

Salamanca, Gto., a 01 de marzo del 2023.

**M. en I. HERIBERTO GUTIÉRREZ MARTIN  
COORDINADOR DE ASUNTOS ESCOLARES  
P R E S E N T E.-**

Por medio de la presente, se otorga autorización para proceder a los trámites de impresión, empastado de tesis y titulación al alumno(a) Salvador Durán Carmona del **Programa de Maestría en Ingeniería Mecánica** y cuyo número de **NUA** es: 810298 del cual soy director. El título de la tesis es: Aplicación de modelos de redes neuronales artificiales para estimar la absorción de energía de deformación en espumas de polipropileno expandido.

Hago constar que he revisado dicho trabajo y he tenido comunicación con los sinodales asignados para la revisión de la tesis, por lo que no hay impedimento alguno para fijar la fecha de examen de titulación.

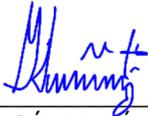
**A T E N T A M E N T E**



DR. HÉCTOR PLASCENCIA MORA  
**DIRECTOR DE TESIS  
SECRETARIO**



DR. ALEJANDRO E. RODRÍGUEZ SÁNCHEZ  
**DIRECTOR DE TESIS**



DR. ERIC NOÉ HERNÁNDEZ RODRÍGUEZ  
**PRESIDENTE**



DR. ELÍAS RIGOBERTO LEDESMA OROZCO  
**VOCAL**



**UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO**

---

---

**CAMPUS IRAPUATO - SALAMANCA  
DIVISIÓN DE INGENIERÍAS**

**“APLICACIÓN DE MODELOS DE REDES  
NEURONALES ARTIFICIALES PARA  
ESTIMAR LA ABSORCIÓN DE ENERGÍA  
DE DEFORMACIÓN EN ESPUMAS DE  
POLIPROPILENO EXPANDIDO”**

**TESIS**

**QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:  
MAESTRO EN INGENIERÍA MECÁNICA**

**PRESENTA:**

**SALVADOR DURÁN CARMONA**

**DIRECTOR DE TESIS:  
DR. HÉCTOR PLASCENCIA MORA**

**CODIRECTOR DE TESIS:  
DR. ALEJANDRO ESTEBAN RODRÍGUEZ SÁNCHEZ**

**SALAMANCA, GUANAJUATO**

**MARZO 2023**

## Agradecimientos

Al ver el resultado logrado con este proyecto, solamente se me ocurre una palabra: ¡Gracias!

En primer lugar le agradezco a mi madre, Miroslava, que siempre me ha brindado su apoyo incondicional para poder cumplir todos mis objetivos personales y académicos. Ella es la que con su cariño me ha impulsado e inspirado siempre a perseguir mis metas y nunca abandonarlas frente a las adversidades. Agradezco a mi padre, Salvador, a quien recuerdo todos los días y aún puedo sentir su presencia. Agradezco a mis hermanos, Jorge, Carlos y Brenda, por sus consejos y siempre contar con su apoyo. A mis sobrinos Yael y Gyan, por toda la alegría y motivación.

Le agradezco profundamente a mis asesores, el Dr. Héctor Plascencia Mora y Dr. Alejandro E. Rodríguez Sánchez, por su dedicación, paciencia, y por compartir sus conocimientos conmigo. Sin sus palabras y correcciones precisas no hubiese podido lograr llegar a esta instancia tan anhelada. Gracias por su guía y todos sus consejos, los llevaré grabados para siempre en la memoria en mi futuro profesional.

Agradezco a mis tíos José Guadalupe Durán e Irma Baeza, y a sus hijos Iván Jaaziel y Paola Marlene, por el apoyo y cariño que me han brindado siempre, por abrirme la puerta de su casa y tratarme como uno más de su familia.

Agradezco a todos mis amigos y comapañeros, los cuales se han convertido en cómplices y hermanos. Gracias por las horas compartidas, los trabajos realizados en conjunto y las historias vividas. Agradecimiento especial a Rafael Carmona, Francisco Zavala, Melvin Pech, Francisco Moya, Zivoni Mosqueda, Isaac Solorio, Fabrizio López, Francisco Cervantes, Eunice Rodríguez, Mildred Ramírez, Tania Mejía, Julián Carmona y Aarón Guillén.

A todas las personas que de una u otra manera estuvieron a mi lado, que me enseñaron y me dieron ánimos. Gracias a todos.

# Índice

<b>Índice de figuras</b>	<b>3</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>5</b>
1.1. Planteamiento del problema . . . . .	6
1.2. Antecedentes . . . . .	7
1.3. Objetivo . . . . .	10
1.3.1. Objetivos específicos . . . . .	10
1.4. Justificación . . . . .	10
<b>2. Marco teórico</b>	<b>11</b>
2.1. Mecanismos de deformación en espumas . . . . .	11
2.1.1. Rango de deformación . . . . .	13
2.2. Propiedades mecánicas de espumas poliméricas a compresión . . . . .	14
2.2.1. Elasticidad lineal . . . . .	14
2.2.2. Elasticidad no-lineal y densificación . . . . .	14
2.2.3. Colapso plástico y densificación . . . . .	15
2.3. Mecanismos de absorción de energía . . . . .	16
2.4. Propiedades mecánicas de espumas poliméricas a tensión . . . . .	17
2.5. Energía de absorción . . . . .	17
2.5.1. Energía de deformación . . . . .	18
2.6. Machine Learning . . . . .	19
2.6.1. Modelos de entrenamiento con regresión lineal . . . . .	20
2.6.2. Optimización . . . . .	21
2.7. Redes Neuronales Artificiales . . . . .	25
2.7.1. Funciones de activación . . . . .	27
<b>3. Materiales y métodos</b>	<b>29</b>
3.1. Eficiencia de energía de deformación en espumas poliméricas . . . . .	29
3.1.1. Espuma de EPP . . . . .	29
3.2. Procedimiento experimental . . . . .	30
3.2.1. Pruebas de compresión de los especímenes de EPP . . . . .	30
3.3. Método para obtener el modelo de RNA . . . . .	33
3.4. Análisis para encontrar la arquitectura del modelo de red neuronal artificial . . . . .	33
<b>4. Resultados</b>	<b>35</b>
4.1. Modelos propuestos de redes neuronales artificiales . . . . .	36
4.2. Selección del mejor modelo . . . . .	38
4.3. Curva de esfuerzo contra deformación . . . . .	39
4.4. Curvas de energía de absorción contra deformación y curvas de eficiencia . . . . .	41
<b>5. Discusiones</b>	<b>45</b>
<b>6. Conclusiones</b>	<b>46</b>

## Índice de figuras

1.	Curvas esquemáticas de esfuerzo contra deformación por compresión para espumas, que muestran los tres regímenes de elasticidad lineal, colapso y densificación: (a) una espuma elastomérica; (b) una espuma plástica-elástica; (c) una espuma elástica frágil (Gibson, 1997). . . . .	11
2.	Curvas esquemáticas de esfuerzo contra deformación por tensión para espumas, que muestran regímenes de comportamiento: (a) espuma elastomérica; (b) espuma plástica-elástica; (c) espuma elástica-quebradiza (Gibson, 1997).	12
3.	Curvas típicas de carga cuasi-estática y dinámica de espumas poliméricas (Gibson, 1997). . . . .	13
4.	La formación de bisagras de plástico en una espuma de celda abierta (Gibson, 1997). . . . .	15
5.	Valores máximos de tensión generados en espumas de tres densidades al absorber la misma energía $W$ (Gibson, 1997). . . . .	16
6.	Deformación ocasionada por la acción de una carga (Beer, 2009). . . . .	18
7.	Diagrama carga contra desplazamiento (Beer, 2009). . . . .	18
8.	Esquemática del Gradient Descent. . . . .	22
9.	Esquemática del Stochastic Gradient Descent. . . . .	23
10.	Esquemática del $RMSprop$ . . . . .	24
11.	Arquitectura de RNA de alimentación directa típica (Rodríguez-Sánchez & Plascencia-Mora, 2021). . . . .	25
12.	Estructura interna de una neurona oculta (Rodríguez-Sánchez, 2021). . . . .	26
13.	Curvas de eficiencia y esfuerzo contra deformación típicas de espumas poliméricas (Frederick, 1995). . . . .	29
14.	Unidad experimental de EPP. . . . .	30
15.	Máquina de pruebas: INSTRON 8872. . . . .	31
16.	Etapas de compresión características de espumas poliméricas (Frederick, 1995).	31
17.	Curvas Esfuerzo contra Deformación (Barrera-Fernández, 2020). . . . .	32
18.	Curvas de esfuerzo contra deformación de los modelos propuestos de RNA. . . . .	35
19.	Modelo de red neuronal artificial seleccionado. . . . .	38
20.	Pérdida de entrenamiento y validación para el modelo RNA elegido. . . . .	39
21.	Curva esfuerzo contra deformación. . . . .	39
22.	Curvas de carga, energía de absorción contra deformación y de eficiencia de los especímenes de $25 \text{ kg/m}^3$ . . . . .	41
23.	Curvas de carga, energía de absorción contra deformación y de eficiencia de los especímenes de $45 \text{ kg/m}^3$ . . . . .	42
24.	Curvas de carga, energía de absorción contra deformación y de eficiencia de los especímenes de $60 \text{ kg/m}^3$ . . . . .	43

## Índice de tablas

1.	Coeficiente de pérdida para polímeros (Gibson, 1997). . . . .	17
2.	Propiedades de la espuma de EPP. . . . .	29
3.	Modelos propuestos. . . . .	34
4.	Valores de pérdida de los modelos de red neuronal artificial. . . . .	36

# 1. Introducción

Las espumas son materiales celulares conformados por una red tridimensional interconectada de bordes y caras de celdas. Este tipo de espumas poseen microestructuras celulares que se observan en materiales naturales como la madera, corcho, esponjas, hueso trabecular y coral (Okumura, 2008). Pueden clasificarse en espumas de celda abierta cuando el material reside en los bordes de la celda, y de celda cerrada cuando tiene material sólido en las caras (Gibson, 1997). Es difícil definir una unidad de celda representativa para las espumas porque éstas presentan muchas irregularidades como diferentes formas y tamaños de celda, curvaturas de las caras y distribución del material sólido de la matriz (Sue, 2006).

Actualmente, las espumas sintéticas son materiales utilizados comúnmente en diversas áreas debido a su bajo peso, soporte estructural, capacidad para absorber impactos, aislamiento térmico y acústico, entre otras características (Diosdado de la Peña, 2013). Una espuma de polímero es una mezcla de polímero y gas, lo que da al material una estructura porosa o celular (Goover, 2017).

En específico, la espuma de polipropileno expandido (EPP) es una espuma moldeada de celda cerrada que se compone de bordes y membranas, con un conjunto de propiedades que la distinguen de otros materiales (Diosdado de la Peña, 2013). La espuma de polipropileno pertenece a la familia de las espumas poliolefinas.

Pueden clasificarse en espumas de celda abierta cuando el material reside en los bordes de la celda, y de celda cerrada cuando tiene material sólido en las caras (Diosdado de la Peña, 2013). En aplicaciones en las que son empleadas espumas poliméricas de celda cerrada, la EPP es comúnmente usada para absorber energía en sistemas amortiguadores (Raps, 2015). Las características de absorción de energía de deformación del EPP están directamente relacionadas con la carga que se le aplica al componente amortiguador fabricado de este material tipo espuma y con los impactos que las estructuras reciben.

En los últimos diez años, en más del 40 % de los modelos modernos de sistemas de amortiguamiento de energía en la industria automotriz han usado algún tipo de absorbedor de energía de espuma polimérica (Yildizhan, 2016). Esto incrementó el uso de absorbedores de energía fabricados con espuma, lo cual refleja la actual reducción de peso impuesta por las OEM's (Mhapankar, 2020). Debido a su baja densidad, las espumas implementadas en tales sistemas ahorraron sobrecargas de peso significativas, lo cual ha expandido su uso incluso a la industria aeronáutica (Yildizhan, 2016).

Mucho del alcance del diseño en el uso de esta espuma ha englobado una gran variedad de densidades, que van desde  $15 \text{ kg/m}^3$  hasta  $200 \text{ kg/m}^3$ , y sus dimensiones como parámetro de variación de sus características de absorción de energía de deformación (ver ARPRO, 2021). Las características de absorción de energía de un bloque de material EPP dependen de su densidad, la temperatura ambiente, y la velocidad de impacto (rango de deformación).

En el pasado se han realizado estudios para predecir las respuestas de esfuerzo en los materiales de espuma utilizando un enfoque completamente diferente a través de redes neuronales artificiales (RNA). En espumas poliméricas, las RNA pueden predecir los esfuerzos

utilizando variables relevantes del material, como la densidad de la espuma, o variables físicas como la tasa de carga, la temperatura y la deformación. Además, se ha demostrado que este tipo de modelos también se pueden combinar con modelos tradicionales y métodos numéricos para modelar estructuras complejas, teniendo a disposición métodos para predecir respuestas que se puedan usar para aplicaciones prácticas (Rodríguez-Sánchez, 2022).

El modelado basado en RNA ha sido usado para superar dificultades como las que se presentan al usar modelos de hiperelasticidad para espumas. El trabajo de Dudzik & Stręk (2020) da un ejemplo en el cual las RNA son usadas para modelar el comportamiento a compresión de materiales de espumas de aluminio. Además, en el estudio de Rodríguez-Sánchez & Plascencia-Mora (2021), ha sido demostrado que las RNA pueden ser aplicadas a modelos en rangos enteros de condiciones de material y condiciones de prueba en espumas de poliestireno expandido, logrando predicciones de bajo error con respecto a los datos experimentales, abordando el esfuerzo uniaxial de compresión  $\sigma_c$  utilizando un sistema objetivo considerando la densidad  $\rho$ , la tasa de carga  $L$  y la deformación  $\epsilon$  de dicho material. De esta manera, las RNA pueden incluir más variables para tales fines además de la deformación como variable de entrada.

## 1.1. Planteamiento del problema

Los absorbedores de energía son usados en numerosas aplicaciones de seguridad en transportes, como automóviles o estructuras aéreas para absorción de energía de choque. Su propósito es reducir las cargas o mitigar daños a los pasajeros a través del control de su deformación o destrucción de una estructura absorbidora de energía (D. Evans & T. Morgan, 1999). Las estructuras de absorción de impacto se presentan como componentes de pared delgada, materiales celulares como espumas, materiales compuestos tipo panal de abeja, o materiales combinados de estos. Las espumas poliméricas son comunes especialmente cuando el peso es crítico (Xu, 2018).

Por su capacidad de absorción de energía de deformación, la espuma de polipropileno expandido ha sido usada y estudiada en el pasado (Morton, 2020). Pero hasta la fecha, no se han llevado a cabo estudios computacionales rigurosos de su comportamiento al deformarse a grandes rangos de compresión usando análisis de simulación por computadora y desempeño energético.

En el caso de la industria del transporte, la utilización de este tipo de materiales en la época moderna ha incrementado progresivamente (Yildizhan, 2016), haciendo al EPP un material de soporte para el desempeño en aplicaciones de disipación de energía y de seguridad ante impacto de eventos de accidentes vehiculares; lo cual requiere de un análisis de la respuesta a estos impactos considerando un estudio más amplio de geometrías que el que está reportado en la literatura (Frederick, 1995), a tasa de velocidad de compresión normalizada y utilizando redes neuronales artificiales.

Las investigaciones acerca de las configuraciones de los absorbedores de energía poliméricos analizando variación geométrica y, además, haciendo el análisis mediante redes neuronales artificiales son escasas. Por lo cual, los efectos de absorción de energía de deformación de la espuma de EPP no se han analizado desde ese punto de vista.

Además, es relevante estudiar y modelar la absorción de energía contribuyendo al diseño de absorbedores elaborados con espumas poliméricas, teniendo en cuenta la densidad a la que son elaboradas y la velocidad de carga a la que son sometidas las espumas de EPP durante impactos.

## 1.2. Antecedentes

El EPP fue desarrollado por primera vez en la década de los 70 por la compañía japonesa JSP como resultado de la investigación de generar nuevas formas de polipropileno. Las primeras aplicaciones del material fueron desarrolladas para productos de la industria automotriz (ver ARPRO, 2021). Desde entonces, la demanda del EPP ha incrementado enormemente en todas las regiones del mundo, partiendo de la necesidad de las fábricas de automóviles de mejorar su absorción energética mientras se reduce peso y el impacto al medio ambiente. La primera aplicación automotriz para el EPP fue para un componente absorbedor de energía en un sistema amortiguador. Actualmente, el EPP es ampliamente utilizado para otras partes del automóvil como asientos y componentes de interiores, que se prevé extender su uso a lo largo de la presente década (Mhapankar, 2020).

Desde la década de los 1990, la espuma de EPP ha sido utilizada en el diseño de partes estructurales de la industria aeroespacial, naval, y automotriz; aplicaciones de equipos de protección (chalecos salvavidas, cascos y empaques), y para seguridad en el empaqueo de materiales frágiles debido a su ligereza y desempeño a bajas deformaciones (Andena, 2016; Mills, 2003).

A partir de los años 2000 ha prevalecido el aligeramiento de peso para reducir consumo de combustible y así aumentar la eficiencia en energía de absorción en estructuras de vehículos de pasajeros y otras industrias. Diversos estudios han demostrado que las configuraciones de forma compleja con materiales tipo espuma isotrópicos podrían colapsar de una manera controlada (Raps, 2015; Mills, 2003), presentando una eficiencia de energía de absorción notoria cuando se comparan con modelos de plásticos elastómeros.

Recientemente, en 2017 Winter realizó estudios tomando en cuenta la resolución entre las simulaciones de absorción de energía y experimentación en estructuras plásticas celulares cargados dinámicamente (Winter, 2017), al modificar el modelo matemático de predicción de esfuerzo y energía dinámica, los cuales pudieron predecir la formación de puntos críticos de esfuerzo y los cambios de absorción de esta energía. En este mismo estudio, se utilizó la mecánica de medios continuos en un modelo que simula impactos, y así se estudió la barrera de energía de choque que es el factor clave del análisis de impacto para diferentes densidades. Estos estudios describen la deformación debida a impactos, basada en la forma final del espécimen después del impacto, pero no muestra evidencia concreta para verificar la deformación a grandes cambios de volumen respecto al tiempo de deformación de espumas poliméricas.

Un estudio reciente de Rodríguez-Sánchez et al. (2019) ha presentado una investigación respecto a la caracterización del material EPS; en su contenido se incluye el modelado numérico de dicho material para diferentes densidades y velocidades de carga. En esta investigación se reporta un modelado numérico en el que se menciona el uso de modelos constitutivos de material, referente a teoría del medio continuo para hiperelasticidad, mismos que ajustan y permiten predecir los datos experimentales con un error menor al 10 % respecto a datos experimentales.

Los métodos de visualización numéricos son maneras efectivas e intuitivas de observar la distribución de esfuerzos y evaluación de trabajo energético. Morton y Reyes, 2000 (Morton, 2020), experimentalmente observaron la respuesta a la compresión y tensión de una espuma de EPP de  $30 \text{ kg/m}^3$ , a diferentes rangos de carga y temperaturas en donde se utiliza este material como mitigador de esfuerzos, y en donde se puede ver que la morfología del EPP influye en su respuesta mecánica.

Un estudio realizado por Ghaboussi, Garret y Wu (1991) reporta y demuestra que las redes neuronales artificiales pueden ser útiles como un alternativo acercamiento al modelado de la respuesta de materiales.

Además, para materiales tipo espuma, arquitecturas de redes neuronales han sido reportadas para modelar sus respuestas al esfuerzo en la ausencia de modelos mecánicos. En el trabajo llevado a cabo por Sun-Woh y Somchai (1997), se usa un modelo de red neuronal de dos capas ocultas para predecir las curvas de amortiguamiento de espumas de poliestireno expandido que cubren dos materiales de diferentes proveedores y densidades que van desde  $18 \text{ kg/m}^3$  a  $30 \text{ kg/m}^3$  (Lye, 1997).

Sobre los materiales de espuma, un estudio más reciente de Weng et al. (Weng, 2020) presenta la aplicación de retroalimentación de un modelo de red neuronal avanzado para describir la relación de esfuerzo contra deformación en fundición gris durante la nanoindentación.

En un estudio realizado por Rodríguez-Sánchez y Plascencia (2021), se presenta un enfoque basado en redes neuronales artificiales que produce modelos que son capaces de mapear la respuesta a la tensión de compresión y los parámetros de absorción de energía de una espuma de poliestireno expandido al considerar su deformación, las tasas de carga a compresión y diferentes densidades. Los resultados muestran que es posible obtener un único modelo de red neuronal artificial que puede abstraer espacios de solución de absorción de energía y esfuerzo para las condiciones estudiadas en el material.

En el estudio de Dudzik y Stręk (Dudzik, 2020) se reporta la obtención de una función analítica que permite determinar curvas simples para densidades elegidas o una superficie para un rango de densidades para modelar el comportamiento de un aluminio de celda abierta. Estos resultados se analizaron con el uso de un nuevo modelo RNA de la relación esfuerzo contra deformación por compresión para esponja de aluminio.

Otro estudio realizado en 2019 por Rodríguez-Sánchez presenta un modelo de red neuronal artificial que fue entrenado con datos de esfuerzo contra deformación de un material elastómero termoplástico. Los resultados demostraron que el modelo de retroalimentación de redes neuronales es más preciso en la predicción de la respuesta del elastómero no lineal debido a que presentó diferencias del 1 % con respecto a los datos experimentales (Rodríguez-Sánchez & Ledesma-Orozco et al., 2019).

Un estudio de Yang et al. (Yang, 2021) informa que se utilizó una serie de métodos de aprendizaje automático para predecir la deformación por fluencia compresiva de los materiales elastómeros de poliuretano (PUE) considerados. El método de optimización que combina un algoritmo genético y validación cruzada k-fold con los hiperparámetros del modelo de aprendizaje automático podrían mejorar efectivamente la precisión de ajuste en el conjunto de entrenamiento.

Simultáneamente, un estudio de Dudzik y Malforzata Strek et al. (Dudzik & Stręk, 2020) propone una arquitectura de una red neuronal artificial para modelar adecuadamente el comportamiento a compresión de espumas de aluminio. Los autores utilizaron un algoritmo para construir diferentes estructuras de redes neuronales artificiales, que se aproximaron a las relaciones de esfuerzo contra deformación de una esponja de aluminio sometida a compresión. El análisis realizado de los errores relativos condujo a la observación de que el enfoque presentado proporciona una aproximación de ingeniería satisfactoria del comportamiento de compresión.

Las espumas de polipropileno expandido (Tsurugai, 1998) son comúnmente usadas para la absorción de energía en sistemas de reducción de impacto, los cuales son implementados en la industria automotriz (Evans & Morgan, 1999) y en el diseño de elementos protectores en general (Andena, 2016). Recientemente, la resistencia a choques de estructuras complejas de materiales de tipo espuma de diferentes densidades incrementó su relevancia (Andena, 2016). Las espumas poliméricas pueden reducir peso y, al mismo tiempo, mejorar el rendimiento de los transportes a través de la realización de nuevos diseños.

En los últimos veinticinco años, gran parte del proceso de diseño de las espumas poliméricas aplicado en la industria de indumentaria deportiva ha considerado una gran variedad de densidades y espesores (Mills, 2003). En esta aplicación, las características de forma están directamente relacionadas a la dirección de la carga que el espécimen recibe. Por lo tanto, para mejorar la absorción energética del diseño de estos sistemas usando espuma EPP es necesario analizar su variación de forma en función de la dirección de la carga aplicada.

En un trabajo previo realizado por Barrera-Fernández en 2021, se estudia un número de patrones de corte de espuma de EPP los cuales son validados parcialmente por métodos experimentales (Barrera-Fernández, 2020).

Un sistema de disipación de energía de espuma EPP puede reducir el peso de los componentes debido a su baja densidad (Tsurugai, 1998). Como el resultado de la absorción de energía varía a través de las deformaciones de las celdas, las características de forma de un bloque de espuma en particular dependen de su densidad y velocidad de impacto (rango de deformación) (Frederick, 1995). Como las espumas de EPP están disponibles en una gama

de variantes de diferentes densidades, tal como se ofrece en el mercado (ver ARPRO, 2021), tres densidades comunes fueron escogidas para este estudio. La densidad del material juega un papel fundamental en este estudio.

Con relación al análisis de EPP mediante redes neuronales artificiales, esto aún es un tema poco estudiado ya que en la literatura clásica no existe un modelo de red neuronal artificial que permita estudiar y derivar las curvas de absorción de energía mecánica considerando distintos parámetros como la tasa de carga, niveles de deformación y densidad del material.

### **1.3. Objetivo**

Desarrollar modelos de redes neuronales artificiales para analizar y estimar la respuesta compresiva de una espuma de polipropileno expandido con diferentes densidades, para obtener, en combinación con expresiones teóricas, la absorción de la energía mecánica absorbida en el material.

#### **1.3.1. Objetivos específicos**

- Obtener un conjunto de datos que conste de datos de carga de compresión frente a deformación de un material de espuma de polipropileno expandido.
- Derivar curvas de esfuerzo contra deformación del conjunto de datos descrito anteriormente.
- Llevar a cabo experimentación en la arquitectura de modelos de redes neuronales artificiales en lo que refiere al número de neuronas y los hiperparámetros del algoritmo de optimización.
- Utilizar la arquitectura de red neuronal artificial elegida para modelar diferentes cargas de esfuerzo y deformación en la EPP.

### **1.4. Justificación**

En los últimos años, ha habido una búsqueda de elementos estructurales absorbedores de energía más ligeros y seguros en muchos campos tales como la industria automotriz, naval y aeroespacial; para así reducir gastos en combustible, emitir menos gases contaminantes y mejorar la integridad estructural de los vehículos y seguridad de los pasajeros (Yildizhan, 2016; Mhapankar, 2020).

Debido a su relevancia para aplicaciones de ingeniería, el objetivo de esta investigación es tener un modelo que permita derivar curvas de esfuerzo contra deformación que incluya tres variables: deformación, velocidad de carga y densidad del material EPP, estas variables con diferentes niveles.

Se desarrollarán modelos de redes neuronales artificiales ya que, en la actualidad, no existe un modelo en la literatura clásica que permita derivar curvas de absorción de energía mecánica considerando los diferentes niveles de deformación, tasa de carga y densidad del material EPP.

## 2. Marco teórico

En el presente capítulo se muestra la descripción del comportamiento y propiedades mecánicas de las espumas poliméricas cuando son sometidas a compresión. Además, se cubren los mecanismos de deformación en espumas, mecanismos de absorción de energía, energía de absorción y la aplicación de modelos de redes neuronales artificiales para estudiar dicho material.

El *Machine Learning* y las redes neuronales artificiales son descritas con los parámetros utilizados para crear los modelos que se aplicarán a las espumas para así crear curvas de esfuerzo contra deformación del material, simulando pruebas a compresión.

### 2.1. Mecanismos de deformación en espumas

La Figura 1 muestra curvas esquemáticas de esfuerzo contra deformación por compresión para una espuma elastomérica, elasto-plástica y frágil. Estas muestran elasticidad lineal a esfuerzos bajos seguidas de una zona *plateau* de colapso larga, truncada por un régimen de densificación en el que el esfuerzo aumenta abruptamente (Gibson, 1997).

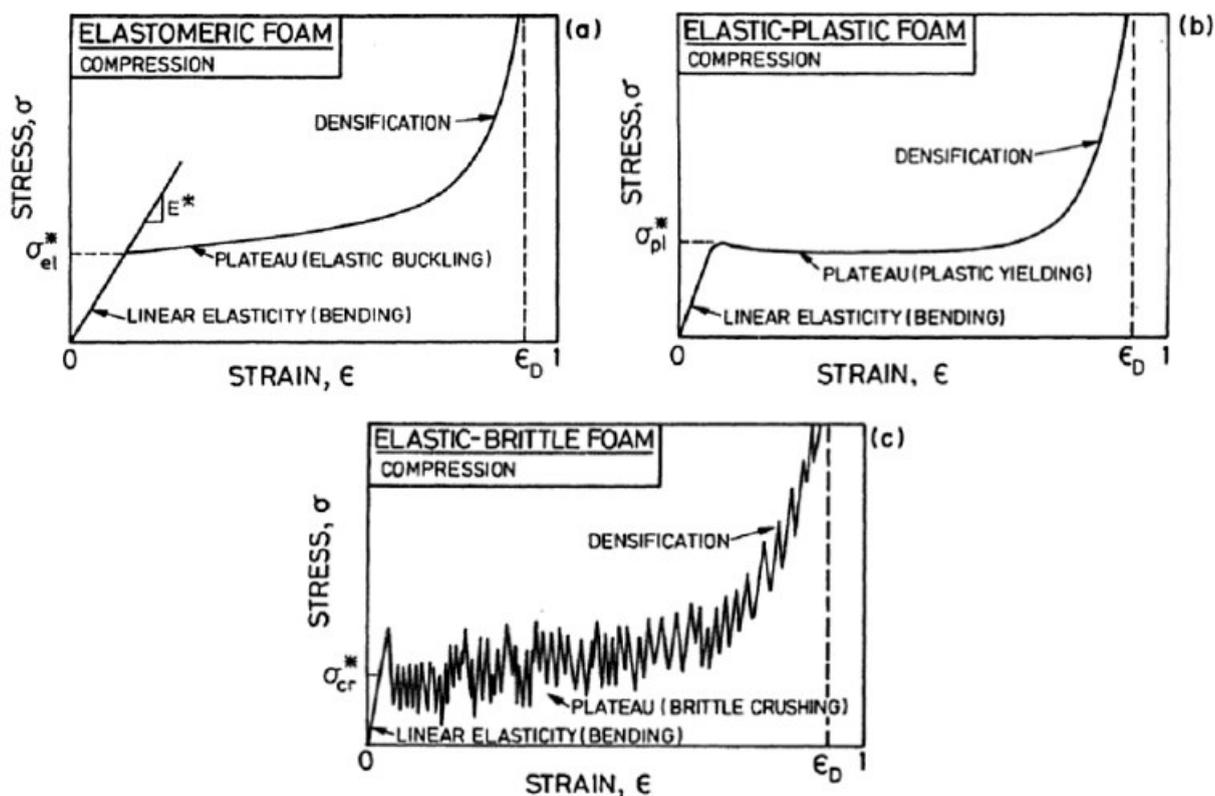


Figura 1: Curvas esquemáticas de esfuerzo contra deformación por compresión para espumas, que muestran los tres regímenes de elasticidad lineal, colapso y densificación: (a) una espuma elastomérica; (b) una espuma plástica-elástica; (c) una espuma elástica frágil (Gibson, 1997).

La elasticidad lineal está controlada por la flexión de las celdas y, si las celdas son cerradas, por el estiramiento de la celda. El módulo de Young,  $E$ , es la pendiente inicial de la curva esfuerzo contra deformación. Cuando la carga es compresiva, la zona *plateau* se asocia con el colapso de las celdas por pandeo elástico en espumas elastoméricas, por la deformación de bisagras plásticas en una espuma que cede (como un metal), y por trituración quebradiza en una espuma frágil (como una cerámica). Cuando las celdas se han colapsado por completo, las paredes de las celdas opuestas entran en contacto y el esfuerzo adicional comprime el sólido mismo, dando la región final de esfuerzo rápidamente creciente (Gibson, 1997).

La respuesta a la tensión de cada tipo de espuma se muestra esquemáticamente en la Figura 2. La elasticidad lineal inicial es causada por la flexión de la pared de la celda, más el estiramiento si las celdas son cerradas. En la espuma elastomérica, las deformaciones más grandes giran los bordes de las celdas hacia el eje de tracción, aumentando la rigidez de la estructura. Las paredes de las celdas de la espuma plástica también giran hacia el eje de tensión (mediante la flexión plástica), dando un punto de fluencia seguido de una curva de esfuerzo contra deformación ascendente que finalmente se trunca por la fractura. En la espuma frágil, una grieta nuclea en una pared celular débil o falla preexistente y se propaga catastróficamente, dando una fractura frágil rápida. Algunas espumas (las espumas poliméricas rígidas son ejemplos) son plásticas en compresión, pero frágiles en tensión. Esto se debe al efecto de concentración de esfuerzos de una fisura, que puede provocar la falla de la pared de la celda y una fractura rápida cuando se carga en tensión, pero que ocasiona un daño menor en compresión.

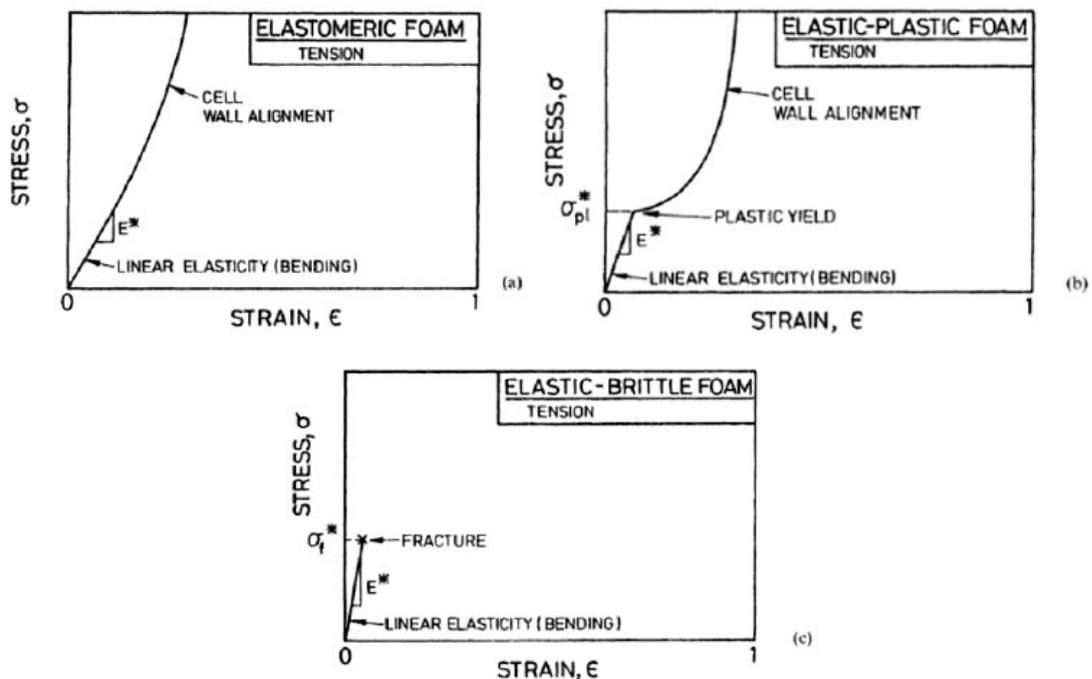


Figura 2: Curvas esquemáticas de esfuerzo contra deformación por tensión para espumas, que muestran regímenes de comportamiento: (a) espuma elastómerica; (b) espuma plástica-elástica; (c) espuma elástica-quebradiza (Gibson, 1997).

### 2.1.1. Rango de deformación

El rango de deformación es definido como el cambio en la deformación de un material respecto al tiempo. Los rangos de grandes deformaciones eventualmente ocurren sobre un corto periodo de tiempo (20 – 1000 m/s) y tienden a sobrepasar las propiedades elásticas de los materiales. De igual manera, los rangos de bajas deformaciones son las que ocurren eventualmente sobre un periodo de tiempo más largo debido a la resistencia al impacto o la rugosidad de los materiales (Gibson, 1997).

### Métodos experimentales para determinar los efectos del rango de deformación en polímeros

El efecto del rango de deformación sobre la absorción de energía y tipo de falla de polímeros han sido discutidos en la literatura (David, 2015; Kara, 2013). Las pruebas cuasi-estáticas y de impacto son los métodos de prueba comúnmente conducidos sobre los polímeros para estudiar la capacidad de absorción de energía. Esta información es importante para las aplicaciones donde la capacidad de absorción de energía es de relevancia.

La Figura 3 provee una comparación entre las curvas del esfuerzo contra la deformación, en condiciones de cargas cuasi-estáticas y dinámicas típicas de espumas poliméricas.

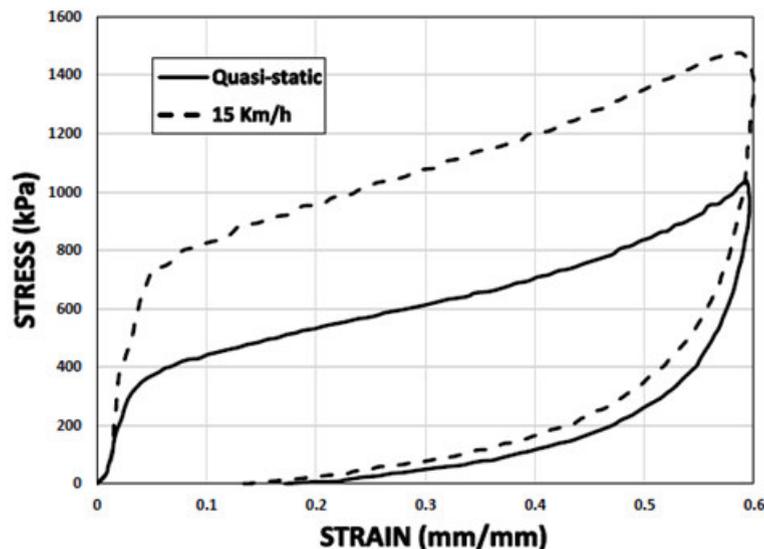


Figura 3: Curvas típicas de carga cuasi-estática y dinámica de espumas poliméricas (Gibson, 1997).

### Prueba de compresión cuasi-estática

Una prueba de compresión cuasi-estática es descrita como la capacidad de absorción de energía de los polímeros cuando son sometidos a cargas axiales. Las pruebas cuasi-estáticas son desarrolladas usando una prensa donde el espécimen es comprimido a una muy baja velocidad entre dos platos de acero paralelos. La capacidad de energía de absorción de los materiales sensibles al rango de deformación alto depende de la velocidad de compresión.

Por lo tanto, la determinación de la absorción de energía usando una prueba cuasi-estática no representa la resistencia a choques de una estructura (Gibson, 1997).

## 2.2. Propiedades mecánicas de espumas poliméricas a compresión

Las propiedades mecánicas de los polímeros son de interés, en particular en todas las aplicaciones en las que se utilizan polímeros como materiales estructurales. El comportamiento mecánico implica la deformación de un material bajo la influencia de fuerzas aplicadas. Estas propiedades están controladas por parámetros elásticos (van Krevelen, 2009).

Las pruebas a compresión describen el comportamiento de un material cuando está sometido a una carga de compresión a una velocidad uniforme. Los ensayos de compresión proporcionan un método para obtener resultados en investigación y desarrollo, control de calidad y aceptación o rechazo según especificaciones.

De acuerdo con Gibson (1997), son relevantes para la mecánica de material de las espumas las siguientes características:

- Elasticidad lineal.
- Elasticidad no-lineal y densificación.
- Colapso plástico y densificación.

Cada una de estas propiedades se detalla en las siguientes subsecciones.

### 2.2.1. Elasticidad lineal

El comportamiento elástico lineal de una espuma se caracteriza por un conjunto de módulos. Se necesitan dos módulos para describir una espuma isotrópica; generalmente se eligen del módulo de Young,  $E$ , el módulo de corte,  $G$ , el módulo de volumen,  $K$ , y la relación de Poisson  $\nu$ .

### 2.2.2. Elasticidad no-lineal y densificación

La elasticidad lineal está limitada a deformaciones pequeñas, normalmente del 5% o menos. Las espumas elastómeras se pueden someter a tensión o compresión a deformaciones mucho mayores que ésta. La deformación sigue siendo recuperable (y, por tanto, elástica), pero no es lineal. En compresión (el modo de carga más común), la curva de esfuerzo contra deformación muestra una zona *plateau* extensa en el esfuerzo, el esfuerzo de colapso elástico, y es este esfuerzo el que es importante en el diseño de cojinetes, empaques y sistemas tipo espuma para amortiguar vibraciones.

El esfuerzo de colapso elástico y el comportamiento posterior al colapso dependen de si la espuma es de celda abierta o cerrada. Las espumas de celda abierta, como los poliuretanos, colapsan con una carga casi constante, dando una zona *plateau* larga y plana.

En espumas de celda cerrada, como los polietilenos, la compresión del gas dentro de las celdas, junto con los esfuerzos de la membrana que aparecen en las caras de la celda, dan una curva de esfuerzo contra deformación que aumenta con la deformación.

Cuando las espumas con celdas cerradas colapsan elásticamente, el fluido en las celdas se comprime. Esto puede cambiar tanto el esfuerzo de colapso y el comportamiento posterior al colapso.

En las espumas fabricadas por el hombre, el gas tiene poco efecto sobre el inicio del colapso; pero en los materiales celulares naturales, que forman las hojas y tallos de las plantas, esto no es así. La presión de turgencia (o celda) en una hoja es a menudo tan grande como seis atmósferas, por lo que la presión interna aumenta considerablemente la tensión de colapso; de hecho, la controla en gran medida.

### 2.2.3. Colapso plástico y densificación

Las espumas hechas de materiales que tienen un punto de fluencia plástica (por ejemplo, polímeros rígidos o metales) *colapsan plásticamente* cuando se cargan más allá del régimen elástico lineal. El colapso plástico, como el pandeo elástico, da una zona *plateau* horizontal larga a la curva de esfuerzo contra deformación, aunque la deformación ya no es recuperable. Nuevamente, como el pandeo elástico, la falla se localiza en una banda transversal a la dirección de la carga que se propaga por toda la espuma con un esfuerzo creciente. La zona *plateau* de largo esfuerzo se aprovecha en espuma para protección contra choques y sistemas de absorción de energía.

El colapso plástico en una espuma de celdas abiertas ocurre cuando el momento ejercido sobre las paredes de las celdas excede el momento totalmente plástico, creando bisagras plásticas como las que se muestran en la Figura 4. Como siempre, las espumas de celda cerrada son materiales con mayor nivel de complejidad; en ellos, la carga de colapso plástico puede verse afectada tanto por el estiramiento como por la flexión de las paredes de la celda, y por la presencia de un fluido dentro de las celdas.

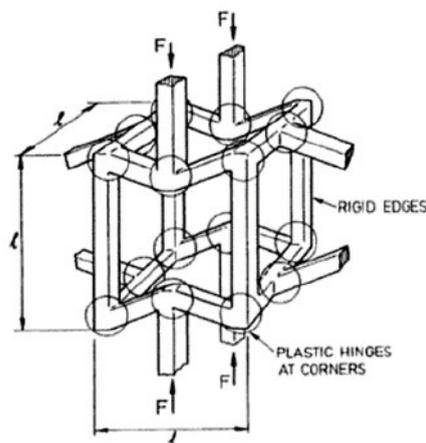


Figura 4: La formación de bisagras de plástico en una espuma de celda abierta (Gibson, 1997).

Las celdas cerradas tienen membranas que se extienden por sus caras. El colapso plástico hace que las membranas se deformen en la dirección de compresión; al ser delgadas, la fuerza requerida para arrugarlos es pequeña. Pero en ángulo recto con respecto a esta dirección, las membranas se tensan y el trabajo requerido para extenderlas contribuye significativamente al límite elástico de la espuma. Esto se evalúa calculando el trabajo realizado en un incremento de deformación e igualándolo a la disipación plástica al doblar y tensar las paredes de la celda.

### 2.3. Mecanismos de absorción de energía

Cuando se carga una espuma, las fuerzas que se le aplican realizan trabajo. El trabajo por unidad de volumen al deformar la espuma a una deformación  $\epsilon$  es simplemente el área bajo la curva esfuerzo contra deformación hasta la deformación  $\epsilon$  (Figura 5). Se absorbe una reducida cantidad de energía en el régimen lineal elástico corto. Como muestra la figura, es la meseta larga (zona *plateau*) de la curva de esfuerzo contra deformación, que surge del colapso de la celda por pandeo, cedencia o aplastamiento, lo que permite una gran absorción de energía con una carga aproximadamente constante. El nivel de esta zona *plateau* depende del material y la densidad de la espuma, y de la velocidad de deformación (Gibson, 1997).

En la Figura 5 se muestran los valores máximos de tensión generados en espumas de tres densidades al absorber la misma energía  $W$ , dados por  $(\sigma_p)_1$ ,  $(\sigma_p)_2$  y  $(\sigma_p)_3$ . La espuma de densidad más baja tiene un punto de inflexión antes de absorber la energía  $W$ , generando un esfuerzo máximo alto. La espuma de mayor densidad también genera un pico de tensión alto antes de absorber la energía  $W$ . Entre estos dos extremos hay una densidad óptima, que absorbe la energía  $W$ , en el pico de tensión más bajo,  $(\sigma_p)_2$  (Gibson, 1997).

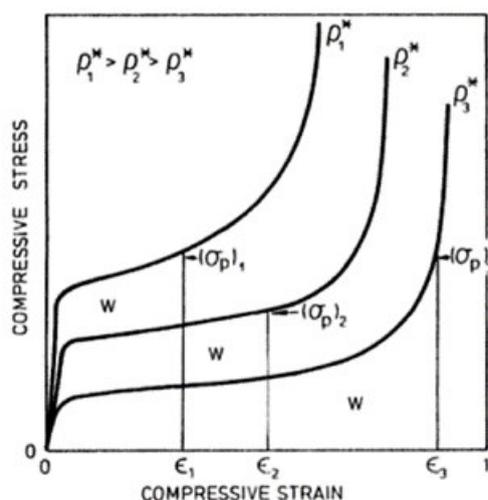


Figura 5: Valores máximos de tensión generados en espumas de tres densidades al absorber la misma energía  $W$  (Gibson, 1997).

En la absorción de energía intervienen varios mecanismos. Algunos están relacionados con la deformación elástica, plástica o de fractura de las paredes celulares y con la compresión o flujo del fluido dentro de las celdas. Los mecanismos relevantes para una espuma en particular

dependen del comportamiento del material de la pared celular y de si las celdas son abiertas o cerradas (Gibson, 1997).

El esfuerzo que ocurre durante la etapa *plateau* para las espumas elastoméricas está determinado por el pandeo elástico de las celdas. Dado que se trata de una forma de deformación elástica, gran parte del trabajo externo almacenado durante la carga se libera nuevamente cuando se descarga la espuma. Pero debido a que los materiales elastoméricos muestran amortiguamiento o histéresis, no se recupera todo el trabajo externo; una fracción se disipa en forma de calor. La fracción,  $\eta$ , se conoce como coeficiente de pérdida; los valores típicos para él se dan en la Tabla 1.

Tabla 1: Coeficiente de pérdida para polímeros (Gibson, 1997).

Material	Rango de frecuencia (Hz)	Temperatura (C)	Coeficiente de pérdida, $\eta$
PMMA	0.001-1000	25	0.01-0.05
Poliéster	1-10000	43	0.02-0.03
Poliestireno	0.01-100	-	0.01-0.02
<b>Polipropileno</b>	<b>10-100</b>	<b>20</b>	<b>0.1-0.2</b>

La variación de los parámetros viscoelásticos puede estudiarse en función tanto de la frecuencia como de la temperatura. El coeficiente de pérdida,  $\eta$ , determina la viscoelasticidad del materia. Un coeficiente de pérdida alto o bajo indica si se trata de un material viscoso o elástico (Wang et al., 2021).

## 2.4. Propiedades mecánicas de espumas poliméricas a tensión

Las espumas de estructuras y los núcleos de espuma en estructuras tipo sándwich están sujetos tanto a tensión como a compresión. La fractura, sin embargo, es bastante diferente; el esfuerzo de tensión puede provocar una fractura rápida y frágil, mientras que la compresión provoca un aplastamiento progresivo (Gibson, 1997). En este trabajo las pruebas a tensión no son mencionadas, ya que las pruebas a compresión proporcionan más información para conocer el comportamiento de las espumas EPP sometidas a impacto, lo cual es el propósito principal de este trabajo.

## 2.5. Energía de absorción

La energía de absorción es definida como el área bajo la curva carga contra desplazamiento (Nurul, 2019). La carga promedio es identificada como la determinación de parámetros de capacidad de energía absorbida basada en la definición de energía de absorción y el valor del pico de la carga, el cual fue alcanzado en el primer paso de las pruebas cuasi-estáticas.

La *energía de deformación* de un miembro, está definida como el incremento de energía asociada con la deformación de éste (Beer, 2009).

### 2.5.1. Energía de deformación

Se considera una barra  $BC$  de longitud  $L$  y área de sección transversal uniforme  $A$ , la cual es empotrada en  $B$  a un soporte fijo, y sujeta en  $C$  a un *incremento lento* de carga axial  $P$  como se muestra en la Figura 6 (Beer, 2009).

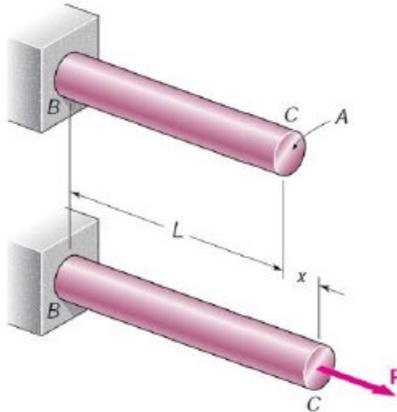


Figura 6: Deformación ocasionada por la acción de una carga (Beer, 2009).

A través de representar la magnitud de  $P$  de la carga contra la deformación  $x$  de la barra, se obtiene un diagrama específico de carga contra desplazamiento (Figura 7) que es característica de la barra  $BC$  (Figura 6).

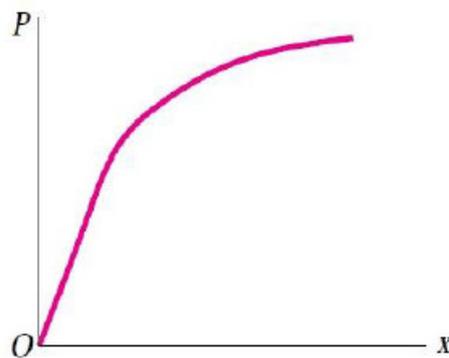


Figura 7: Diagrama carga contra desplazamiento (Beer, 2009).

Se considera el trabajo  $dU$  realizado a través de la carga  $P$ , de modo que la barra se elonga debido a un diferencial de desplazamiento  $dx$ . Este *trabajo elemental* es igual al producto de la magnitud  $P$  de la carga y de la pequeña elongación  $dx$ . Se escribe como se muestra en la ecuación 1.

$$dU = Pdx \quad (1)$$

y se nota que la expresión obtenida es igual al elemento de área de ancho  $dx$ , localizado bajo el diagrama carga/desplazamiento (Figura 7). El *trabajo total*  $U$ , representado en la ecuación 2, realizado por la carga de la barra produce una deformación  $x_1$ , y es, por lo tanto:

$$U = \int_0^{x_1} P dx \quad (2)$$

y es igual al área bajo el diagrama carga contra desplazamiento entre  $x = 0$  y  $x = x_1$ .

El trabajo realizado por la carga  $P$ , como ésta es aplicada lentamente a la barra, debe resultar en el incremento de energía asociado ( $E$ ) con su deformación. Esta energía es conocida como la *energía de deformación* de la barra. Se tiene entonces por definición (ecuación 3),

$$E_a = U = E = \int_0^{x_1} P dx \quad (3)$$

El trabajo y energía deben ser expresados en unidades obtenidas del multiplicar unidades de longitud y unidades de fuerza. Por lo tanto, si se utiliza el Sistema Métrico de Unidades Internacionales (SI), el trabajo y la energía son expresados en  $N \cdot m$ ; esta unidad es llamada *joule* ( $J$ ).

Dado que la  $E_a$  corresponde a un área debajo de una curva, para calcularla se puede implementar numéricamente la Regla del Trapecio de acuerdo con la siguiente expresión:

$$E_a = \frac{1}{2} \sum_{i=2}^n (P_i + P_{i-1}) \cdot (x_i - x_{i-1}) \quad (4)$$

donde  $P$  es la fuerza y  $x$  es el desplazamiento.

La eficiencia ( $\eta$ ) está definida por (ecuación 5):

$$\eta = \frac{E_{abs}}{E_{mx}} \quad (5)$$

donde  $E_{abs}$  es la energía hasta el fin de la deformación actual, y  $E_{mx}$  es la máxima cantidad de energía la cual podría haber sido absorbida asumiendo un esfuerzo máximo de la deformación actual.

## 2.6. Machine Learning

El *Machine Learning* es la ciencia y el arte de programar computadoras para que ellas puedan *aprender de los datos* (Géron, 2019). En 1959, Samuel definió el término de Machine Learning como el campo de estudio que da a las computadoras la habilidad de aprender sin ser explícitamente programadas. En una definición más orientada a la ingeniería: *Se dice que un programa de computadora aprende de la experiencia  $E$  con respecto a alguna tarea  $T$  y alguna medida de desempeño  $P$ , si su desempeño en  $T$ , medido por  $P$ , mejora con la experiencia  $E$ .* - Tom Mutchell, 1997.

El *Machine Learning* es ideal para:

- Problemas para los cuales las soluciones existentes requieren mucho ajuste manual o largas listas de reglas: un algoritmo de *Machine Learning* a menudo puede simplificar el código y funcionar mejor.
- Problemas complejos para los que no existe una buena solución utilizando un enfoque tradicional: las mejores técnicas de *Machine Learning* pueden encontrar una solución.
- Entornos fluctuantes: un sistema de *Machine Learning* puede adaptarse a nuevos datos.
- Obtener información sobre problemas complejos y grandes cantidades de datos.

Entonces, el *Machine Learning* es útil para problemas que son demasiado complejos para enfoques tradicionales o tener algoritmos no conocidos.

### 2.6.1. Modelos de entrenamiento con regresión lineal

Un modelo lineal hace una predicción simplemente calculando una suma ponderada de las características de entrada, más una constante llamada *sesgo* (*bias*, también llamado *término de intersección*, *intercept*), como se muestra en la ecuación 6 (Géron, 2019).

$$\hat{y} = \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \dots + \theta_n x_n \quad (6)$$

donde  $\hat{y}$  es el valor predicho;  $n$  es el número de características;  $x_i$  es el  $i^{\text{th}}$  valor característico y  $\theta_j$  es el  $j^{\text{th}}$  parámetro del modelo (incluyendo el término de sesgo  $\theta_0$  y la característica del peso, *weights*,  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_n$ ).

Por lo tanto, para entrenar un modelo de regresión lineal, debe encontrar el valor de  $\theta$  que minimiza el valor RMSE (raíz del error cuadrático medio, por sus siglas en inglés), y conduce al mismo resultado (porque el valor que minimiza una función también minimiza su raíz cuadrada) (Géron, 2019).

Esto puede ser escrito usando la forma vectorizada, como se muestra en la ecuación 7.

$$\hat{y} = h_{\vec{\theta}}(\vec{x}) = \vec{\theta} \cdot \vec{x} \quad (7)$$

donde  $\vec{\theta}$  es el vector de parámetros del modelo, conteniendo el término de sesgo  $\theta_0$  y los pesos característicos  $\theta_1$  a  $\theta_n$ ;  $\vec{x}$  es el vector característico de la interferencia, conteniendo  $x_0$  a  $x_n$ , con  $x_0$  siempre igual a 1;  $\vec{\theta} \cdot \vec{x}$  es el producto de los vectores  $\vec{\theta}$  y  $\vec{x}$ , el cual es igual a  $\theta_0 x_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \dots + \theta_n x_n$ ;  $h_{\vec{\theta}}$  es la función de hipótesis, usando los parámetros del modelo  $\vec{\theta}$ .

El MSE (error cuadrático medio, por sus siglas en inglés) de una hipótesis lineal  $h_{\theta}$  en un conjunto de entrenamiento  $X$  se calcula usando la ecuación 8 (Géron, 2019).

$$MSE(X, h_{\theta}) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (\theta^T x^{(i)} - y^{(i)})^2 \quad (8)$$

donde  $m$  es el número de instancias en el conjunto de datos en el que se mide el MSE,  $x^{(i)}$  es un vector de todos los valores de características de la  $i^{th}$  instancia en el conjunto de datos, e  $y^{(i)}$  es la salida deseada para esa instancia.

### 2.6.2. Optimización

La optimización es el proceso en el que se encuentra el modelo de forma iterativa que da como resultado una evaluación máxima y mínima de la función. Es una de las técnicas más importantes en *Machine Learning* para obtener mejores resultados. Los optimizadores comparan los resultados en cada iteración cambiando los hiperparámetros en cada paso hasta llegar a los resultados óptimos. Se crea un modelo preciso con menos tasa de error.

Lo que un optimizador hace es afinar los valores de los parámetros para reducir el error cometido por la red. El proceso mediante el cual se hace esto se conoce como “backpropagation”.

De acuerdo con Gerón (2019), los principales optimizadores son los siguientes:

- Gradient Descent
- Stochastic Gradient Descent (SGD)
- Momentum optimization
- RMSprop
- AdaGrad
- Adam

A continuación, se describen los algoritmos mencionados.

#### Gradient Descent

Es un algoritmo de optimización capaz de encontrar soluciones óptimas a una amplia gama de problemas. La idea general del *Gradient Descent* es ajustar los parámetros iterativamente para minimizar una función de costo. Mide el gradiente local de la función de error con respecto al vector de parámetros  $\theta$ , y va en la dirección del gradiente descendente (Gerón, 2019). Una vez que el gradiente es cero, ha alcanzado un mínimo (Figura 8).

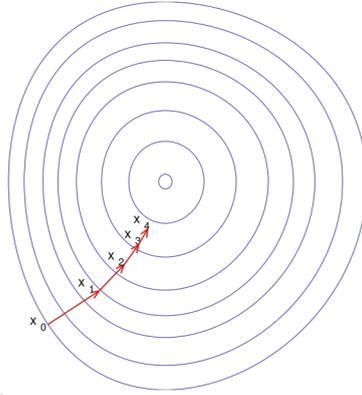


Figura 8: Esquematación del Gradient Descent.

Concretamente, comienza llenando  $\theta$  con valores aleatorios aleatorios (esto se llama inicialización aleatoria), y luego lo mejora gradualmente, dando un paso de bebé a la vez, cada paso intentando disminuir la función de costo (por ejemplo, el MSE), hasta que el algoritmo converge a un mínimo.

Un parámetro importante en Descenso de Gradiente es el tamaño de los pasos, determinado por el hiperparámetro rango de aprendizaje, learning rate. Si el rango de aprendizaje es demasiado pequeño, entonces el algoritmo tendrá que pasar por muchas iteraciones para converger, lo cual tomará mucho tiempo. De otro modo, si el rango de aprendizaje es demasiado alto, tú podrías saltar a través del valle y terminar sobre el otro lado, posiblemente incluso más arriba de lo que estabas antes. Esto podría hacer que el algoritmo diverja, con valores más y más grandes, fracasando en encontrar una buena solución.

La función de costo de MSE para un modelo de regresión lineal resulta ser una función convexa, lo que significa que, si selecciona dos puntos en la curva, el segmento de línea que los une nunca cruza la curva. Esto implica que no hay mínimos locales, solo un mínimo global. También es una función continua con una pendiente que nunca cambia abruptamente. Estos dos hechos tienen una gran consecuencia: se garantiza que el descenso de gradiente se acerque arbitrariamente al mínimo global.

### Stochastic Gradient Descent (SGD)

El cálculo de la derivada parcial de la función de coste respecto a cada uno de los pesos de la red para cada observación es, dado el número de diferentes pesos y observaciones, inviable. Por lo tanto, una primera optimización consiste en la introducción de un comportamiento estocástico (aleatorio). *SGD* limita el cálculo de la derivada a tan solo una observación (por batch). Existen algunas variaciones basadas por ejemplo en seleccionar varias observaciones en vez de una (mini-batch *SGD*).

Una variación es la introducción de momentum (Rumelhart et al., 1986). De forma intuitiva, el momentum acelera el descenso en direcciones similares a las anteriores. Para ello,

vamos a guardar un vector que representa la media en ventana de los anteriores vectores de descenso, y si el nuevo vector es similar al vector de momentum aceleramos su descenso.

Stochastic Gradient Descent simplemente elige una instancia aleatoria en el conjunto de entrenamiento en cada paso y calcula los gradientes basados solo en esa única instancia (Figura 9). Esto hace que el algoritmo sea mucho más rápido, ya que tiene muy pocos datos para manipular en cada iteración. También hace posible entrenar en grandes conjuntos de entrenamiento, ya que solo una instancia debe estar en la memoria en cada iteración.

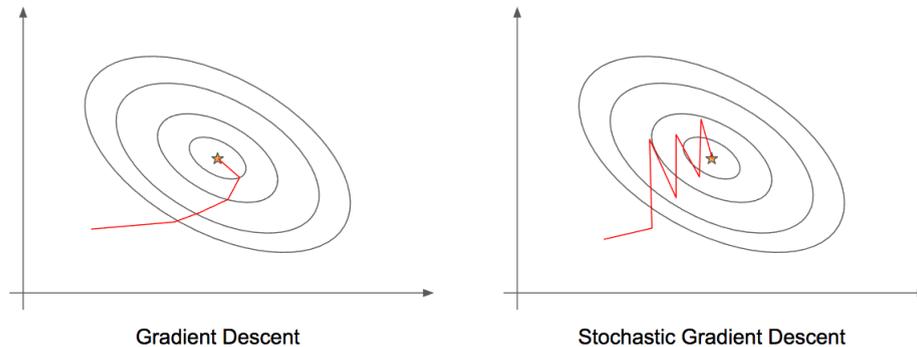


Figura 9: Esquematzación del Stochastic Gradient Descent.

### Adaptive Gradient Algorithm (AdaGrad)

El algoritmo *AdaGrad* (Duchi et al., 2011) introduce una variación muy interesante en el concepto de factor de entrenamiento: en vez de considerar un valor uniforme para todos los pesos, se mantiene un factor de entrenamiento específico para cada uno de ellos. Sería inviable calcular este valor de forma específica así que, partiendo del factor de entrenamiento inicial, *AdaGrad* lo escala y adapta para cada dimensión con respecto al gradiente acumulado en cada iteración (ecuaciones 9 y 10).

$$s \leftarrow s + \nabla_{\theta} J(\theta) \otimes \nabla_{\theta} J(\theta) \quad (9)$$

$$\theta \leftarrow \theta - \eta \nabla_{\theta} J(\theta) \oslash \sqrt{s + \epsilon} \quad (10)$$

*AdaGrad* a menudo funciona bien para problemas cuadráticos simples, pero desafortunadamente, a menudo se detiene demasiado pronto cuando se entrenan redes neuronales. La tasa de aprendizaje se reduce tanto que el algoritmo termina deteniéndose por completo antes de alcanzar el óptimo global. Entonces, aunque Keras tiene un optimizador *AdaGrad*, no debe usarlo para entrenar redes neuronales profundas.

### RMSprop (Root Mean Square Propagation)

*RMSProp* es un algoritmo similar (Gerón, 2019). También mantiene un factor de entrenamiento diferente para cada dimensión, pero en este caso el escalado del factor de entrenamiento se realiza dividiéndolo por la media del declive exponencial del cuadrado de los gradientes (Figura 10).

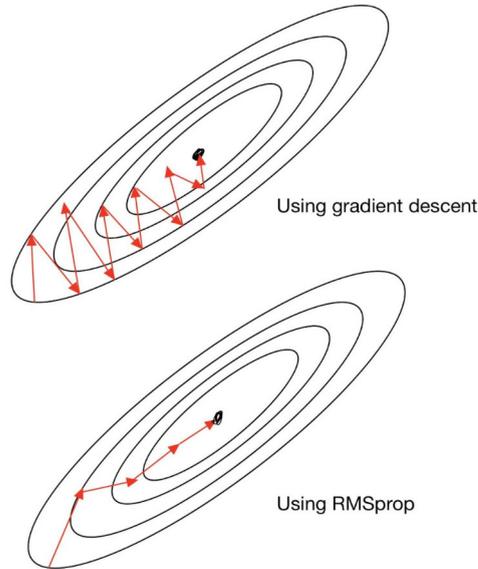


Figura 10: Esquemmatización del *RMSprop*.

Lo hace utilizando decaimiento exponencial en el primer paso (ecuaciones 11 y 12).

$$s \leftarrow \beta s + (1 - \beta) \nabla_{\theta} J(\theta) \otimes \nabla_{\theta} J(\theta) \quad (11)$$

$$\theta \leftarrow \theta - \eta \nabla_{\theta} J(\theta) \oslash \sqrt{s + \epsilon} \quad (12)$$

La tasa de decaimiento  $\beta$  normalmente se establece en 0.9.

Excepto en problemas muy simples, este optimizador casi siempre funciona mucho mejor que *AdaGrad*. De hecho, fue el algoritmo de optimización preferido de muchos investigadores hasta que surgió la optimización *Adam*.

### Adaptive Moment Estimation (ADAM)

El algoritmo *Adam* (Kingma, 2015) combina las bondades de *AdaGrad* y *RMSProp*. Se mantiene un factor de entrenamiento por parámetro y además de calcular *RMSProp*, cada factor de entrenamiento también se ve afectado por la media del momentum del gradiente.

Los algoritmos mas recientes como *Adam*, están contruidos en base a sus predecesores, por tanto podremos esperar que su rendimiento sea superior.

Dado que *Adam* es un algoritmo de tasa de aprendizaje adaptativo (como *AdaGrad* y *RMSProp*), requiere menos ajustes del hiperparámetro  $\eta$  de la tasa de aprendizaje. A menudo puede usar el valor predeterminado  $\eta = 0.001$ , lo que hace que *Adam* sea aún más fácil de usar que Gradient Descent.

## 2.7. Redes Neuronales Artificiales

Las redes neuronales artificiales, RNA, son modelos computacionales descritos en primera instancia en 1943 por el neurofisiológico Warren McCulloch y el matemático Walter Pitts que presentan el estudio del modelado del comportamiento de una neurona biológica en términos de recibir, procesar y emitir información (Géron, 2019).

Las RNA son modelos computacionales que consisten en unidades de procesamiento simples, similares a las *neuronas*, que se organizan en grupos denominados *capas*, como se muestra en la Figura 11.

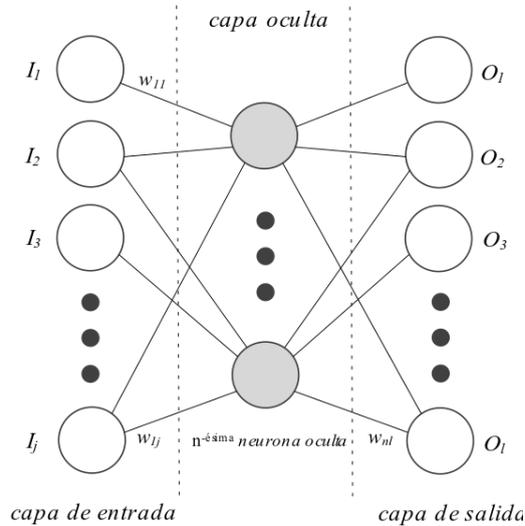


Figura 11: Arquitectura de RNA de alimentación directa típica (Rodríguez-Sánchez & Plascencia-Mora, 2021).

Haciendo referencia a la Figura 11, las entradas  $j$  de una RNA determinada puede representarse mediante un vector de la siguiente manera:

$$\mathbf{I} = [I_1, I_2, I_3, \dots, I_j]^T \quad (13)$$

Además, las salidas de una RNA como la presentada en la Figura 11, se puede describir en forma de matriz de la siguiente manera:

$$\begin{bmatrix} O_{11} & O_{12} & \cdots & O_{1l} \\ O_{21} & O_{22} & \cdots & O_{2l} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ O_{k1} & O_{k2} & \cdots & O_{kl} \end{bmatrix} \quad (14)$$

donde  $l$  es el número de salidas en una RNA, y  $k$  es el número de casos de entrenamiento usados para entrenar un modelo RNA, que puede medirse experimentalmente u obtenerse de otros modelos (por ejemplo, modelos numéricos).

De los términos más recurrentes para definir una arquitectura de RNAs, las capas se pueden distinguir según su posición dada por la dirección en la que fluye la información en la red (de entradas a salidas): (a) la capa que contiene las unidades de entrada, se llama capa de entrada; (b) la capa que contiene las unidades de salida se llama capa de salida; y (c) todas las capas intermedias se conocen como capas ocultas, es decir, una capa cuyas salidas de neuronas no pertenecen a las salidas de la RNA global (Rodríguez-Sánchez & Plascencia-Mora, 2021).

La Figura 12 representa una sola neurona de la capa oculta de la RNA representada en la Figura 11.

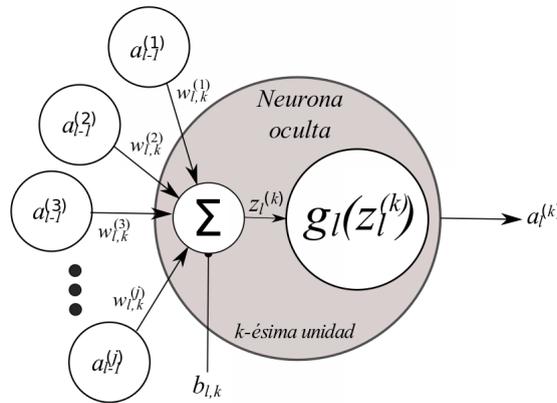


Figura 12: Estructura interna de una neurona oculta (Rodríguez-Sánchez, 2021).

Los elementos más básicos de una Red Neuronal Artificial son las neuronas artificiales. Las neuronas se conectan con otras neuronas a través de *pesos* (*weights*)  $w_{l,k}^{(j)}$ , y emiten información por medio de *activaciones*  $a_l^{(k)}$ , así como se muestra en la Figura 12.

En la Figura 12,  $l$  es el número de capa,  $k$  es el número de neurona en la capa actual,  $l, j$  es el número de neurona en la capa previa,  $l-1$  es la capa anterior,  $w_{l,k}^{(j)}$  es el peso de la  $k$ -ésima neurona de la capa  $l$  con respecto a la neurona  $j$  de la capa anterior  $l-1$ ,  $b_{l,k}$  es el sesgo para la  $k$ -ésima neurona en la capa  $l$ ,  $a_{l-1}^{(j)}$  es la activación de la  $j$ -ésima neurona de la capa previa  $l-1$ ,  $z_l^{(k)}$  es la suma de combinación lineal de los pesos por las  $a_{l-1}^{(j)}$  y sesgos  $b_{l,k}$ ,  $g_l(\cdot)$  es la función de activación para las neuronas de la capa  $l$  y  $a_l^{(k)}$  es la activación de la  $k$ -ésima neurona de la capa  $l$ .

Cada activación se obtiene por medio de la siguiente expresión:

$$a_l^{(k)} = g_l(z_l^{(k)}) \quad (15)$$

donde  $z_l^{(k)}$  es igual a:

$$z_l^{(k)} = \sum_{j=1}^m w_{l,k}^{(j)} a_{l-1}^{(j)} + b_{l,k} \quad (16)$$

Para el caso de la última capa de una red neuronal, se tiene que:

$$\hat{y}_i^{(k)} = a_L^{(k)} \quad (17)$$

por lo tanto, las activaciones de la capa de salida son predicciones de RNA, donde  $L$  es el índice de la capa de salida (Rodríguez-Sánchez, 2021).

### 2.7.1. Funciones de activacion

En las redes neuronales artificiales, la función de activación de un nodo define la salida de ese nodo dada una entrada o un conjunto de entradas.

La función de activación se encarga de devolver una salida a partir de un valor de entrada, normalmente el conjunto de valores de salida en un rango determinado como  $(0, 1)$  o  $(-1, 1)$ .

Las funciones de activación más comúnmente usadas se detallan a continuación:

- **Función sigmoideal, sigmoid:** La función sigmoideal transforma los valores introducidos a una escala  $(0, 1)$ , donde los valores altos tienen una manera asintótica a 1 y los valores muy bajos tienen de manera asintótica a 0. La función sigmoideal satura y mata el gradiente, tiene lenta convergencia, no está centrada en el cero, está acotada entre 0 y 1, y tiene buen rendimiento en la última capa. La función sigmoideal se muestra en la ecuación 18.

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (18)$$

- **Funcion ReLU (Rectified Lineal Unit):** La función ReLU transforma los valores introducidos anulando los valores negativos y dejando los positivos tal como entran. La función ReLU no está acotada, se pueden morir demasiadas neuronas, se comporta bien con imágenes y tiene un buen desempeño en redes convolucionales. La función ReLU se muestra en la ecuación 19.

$$f(x) = \max(0, x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ x & \text{for } x \geq 0 \end{cases} \quad (19)$$

- **Función Leaky ReLU:** La función Leaky ReLU transforma los valores introducidos multiplicando los negativos por un coeficiente rectificado y dejando los positivos según entran. Es similar a la función ReLU, penaliza los negativos mediante un coeficiente rectificador, no está acotada, se comporta bien con imágenes, y tiene buen desempeño en redes convolucionales. La función Leaky ReLU se muestra en la ecuación 20.

$$f(x) = \max(0, x) = \begin{cases} 0 & \text{for } x < 0 \\ a \cdot x & \text{for } x \geq 0 \end{cases} \quad (20)$$

- Función tangente hiperbólica,  $\tanh$ : La función tangente hiperbólica transforma los valores introducidos a una escala  $(-1, 1)$ , donde los valores altos tienen de manera asintótica a 1 y los valores muy bajos tienden de manera asintótica a -1. La función tangente hiperbólica es muy similar a la sigmoïdal, satura y elimina el gradiente, tiene lenta convergencia, está centrada en 0, está acotada entre -1 y 1, se utiliza para decidir entre una opción y la contraria y tiene buen desempeño en redes recurrentes. La función tangente hiperbólica se muestra en la ecuación 21.

$$f(x) = \frac{2}{1 + e^{-2x}} - 1 \quad (21)$$

La función  $g_l(\cdot)$  define la activación de una neurona si se alcanza un determinado umbral cuando se excita con información de la combinación lineal  $z_l^{(k)}$ .

Dependiendo del tipo de función, una RNA puede abordar no linealidades de los datos con que se entrena.

La elección de la función de activación es crítica a la hora de diseñar arquitecturas de RNA, ya que, dependiendo de un problema determinando, algunas funciones pueden funcionar mejor que otras. En este trabajo se usará como función de activación la función *tangente hiperbólica*,  $\tanh$ , para todas las neuronas en las capas ocultas de la RNA.

### 3. Materiales y métodos

#### 3.1. Eficiencia de energía de deformación en espumas poliméricas

Además del esfuerzo, otros aspectos pueden ser graficados con deformación. La Figura 13 contiene una curva característica típica de carga generada por la compresión de una muestra de espuma polimérica, necesaria para la realización del presente estudio. Estas curvas sitúan la energía absorbida por unidad de volumen (del inglés Unit Energy,  $E_{abs}$ ) y la eficiencia ( $\eta$ ), que es máxima alrededor del 33 % al 35 % de la deformación unitaria (Frederick, 1995).

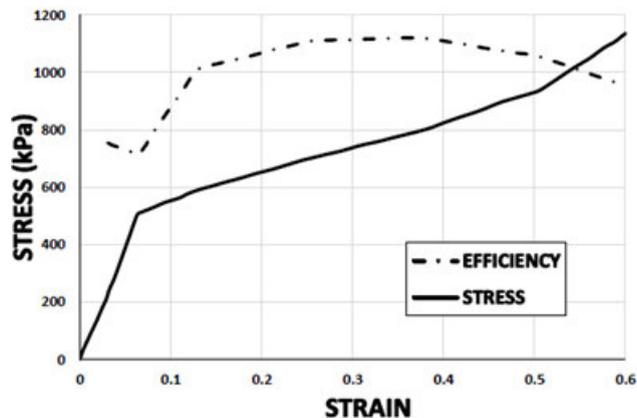


Figura 13: Curvas de eficiencia y esfuerzo contra deformación típicas de espumas poliméricas (Frederick, 1995).

En impactos de baja velocidad y sin cambios en sus parámetros, la cantidad de energía, la cual debe ser absorbida por el sistema de amortiguamiento, está relacionada a la masa y velocidad del componente. La eficiencia de energía de un absorbedor permitirá que esta energía sea absorbida por medio de dos situaciones:

- A menor desplazamiento (menor deformación).
- Con menor carga máxima.

##### 3.1.1. Espuma de EPP

Las propiedades listadas en la Tabla 2 corresponden a un rango de deformación cuasi-estático, el cual pertenece a las condiciones de prueba distribuidas en este proyecto. La espuma de EPP ve un aumento súbito en su rigidez a mayores rangos que el rango cuasi-estático.

Tabla 2: Propiedades de la espuma de EPP.

	20	45	60
Densidad ( $\text{kg/m}^3$ )	20	45	60
Módulo de Young (MPa)	75	215	320
Coefficiente de Poisson	0.001	0.03	0.04
Esfuerzo de cedencia (MPa)	24	7.7	10

El polipropileno expandido es una espuma de celda cerrada, altamente versátil que provee un rango único de propiedades incluyendo gran absorción de energía de deformación, resistencia a impactos múltiples, aislamiento térmico, flotabilidad, resistencia a cambios químicos ambientales, gran resistencia a la compresión y 100 % reciclable. El EPP se fabrica en un amplio rango de densidades, desde  $15 \text{ kg/m}^3$  hasta  $200 \text{ kg/m}^3$  (ver ARPRO, 2021), donde tres de estas fueron elegidas para la validación del uso del material.

### 3.2. Procedimiento experimental

Las pruebas experimentales del material fueron realizadas en un estudio previo realizado por Barrera-Fernández, donde estudia el comportamiento de las espumas de polipropileno expandido con distintas geometrías mediante el método de elemento finito. Los resultados de estos experimentos se usaron, de igual manera, para este trabajo. La descripción del procedimiento se muestra a continuación.

La medición de la respuesta de EPP de forma experimental fue estudiada previamente en un trabajo realizado por Barrera-Fernández, quien llevó a cabo una campaña de ensayos a compresión bajo el estándar ASTM D1621 (ASTM, 2016), a una densidad aparente de  $25 \text{ kg/m}^3$ ,  $45 \text{ kg/m}^3$  y  $60 \text{ kg/m}^3$ . Para tal objetivo, se usaron cinco unidades experimentales cúbicas de medidas aparentes de  $30 \times 30 \times 30 \text{ (cm}^3\text{)}$  para cada densidad (Figura 14), ya que, para las velocidades de prueba de  $0.164 \text{ mm/s}$ ,  $1.64 \text{ mm/s}$  y  $16.4 \text{ mm/s}$  (ASTM, 2016), no se cuenta con una hoja de especificaciones de propiedades.



Figura 14: Unidad experimental de EPP.

#### 3.2.1. Pruebas de compresión de los especímenes de EPP

Las pruebas de compresión, realizadas en el trabajo de Barrera-Fernández, se realizaron en una máquina universal INSTRON 8872 acondicionada con superficies de compresión (Figura 15). Los datos obtenidos de los experimentos en esta máquina se obtuvieron a través de su procesamiento por medio del software WaveMatrix®. Como material de apoyo fue requerido un vernier y una balanza de precisión para obtener medidas y masas de cada espécimen, y así incluir estas mediciones a una base de datos de curvas promedio.



Figura 15: Máquina de pruebas: INSTRON 8872.

Las unidades experimentales fueron probadas bajo cargas uniaxiales y la compresión se llevó hasta un 90 % de la longitud inicial de la altura, considerando este valor como máximo, con el objetivo de obtener las tres regiones de su respuesta a compresión: elástica, *plateau*, y densificación del material (Figura 16). Las velocidades de prueba se eligieron en adherencia a pruebas similares llevadas a cabo en un material EPS que están reportadas en (Rodríguez-Sánchez et al., 2019). Como tal, estas velocidades de prueba permiten obtener las tres etapas de compresión observadas en espumas poliméricas.

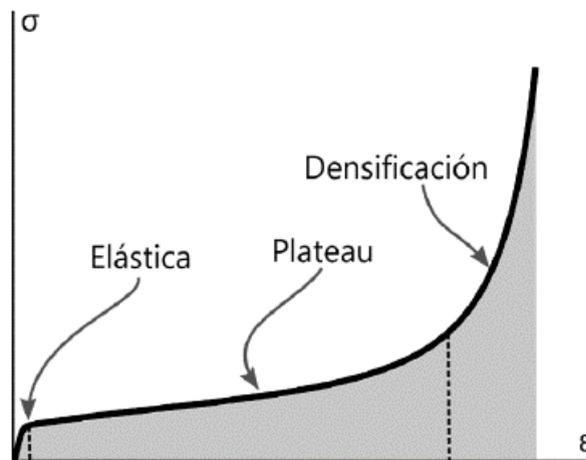


Figura 16: Etapas de compresión características de espumas poliméricas (Frederick, 1995).

La Figura 16 muestra una respuesta al esfuerzo de compresión típica de espumas poliméricas de celda cerrada rígidas y semirrígidas, la cual exhibe una significativa alta no-linealidad a la deformación. Esta figura muestra las tres etapas de esfuerzo a la compresión.

Ya que en la máquina universal INSTRON 8872 de pruebas, los datos obtenidos de la experimentación corresponden con mediciones de carga y desplazamiento de la superficie superior de compresión, se hizo la misma conversión de los datos para trazar las curvas de esfuerzo contra deformación.

Después de calcular el esfuerzo ingenieril y la deformación unitaria por medio de las ecuaciones (22) y (23), donde  $F$  es la carga aplicada,  $A_0$  es el área de sección transversal,  $\Delta L$  es el cambio de longitud del espécimen y  $L_0$  su longitud inicial, entonces, fue posible trazar las curvas de esfuerzo contra deformación de las cinco unidades experimentales de cada densidad.

$$\sigma = \frac{F}{A_0} \quad (22)$$

$$\epsilon = \frac{\Delta L}{L_0} \quad (23)$$

De estas pruebas experimentales se obtienen cinco curvas correspondientes a cada espécimen. Entonces, de estas se obtuvo una curva promedio experimental al calcular la media del esfuerzo ingenieril correspondiente a la deformación unitaria de todas las curvas. Las curvas esfuerzo contra deformación promedio para cada densidad se muestran en la Figura 17.

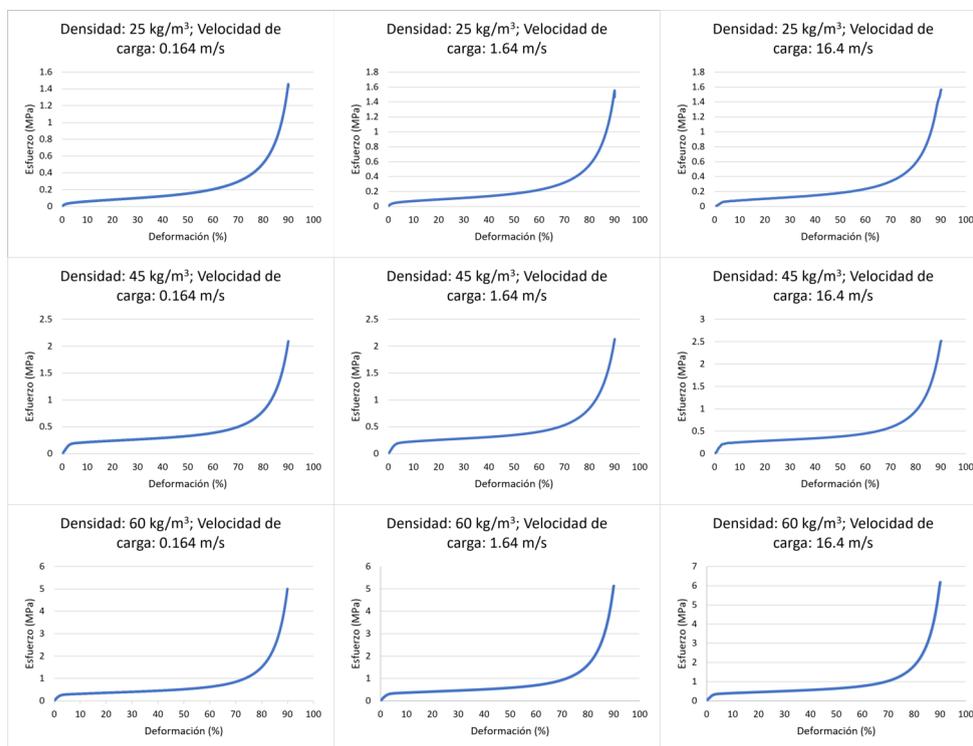


Figura 17: Curvas Esfuerzo contra Deformación (Barrera-Fernández, 2020).

### 3.3. Método para obtener el modelo de RNA

Para ser funcional, las RNA necesitan ser entrenadas con datos relacionados al problema de estudio. Las RNA aprenden usando casos de entrenamiento del fenómeno o del problema que está bajo observación. Para este trabajo, los datos para entrenar una RNA se refiere a la densidad, tasas de carga y deformación. Estos datos fueron usados para ajustar los pesos de la RNA a través de la función del error cuadrático medio (*Mean Square Error, MSE*):

$$MSE = \frac{1}{mn} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (T_{ij} - Z_{ij})^2 \quad (24)$$

donde  $Z_{ij}$  corresponde a los valores estimados de un problema dado por la RNA,  $T_{ij}$  se refiere a los valores objetivo,  $n$  es el valor de salidas y  $m$  representa el número de casos de entrenamiento.

### 3.4. Análisis para encontrar la arquitectura del modelo de red neuronal artificial

El material EPP fue probado a deformación de compresión bajo varias condiciones que serán usadas como entradas para crear modelos basados en redes neuronales artificiales. Para este propósito, Rodríguez-Sánchez (2021) propone una guía y parámetros de entrenamiento esenciales en el modelado constitutivo de un material con RNA, considerando los siguientes puntos:

- Normalizar o estandarizar las características (entradas).
- Construir conjuntos de datos. Tres conjuntos de datos: (1) Entrenamiento, (2) validación, y (3) prueba. El conjunto de prueba serán los datos de una curva a condiciones que no se usan para entrenar ni validar los modelos RNA.
- Aleatorizar los conjuntos de entrenamiento y validación antes de alimentar a cualquier RNA.
- Establecer un método para seleccionar la arquitectura de un modelo.
- Usar la función tangente hiperbólica,  $\tanh$ , para las neuronas de un modelo.
- Guardar el mejor modelo durante entrenamiento a través de técnicas de *Callbacks* de *TensorFlow*.
- Evaluar los modelos con el conjunto de prueba y medidas de error locales y globales.
- Conducir un análisis estadístico del error global de una arquitectura y reportar la distribución del mismo por medio de gráficas de caja, o gráficas de violín.
- Conducir simulaciones para condiciones de las entradas distintas al entrenamiento.

Para encontrar el mejor modelo de RNA se propusieron ocho modelos con dos capas ocultas y en cada capa oculta se tiene un número distinto de neuronas. La función de activación usada es, siguiendo la guía anterior, la función tangente hiperbólica *tanh*. Además, se probaron dos distintos optimizadores, *RMSprop* y *SGD*. Los modelos propuestos se muestran en la Tabla 3 donde  $\theta_1$  es el número de neuronas en la primer capa oculta y  $\theta_2$  es el número de neuronas para la segunda capa oculta.

Tabla 3: Modelos propuestos.

Modelo	$\theta_1$	$\theta_2$	Función de activación	Optimizador
1	16	8	tanh	<i>RMSPprop</i>
2	16	7	tanh	<i>RMSPprop</i>
3	17	8	tanh	<i>RMSPprop</i>
4	10	6	tanh	<i>RMSPprop</i>
5	16	10	tanh	<i>RMSPprop</i>
6	16	8	tanh	<i>SGD</i>
7	16	10	tanh	<i>SGD</i>
8	10	6	tanh	<i>SGD</i>
9	16	7	tanh	<i>SGD</i>

Se obtuvieron curvas de predicción y validación para cada uno de los modelos. Los parámetros usados para la elaboración de estas curvas son el número de neuronas en las capas ocultas, representadas por  $\theta_1$  para la primera capa oculta y  $\theta_2$  para la segunda capa oculta, el número de épocas el cual es de 1000. Este número de épocas han dado buenos resultados en el entrenamiento de modelos de RNA porque se observó que más iteraciones de entrenamiento potencialmente conducen a un *sobreajuste* de los datos que pertenecen al conjunto de entrenamiento (Rodríguez-Sánchez & Plascencia-Mora, 2021). Éste se produce cuando un sistema de *Machine Learning* se entrena demasiado que hace que el algoritmo aprenda patrones que no son generales.

Dos tipos de optimizadores (*RMSprop* y *SGD*) y *tanh* como función de activación. Además se compararon las curvas de predicción contra las de los datos experimentales para cada caso, y se obtuvo el valor de pérdida de cada uno de los modelos.

## 4. Resultados

Las curvas de esfuerzo contra deformación dan información sobre el comportamiento mecánico de materiales sometidos a cargas a compresión. Como se mencionó anteriormente, consta de tres etapas principales las cuales son la zona elástica, etapa *plateau* y densificación. Existen diferentes métodos para obtener estas curvas, y las redes neuronales artificiales son un método innovador los cuales pueden crear curvas de predicción que, comparadas con las generadas por los datos experimentales, se aproximan con mucha precisión a estas curvas, claro está, seleccionando el modelo de red neuronal artificial adecuado.

A continuación, se muestran las curvas de esfuerzo contra deformación de los nueve modelos de red neuronal artificial. La curva de Datos Experimentales con la que se compara la curva de Predicción es una curva promedio de las cinco curvas experimentales generadas por las pruebas a cada espécimen con densidad de  $45 \text{ kg/m}^3$  a una velocidad de carga de  $1.64 \text{ m/s}$ .

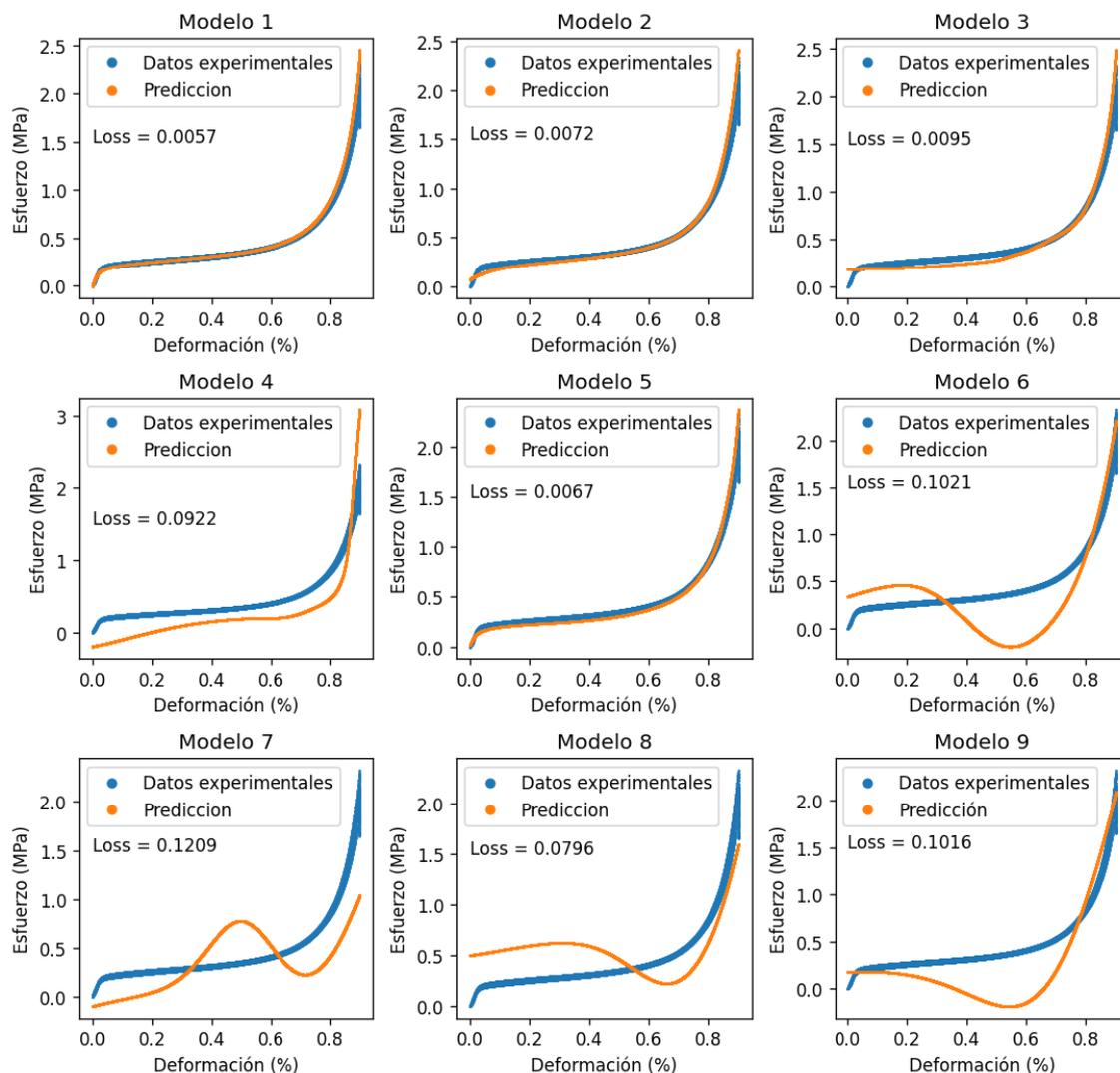


Figura 18: Curvas de esfuerzo contra deformación de los modelos propuestos de RNA.

Los valores de pérdida se muestran en la Tabla 4.

Tabla 4: Valores de pérdida de los modelos de red neuronal artificial.

Modelo	Valor de pérdida ( <i>Loss</i> )
1	0.0057
2	0.0072
3	0.0095
4	0.0922
5	0.0067
6	0.1021
7	0.1209
8	0.0796
9	0.1016

El valor de pérdida representa el error entre las curvas de datos experimentales y las de predicción. Entre más bajo sea el valor de pérdida, menor error habrá.

#### 4.1. Modelos propuestos de redes neuronales artificiales

En la Figura 18 se muestran las simulaciones de la curva de esfuerzo contra deformación de cada modelo de red neuronal artificial con las variables estudiadas en este trabajo. A continuación se muestra una descripción de cada modelo.

El Modelo 1 se compone de 16 neuronas en la primer capa oculta y 8 neuronas en la segunda capa oculta, usa el optimizador *RMSPprop*. Se puede observar que en este modelo la curva de predicción tiene un comportamiento muy similar a la tendencia que tiene la curva realizada con los datos experimentales. El valor de pérdida (*Loss*) es muy bajo por lo que se puede decir que la curva de predicción de este modelo se asemeja demasiado a la realidad.

El Modelo 2 se compone de 16 neuronas en la primer capa oculta y 7 neuronas en la segunda capa oculta, usa el optimizador *RMSPprop*. Similar al Modelo 1, se observa que la curva de predicción tiene un comportamiento muy cercano a la realidad ya que sigue la tendencia de la curva con los datos experimentales, con una excepción en la zona elástica. El valor de pérdida es bajo, pero es más mayor que el Modelo 1.

El Modelo 3 se compone de 17 neuronas en la primera capa oculta y 8 neuronas en la segunda capa oculta, usa el optimizador *RMSPprop*. En este caso se observa que en la región de elasticidad la curva de predicción no logra alcanzar el nivel de la curva experimental, caso contrario a lo que sucede en la zona *plateau* y densificación. El comportamiento de la curva de Predicción tiene un comportamiento que se asemeja al de una función exponencial, y se logra observar que en la zona *plateau* la curva de Predicción no alcanza por completo a la curva de Datos experimentales.

El Modelo 4 se compone de 10 neuronas en la primer capa oculta y 6 neuronas en la segunda capa oculta, usa el optimizador *RMSProp*. Se observa que la curva de Predicción no logra seguir la tendencia de la curva de Datos experimentales en ninguna etapa. En la etapa elástica, la curva de Predicción comienza por debajo de la curva de Datos experimentales y así continúa durante toda la zona *plateau* y al comienzo de la etapa de densificación, después tiene un incremento abrupto y sobrepasa la curva de Datos experimentales. El valor de pérdida en este modelo es alto comparado a los primeros tres modelos.

El Modelo 5 se compone de 16 neuronas en la primer capa oculta y 10 neuronas en la segunda capa oculta, usa el optimizador *RMSProp*. Se muestra un buen comportamiento de la curva de predicción comparada con la curva de datos experimentales, pero se logra observar una pequeña desviación en el área elástica y en la etapa de densificación. Este modelo tiene un valor de pérdida bajo así que, al igual que el Modelo 1 y el Modelo 2, se puede decir que es un modelo confiable.

El Modelo 6, muy similar al Modelo 1, tiene 16 neuronas en la primer capa oculta, 8 neuronas en la segunda capa oculta, la diferencia está en que este modelo usa el optimizador *SGD*. Su valor de pérdida es muy elevado, lo que se refleja en el comportamiento de la curva de Predicción, pues no sigue la tendencia en ninguna etapa de la curva de Datos experimentales.

El Modelo 7, muy similar al Modelo 5, tiene 16 neuronas en la primer capa oculta y 10 neuronas en la segunda capa oculta, la diferencia está en el que este modelo usa el optimizador *SGD*. Similar al Modelo 6, la curva de predicción presenta inestabilidad desde la etapa elástica, al igual que por la etapa *plateau* lo que hace que no siga la tendencia de la curva con los datos experimentales. Al llegar a la etapa de densificación, la curva de predicción no logra alcanzar los valores de la curva de los datos experimentales. El valor de pérdida de este modelo es el más elevado entre los modelos aplicados.

El Modelo 8, muy similar al Modelo 4, tiene 10 neuronas en la primer capa oculta y 6 neuronas en la segunda capa oculta, la diferencia está en el que este modelo usa el optimizador *SGD*. En este caso las curvas en ningún momento se asemejan las curvas de predicción y experimental. La curva de predicción está por debajo de la curva de datos experimentales en las etapas elástica y *plateau*.

El Modelo 9, muy similar al Modelo 2, tiene 16 neuronas en la primer capa oculta y 7 neuronas en la segunda capa oculta, la diferencia está en el que este modelo usa el optimizador *SGD*. Se observa que la curva de predicción tiene un comportamiento completamente diferente al de la curva de datos experimentales. En la zona elástica y *plateau*, la curva de predicción está por debajo de la curva de datos experimentales; y una vez pasando a la etapa de densificación los datos de la curva de predicción se sobrepasan a la curva de datos experimentales.

## 4.2. Selección del mejor modelo

Las curvas de los modelos 1 al 5 fueron realizadas con el optimizador *RMSProp*. En las curvas de los modelos 1 y 5 se observa que la curva de predicción se asemeja demasiado a la curva de validación y presentan un valor de pérdida menor a los 0.001 puntos, lo que los hacen modelos muy exactos para modelar el comportamiento del material. Los modelos 2 y 3 también muestran curvas de predicción similares a las de validación, pero los valores de pérdida son superiores a los modelos 1 y 5.

Las curvas de los modelos 6 al 9 fueron realizadas con el optimizador *SGD*. En estos modelos se observa que las curvas de Predicción no siguen la tendencia de la curva de Datos experimentales, sus valores de pérdida son los más altos por lo que se asume que no son modelos adecuados para este tipo de material. Incluso en las curvas de Predicción tienen valores de esfuerzo menores a 0, algo completamente erróneo en pruebas a compresión del material, por lo que se descartan de inmediato.

Comparando exclusivamente los modelos 1 y 5, al ser los mejores modelos, se puede apreciar que el modelo 1 tiene un valor de pérdida menor al modelo 5 por lo que se puede decir que este modelo es más preciso para trabajar los modelos de predicción y graficar las curvas de esfuerzo contra deformación de espumas de polipropileno expandido sometido sometidas a compresión, por lo que se selecciona el Modelo 1.

En la Figura 19 se muestra la arquitectura del modelo neuronal seleccionado.

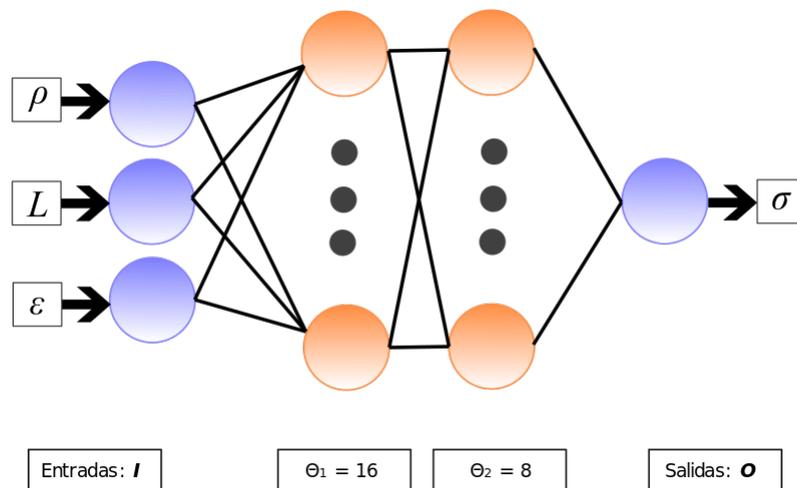


Figura 19: Modelo de red neuronal artificial seleccionado.

Las pérdidas de validación y entrenamiento de la RNA elegida se muestra en la Figura 20. Se puede observar que después de 200 épocas, el error para los conjuntos de entrenamiento y validación tienden a aplanarse y comportarse de manera similar para las épocas restantes.

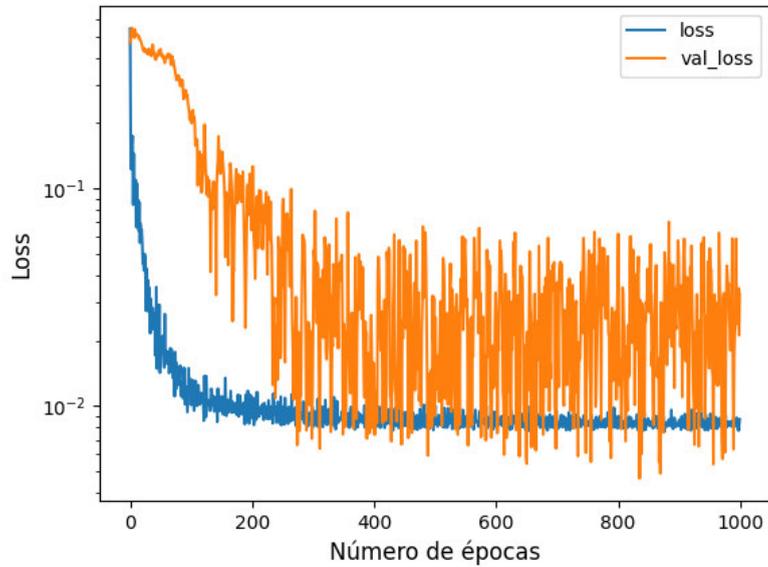


Figura 20: Pérdida de entrenamiento y validación para el modelo RNA elegido.

### 4.3. Curva de esfuerzo contra deformación

Una vez que se ha elegido una arquitectura de RNA, esta se excita con las deformaciones, densidades y tasas de carga para producir estimaciones de esfuerzo. La Figura 21 muestra la simulación de la curva de esfuerzo contra deformación del modelo de red neuronal seleccionado con las variables estudiadas en este trabajo. En esta figura es posible observar una comparación con los resultados experimentales: para datos reales, se observa que el modelo de RNA seleccionado tiende a replicar su tendencia con buena aproximación, ya que presenta las regiones elástica, *plateau* y densificación de las espumas EPP.

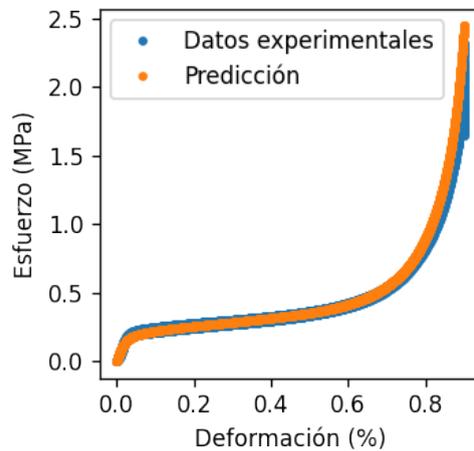


Figura 21: Curva esfuerzo contra deformación.

En la Figura 21 se observa un buen comportamiento del modelo elegido con respecto a los datos experimentales. En la etapa de densificación del material, muestra que el modelo de RNA tiende entre todos los datos de prueba, para actuar como la predicción del la respuesta promedio de estos.

Con respecto al problema de *sobreajuste* que a veces presentan algunos modelos basados en redes neuronales, la Figura 21 muestra que las predicciones del Modelo 1 de red neuronal artificial elegido en el conjunto de datos de prueba, siguen la tendencia de la respuesta a la tensión de compresión del material analizado en condiciones nunca vistas por esto.

Con la arquitectura seleccionada se procedió a realizar pruebas con los diferentes niveles de densidad y velocidades de carga.

#### 4.4. Curvas de energía de absorción contra deformación y curvas de eficiencia

La Figura 22 muestra las curvas simuladas de carga, energía de absorción contra deformación y de eficiencia de los especímenes con densidad de  $25 \text{ kg/m}^3$ , a tres velocidades de carga.

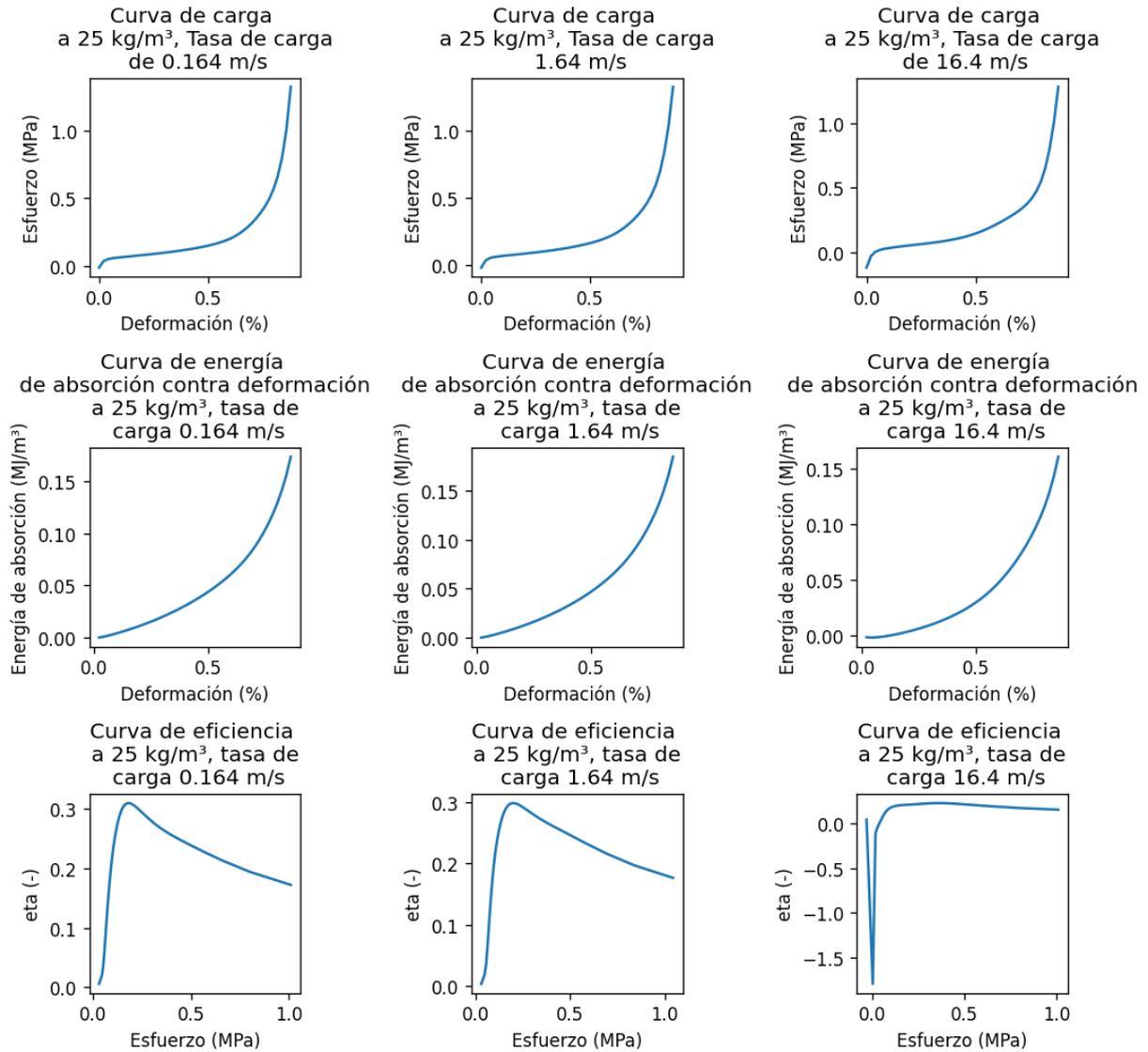


Figura 22: Curvas de carga, energía de absorción contra deformación y de eficiencia de los especímenes de  $25 \text{ kg/m}^3$ .

La Figura 23 muestra las curvas de carga, energía de absorción contra deformación y de eficiencia de los especímenes con densidad de  $45 \text{ kg/m}^3$ , a tres velocidades de carga.

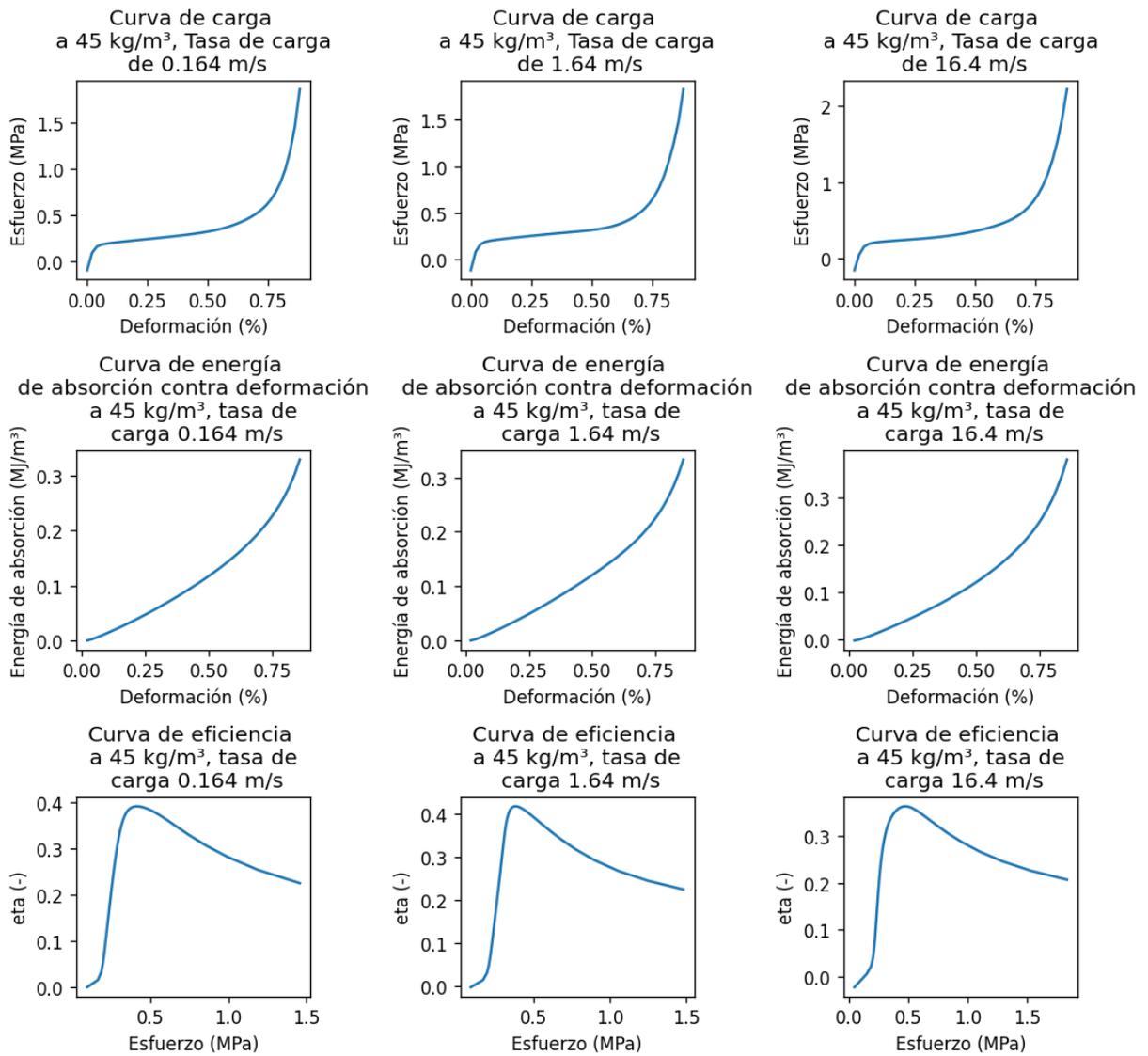


Figura 23: Curvas de carga, energía de absorción contra deformación y de eficiencia de los especímenes de  $45 \text{ kg/m}^3$ .

La Figura 24 muestra las curvas de carga, energía de absorción contra deformación y de eficiencia de los especímenes con densidad de  $60 \text{ kg/m}^3$ , a tres velocidades de carga.

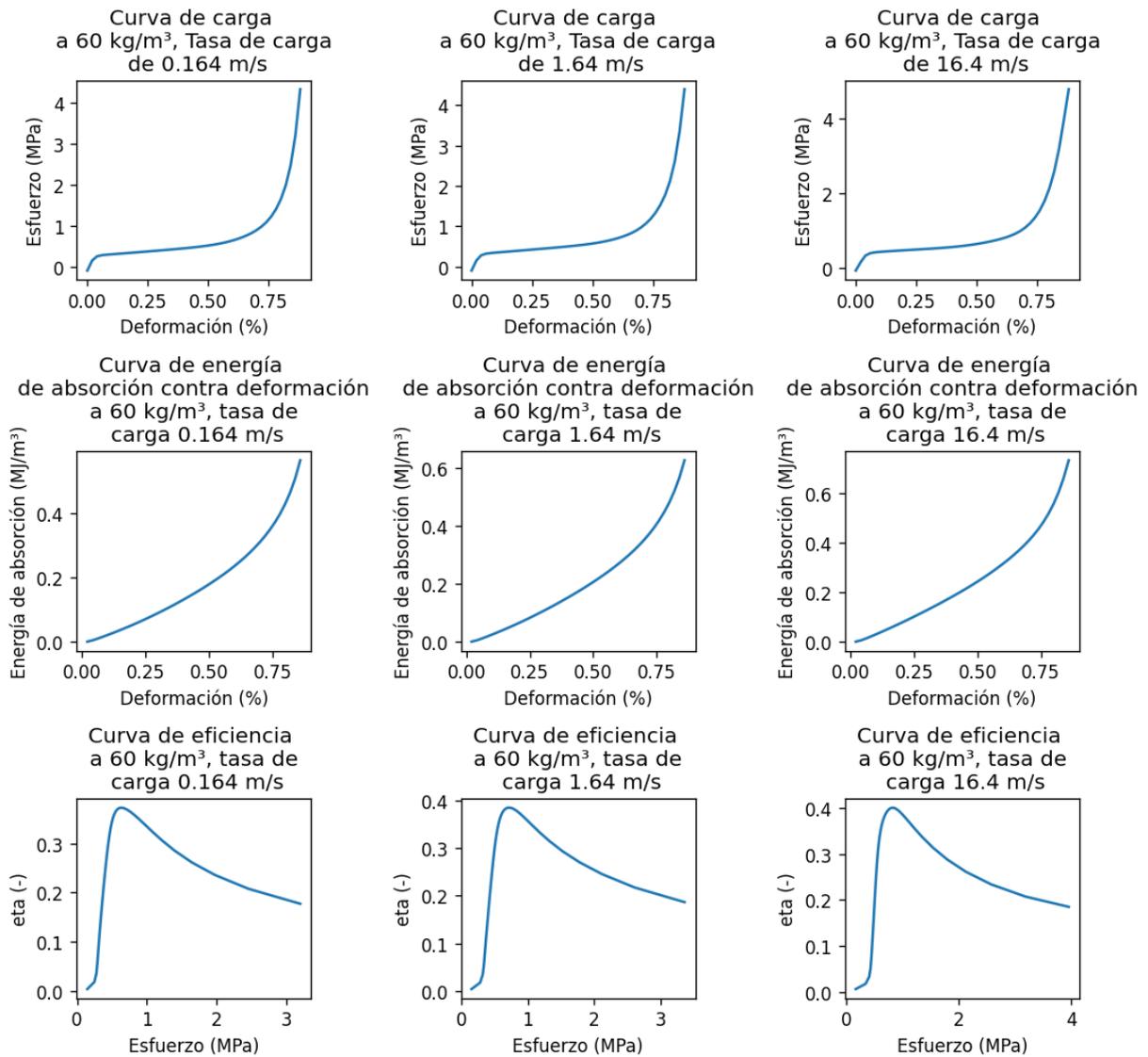


Figura 24: Curvas de carga, energía de absorción contra deformación y de eficiencia de los especímenes de  $60 \text{ kg/m}^3$ .

Las curvas de energía de absorción contra deformación muestran que los especímenes absorben más energía mientras el porcentaje de deformación incrementa. La eficiencia se grafica contra el esfuerzo. Se puede observar que cada espuma tiene una eficiencia máxima para un esfuerzo diferente. Las curvas de eficiencia muestran el efecto de la densidad sobre la eficiencia. Estas figuras también muestran la comparación de la RNA en contraste a los datos experimentales obtenidos de una sola prueba del conjunto de datos de validación.

Las curvas de eficiencia muestran que el incremento en la densidad afecta positivamente la eficiencia de absorción en el material, independientemente de las condiciones de velocidad de carga. Adicionalmente, puede ser observado que el modelo de RNA es adecuado para producir datos que no fueron parte de su entrenamiento.

## 5. Discusiones

El modelo de red neuronal artificial seleccionado fue adecuado para el estudio del comportamiento de las espumas de polipropileno expandido, el cual dio resultados muy apegados a la realidad con muy bajo valor de error comparado a los datos de las pruebas experimentales que se obtuvieron de las pruebas a compresión aplicadas al material. En este trabajo, el modelo de red neuronal artificial seleccionado es de tres neuronas en la capa de entrada, dieciséis neuronas en la primer capa oculta, ocho neuronas en la segunda capa oculta, y una neurona en la capa de salida la cual producía los valores del esfuerzo. Se lograron producir curvas de esfuerzo contra deformación para cada espécimen, teniendo como variables de entrada tres diferentes densidades, tres tasas de carga y deformación.

Aún así, es importante mencionar que este modelo de red neuronal artificial, si bien funciona para materiales poliméricos de celda cerrada, no tendrá los mismos resultados con otro tipo de material ya que se tienen que tomar en cuenta otros parámetros y propiedades. Se sugiere usar el método presentado en este trabajo para así realizar modelos para otros materiales, incluir más variables y los parámetros necesarios para su estudio.

En las Figuras 23, 24 y 25 se puede observar que las curvas de esfuerzo contra deformación de cada espécimen tienen un comportamiento similar a la curva de esfuerzo contra deformación del modelo de red neuronal artificial seleccionado. De igual forma, es posible observar que conforme la densidad aumenta, el esfuerzo máximo que soportan los especímenes también lo hará.

De manera similar a las curvas de esfuerzo contra deformación, en las Figuras 23, 24 y 25 se observa un incremento en la energía de absorción conforme aumenta la densidad. De igual manera, se observa que la energía de absorción aumenta cuando el porcentaje de deformación va aumentando.

En las mismas figuras mencionadas anteriormente se observa que la mayor eficiencia corresponde a los especímenes de  $45 \text{ kg/m}^3$  cuando el esfuerzo es cercano a los 0.5 MPa, alcanzando un valor de  $\eta$  de 0.4. En los especímenes se observa que también en el mismo intervalo de esfuerzo se obtiene el mayor puntaje de eficiencia.

## 6. Conclusiones

Las siguientes conclusiones pueden ser extraídas de los resultados anteriores.

- Los modelos de redes neuronales artificiales, como se informa en este estudio, ayudan a abordar la respuesta de materiales no lineales como las espumas EPP.
- Dado el bajo error con respecto a los datos experimentales obtenidos de las RNA en este trabajo para espumas EPP (valor de pérdida de 0.0057), se puede concluir que las arquitecturas como las que se presentan aquí pueden ser útiles para estudiar las fuerzas de impacto en polímeros.
- Los resultados muestran que el uso de este modelo de red neuronal artificial es ideal para poder estudiar el comportamiento mecánico de las espumas de polipropileno expandido sin tener que realizar pruebas experimentales, ya que estas pruebas resultan costosas debido a que se requiere de un número alto de pruebas para poder realizar una estadística con resultados confiables.
- Los modelos que usaron el optimizador *RMSPprop* mostraron mejores resultados que los modelos que usaron el optimizador *SGD*. El valor de pérdida no superó los 0.01 puntos a excepción del Modelo 4, en cambio, el mejor modelo de los que usaron el optimizador *SGD* fue el Modelo 8 con valor de pérdida de 0.0796, un valor muy superior comparado con los 0.0057 del modelo seleccionado.

Como trabajo futuro podría estudiarse con redes neuronales artificiales el comportamiento mecánico a compresión de las espumas de polipropileno expandido con diversas geometrías, por ejemplo las presentadas en el trabajo de Barrera-Fernández en las que utilizó especímenes con cortes circulares, triangulares y arco. Estudiar la micrografía a nivel celular del polímero para identificar un parámetro que funcione como variable de entrada según la densidad de la espuma polimérica.

Otro enfoque sería aplicar métodos de *Deep Learning* y entrenamiento de redes neuronales artificiales para segmentación de imágenes de micrografías de espumas poliméricas de celda cerrada, además de encontrar la correlación entre propiedades microestructurales de espumas poliméricas y su respuesta mecánica a compresión.

## Referencias

- [1] D. RAPS, N. HOSSIENY, C.B. PARK and V. ALTSTÄDT, «Past and present developments in polymer bead foams and bead foaming technology», *Polymer*, vol. 56. 2015. doi: 10.1016/j.polymer.2014.10.078
- [2] www.arpro.com, «ARPRO».
- [3] L. ANDENA, F. CAIMMIA, L. LEONARIDA, A. GHISIB, S. MARIANIB and F. BRAGHIN, «Towards safer helmets: characterisation, modelling and monitoring», *Procedia Eng*, vol. 147, no. 1, pp. 478-483. 2016.
- [4] M. DUDZIK and A. M. STREK, «ANN Architecture Specifications for Modelling of Open-Cell Aluminum under Compression», *Math Probl Eng*, vol. 2020, pp. 1-26. Feb. 2020. doi: 10.1155/2020/2834317.
- [5] A. E. RODRÍGUEZ-SÁNCHEZ and H. PLASCENCIA-MORA, «A machine learning approach to estimate the strain energy absorption in expanded polystyrene foams», *Journal of Cellular Plastics*, May 2021. doi: 10.1177/0021955X211021014.
- [6] A. E. RODRÍGUEZ-SÁNCHEZ «Modeling Nonlinear Compressive Stress Responses in Closed-cell Polymer Foams Using Artificial Neural Networks: A Comprehensive Case Study», *ACS Books*, Jan 2022.
- [7] D. EVANS and T. MORGAN, «Engineering thermoplastic energy absorbers for bumpers», 1999. doi: 10.4271/1999-01-1011.
- [8] D. T. MORTON, A. REYES, A. CLAUSENA and O. HOPPERSTADA, «Mechanical response of low density expanded polypropylene foams in compression and tension at different loading rates and temperatures», *Mater Today Commun*, vol. 23, no. 1. pp. 1-13, 2020.
- [9] F. XU, X. ZHANG and H. ZHANG, «A review on functionally graded structures and materials for energy absorption», *Eng Struct*, vol. 1717. pp. 309-325, 2018.
- [10] M. YILDIZHAN, B. EFENDIOGLU, N. KAYA, I. ÖZTÜRK, E. ALBAK and F. ÖZTÜRK, «Design of improved energy absorbing pads to reduce occupant injuries in vehicle side impact», *International Journal of Vehicle Design*, vol. 71, no. 1, pp. 174-190, 2016.
- [11] G. FREDERICK, «Optimization of expanded polypropylene foam coring to improve bumper foam core energy absorbing capability», 1995. doi: 10.4271/950549.
- [12] www.arpro.com, «ARPRO», *Technical information*.
- [13] N. MILLS, C. FITZGERALD, A. GILCHRIST and R. VERDEJO, «Polymer foams for personal protection: cushions, shoes and helmets», *Composites and Science Technology*, pp. 2389-2400, 2003.
- [14] M. MHAPANKAR, «Weight reduction technologies in the automotive industry», *ARANCIA*, pp. 1-12, 2020.

- [15] R. E. WINTER, M. COTTON, E. J. HARRIS, D. E. EAKINS and G. MCSHANE, «High resolution of energy absorption in dynamically loaded cellular structures», *Springer Shock Waves*, pp. 221-236, 2017.
- [16] A. E. RODRÍGUEZ-SÁNCHEZ, H. PLASCENCIA-MORA, E. R. LEDESMA-OROZCO, E. AGUILERA-GÓMEZ and D. A. GÓMEZ-MÁRQUEZ, «Numerical analysis of energy absorption in expanded polystyrene foams», *Journal of Cellular Plastics*, pp. 1-24, 2019.
- [17] GHABOUSSI J, GARRETT J. H. and WU X., «Knowledge based modeling of material behavior with neural networks», *J. EngMech*, no. 118, pp. 1059-1059, 1992.
- [18] LYE S. W. and CHUCHOM S., «A neural predictive model for characterising impact cushioning curves», *Eng Appl Artif Intell*, no. 10, pp. 639-646, 1997.
- [19] WENG J., LINDVALL R., and ZHUANG K., «A machine learning based approach for determining the stress-strain relation of grey cast iron from nanoindentation», *Mech Mater*, no. 148, 2020.
- [20] GROOVER MIKELL P «Fundamentos de manufactura moderna», 3ra Ed., McGraw-Hill, 2017.
- [21] M. DUDZIK and A. STREK, «ANN model of stress-strain relationship for aluminium sponge in uniaxial compression», *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, vol. 58, no. 2, pp. 385-390, Apr. 2020, doi:10.15632/jtm-pl/116804.
- [22] RÄTZSCH M, BUCKA H., and PANZER U., «Polypropylene an A-Z Reference», *Kaiserslautern*, pp. 635-642, 1999.
- [23] A. E. RODRÍGUEZ-SÁNCHEZ, E. LEDESMA-OROZCO, S. LEDESMA and A. VIDAL-LESSO, «Application of artificial neural networks to map the mechanical response of a thermoplastic elastomer», *Mater Res Express*, vol. 6, no. 7, p. 075320, Apr. 2019, doi: 10.1088/2053-1591/ab13ec.
- [24] C. YANG, W. MA, J. ZHONG and Z. ZHANG, «Comparative Study of Machine Learning Approaches for Predicting Creep Behavior of Polyurethane Elastomer», *Polymers (Basel)*, vol. 13, no. 11, pp. 1768, May 2021, doi: 10.3390/polym13111768.
- [25] K. TSURUGAI and H. TOKORO, «Shock Absorbing Material», US 6,451,419 B, 1998.
- [26] J. A. BARRERA FERNÁNDEZ, H. PLASCENCIA MORA and A. E. RODRÍGUEZ SÁNCHEZ, «Modelado numérico de la respuesta a compresión de una espuma de polipropileno expandido por elementos finitos», *Memorias del XXVI congreso internacional anual de la SOMIM*, vol. 1, pp. 1-2, Oct. 2020.
- [27] D. OKUMURA, A. OKADA and N. OHNO, «Buckling behavior of Kelvin open-cell foams under [0 0 1], [0 1 1] and [1 1 1] compressive loads», *Int J Solids Struct*, vol. 45, no. 13, pp. 3807-3820, Jun. 2008, doi: 10.1016/j.ijsolstr.2007.10.021.
- [28] L. J. GIBSON and F. A. MICHAEL, «Cellular solids. Structure and properties», Second. Cambridge Solid State Science Series, 1997.

- [29] D. W. VAN KREVELEN and K. TE NIJENHUIS, «Properties of Polymers. Their Correlation with Chemical Structure; their Numerical Estimation and Prediction from Additive Group Contributions», 4th ed. Elsevier, 2009.
- [30] JOSÉ ANGEL DIOSDADO DE LA PEÑA, HÉCTOR PLASCENCIA-MORA and MIGUEL TORRES C., «Modelo numérico-experimental de la absorción de energía del EPS», *Editorial Académica Española*, 2013.
- [31] J. W. SUE, «Effect of Microstructure of Closed Cell Foam on Strength and Effective Stiffness a Dissertation», 2006.
- [32] M. DAVID and A. F. JOHNSON, «Effect of strain rate on the failure mechanisms and energy absorption in polymer composite elements under axial loading», *Compos Struct*, vol. 122, pp. 430-439, Apr. 2015, doi: 10.1016/j.compstruct.2014.11.010.
- [33] A. KARA, A. TASDEMIRCI and M. GUDEN, «Modeling quasi-static and high strain rate of deformation and failure behavior of a ( $\pm 45$ ) symmetric E-glass/polyester composite under compressive loading», *Mater Des*, vol. 49, pp. 566-574, 2013, doi: 10.1016/j.matdes.2013.01.002.
- [34] ASTM International, *Standard Test Method for Compressible Properties of Rigid Cellular Plastics - ASTM D1621 - 16*. West Conshohocken: PA: ASTM, 2016.
- [35] M. R. NURUL FAZITA, H. P. S. ABDUL KHALI, A. NOR AMIRA IZZATI and SAMUL RIZAL, «Effects of strain rate on failure mechanism and energy absorption in polymer composites», *Failure Analysis in Biocomposites, Fibre-Reinforced and Hybrid Composites*, pp. 51-78, 2019.
- [36] YAN-JIE WANG, YANG HE, SI YU ZHENG, ZIYANG XU, JIA LI, YIPING ZHAO, LI CHEN and WENGUANG LIU, «Polymer Pressure-Sensitive Adhesive with A Temperature-Insensitive Loss Factor Operating Under Water and Oil», *Advanced Functional Materials*, vol. 31, issue 48, 2021.
- [37] F. P. BEER and E. R. JOHNSTON JR., «Mecánica de materiales», *McGraw Hill*, Ed. 5, Cap. 11, pp. 670-676, 2009.
- [38] AURÉLIEN GÉRON, «Hands-on Machine Learning with Scikit-Learn, Keras & TensorFlow. Concepts, Tools, and Techniques to Build Intelligent Systems», *O'Reilly*, Ed. 2, June 2019.
- [39] DAVID E. RUMELHART, GEOFFREY E. HILTON and RONALD J. WILLIAMS, «Learning representations by back-propagating errors», *Nature*, pp. 533-536, 1986, doi:10.1038/323533a0
- [40] JOHN DUCHI, ELAD HAZAN and YORAM SINGER, «Adaptive Subgradient Methods for Online Learning and Stochastic Optimization», *Journal of Machine Learning Research*, vol. 12, pp. 2121-2159, 2011.
- [41] DIEDERIK P. KINGMA and JIMMY LEI-BA, «ADAM: A Method for Stochastic Optimization», *ICLR*, 2015.

- [42] A. E. RODRÍGUEZ-SÁNCHEZ «Impementación de TensorFlow y Keras en el modelado de materiales. Modelado de respuesta mecánica de materiales por Redes Neuronales Artificiales», pp. 28, 2021.
- [43] M. MHAPANKAR «Wheight reduction technologies in the automotive industry», *ARANC*, pp. 1-12, 2020.