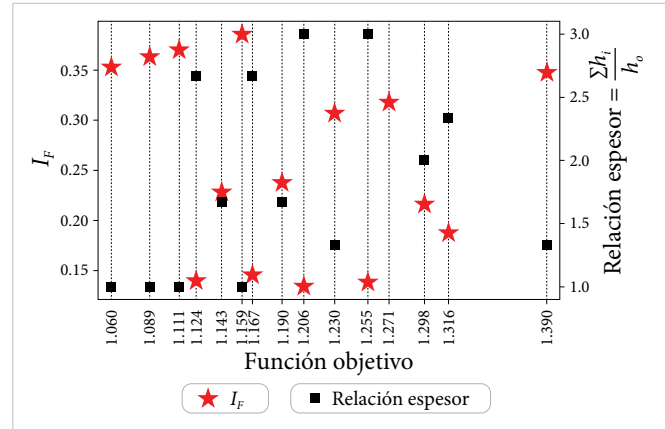


Figura 13. Espacio de soluciones óptimas.

Con los resultados anteriores, un diseñador puede elegir la opción más adecuada para su problema: para aplicaciones no críticas, podrá optar por la solución brindada por el efecto de las orientaciones, mientras que para aquellas con mayor riesgo, seleccionará las de mayor espesor.

El punto más relevante del estudio que demuestra su efectividad es la comparación con los métodos tradicionales. Según la literatura y lo comprobado en el presente análisis, para obtener una evaluación del sistema (placa con agujero fijo) a través de una simulación FEM, se requieren aproximadamente 13.95 segundos al ejecutarse en una computadora con un procesador Intel Core i5-8300H a 2.3 GHz y 16 GB de RAM. Conociendo además que, para encontrar una solución óptima por el presente método se requieren 40 segundos y al menos de 300 iteraciones (véase la Figura 11). Es posible establecer en la Tabla 3 una comparativa entre los tiempos necesarios para lograr un espacio de diseño, como el representado en la Figura 13 (15 soluciones), usando el método clásico y el postulado por la presente investigación.

TABLA 3
ANÁLISIS COMPARATIVO DE MÉTODOS EN EL DISEÑO

	CLÁSICO	ACTUAL
Tiempo para obtener una solución óptima	4185 segundos	40 segundos*
Tiempo necesario para un espacio de diseño (15 soluciones)	1046.25 minutos	10 minutos*

* Resultados obtenidos con RNA entrenada.

Es importante destacar que el método actual resulta útil cuando el equipo de diseñadores requiere o busca un rango amplio de alternativas viables, ya que para aplicarlo es necesario crear una base de datos previamente. Por lo tanto, si solo se busca una solución limitada al problema, la presente metodología de diseño podría no ser la más adecuada.

Finalmente, es importante destacar que los modelos basados en redes neuronales presentados en este trabajo no fueron entrenados con datos experimentales. No obstante, en futuros estudios, la inclusión de variables como el espesor de las láminas o aspectos relacionados con la fabricación de especímenes de prueba podría generar incertidumbre en la respuesta mecánica de los materiales. Por ello, se recomienda ajustar adecuadamente los modelos para garantizar su robustez.

IV. CONCLUSIONES

El presente estudio adapta el método de optimización del templado simulado al análisis de materiales compuestos laminados utilizando metamodelos basados en RNA para definir una función objetivo. De los resultados obtenidos, se puede concluir lo siguiente:

- El uso de metamodelos basados en RNA para el diseño de materiales compuestos laminados permite una exploración más efectiva al estudiar las relaciones que buscan mejorar el índice de falla de Tsai-Wu, a la vez que reduce el peso de la pieza.
- Una función objetivo que relaciona el producto entre el espesor escalado del laminado y el índice de falla de Tsai-Wu es adecuada y ventajosa en el diseño, ya que permite identificar explícitamente la región o el punto donde modificar las orientaciones en el laminado deja de mejorar la pieza, quedando esta únicamente dependiente del espesor del compuesto.
- Para lograr una buena convergencia en el templado simulado adaptado a los materiales compuestos es fundamental establecer correctamente las funciones de perturbación de las soluciones. Se aconseja utilizar para las orientaciones de las fibras ángulos expresados en forma de grados decimales, cuyos valores sean enteros. Para el espesor, es recomendable usar rangos que sean múltiplos del grosor esperado para una lámina.

- Finalmente, el uso de metamodelos, funciones objetivas centradas en el índice de Tsai-Wu y el espesor escalado, en combinación con el templado simulado adaptado a materiales compuestos, proporciona una ventaja competitiva notable sobre los métodos tradicionales. Esto se debe a su capacidad para encontrar un mayor número de soluciones de diseño en tiempos considerablemente más cortos.

REFERENCIAS

- [1] P. K. Mallick, *Fiber-Reinforced Composites: Materials, Manufacturing, and Design*, 3.ª ed. Boca Raton: CRC Press, 2007.
- [2] T. W. Clyne y D. Hull, *An Introduction to Composite Materials*, 3.ª ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2019. doi: [10.1017/9781139050586](https://doi.org/10.1017/9781139050586).
- [3] P. Beardmore y C. F. Johnson, "The potential for composites in structural automotive applications", *Compos Sci Technol*, vol. 26, n.º 4, pp. 251-281, 1986, doi: [10.1016/0266-3538\(86\)90002-3](https://doi.org/10.1016/0266-3538(86)90002-3).
- [4] O. Bas, E. Ates y F. Ozturk, "Thermoplastic Composite Materials for the Aerospace Industry", *RDMS*, vol. 15, n.º 5, 2021, doi: [10.31031/rdms.2021.15.000872](https://doi.org/10.31031/rdms.2021.15.000872).
- [5] J. Zhang, G. Lin, U. Vaidya y H. Wang, "Past, present and future prospective of global carbon fibre composite developments and applications", *Compos B Eng*, vol. 250, p. 110463, 2023, doi: [10.1016/j.compositesb.2022.110463](https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2022.110463).
- [6] I. A. Hassan, H. S. Ramadan, M. A. Saleh y D. Hissel, "Hydrogen storage technologies for stationary and mobile applications: Review, analysis and perspectives", *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 149, art. 111311, oct. 2021, doi: [10.1016/j.rser.2021.111311](https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.111311).
- [7] C. Jenkins y S. Khanna, *Mechanics of materials: a modern integration of mechanics and materials in structural design*, 1.ª ed. Academic Press, 2005.
- [8] S. W. Tsai y E. M. Wu, "A General Theory of Strength for Anisotropic Materials", *J Compos Mater*, vol. 5, n.º 1, pp. 58-80, 1971, doi: [10.1177/002199837100500106](https://doi.org/10.1177/002199837100500106).
- [9] E. J. Hearn, "Strain energy", en *Mechanics of Materials I: An Introduction to the Mechanics of Elastic and Plastic Deformation of Solids and Structural*, 3.ª ed., E. J. Hearn,

- ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1997, cap. 11, pp. 254-296. doi: [10.1016/B978-075063265-2/50012-8](https://doi.org/10.1016/B978-075063265-2/50012-8).
- [10] H. Ghiasi, K. Fayazbakhsh, D. Pasini y L. Lessard, “Optimum stacking sequence design of composite materials Part II: Variable stiffness design”, *Compos. Struct.*, vol. 93, n.º 1, pp. 1-13, dic. 2010, doi: [10.1016/j.compstruct.2010.06.001](https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2010.06.001).
- [11] H. Ghiasi, D. Pasini y L. Lessard, “Optimum stacking sequence design of composite materials Part I: Constant stiffness design”, *Compos. Struct.*, vol. 90, n.º 1, pp. 1-11, sept. 2009, doi: [10.1016/j.compstruct.2009.01.006](https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2009.01.006).
- [12] S. Setoodeh, M. M. Abdalla y Z. Gürdal, “Design of variable-stiffness laminates using lamination parameters”, *Compos B Eng*, vol. 37, n.º 4, pp. 301-309, 2006, doi: [10.1016/j.compositesb.2005.12.001](https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2005.12.001).
- [13] R. T. L. Ferreira, I. A. Ashcroft, S. Li y P. Zhuo, “Optimisation of Fibre-Paths in Composites Produced by Additive Manufacturing”, en *EngOpt 2018 Proceedings of the 6th International Conference on Engineering Optimization*, Springer International Publishing, 2019, pp. 1083-1094, doi: [10.1007/978-3-319-97773-7_94](https://doi.org/10.1007/978-3-319-97773-7_94).
- [14] G. X. Gu, C. T. Chen y M. J. Buehler, “De novo composite design based on machine learning algorithm”, *Extreme Mech Lett*, vol. 18, pp. 19-28, en. 2018, doi: [10.1016/j.eml.2017.10.001](https://doi.org/10.1016/j.eml.2017.10.001).
- [15] C.-T. Chen y G. X. Gu, “Machine learning for composite materials”, *MRS Commun*, vol. 9, n.º 2, pp. 556-566, jun. 2019, doi: [10.1557/mrc.2019.32](https://doi.org/10.1557/mrc.2019.32).
- [16] G. X. Gu, C.-T. Chen, D. J. Richmond y M. J. Buehler, “Bioinspired hierarchical composite design using machine learning: Simulation, additive manufacturing, and experiment”, *Mater Horiz*, vol. 5, n.º 5, pp. 939-945, sept. 2018, doi: [10.1039/c8mh00653a](https://doi.org/10.1039/c8mh00653a).
- [17] C.-T. Chen y G. X. Gu, “Generative Deep Neural Networks for Inverse Materials Design Using Backpropagation and Active Learning”, *Adv. Sci.*, vol. 7, n.º 5, mar. 2020, doi: [10.1002/advs.201902607](https://doi.org/10.1002/advs.201902607).
- [18] J. Chen, L. Wan, Y. Ismail, J. Ye y D. Yang, “A micro-mechanics and machine learning coupled approach for failure prediction of unidirectional CFRP composites under triaxial loading: A preliminary study”, *Compos Struct*, vol. 267, art. 113876, jul. 2021, doi: [10.1016/j.compstruct.2021.113876](https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2021.113876).
- [19] Z. Liao, C. Qiu, J. Yang, J. Yang y L. Yang, “Accelerating the Layup Sequences Design of Composite Laminates via Theory-Guided Machine Learning Models”, *Polymers*, vol. 14, n.º 15, ag. 2022, doi: [10.3390/polym14153229](https://doi.org/10.3390/polym14153229).
- [20] E. Ledesma-Orozco, J. C. Galvis-Chacón y A. E. Rodríguez-Sánchez, “Neural networks modeling of strain energy density and Tsai-Wu index in laminated composites”, *J Compos Mater*, vol. 58, n.º 10, feb. 2024, doi: [10.1177/00219983241235856](https://doi.org/10.1177/00219983241235856).
- [21] J. N. Reddy, *Mechanics of Laminated Composite Plates and Shells: Theory and Analysis*, 2.ª ed. Boca Raton: CRC Press, 2003, doi: [10.1201/b12409](https://doi.org/10.1201/b12409).
- [22] J. Leon-Becerra, O. A. González-Estrada y H. Sánchez-Acevedo, “Comparison of Models to Predict Mechanical Properties of FR-AM Composites and a Fractographical Study”, *Polymers*, vol. 14, n.º 17, sept. 2022, doi: [10.3390/polym14173546](https://doi.org/10.3390/polym14173546).
- [23] J. León-Becerra, M. Á. Hidalgo-Salazar y O. A. González-Estrada, “Progressive damage analysis of carbon fiber-reinforced additive manufacturing composites”, *Int J Adv Manuf Technol*, vol. 126, n.º 5, pp. 2617-2631, 2023, doi: [10.1007/s00170-023-11256-w](https://doi.org/10.1007/s00170-023-11256-w).
- [24] E. J. Barbero, *Finite element analysis of composite materials using ANSYS*, 2.ª ed. Boca Raton: CRC Press, 2013, doi: [10.1201/b16295](https://doi.org/10.1201/b16295).
- [25] S. Zhang, “On the accuracy of Reissner-Mindlin plate model for stress boundary conditions”, *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, vol. 40, n.º 2, 2006, doi: [10.1051/m2an:2006014](https://doi.org/10.1051/m2an:2006014).
- [26] C. C. Aggarwal, *Neural Networks and Deep Learning*. Springer International Publishing, 2018, doi: [10.1007/978-3-319-94463-0](https://doi.org/10.1007/978-3-319-94463-0).
- [27] A. E. Rodríguez-Sánchez y H. Plascencia-Mora, “Modeling hysteresis in expanded polystyrene foams under compressive loads using feed-forward neural networks”, *J. Cell. Plast.*, vol. 59, n.º 4, may. 2023, doi: [10.1177/0021955X231174362](https://doi.org/10.1177/0021955X231174362).

- [28] M. Abadi *et al.*, “TensorFlow: Large-Scale Machine Learning on Heterogeneous Distributed Systems”, *arXiv*, art. arXiv.1603.04467, mar. 2016, doi: [10.48550/arXiv.1603.04467](https://doi.org/10.48550/arXiv.1603.04467).
- [29] V. A. Alcántar, “Optimización de recipientes a presión del Tipo III y IV”, tesis doctoral, Universidad de Guanajuato, Salamanca, Guanajuato, 2015.
- [30] N. S. Nise, *Control Systems Engineering*, 6.ª ed. Hoboken, NJ: John Wiley & Sons, 2011.
- [31] D. T. Pham y D. Karaboga, *Intelligent Optimisation Techniques*, 1.ª ed. Londres: Springer London, 2000.
- [32] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt y M. P. Vecchi, “Optimization by Simulated Annealing”, *Science*, vol. 220, n.º 4598, pp. 671-680, may. 1983, doi: [10.1126/science.220.4598.671](https://doi.org/10.1126/science.220.4598.671).
- [33] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller y E. Teller, “Equation of State Calculations by Fast Computing Machines”, *J Chem Phys*, vol. 21, n.º 6, pp. 1087-1092, jun. 1953, doi: [10.1063/1.1699114](https://doi.org/10.1063/1.1699114).
- [34] P. J. M. Laarhoven y E. H. L. Aarts, *Simulated annealing: theory and applications*. EUA: Kluwer Academic Publishers, 1987.
- [35] S. Ledesma, G. Aviña y R. Sanchez, “Practical Considerations for Simulated Annealing Implementation”, en *Simulated Annealing*, C. M. Tan, ed. Rijeka: IntechOpen, 2008, cap. 20, doi: [10.5772/5560](https://doi.org/10.5772/5560).

AGRADECIMIENTOS

El primer autor agradece al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías (CONAHCYT) y a la Universidad de Guanajuato por el apoyo financiero y la oportunidad de realizar sus estudios de doctorado.

DECLARACIÓN DE DISPONIBILIDAD DE DATOS

En respuesta a una recomendación arbitral, los autores ponen a disposición de los interesados la base de datos y los resultados de las métricas correspondientes al entrenamiento de los modelos en este estudio, comunicándose con el autor de correspondencia a la dirección de correo: aerodriguez@up.edu.mx.