





A Comparative Between Artificial Neural Networks and Multiple Linear Regression for the Estimation of Mechanical Properties in Cast Aluminum

Diana Guadalupe Molina-Bermúdez , José Antonio Vázquez López , Juan Israel Yañez Vargas , and Claudia Alejandra Gallegos Sánchez 

Abstract—Metallic materials are composed of elements with defined chemical composition, and their intrinsic atomic arrangement confers them a distinctive crystalline structure. Thus, it is relevant to study of metallic materials, specifically cast aluminum alloys, whose physical and mechanical properties depend inherently on their chemical composition. Regarding the importance of mechanical properties, such as hardness, elastic modulus and ultimate tensile strength in optimizing industrial performance, it becomes essential to employ robust methods for their estimation. This study examines the computational estimation of mechanical properties from the chemical composition of various cast aluminum alloys. Two estimation modeling approaches were employed: Artificial Neural Networks (ANNs) and Multiple Linear Regression (MLR). Model performance was evaluated using three statistical metrics: Mean Absolute Error (MAE), which measures the average magnitude of errors; Root Mean Square Error (RMSE), which emphasizes larger error; and Mean Absolute Percentage Error (MAPE), which evaluates the percentage error relative to observed values. The results revealed that the ANN model exhibited superior estimation accuracy across all metrics when compared to the MLR approach. Specifically, the ANN model achieved lower values of MAE and RMSE, indicating more precise estimations and a significantly reduced MAPE, demonstrating improved reliability in estimating mechanical properties. These findings underscore the potential of ANNs as a more effective tool for estimating the mechanical performance of cast aluminum alloys based on their chemical composition. Additionally, the estimation capacity of both models was externally validated using experimental data reported in the literature, enhancing the reliability of the findings.

Link to graphical and video abstracts, and to code:
<https://latam.ieceer9.org/index.php/transactions/article/view/9682>

Index Terms—Artificial neural networks, chemical composition, mechanical properties, multiple linear regression.

I. INTRODUCCIÓN

LOS materiales metálicos tienen una aplicabilidad industrial muy amplia, debido a las propiedades mecánicas

The associate editor coordinating the review of this manuscript and approving it for publication was Ruth Aguilar (*Corresponding author: Diana Guadalupe Molina-Bermúdez*).

Diana Guadalupe Molina-Bermúdez, and J. A. V. López are with the Tecnológico Nacional de México in Celaya, Guanajuato, México (e-mails: d2103024@itcelaya.edu.mx, and antonio.vazquez@itcelaya.edu.mx).

J. I. Y. Vargas is with Universidad Politécnica de Juventino Rosas in Santa Cruz de Juventino Rosas, Guanajuato, México (e-mail: jyanez@upjr.edu.mx).

C. A. G. Sánchez is with the Comisión Nacional del Agua in Celaya, Guanajuato, México (e-mail: d1903020@itcelaya.edu.mx).

que presentan, las cuales, dependen en gran medida de su composición química. Los retos a los que se enfrenta actualmente la manufactura de materiales metálicos, radican en la obtención de productos con características específicas. Se busca por ejemplo una mayor resistencia mecánica, mayor ductilidad y tenacidad, por mencionar algunas. Por lo que, se considera relevante determinar cuáles son las propiedades mecánicas que presentará un material metálico, debidas a la composición química de éste.

Las aplicaciones de los materiales metálicos son varias, por lo que, se puede resaltar la importancia que tiene la fundición de aleaciones de aluminio en la industria del transporte, donde, el proceso de reciclar aluminio se ha comprobado que resulta ser una práctica sustentable [1], [2]. La evaluación de las propiedades mecánicas de las aleaciones de aluminio, como pueden ser la dureza, el módulo elástico y la resistencia a la tracción, es imperante para tener un buen control de calidad. De esta manera, contar con métodos simples y rápidos que permitan conocer estas propiedades es de gran interés para el ámbito productivo.

Ante esta perspectiva, se considera idóneo realizar la predicción de las propiedades mecánicas de aleaciones de aluminio fundido. La eficiencia de la combinación entre Redes Neuronales Artificiales (RNAs), sistemas difusos y ciencia de los datos en el área de materiales para la predicción de propiedades mecánicas, está comprobada en la bibliografía consultada. Los trabajos de investigación que se han realizado han detectado una necesidad de desarrollo de nuevas técnicas para la selección de materiales [3]–[5].

La aplicación de una Red Neuronal Artificial (RNA) para el aprendizaje automático se presenta en [6]. Los autores de dicha investigación describen un sistema experto para la identificación de fallas en tuberías en tierra. El procedimiento utilizado para la adquisición de conocimiento y el desarrollo de una base de datos de fallas en tuberías, se describe en esta publicación. Se logra entrenar a una RNA que arrojó resultados positivos comparada con los resultados obtenidos a partir de la experiencia de los expertos.

En referencia a las aleaciones de aluminio fundido, los estudios han priorizado el incremento de la resistencia de estos materiales mediante la aplicación de tratamientos térmicos. En el trabajo presentado en [7] se estimaron la dureza y la resistencia a la flexión a partir de datos experimentales previos, utilizando diferentes algoritmos de aprendizaje automático. Los resultados indican que las propiedades de las aleaciones de

aluminio pueden determinarse con éxito mediante Inteligencia Artificial (IA).

La integración de técnicas de (IA) ha sido ampliamente abordada en la literatura [8], con especial énfasis en el análisis de métodos computacionales innovadores orientados a la selección óptima de materiales para productos manufacturados bajo el contexto de la Industria 4.0. Este enfoque incluye desarrollos tecnológicos que permiten la reducción eficiente de grandes volúmenes de datos, facilitando así la toma de decisiones informadas durante los procesos de diseño y fabricación. Además, el análisis considera variables críticas como el comportamiento de los materiales involucrados, las condiciones operativas de los equipos y las características específicas de sus componentes, lo que contribuye a una comprensión integral del entorno industrial.

Los autores mencionados anteriormente ejecutaron trabajos en los que aplicaron RNAs en combinación con técnicas de Big Data para estimar de forma aceptable los principales parámetros que caracterizan la curva de tensión-deformación de aleaciones de aluminio [9]. Estas estimaciones se fundamentan en el conocimiento previo de la composición química y los tratamientos aplicados a los materiales analizados, considerados como variables de entrada. Gracias a esta integración metodológica, se logra una caracterización más eficiente y adaptativa del comportamiento mecánico de las aleaciones, lo que representa un avance significativo en los enfoques predictivos de la ingeniería de materiales.

La Ciencia de Datos, por otra parte, se considera como una continuación de diversos campos de análisis de datos. Entre las herramientas que se tienen, se puede mencionar a la estadística, la minería de datos, el aprendizaje automático y el análisis predictivo. El modelado de un conjunto de datos, además del diseño y utilización de algoritmos para almacenar, procesar y visualizar de manera eficiente la información se puede lograr con el uso de dichas herramientas.

De acuerdo con la información anterior, la investigación de D. Merayo [10], se considera importante, debido a que se desarrolla una herramienta asistida por computadora para predecir propiedades físicas y mecánicas relevantes que intervienen en las tareas de selección de materiales metálicos. El sistema se basa en el uso de RNAs respaldadas por la recopilación de datos masivos de información. Los datos contienen a características tecnológicas de miles de materiales. El valor agregado de su metodología consiste en el uso de técnicas de IA para estimar algunas propiedades importantes. Se optimiza la selección de materiales metálicos en aplicaciones de ingeniería. Concluyen que las RNAs han demostrado ser una herramienta adecuada para la estimación de propiedades físicas. Por lo tanto, pueden emplearse para describir el comportamiento elasto-plástico de materiales industriales.

La investigación [11] analiza el comportamiento termomecánico de un acero microaleado de medio carbono mediante una RNA. El modelo de RNA propuesto, comprueba que es capaz de predecir con exactitud y eficiencia el comportamiento de fluencia en caliente del acero estudiado. Los autores concluyen que existe una buena relación entre los resultados experimentales y los resultados de la RNA.

El presente trabajo compara la precisión de dos enfoques

para estimar la dureza, el módulo elástico y la resistencia a la tracción de aleaciones de aluminio fundido. Para esto, se implementan RNAs y Regresión Lineal Múltiple (RLM), considerando como variables de entrada la composición química de las aleaciones. La efectividad de cada modelo se evaluó mediante el cálculo de la Raíz del Error Cuadrático Medio (*RMSE*), permitiendo determinar cuál de los enfoques ofrece mayor fidelidad en la estimación de las propiedades mecánicas.

Para mejorar la capacidad de estimación de los modelos presentados en este trabajo, es fundamental validar sus resultados frente a datos experimentales que han sido publicados previamente. La validación permite evaluar la robustez de los modelos, asegurando que sus estimaciones sean coherentes con las tendencias observadas en estudios anteriores. Por lo que, el uso de información de aleaciones documentadas en la literatura proporciona un marco de comparación que fortalece la confiabilidad y aplicabilidad del enfoque propuesto.

Uno de los trabajos utilizados para la validación, es el que presentan [12], donde analizan la caracterización de la estructura y propiedades de aleaciones de AlCuMg. Muestran el impacto del contenido de magnesio y titanio en la resistencia del material, mediante el estudio de la dureza y la resistencia. Este trabajo proporciona una base sólida para la optimización de aleaciones de aluminio en aplicaciones industriales, especialmente en el sector del transporte y la ingeniería estructural.

Por otro lado, en [13] analizan el reciclaje de aleaciones de aluminio y su impacto en la industria del transporte. La aportación principal radica en la comparación entre aleaciones primarias y secundarias, evaluando las propiedades mecánicas y microestructurales de estos materiales. Se presenta un análisis detallado de la composición química, la resistencia a la tracción y la dureza.

El conjunto de datos empleado en la presente investigación representa condiciones reales de manufactura de aleaciones de aluminio fundido. Su selección se basa en la disponibilidad de mediciones confiables y precisas. Además, su representatividad dentro del entorno industrial garantiza que los resultados obtenidos mantengan relevancia técnica y potencial de transferencia hacia procesos productivos.

II. METODOLOGÍA

La metodología experimental ilustrada en la Fig. 1, se compone de diversas etapas que estructuran el proceso. En cada fase, se recopila, organiza y depura información relevante sobre las aleaciones de aluminio. Posteriormente, los datos fueron procesados mediante dos enfoques distintos para la estimación de propiedades mecánicas.

A. Recolección de los Datos

La primera etapa de la metodología corresponde a la recolección de información. Los datos de entrada se obtuvieron de una biblioteca virtual de materiales, la cual es alimentada con información proporcionada por proveedores y fabricantes a nivel mundial, lo que representa una base sólida para la selección y análisis de materiales [14]. Este repositorio permite consultar y descargar fichas técnicas específicas de diferentes materiales, que incluyen propiedades físicas, químicas, mecánicas y térmicas, por mencionar algunas.

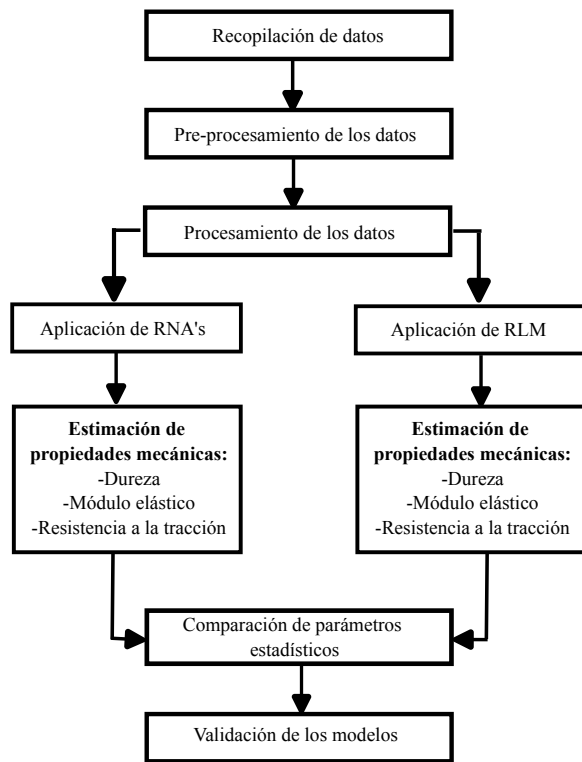


Fig. 1. Esquema general del procedimiento metodológico aplicado en el estudio.

La búsqueda de fichas técnicas dio como resultado una base de datos. La cual, consiste en 290 materiales comerciales de aleaciones de aluminio fundido. Las aleaciones se encuentran estandarizadas por diferentes organismos como American Society for Testing and Materials (ASTM), Society of Automotive Engineers (SAE), International Organization for Standardization (ISO), entre otros.

Las fichas técnicas contienen información de la composición química de los materiales, formada por: Aluminio, Hierro, Silicio, Zinc, Cobre, Magnesio, Manganeso, Níquel, Titanio, Cromo y Estaño. Las propiedades mecánicas a considerar son: dureza, módulo elástico y resistencia a la tracción. Los parámetros de entrada considerados para el modelo de RNAs corresponden a la composición química de las aleaciones de aluminio. Su selección se fundamentó en principios metalúrgicos, ya que la presencia de diferentes elementos aleantes tiene influencia en el desempeño mecánico de las aleaciones correspondientes. Estos elementos han demostrado afectar propiedades como la resistencia, la dureza y la tenacidad.

B. Pre-procesamiento de los Datos

La segunda etapa de la metodología corresponde al pre-procesamiento de los datos, considerado como un paso crítico en el desarrollo y entrenamiento de las RNAs. En esta etapa se garantiza la calidad, consistencia y confiabilidad de los datos para mejorar el rendimiento del modelo. El uso de datos sin procesar puede introducir sesgos o ruidos que pueden afectar de manera negativa a la capacidad de generalización del modelo y su precisión de estimación [15], [16].

El estudio de la información se desarrolla utilizando un conjunto de datos estructurados, caracterizado por un formato tabular para organizar las observaciones, asegurándose una disposición sistémica y uniforme. Dentro del conjunto de datos, las variables empleadas son de naturaleza continua, lo que conlleva que puedan asumir un rango infinito de valores dentro de un intervalo definido. El objetivo del tratamiento de la información es reducir el ruido de los datos originales y con esto, generar estimaciones y modelos más certeros. Los conjuntos de datos formados a partir del pre-procesamiento servirán como información de entrada para alimentar a la RNA.

C. Procesamiento de los Datos

En primera instancia, el procedimiento mediante el cual se logra el aprendizaje de las redes, se denomina entrenamiento, el cual se basa matemáticamente en el problema de descenso de gradiente. El problema de aprendizaje de una RNA es la minimización de la función de error asociada. Dicha función, generalmente consta de dos términos. El primero, evalúa el ajuste de la salida de la red con respecto a los datos disponibles. El segundo término, se utiliza para evitar el sobreajuste. El entrenamiento de la red, se realizó a través del algoritmo Backpropagation, basado en el descenso de gradiente y la regla delta, junto con su implementación numérica [17]. La cantidad de neuronas en la capa oculta se determinó con base en la minimización del MSE, asegurando un balance entre la complejidad y la capacidad de representación del modelo.

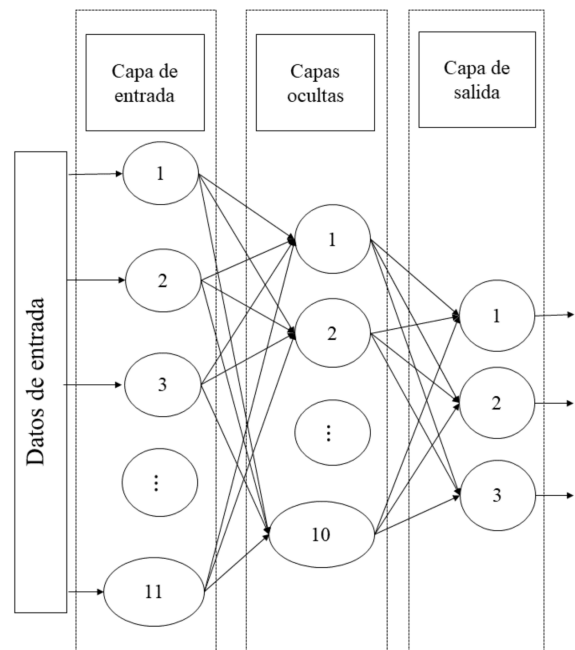


Fig. 2. Estructura de capas y flujo de datos en el modelo de RNA aplicado a la estimación de propiedades mecánicas.

La aplicación de RNAs inicia con la compilación, el entrenamiento y la estimación de las propiedades mecánicas objeto de estudio. Estas se estimaron a partir de la composición

TABLA I
COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LAS ALEACIONES

Aleaciones	Elementos (%)								
	Al	Fe	Si	Cu	Zn	Mg	Ti	V	Cr
AlCu15Mg1 (0%Ti)	84.23	0.15	0.07	14.30	0.080	1.139	0.002	0.004	0.002
AlCu15Mg1 (0.25%Ti)	83.58	0.16	0.06	14.67	0.069	1.067	0.347	0.010	0.002
AlCu15Mg2 (0.25%Ti)	81.90	0.15	0.08	14.97	0.077	2.391	0.289	0.000	0.002
AlCu15Mg3 (0%Ti)	82.53	0.16	0.08	14.40	0.075	2.943	0.348	0.001	0.003
AlCu15Mg3 (0.25%Ti)	81.30	0.20	0.08	14.63	0.076	3.354	0.323	0.010	0.003
AlCu15Mg4 (0.25%Ti)	76.27	0.20	0.11	16.06	0.082	4.967	0.261	0.002	0.005
AlCu15Mg5 (0%Ti)	78.32	0.20	0.10	15.31	0.086	5.897	0.003	0.004	0.005
AlCu15Mg5 (0.25%Ti)	77.15	0.21	0.11	15.44	0.080	5.645	0.342	0.011	0.005

química de los diferentes materiales. Posteriormente, se definió la topología de la red, estableciendo la manera en que se conectan los perceptrones, un aspecto clave para su desempeño y capacidad de aprendizaje. La arquitectura empleada se muestra en la Fig. 2. El procesamiento de los conjuntos de datos se llevó a cabo utilizando el entorno de cómputo MATLAB® en su versión estudiantil.

Los principales parámetros de una red neuronal son el número de capas ocultas, las funciones de activación y el número de neuronas por capa. Los cuales, deben definirse antes de iniciar el entrenamiento. La selección de estos hiperparámetros garantiza estabilidad, precisión y robustez en la estimación de propiedades mecánicas de aleaciones de aluminio fundido.

La propuesta inicial es trabajar con una red neuronal del tipo Perceptrón Multicapa [18], utilizando la función de activación sigmoidea en las capas ocultas y lineal en la capa de salida. Se empleó el algoritmo Levenberg-Marquardt para la optimización, con una tasa de aprendizaje de 0.01, un número máximo de 1000 épocas y un criterio de error mínimo de 10^{-6} como condición de paro. Los datos utilizados se clasifican de manera aleatoria en los siguientes porcentajes: 70% fueron empleados para entrenamiento, 15% para validación y 15% para la estimación.

Como método complementario de estimación, se empleó la RLM, la cual, es una técnica estadística utilizada para analizar la relación entre una variable dependiente y múltiples variables independientes. Esta herramienta permite generar un modelo lineal que describe el comportamiento de la variable de interés con base en la influencia simultánea de distintos predictores. El modelo adoptado se expresa mediante la ecuación (1):

$$Y_i = (\beta_0 + \beta_1 X_{1i} + \beta_2 X_{2i} + \dots + \beta_n X_{ni} + e_i), \quad (1)$$

donde β_0 es la ordenada al origen, β_i representa el efecto promedio que tiene el incremento en una unidad de la variable predictora X_i sobre la variable dependiente Y , manteniéndose constantes el resto de las variables y e_i es la diferencia entre el valor observado y el estimado por el modelo.

Sin embargo, la eficacia de la RLM está condicionada por ciertas restricciones de linealidad. Estas limitaciones pueden reducir la precisión y aplicabilidad de los resultados, especialmente en relaciones complejas o no lineales. Debido a estas limitaciones se compara su desempeño con otras técnicas, como las RNAs.

D. Comparación de Parámetros Estadísticos

El rendimiento del proceso de predicción de las propiedades mecánicas, se calculó utilizando la desviación relativa absoluta. Dicha estimación se aplicó para cada muestra de los subconjuntos de prueba. La información obtenida fue utilizada para calcular diversos estimadores estadísticos que permiten conocer la bondad y corrección de la metodología.

El concepto del error, por su parte, hace referencia a la incertidumbre de la estimación. Se puede calcular la diferencia entre el valor estimado (y_i) y el valor real (f_i), de un conjunto de datos (n). El subíndice i denota a una observación específica [19], [20]. Se calcularon tres métricas estadísticas para evaluar el desempeño de los modelos, las cuales se describen a continuación de manera específica:

Error absoluto medio (MAE – Mean Absolute Error). Utiliza los valores absolutos de los errores en los cálculos, lo que arregla el problema de la cancelación de errores con signos opuestos, se usa la ecuación (2). Calcula el promedio de la magnitud absoluta de todos los valores de los errores.

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - f_i|. \quad (2)$$

Raíz del Error Cuadrático Medio (RMSE – Root Mean Square Error). En estadística se conoce como <desviación estándar de los errores>, la ecuación que se usa se muestra en (3). Este error comparte las ventajas del error cuadrático medio y se utiliza comúnmente en la estimación y análisis de las regresiones para verificar resultados experimentales. Además, presenta la ventaja de tener las mismas unidades que la variable estimada.

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - f_i)^2}. \quad (3)$$

Error Porcentual Absoluto Medio (MAPE – Mean Absolute Percentage Error). Arregla el problema de la compensación de errores y funciona mejor si no hay extremos en los datos, se aprecia en la ecuación (4).

$$MAPE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n 100 \cdot \left| \frac{y_i - f_i}{y_i} \right|. \quad (4)$$

E. Validación de los Modelos

Para evaluar la precisión y aplicabilidad de los modelos de estimación propuestos, se llevó a cabo una validación utilizando información experimental previamente publicada sobre aleaciones de aluminio. Esta etapa permite verificar la concordancia entre las estimaciones computacionales y los datos reales, fortaleciendo la confiabilidad de los enfoques aplicados. El análisis detallado de dicha concordancia proporciona evidencia del potencial de transferencia tecnológica hacia entornos industriales.

En particular, fue considerada la información de las aleaciones AlCuMg [12] y AlSi9Cu3 [13], se emplearon los datos experimentales como entradas para los modelos basados en RNAs y RLM, se generaron las estimaciones correspondientes para las propiedades mecánicas de interés. En la Tabla I se encuentra la composición química de las aleaciones AlCuMg con diferentes concentraciones de magnesio y titanio [12]. Por su parte la Tabla II muestra la composición química de la aleación primaria A226 obtenida de acuerdo a la norma EN 1706, así como también la composición correspondiente a la aleación secundaria, la cual es preparada a partir del reciclaje de chatarra de aluminio [13].

La inclusión de estas aleaciones de AlCuMg y AlSi9Cu3 permite evaluar la capacidad del modelo para capturar las tendencias en materiales con diferentes composiciones. Esta diversidad composicional es clave para analizar si el enfoque propuesto logra identificar tendencias coherentes en la evolución de las propiedades mecánicas, especialmente cuando se modifican elementos de aleación. Además, se podría asegurar su aplicabilidad en estudios que consideren la optimización de propiedades mecánicas en la industria del aluminio.

TABLA II
COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LA ALEACIÓN A226 EN SU
VARIANTE PRIMARIA Y SECUNDARIA

Elementos	Aleaciones	
	Primario A226 (EN 1706)	Secundario A226
Si	8.00 - 11.00 %	9.40%
Cu	2.00 - 4.00 %	2.40%
Mn	0.55 %	0.24%
Zn	1.20%	1.00%
Mg	0.15 - 0.55 %	0.28%
Ni	0.55 %	0.05%
Pb	0.35 %	0.09%
Fe	0.60 - 1.10 %	0.90%
Ti	0.20 %	0.04%
Sn	0.15 %	0.03%
Cr	0.15 %	0.04%
Al	Balance	Balance

III. RESULTADOS

La aplicación de la metodología experimental, ilustrada en la Fig. 1, permitió obtener los siguientes resultados. Se copiaron las fichas técnicas de distintos materiales comerciales de aleaciones de aluminio fundido, las cuales fueron analizadas y caracterizadas conforme a lo descrito en la sección "A. Recolección de los datos". La composición química de cada aleación se utilizó como variable de entrada, mientras que las

propiedades mecánicas representaron las variables de salida de los modelos.

Las 290 aleaciones consideradas en el estudio se clasificaron de acuerdo con su composición base. En total, 54 materiales corresponden a aluminio con una pureza superior al 99%; 54 pertenecen a la aleación aluminio-cobre; 75 son parte de las combinaciones de aluminio con silicio-magnesio; 42 aluminio con zinc y los 8 restantes, constituyen la aleación aluminio-estaño. La estimación de las propiedades mecánicas se llevó a cabo aplicando dos enfoques distintos. Con fines ilustrativos, la información presentada a continuación, corresponde a la aleación aluminio-silicio.

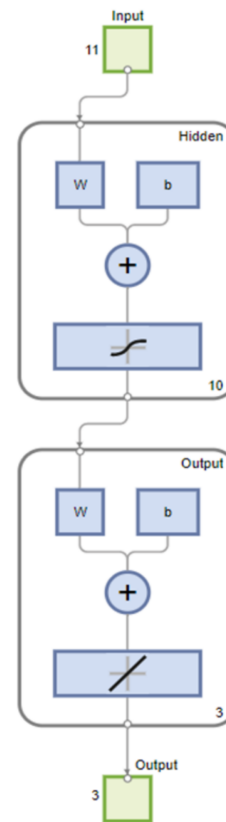


Fig. 3. Configuración estructural de la RNA empleada: entradas, salidas y capas ocultas.

La implementación de RNAs comenzó con una arquitectura compuesta por once señales de entrada, dos capas ocultas con funciones de activación sigmoidea y lineal, y tres señales de salida correspondientes a las propiedades mecánicas. La capa oculta incorpora la función de activación sigmoidea, elegida por su capacidad para introducir no linealidad y mejorar la representación del modelo. Para la minimización del error, se empleó el algoritmo Levenberg-Marquardt, el cual combina las ventajas del método de Gauss-Newton y el descenso por gradiente. Esta combinación optimizó el entrenamiento, reduciendo el MSE y asegurando un modelo robusto con una adecuada capacidad de generalización. La Fig. 3 presenta dicho arreglo de red.

El número de neuronas en la capa oculta se determinó mediante un análisis basado en el valor del rendimiento del modelo,

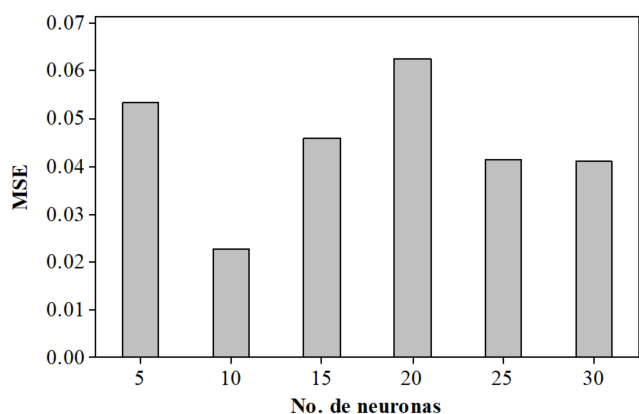


Fig. 4. Comparación de valores de MSE en función del número de neuronas en la capa oculta.

con respecto al MSE y $RMSE$. En el proceso de ajuste se probaron seis configuraciones con diferentes cantidades de neuronas. Se comparó su impacto en el desempeño del modelo como puede apreciarse en la Fig. 4 y Fig. 5.

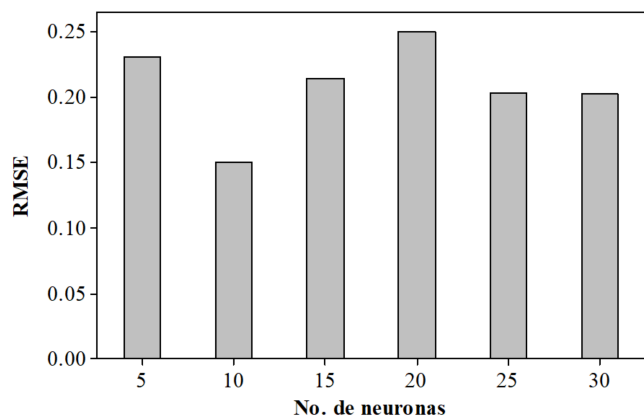


Fig. 5. Comparación de valores de $RMSE$ en función del número de neuronas en la capa oculta.

A partir del análisis comparativo de las gráficas mostradas en la Fig. 4 y Fig. 5, se determinó que la configuración con 10 neuronas en la capa oculta proporciona un equilibrio adecuado entre capacidad representativa y generalización. Esta elección se fundamenta en la observación de los valores mínimos obtenidos tanto de MSE como de $RMSE$. Además, la configuración seleccionada indica que el modelo logra una adecuada capacidad de estimación de los datos sin incurrir en un sobreajuste.

En referencia a la aplicación del método de RLM, para la estimación de las propiedades mecánicas, se obtuvieron las ecuaciones mostradas en (5), (6) y (7).

Dureza:

$$y = -1853.72 + 19.06x_1 + 43.63x_2 + 18.68x_3 - 73.22x_4 + 50.07x_5 + 34.91x_6 + 53.26x_7 - 40.92x_9. \quad (5)$$

Modulo elástico:

$$y = -335.64 + 4.18x_1 + 43.92x_2 + 4.10x_3 - 10.77x_4 + 13.27x_5 + 0.79x_6 + 0.0045x_7 - 22.92x_9. \quad (6)$$

Resistencia a la tracción:

$$y = -6768.16 + 69.29x_1 + 232.18x_2 + 70.70x_3 - 228.34x_4 + 215.04x_5 + 157.30x_6 + 92.50x_7 - 384.52x_9, \quad (7)$$

donde $x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7$ y x_9 representan a cada uno de los elementos de la composición química de la aleación aluminio-silicio: Al, Fe, Si, Zn, Cu, Mg, Mn y Ti, respectivamente.

La Tabla III contiene los valores esperados y obtenidos a partir de la aplicación de los dos métodos. Los resultados de estimación de las RNAs y la RLM dan pauta para la construcción de las gráficas mostradas en las Figs. 6, 7 y 8, respectivamente.

TABLA III
COMPARACIÓN DE VALORES ESPERADOS Y VALORES DE ESTIMADOS

Muestra	Valor esperado	Valor de RNAs	Valor de regresión
Dureza (HB)			
1	40	46.3079	39.7770
2	50	85.0798	67.7655
3	85	85.0798	67.7655
⋮	⋮	⋮	⋮
28	60	73.9739	61.6260
Módulo elástico (GPa)			
1	71	71.5719	70.1970
2	71	71.0275	70.6427
3	71	71.0275	70.6427
⋮	⋮	⋮	⋮
28	71	70.5841	70.5904
Resistencia a la tracción (MPa)			
1	115	168.0720	116.3755
2	140	258.0850	197.1035
3	240	258.0580	197.1035
⋮	⋮	⋮	⋮
28	240	242.3239	245.2015

Los valores mostrados en la Tabla III corresponden a la aleación aluminio-silicio. El grupo perteneciente a dicha aleación contiene 28 muestras, y el comportamiento de los valores esperados y estimados son similares. Por lo que, se tomó la decisión de omitir algunos valores por cuestiones de visualización.

Las Figs. 6, 7 y 8 muestran el comportamiento de los valores esperados de las propiedades mecánicas y sus valores de estimación por RNAs y RLM. El comportamiento que más se asemeja a los valores esperados, es el modelo predictivo que resulta de la aplicación de RNAs. Dicho análisis visual puede apreciarse con las tres propiedades mecánicas.

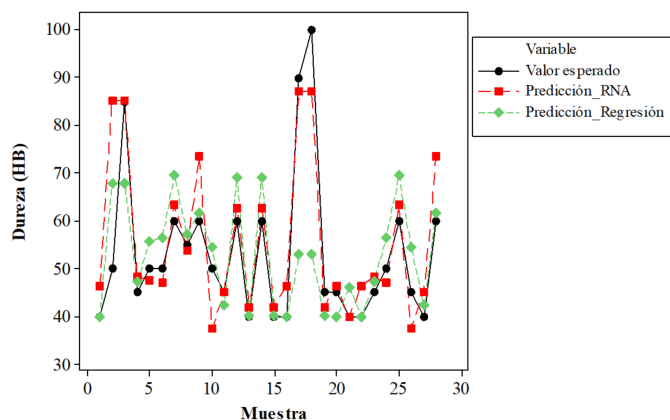


Fig. 6. Comparación entre valores esperados de dureza y estimaciones obtenidas mediante modelos de RNAs y RLM.

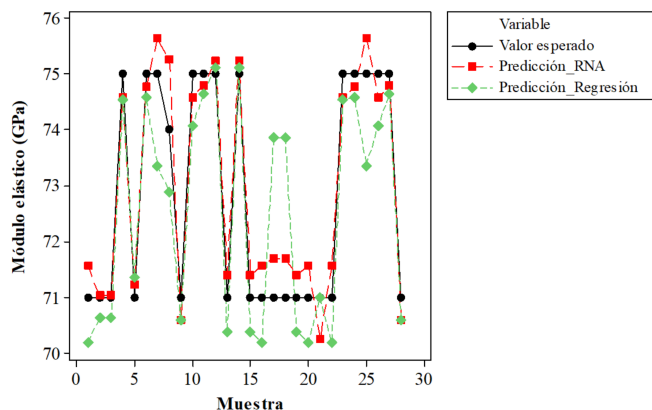


Fig. 7. Comparación entre valores esperados de módulo elástico y estimaciones obtenidas mediante modelos de RNAs y RLM.

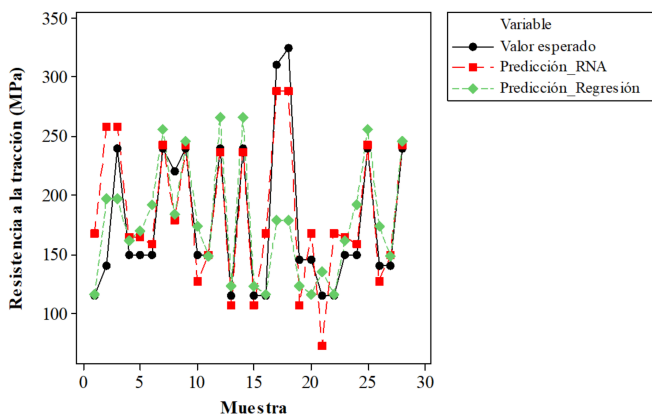


Fig. 8. Comparación entre valores esperados de resistencia a la tracción y estimaciones obtenidas mediante modelos de RNAs y RLM.

El análisis comparativo de las métricas estadísticas MAE , $RMSE$ y $MAPE$ evidencia que el modelo de estimación basado en RNAs presenta un desempeño superior en la estimación de las propiedades mecánicas basado en la Tabla

IV. La reducción que se aprecia en MAE indica una menor desviación absoluta entre los valores reales y estimados, lo que refleja una mayor precisión en las estimaciones generadas por la RNA. De manera complementaria, el $RMSE$ muestra una disminución en la magnitud de los errores, lo que sugiere una mayor estabilidad en la modelización y una menor sensibilidad a valores atípicos. Así mismo, la mejora en $MAPE$ confirma una reducción del error relativo porcentual, facilitando una interpretación cuantitativa más fiable en la precisión del modelo.

TABLA IV
EVALUACIÓN DE MÉTRICAS ESTADÍSTICAS

Propiedad	Modelo	MAE	$RMSE$	$MAPE$
Dureza	RNAs	5.6872	8.9420	9.8403
	RLM	7.8965	13.1937	14.0697
Módulo elástico	RNAs	0.4412	0.5068	0.6048
	RLM	0.7741	1.0394	1.0650
Resistencia a la tracción	RNAs	22.7323	33.6462	13.9930
	RLM	28.3754	44.1303	15.9060

Los resultados que se generaron a partir de los modelos de RNAs y RLM muestran niveles de precisión aceptables en la estimación de las propiedades mecánicas de las aleaciones de aluminio. Sin embargo, para establecer la robustez y aplicabilidad del enfoque de los modelos de estimación, se ha llevado a cabo una validación mediante la comparación con datos experimentales previamente reportados en la literatura. La incorporación de dichos datos permite evaluar la capacidad de generalización de los modelos más allá de las muestras analizadas en el trabajo, con lo que se puede verificar su consistencia con estudios publicados.

TABLA V
COMPARACIÓN DE VALORES PUBLICADOS Y VALORES ESTIMADOS DE LA ALEACIÓN ALCUMG

Aleación	Valor publicado	Valor de RNAs	Valor de regresión
Dureza (HB)			
AlCu15Mg1 (0%Ti)	146	116.3	509.3
AlCu15Mg1(0.25%Ti)	148	157.7	499.9
AlCu15Mg2(0.25%Ti)	153	161.5	530.8
AlCu15Mg3 (0%Ti)	155	167.7	531.7
AlCu15Mg3(0.25%Ti)	159	167.6	536.9
AlCu15Mg4(0.25%Ti)	160	187.6	571.6
AlCu15Mg5 (0%Ti)	161	189.6	615.6
AlCu15Mg5(0.25%Ti)	167	200.6	578.2
Resistencia a la tracción (MPa)			
AlCu15Mg1 (0%Ti)	264.8	226.0	2343.1
AlCu15Mg1(0.25%Ti)	274.6	299.0	2237.7
AlCu15Mg2(0.25%Ti)	283.3	279.1	2413.7
AlCu15Mg3 (0%Ti)	302.2	330.6	2401.7
AlCu15Mg3(0.25%Ti)	334.1	310.3	2449.2
AlCu15Mg4(0.25%Ti)	369.1	307.9	2686.5
AlCu15Mg5 (0%Ti)	372.7	222.5	2911.2
AlCu15Mg5(0.25%Ti)	379.8	383.5	2692.5

A continuación, se presenta el análisis de los resultados obtenidos con base en la información reportada en la sección "E. Validación de los modelos", en particular se muestran las estimaciones correspondientes a la dureza y la resistencia a la tracción. La Tabla V detalla la comparación de los valores

publicados para la aleación AlCuMg y los valores que resultaron de la aplicación de los modelos de estimación propuestos en este trabajo. La Tabla VII recopila los datos publicados correspondientes a las aleaciones Primary y Secondary A226, además de los valores generados a partir de la aplicación de los modelos de RNAs y RLM.

TABLA VI
COMPARACIÓN DE *RMSE*

Propiedad	Modelo	<i>RMSE</i>
Dureza	RNAs	22.36
	RLM	391.91
Resistencia a la tracción	RNAs	61.05
	RLM	2201.00

Mediante el análisis de métricas de error como el *RMSE*, se ha determinado que el modelo de RNAs mantiene una concordancia significativa con los valores experimentales. Los resultados pueden apreciarse en la Tabla VI y Tabla VIII. Donde se puede observar que los valores estimados por el modelo de RNAs muestran una reducción significativa del error en comparación con el modelo de RLM.

TABLA VII
COMPARACIÓN DE VALORES PUBLICADOS Y ESTIMADOS DE LAS ALEACIONES PRIMARY Y SECONDARY A226

Aleación	Valor publicado	Valor de RNAs	Valor de regresión
Dureza (HB)			
Primary A226	82	86.4	41.3
Secondary A226	98	70.3	59.2
Resistencia a la tracción (MPa)			
Primary A226	275	281.6	284.2
Secondary A226	211	129.9	319.5

Los resultados mostrados en la Tabla VI, específicamente para el modelo de RLM, muestran valores de *RMSE* considerablemente elevados tanto para la dureza como para la resistencia a la tracción. Esto puede atribuirse a la variabilidad de los datos experimentales utilizados, los cuales difieren significativamente del conjunto de entrenamiento. Por lo que, el proceso de validación demuestra la capacidad del modelo para enfrentar escenarios diversos y refuerza su evaluación en condiciones reales.

Esta validación basada en la comparación entre las estimaciones de los modelos y los valores experimentales reportados en la Tabla V y Tabla VII, proporciona un marco riguroso para verificar la precisión del enfoque propuesto. El cálculo complementario de métricas estadísticas (Tabla VI y VIII), refuerza la fiabilidad del enfoque utilizado en este trabajo y destaca su potencial aplicación en estudios futuros sobre diseño y optimización de aleaciones.

IV. CONCLUSIONES

Este estudio analiza el desempeño de las RNAs en la estimación de las propiedades mecánicas de aleaciones de aluminio fundido, comparándolas con la RLM. Los resultados obtenidos demuestran que los modelos basados en RNAs

TABLA VIII
COMPARACIÓN DE *RMSE*

Propiedad	Modelo	<i>RMSE</i>
Dureza	RNAs	19.77
	RLM	38.72
Resistencia a la tracción	RNAs	57.50
	RLM	77.00

presentan una capacidad superior para capturar relaciones no lineales complejas entre la composición química y las propiedades mecánicas, lo que mejora la precisión de las estimaciones. La arquitectura neuronal permite modelar interacciones multivariadas con mayor eficacia que los enfoques lineales tradicionales, proporcionando una herramienta más robusta para la caracterización y optimización de materiales.

La estimación precisa de propiedades mecánicas es crucial para la manufactura y el diseño de materiales. La implementación de RNAs en la estimación de propiedades mecánicas representa un avance significativo en la caracterización de materiales, permitiendo identificar relaciones complejas entre la composición química y el desempeño estructural con mayor precisión que los métodos convencionales. Estos enfoques optimizan los procesos de manufactura industrial al reducir la dependencia de ensayos experimentales, incrementando la eficiencia en el diseño y producción de materiales como aleaciones de aluminio fundido.

Asimismo, el uso de modelos neuronales refuerza la integración de herramientas de IA en el campo de la ingeniería de materiales, lo que promueve el desarrollo de nuevas tecnologías y soluciones innovadoras para aplicaciones industriales avanzadas. La capacidad de este tipo de herramientas para modelar dinámicas complejas en materiales las posiciona como una tecnología clave dentro de los sistemas de manufactura avanzada.

Como extensión de esta investigación, se propone el desarrollo de una interfaz automatizada que permita la implementación eficiente del modelo de estimación en entornos de investigación y aplicación industrial. La incorporación de dicha interfaz ayudaría a la integración de nuevos conjuntos de datos experimentales y a la automatización del proceso de estimación, con lo que se podría optimizar la accesibilidad del modelo, además, permitiría la evaluación dinámica de parámetros de entrada y el ajuste adaptativo de la arquitectura de la red neuronal, contribuyendo a la validación continua del modelo. Este enfoque mejorará la reproducibilidad y aplicabilidad del método propuesto, estableciendo un marco metodológico robusto para futuras investigaciones en el campo de la estimación de propiedades mecánicas mediante técnicas de IA.

AGRADECIMIENTOS

Los autores de este trabajo agradecen al apoyo brindado por el Tecnológico Nacional de México en Celaya, a su programa de Doctorado en Ciencias de la Ingeniería y al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías para el desarrollo del proyecto.

REFERENCIAS

- [1] S. Al-Alimi, N. K. Yusuf, A. M. Ghaleb, M. A. Lajis, S. Shamsudin, W. Zhou, Y. M. Altharan, H. S. Abdulwahab, Y. Saif, D. H. Didane, I. S T T and A. Adam, "Recycling aluminium for sustainable development: A review of different processing technologies in green manufacturing", *Results in Engineering*, vol. 23, 2024. doi: 10.1016/j.rineng.2024.102566.
- [2] S. Samberger, P. v. Czarnowski, S. Pogatscher and J. Hirsch, "New strategies to improve recycling and reduce CO₂-emission of Aluminum production and processing", *Journal of light metal welding*, vol. 62, No. 3, pp. 119-132, 2024. doi: 10.11283/jlwa.62.119.
- [3] G. O. Barrionuevo and J. A. Ramos-Grez. "Machine Learning for Optimizing Technological Properties of Wood Composite Filament-Timberfill Fabricated by Fused Deposition Modeling," *Communications in Computer and Information Science*, vol. 1194, pp. 119-132, Mar. 2020, doi: 10.1007/978-3-030-42520-3_10.
- [4] F. J. Pontes, J. R. Ferrerira, M. B. Silva and P. P. Balestrasse, "Artificial neural networks for machining processes Surface roughness modeling," *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, vol. 49, pp. 879-902, Aug. 2010. doi: 10.1007/s00170-009-2456-2.
- [5] S. Sahin, M. R. Tolun and R. Hassanpour, "Hybrid expert systems: A survey of current approaches and applications," *Expert Systems with Applications*, vol. 39, pp. 4609-4617, Mar. 2012. doi: 10.1016/j.eswa.2011.08.130
- [6] V. Castellanos, A. Albitar, P. Hernández and G. Barrera, "Failure analysis expert system for onshore pipelines. Part-I: Structured database and knowledge acquisition," *Expert Systems with Applications*, vol. 38, No. 9, pp. 11085-11090, Sep. 2011. doi: 10.1016/j.eswa.2011.02.153.
- [7] H. Varol Özkavak, M. Ince and E. E. Bicakli, "Prediction of Mechanical Properties of the 2024 Aluminum Alloy by Using Machine Learning Methods," *Arab J Sci Eng*, vol. 48, pp. 2841-2850, Mar. 2023. doi: 10.1007/s13369-022-07009-8.
- [8] D. Merayo, A. Rodríguez-Prieto and A. M. Camacho, "Comparative analysis of artificial intelligence techniques for material selection applied to manufacturing in Industry 4.0," *Procedia Manufacturing*, vol. 41, pp. 42-49, Oct. 2019. doi: 10.1016/j.promfg.2019.07.027.
- [9] D. Merayo, A. Rodríguez-Prieto and A. M. Camacho, "Prediction of the Bilinear Stress-Strain Curve of Aluminum Alloys Using Artificial Intelligence and Big Data," *Metals*, vol. 10, No. 7, pp. 56-84, Jul. 2020. doi: 10.3390/met10070904.
- [10] D. Merayo, A. Rodríguez-Prieto and A. M. Camacho, "Prediction of Physical and Mechanical Properties for Metallic Materials Selection Using Big Data and Artificial Neural Networks," *IEEE Access*, vol. 8, pp. 41-53, 2019, doi: 10.1109/ACCESS.2020.2965769.
- [11] I. Alcelay, E. Peña and A. Al Omar, "Study of the thermo-mechanical behavior of medium carbon microalloyed steel during hot forming process using an artificial neural network," *Revista de Metalurgia*, vol. 52, No. 2, pp. 1-10, 2016, doi: 10.3989/revmetalm.066.
- [12] B. Zlaticanin, B. Radonjic and M. Filipovic, "Characterization of Structure and Properties of As-cast AlCuMg Alloys," *Materials Transactions*, vol. 45, No. 2, pp. 440-446, 2004. doi: 10.2320/matertrans.45.440.
- [13] L. Kuchariková, E. Tillová and O. Bokuvka, "Recycling and properties of recycled aluminium alloys used in the transportation industry," *Transport Problems*, vol. 11, pp. 117-122, 2016. doi: 10.20858/tp.2016.11.2.11.
- [14] M. Bachmayer, Matmatch, Accessed on: Nov. 23, 2022, [Online]. Available: <https://matmatch.com>.
- [15] S. García, S. Ramírez-Gallego, J. Luengo, J. M. Benítez and F. Herrera, "Big Data preprocessing: methods and prospects," *Big Data Analytics* 1:9, Nov. 2016. doi: 10.1186/s41044-016-0014-0.
- [16] C. L. Hernández G. and J. E. Rodríguez R., "Preprocesamiento de datos estructurados," *Rev. Vínculos*, vol. 4, pp. 27-48, Jul. 2013. doi: 10.14483/2322939X.4123.
- [17] M. T. Hagan and M. B. Menhaj, "Training Feedforward Networks with the Marquardt Algorithm," *IEEE Transactions on Neural Networks*, vol. 5, No. 6, pp. 898-993, 1994. doi: 10.1109/72.329697.
- [18] E. A. Ruelas Santoyo and J. Cruz Salgado. "Statistical Control of Multivariate Processes through the Artificial Neural Network Multi-layer Perceptron and the MEWMA Graphic Analysis," *IEEE Latin America Transactions*, vol. 18, No. 06, pp. 1041-1048, Jun. 2020, doi: 10.1109/TLA.2020.9099681.
- [19] F. Bartolomeu, S. Faria, O. Carvalho, E. Pinto, N. Alves, F. S. Silva and G. Miranda, "Predictive models for physical and mechanical properties of Ti6Al4V produced by Selective Laser Melting," *Materials Science and Engineering: A*, vol. 663, pp. 181-192, Apr. 2016. doi: 10.1016/j.msea.2016.03.113.
- [20] J. Mathew, J. Griffin, M. Alamaniotis, S. Kanarachos and M. E. Fitzpatrick, "Prediction of welding residual stresses using machine learning: Comparison between neural networks and neuro-fuzzy systems," *Applied Soft Computing*, vol. 70, pp. 131-146, Sep. 2018. doi: 10.1016/j.asoc.2018.05.017.



Diana Guadalupe Molina Bermúdez obtained the degree in Biochemical Engineer from the Instituto Tecnológico de Celaya in 2011 and the degree of Master in Industrial Engineering from the Tecnológico Nacional de México (TecNM) in Celaya in 2015. She is currently a doctoral student at the TecNM in Celaya. She main lines of research are related to Optimization and Improvement of Industrial Systems.



José Antonio Vázquez López is a professor-research at Tecnológico Nacional de México (TecNM) in Celaya. Attached to the Industrial Engineering Department. He is a specialist in statistics, quality, productivity, pattern recognition and artificial intelligence. He is a member of the Sistema Nacional de Investigadores (SNI) of CONAHCYT. He has more than 150 national and international publications.



Juan Israel Yañez Vargas is an Engineer in Communications and Electronics and Master in Electrical from the Universidad de Guanajuato, in 2008 and 2011 respectively. He is Doctor of Science from CINVESTAV Guadalajara, in 2016. He is currently a professor of Network and Telecommunications Engineering and Master in Engineering at the Universidad Politécnica de Juventino Rosas. His research interests include image processing, signal processing, data processing, remote sensing and their application with ANN's.



Claudia Alejandra Gallegos Sánchez works at the Comisión Nacional del Agua (CONAGUA) in México, developing statistical projects, geographic information systems and environment. She is Environmental Engineering and a postgraduate degree as a Master in Quality and Productivity Engineering. She is a specialist in the management of Geographic Information Systems, cartography, quality and productivity and artificial intelligence.