



Estimación de las constantes elásticas en láminas unidireccionales a través de imágenes microestructurales y *machine learning*

Byron Barriga Machado, Diego Infante García, Antonio R. Quiñonero Moya, José E. Tarancón, Eugenio Giner

Instituto Universitario de Ingeniería Mecánica y Biomecánica - I2MB, Departamento de Ingeniería Mecánica y de Materiales, Universitat Politècnica de València

bbarmac@upv.es, dieingar@upv.es, angumo@upv.es, jetaranc@mcm.upv.es, eginerm@mcm.upv.es

Este estudio presenta el desarrollo y entrenamiento de una red neuronal convolucional combinada con un perceptrón multicapa diseñada para la estimación de las constantes elásticas de una lámina unidireccional a partir de imágenes microestructurales del plano transversal 2-3. Las predicciones se centran en el módulo de elasticidad transversal E_2 y el módulo de cizalladura G_{23} , considerando el caso de deformación plana. Estas propiedades son de particular interés, ya que dependen directamente de la geometría y de la distribución del refuerzo, que en la práctica presenta una disposición aleatoria. Aunque existen modelos efectivos para configuraciones estructuradas, como la ordenación cuadrada, su precisión disminuye cuando se aplican a problemas reales, en los que la distribución es aleatoria.

Para el entrenamiento de la red neuronal se ha utilizado una base de datos sintéticos generada a través del método de elementos finitos basado en homogenización utilizando condiciones de contorno periódicas. Se han considerado elementos de volumen representativo con diferente fracción en volumen, diámetro de fibras y una distribución de fibras aleatoria. La base de datos incluye imágenes microestructurales y las propiedades elásticas de los constituyentes, que sirven como entrada para la red. Las constantes elásticas de la lámina obtenidas de la solución del problema de homogenización se emplean como salida de la red. Finalmente, se discuten las ventajas y limitaciones del enfoque propuesto, así como posibles mejoras y aplicaciones futuras en la caracterización de materiales compuestos.

En resumen, esta herramienta representa un avance en la caracterización rápida y precisa de materiales compuestos, utilizando modelos de machine learning que analizan directamente imágenes microestructurales, con un impacto significativo en la reducción de tiempos de simulación y coste computacional.

1. Introducción

El cálculo de las propiedades elásticas transversales mediante las ecuaciones propuestas por Halpin-Tsai [1] es una de las metodologías más utilizadas debido a su simplicidad y aplicabilidad en diferentes configuraciones de materiales compuestos. Estas ecuaciones dependen de un factor de refuerzo que considera la influencia de la geometría, la distribución de las fibras y la fracción en volumen. Sin embargo, su valor se ha obtenido a partir de configuraciones idealizadas, por ejemplo, para una ordenación cuadrada [2]. Este tipo de configuraciones distan mucho de la realidad ya que no refleja la disposición aleatoria encontrada en la práctica. Trabajos como el de Giner et al. [3], han demostrado influencia de la distribución de las fibras para la determinación del factor de refuerzo.

Por otro lado, los enfoques basados en homogenización mediante elementos finitos (FEM, por sus siglas en inglés) emplean un elemento de volumen representativo (RVE, por sus siglas en inglés) y tienen en cuenta los factores microestructurales como la fracción en volumen, la forma y la distribución de las fibras [4,5]. Sin embargo, esta metodología carece de la simplicidad ofrecida por los modelos analíticos. La generación de RVEs realistas y la resolución de múltiples simulaciones FEM para cada uno de los modelos implica un mayor tiempo de cómputo y procesamiento, limitando su aplicabilidad a nivel práctico.

En este contexto, el uso de la inteligencia artificial (IA), y del *machine learning* en concreto, surge como una alternativa para la estimación de las constantes elásticas en laminados. Diversos estudios han explorado la utilización de técnicas de IA para la caracterización de materiales heterogéneos evidenciando una alta precisión [6–9]. En particular, las redes neuronales convolucionales (CNN, por sus siglas en inglés) destacan principalmente por su capacidad para identificar patrones dentro de las imágenes microestructurales con las que se entrena, lo que permite capturar los factores geométricos de la microestructura. Una ventaja de este enfoque es la rapidez y facilidad de aplicación al solo requerir una imagen para estimar las constantes elásticas. Sin embargo, una limitación es la necesidad de grandes volúmenes de datos para el entrenamiento, aunque esta se puede suplir con la generación de datos sintéticos.

Esta investigación propone un enfoque basado en *machine learning*, combinando una red neuronal convolucional (CNN) con un perceptrón multicapa (MLP) para la estimación de las constantes elásticas en laminados unidireccionales. La arquitectura del modelo consta de una rama con la CNN encargada de extraer características relevantes de las imágenes microestructurales, y otra con el MLP que procesa las propiedades de los constituyentes. Para el entrenamiento, se han generado datos sintéticos mediante simulaciones de elementos finitos, incorporando variabilidad en la distribución y tamaño de las fibras en un amplio rango de fracciones en volumen. Los resultados muestran que el modelo logra estimaciones precisas en comparación con los obtenidos en las simulaciones. Finalmente, se discuten las ventajas y limitaciones del enfoque propuesto, así como posibles mejoras y aplicaciones futuras en la caracterización de materiales compuestos.

2. Materiales y métodos

2.1. Generación de microestructuras

La metodología propuesta se ha empleado en láminas unidireccionales de CFRP, pero puede ser extendida hacia otro tipo de materiales compuestos. El tamaño de los RVE es constante y se ha establecido en $57 \times 57 \mu\text{m}$, cambiando el número de fibras para obtener diferentes valores de fracción en volumen. Además, se utiliza una distribución uniforme en el diámetro de fibras para capturar la variabilidad que sucede comúnmente en la práctica. El rango de valores para la fracción en volumen está comprendido entre 0.3 y 0.7, mientras que para el diámetro de fibra los límites son 4 y $5 \mu\text{m}$.

Para la generación de las microestructuras se utilizó un algoritmo de generación de distribución aleatoria. Las fibras son generadas de manera secuencial con las coordenadas de su centro y diámetro aleatorios. Si una nueva fibra se encuentra en el borde del dominio se genera su contraparte en el lado opuesto para mantener las condiciones de contorno periódicas (PBC por sus siglas en inglés). En cambio, si la nueva fibra se superpone con otra ya existente, esta se descarta y se genera una nueva. El proceso se repite hasta alcanzar el número requerido de fibras para obtener el volumen en fracción establecido. En volúmenes de fibra altos se actualiza la posición de las fibras que se superponen a otras iterativamente como si se tratasen de fuerzas de repulsión entre fibras cercanas, hasta que cumpla la condición de distancia mínima.

En total se han generado 10000 imágenes microestructurales, divididas en 6400 para entrenamiento, 1600 para validación y 2000 para testeo. En la Figura 1 se observa un ejemplo de las imágenes microestructurales para el entrenamiento con diferentes fracciones en volumen.

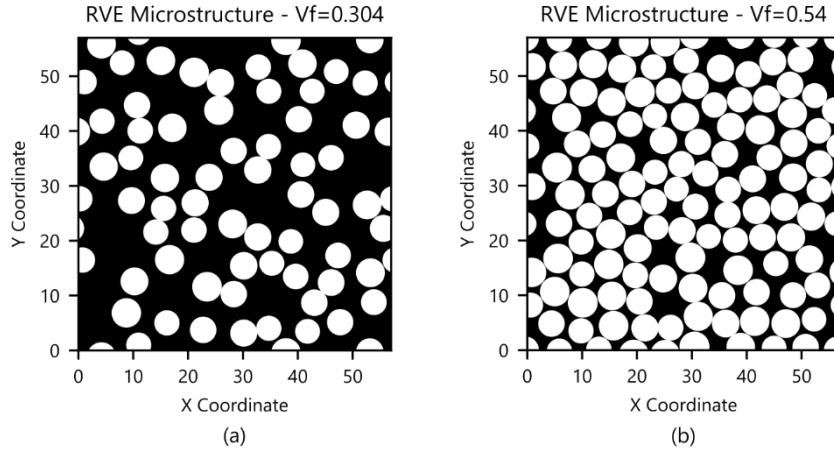


Figura 1. Ejemplos de microestructuras generadas para una fracción en volumen baja (a) y alta (b).

2.2. Análisis numérico y obtención de E_2 y G_{23}

Para la resolución del problema de homogenización mediante elementos finitos se ha utilizado la librería SfePy [10]. Esta librería contiene un módulo dedicado a la homogeneización por expansión asintótica para problemas de elasticidad lineal basado en [11,12]. El problema se resuelve en 2D con la condición de deformación plana.

Para el mallado de las microestructuras se ha utilizado la librería Gmsh con elementos triangulares de orden 1 con un tamaño de $0.95 \mu\text{m}$. Se ha configurado la correspondencia entre el número de nodos y su posición en lados opuestos del RVE para cumplir con las PBCs, como se ilustra en la Figura 2.

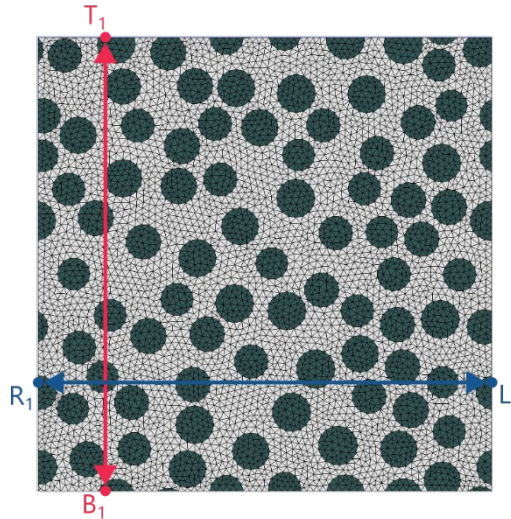


Figura 2. Ejemplo del mallado de una microestructura con $V_f = 0.39$ y con la correspondencia de nodos entre bordes opuestos.

Se ha considerado un comportamiento isótropo tanto para la matriz como para las fibras con adhesión perfecta en su interfaz. Se han utilizado las siguientes propiedades de los constituyentes $E_f = 250 \text{ GPa}$, $\nu_f = 0.30$, $E_m = 5 \text{ GPa}$, $\nu_m = 0.38$ que corresponden a valores típicos para fibras de carbono y resina epoxi respectivamente.

Como resultado del análisis numérico, el módulo de homogenización devuelve la matriz de rigidez reducida $[C]$ para una lámina ortótropa en deformación plana cuyas componentes se muestran en la Ecuación (1).

$$[C] = \begin{bmatrix} C_{22} & C_{23} & 0 \\ C_{23} & C_{33} & 0 \\ 0 & 0 & C_{66} \end{bmatrix} \quad (1)$$

De esta matriz se puede extraer directamente el valor del módulo de cizalladura transversal $G_{23} = C_{66}$. Para determinar el módulo de elasticidad transversal E_2 se debe hacer uso de la matriz de flexibilidad $[\beta]$ reducida indicada en la Ecuación (2). Los elementos de esta matriz están directamente relacionados con los elementos de la matriz de flexibilidad global.

$$[\boldsymbol{\beta}] = [\mathbf{C}]^{-1} = \begin{bmatrix} \beta_{22} & \beta_{23} & 0 \\ \beta_{23} & \beta_{33} & 0 \\ 0 & 0 & \beta_{66} \end{bmatrix} \quad (2)$$

El valor β_{22} es de especial interés ya que está directamente relacionado con E_2 como se indica en la Ecuación (3).

$$\beta_{22} = S_{22} - \frac{S_{12}^2}{S_{11}} \quad (3)$$

De la matriz de flexibilidad global obtenemos las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned} S_{11} &= \frac{1}{E_1} \\ S_{22} &= \frac{1}{E_2} \\ S_{12} &= -\frac{\nu_{12}}{E_1} \end{aligned} \quad (4)$$

Los valores de E_1 y ν_{12} se pueden obtener directamente de las reglas de las mezclas:

$$\begin{aligned} E_1 &= E_f V_f + E_m (1 - V_f) \\ \nu_{12} &= \nu_f V_f + \nu_m (1 - V_f) \end{aligned} \quad (5)$$

Reemplazando la Ecuación (4) y (5) en la Ecuación (3) se obtiene la Ecuación (6) para calcular el módulo de rigidez transversal E_2 .

$$E_2 = \left(\beta_{22} + \frac{\nu_{12}^2}{E_1} \right)^{-1} \quad (6)$$

Las constantes elásticas E_2 y G_{23} constituyen las etiquetas para el entrenamiento de la red neuronal, y son los valores por estimar dentro de la base de datos para testeo.

2.3. Entrenamiento de la red neuronal

Se ha considerado una red neuronal híbrida que combina, por un lado, una red neuronal convolucional y, en su otra rama un perceptrón multicapa. En la Figura 3 se ilustra el esquema de la red neuronal utilizada. La primera rama (CNN) se encarga de extraer la información proveniente de las imágenes microestructurales reconociendo los patrones geométricos presentes. La segunda (MLP) toma como entrada las propiedades mecánicas de los constituyentes. Al final ambas ramas se unifican en capas densas para combinar la información extraída y estimar las propiedades elásticas objetivo.

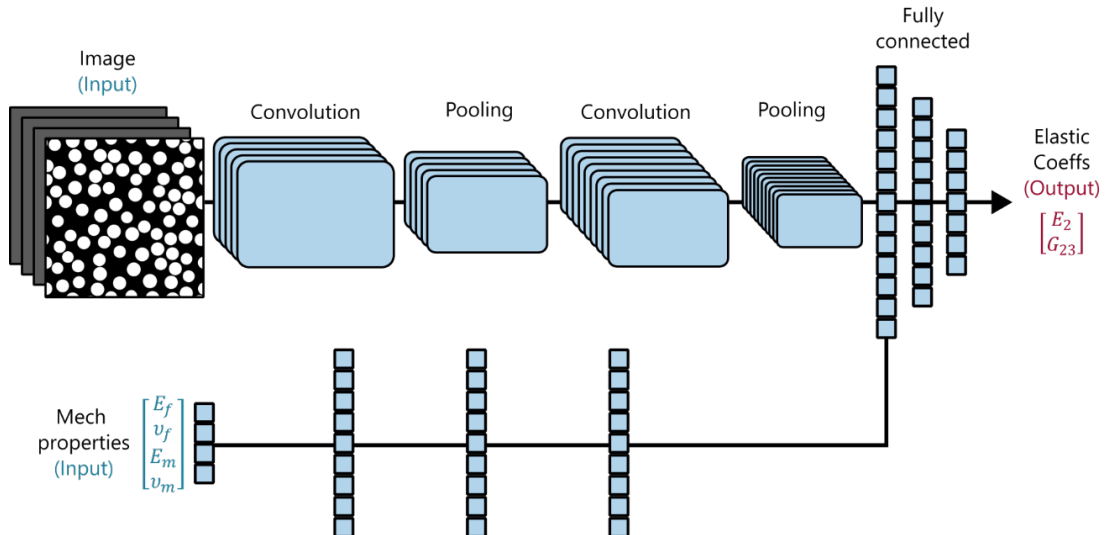


Figura 3. Esquema de la arquitectura de la red neuronal híbrida con dos entradas: la imagen microestructural para la CNN y las propiedades de los constituyentes para el MLP.

La rama de la CNN intercala capas convolucionales con capas de *pooling* para evitar el sobreajuste de los datos. En la rama del MLP se ha utilizado tres capas densas. En ambas ramas la función de activación utilizada fue la unidad lineal rectificada (ReLU, por sus siglas en inglés). En total se ha entrenado la red durante 50 épocas y se ha utilizado el error cuadrático medio (MSE, por sus siglas en inglés) como función de pérdida.

3. Resultados y discusión

Para verificar la convergencia del entrenamiento se ha analizado la evolución de la función de pérdida en relación con el número de épocas de entrenamiento, como se ilustra en la Figura 4. En ella se puede observar cómo la función de pérdida disminuye rápidamente en las primeras épocas y luego progresivamente a medida que avanza el entrenamiento, indicando que la red está mejorando su capacidad de ajuste a los datos. Además, se observa que, a partir de la época 20, la reducción en la pérdida se estabiliza, lo que sugiere que el modelo ha alcanzado su punto de convergencia y no se beneficia significativamente de más iteraciones. En este caso es conveniente el uso de *callbacks* para detener el entrenamiento una vez que ya no existe una mejora dentro del conjunto de validación.

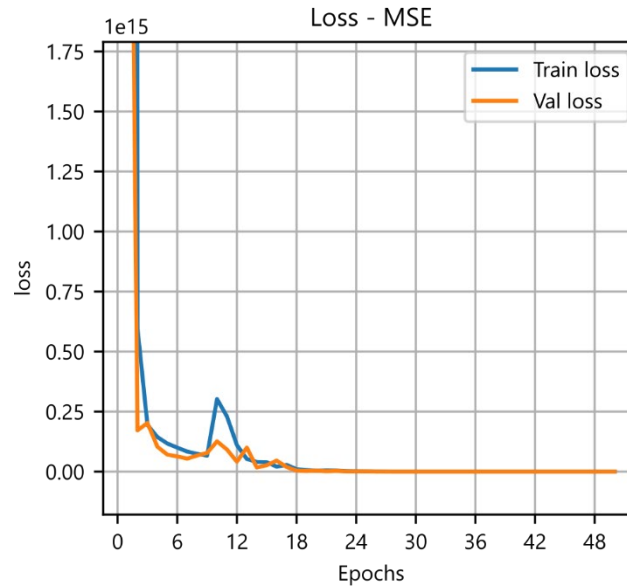


Figura 4. Evolución de la función de pérdida a lo largo del entrenamiento.

Para evaluar el desempeño de la red, se compararon las estimaciones de E_2 y G_{23} con los valores obtenidos mediante el análisis numérico de homogenización, utilizando el diagrama de dispersión de la Figura 5. Esta gráfica resume los principales indicadores de desempeño y proporciona una visualización clara del rendimiento del modelo. Se observa que la red neuronal presenta un menor error porcentual absoluto medio (MAPE) y desviación estándar para el módulo de rigidez transversal E_2 , en comparación con el módulo de cizalladura G_{23} . Sin embargo, en ambos casos, la precisión obtenida se encuentra dentro de un rango aceptable, lo que valida la efectividad del modelo.

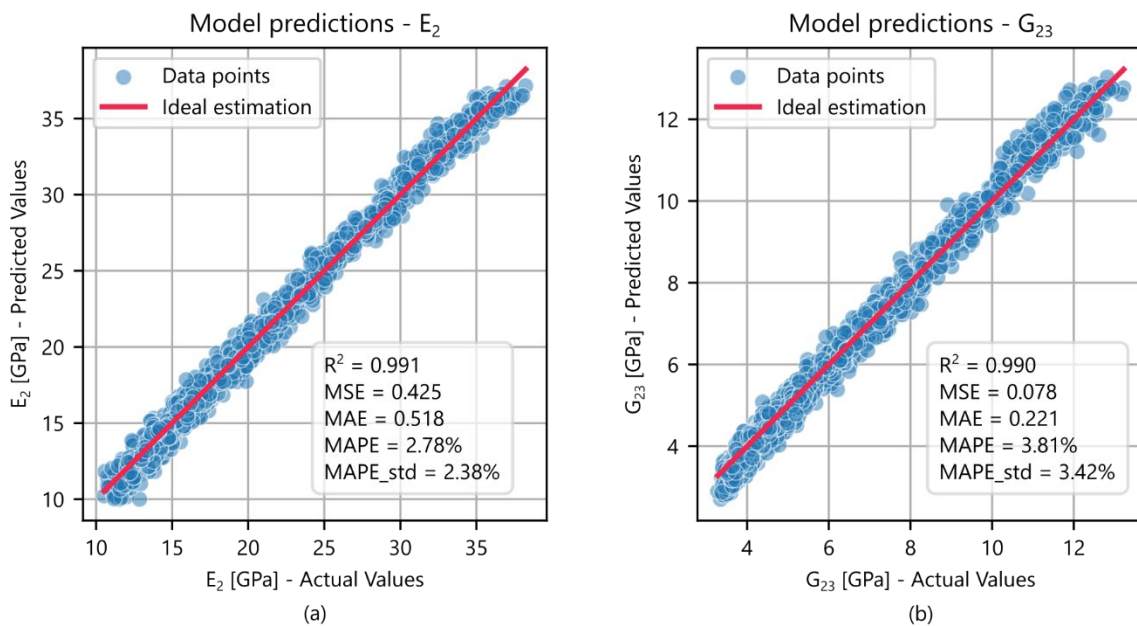


Figura 5. Diagramas de dispersión para los valores estimados por la red neuronal frente a los valores obtenidos mediante FEM para el módulo de rigidez transversal E_2 (a), y el módulo de cizalladura transversal G_{23} (b).

El enfoque basado en el uso de inteligencia artificial adoptado en este trabajo presenta varias ventajas, por ejemplo, la reducción del coste computacional. Mientras que los métodos de homogenización basados en FEM requieren la resolución de sistemas de ecuaciones para cada nueva microestructura, una red neuronal entrenada puede realizar predicciones en tiempo real en un tiempo significativamente menor. En concreto, la generación de las microestructuras y la resolución del análisis numérico para 2000 datos tardó 14 horas aproximadamente, mientras que la red neuronal realizó las estimaciones en la misma cantidad de datos en solo 34 segundos. Esto representa una reducción significativa de hasta 3 órdenes de magnitud en el tiempo de cómputo.

Otra de las ventajas es la flexibilidad y adaptabilidad de la red, que una vez entrenada puede ajustarse a diferentes configuraciones de materiales y distribuciones de fibras. Esto la hace más versátil, ya que no requiere la generación de una malla ni la resolución del problema mediante FEM. En su lugar, permite estimar directamente las constantes elásticas a partir de la imagen de la microestructura.

Si bien el enfoque y metodología abordados en este estudio presentan buenos resultados existen algunas limitaciones que podrían abordarse en futuros trabajos. Una de ellas es la generalización del modelo a microestructuras obtenidas de imágenes experimentales, ya que actualmente el modelo se ha entrenado solamente con datos sintéticos. Validarlo con imágenes reales permitiría evaluar su aplicabilidad en condiciones prácticas. Además, el modelo de homogenización podría mejorarse incorporando una representación más precisa de la interfase y del comportamiento no lineal de la matriz, lo que contribuiría a una estimación más realista de las propiedades elásticas. Finalmente, la optimización de la arquitectura de la red y el ajuste de sus hiperparámetros podrían mejorar aún más la precisión y eficiencia del modelo, reduciendo tiempos de entrenamiento y mejorando su capacidad de generalización.

4. Conclusiones

Los resultados obtenidos demuestran que el uso de *machine learning* para la estimación de constantes elásticas a partir de imágenes microestructurales es una alternativa eficiente y precisa. A partir de este estudio, se pueden extraer las siguientes conclusiones:

- La red neuronal híbrida es capaz de identificar patrones en la distribución de fibras dentro de la microestructura y utilizarlos para estimar con precisión las propiedades elásticas objetivo del material.
- Se confirma que la disposición aleatoria de las fibras influye en las propiedades elásticas de la lámina, especialmente en el caso de fracción en volumen bajo donde la variabilidad es mayor.
- La estimación de las constantes elásticas transversales a partir de imágenes microestructurales evita la dependencia de factores geométricos de distribución de fibras necesaria en modelos analíticos. Estos factores geométricos están definidos principalmente para configuraciones estructuradas, como por ejemplo la ordenación cuadrada de fibras.
- En comparación con métodos numéricos como la homogenización mediante FEM, la red neuronal permite estimaciones en menor tiempo. Se elimina la necesidad de generar mallas, definir condiciones de contorno y resolver múltiples problemas de elementos finitos, lo que reduce significativamente el costo computacional.
- La generación de datos sintéticos permite explorar un amplio rango de configuraciones sin requerir grandes volúmenes de datos experimentales. Futuros trabajos pueden incorporar imágenes reales para aumentar la variabilidad y mejorar la aplicabilidad práctica del modelo. Además, la capacidad de la red para reconocer patrones podría extenderse a la estimación de otras propiedades, límites de fallo o la detección de defectos en la microestructura. Este trabajo sienta las bases para futuras investigaciones en esta dirección.

Agradecimientos

Los autores desean agradecer la financiación recibida a través del proyecto PID2023-151610OB-C22 financiado por MICIU/AEI/10.13039/501100011033 y FEDER, UE. También desean agradecer al Programa de Ayudas de Investigación y Desarrollo (PAID-01-23) de la Universitat Politècnica de València.

Disponibilidad de datos

La base de datos utilizada en este estudio fue generada específicamente para los fines de la investigación. Los datos están disponibles bajo demanda, y pueden ser proporcionados por los autores previa solicitud.

Referencias

- [1] Halpin J. C., *Primer on Composite Materials Analysis, second ed*, CRC press, Florida (1992)
- [2] Jones R. M., *Mechanics of Composite Materials, second ed*, CRC press, Philadelphia (1999)
- [3] Giner, E., Vercher, A., Marco, M., Arango., “Estimation of the reinforcement factor ξ for calculating the transverse stiffness E_2 with the Halpin–Tsai equations using the finite element method”, *Composite Structures* **124**, 402-408 (2015)
- [4] Somer, D., Perić, D., De Souza-Neto, E. A., Dettmer, W.G., “On the characterisation of elastic properties of long fibre composites using computational homogenisation”, *Computational Materials Science* **83**, 149-157 (2014)
- [5] Huang, F., Pang, X., Zhu, F., Zhang, S., Fan, Z., Chen, X., “Transverse mechanical properties of unidirectional FRP including resin-rich areas”, *Computational Materials Science* **198**, 110701 (2021)
- [6] Divakarraju, P. V., Mishra, N., Pandurangan, V., Nithyadharan, M., “Machine learning based inverse framework for predicting the transverse and shear modulus of carbon fiber”, *Computational Materials Science* **230**, 112518 (2023)
- [7] Li, M., Li, S., Tian, Y., Fu, Y., Pei, Y., Zhu, W., Ke, Y., “A deep learning convolutional neural network and multi-layer perceptron hybrid fusion model for predicting the mechanical properties of carbon fiber”, *Materials & Design* **227**, 111760 (2023)
- [8] Pathan, M.V., Ponnusami S.A., Pathan, J., Pitisongsawat, R., Erice, B., Petrinic, N., Tagarielli, V.L., “Predictions of the mechanical properties of unidirectional fibre composites by supervised machine learning” *Scientific Reports* **9**, 13964 (2019)
- [9] Gavallas, P., Stefanou, G., Savvas, D., Mattrand, C., Bourinet, J. M., “CNN-based prediction of microstructure-derived random property fields of composite materials”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* **430**, 117207 (2024)
- [10] Cimrman, R., Lukeš, V., Rohan, E., “Multiscale finite element calculations in Python using SfePy”, *Adv Comput Math* **45**, 1897–1921 (2019)
- [11] Oliveira, J.A., Pinho-da-Cruz, J., Teixeira-Dias, F., “Asymptotic homogenisation in linear elasticity. Part II: Finite element procedures and multiscale applications”, *Computational Materials Science* **45**, 1081-1096 (2009)
- [12] Pinho-da-Cruz, J., Oliveira, J.A., Teixeira-Dias, F., “Asymptotic homogenisation in linear elasticity. Part I: Mathematical formulation and finite element modelling”, *Computational Materials Science* **45**, 1073-1080 (2009)