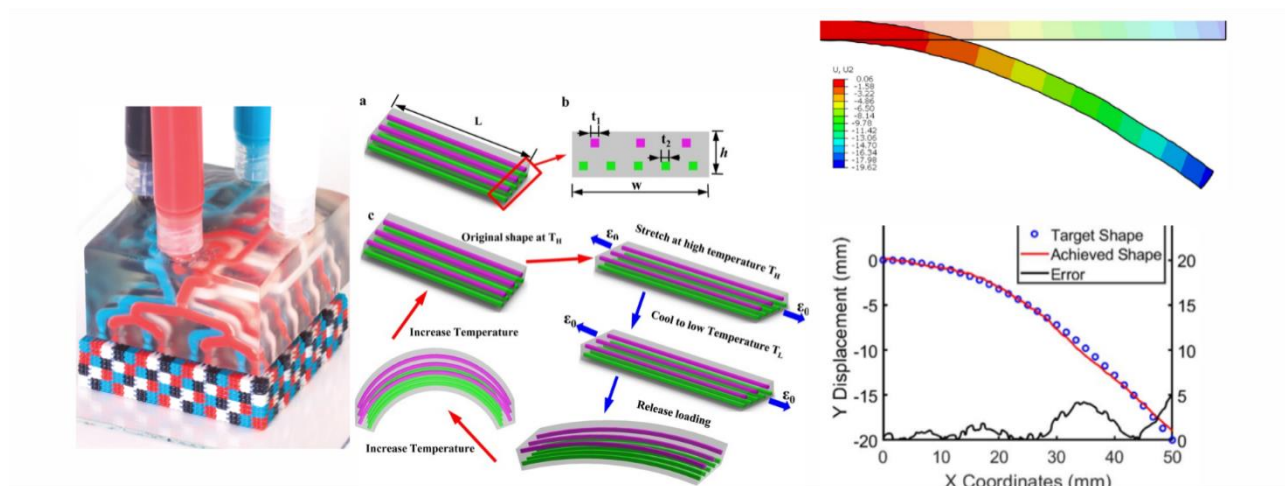


Graphical Abstract



4D printing technology creates digital composites with responsive properties. To optimize their design, models using artificial intelligence and pixel/voxel data are being developed.

PLANEJAMENTO RACIONAL DE COMPÓSITOS DIGITAIS POR IMPRESSÃO 4D

Diego M. G. Kamura^a

^a Departamento de Química Fundamental, Instituto de Química, Universidade Estadual de São Paulo, 05508-900 São Paulo – SP, Brasil

Resumo:

A Indústria 4.0, caracterizada pela integração de tecnologias digitais avançadas no ambiente de produção industrial, apresenta novas ferramentas criativas para o desenvolvimento de materiais. Entre elas, a manufatura aditiva e a inteligência artificial. A combinação dessas duas ferramentas proporcionou aos pesquisadores uma ampla gama de possibilidades no design de materiais mais complexos, com funcionalidades inovadoras. Materiais digitais são uma classe recente de compósitos, onde as estruturas são pixelizadas/voxelizadas, permitindo a construção de materiais híbridos complexos com uma composição estrutural muito bem definida. Esses materiais podem apresentar um comportamento responsivo previsível e ajustável, graças a algoritmos de aprendizado de máquina.

Palavras-chave: material digital; aprendizado de máquina; manufatura aditiva, compósitos responsivos.

*diegokamura@usp.br

RATIONAL DESIGN OF VIRTUAL COMPOSITES IN INDUSTRY 4.0

Industry 4.0, characterized by the integration of advanced digital technologies in the industrial production environment, presents new creative tools for material development. Among them, additive manufacturing and artificial intelligence. The combination of these two tools has provided researchers with a wide range of possibilities in designing more complex materials with innovative functionalities. Digital materials are a recent class of composites, where structures are pixelated/voxelated, allowing for the construction of complex hybrid materials with a very well-defined structural composition. These materials can exhibit predictable and adjustable responsive behavior thanks to machine learning algorithms.

Keywords: digital material; machine learning; additive manufactory, responsive composites.

INTRODUÇÃO

Ao longo de décadas de pesquisa, os materiais compósitos se tornaram elementos vitais em diversas indústrias, impulsionando os processos de design e fabricação em setores que incluem automotivo, aeroespacial, construção, dispositivos vestíveis e estruturas responsivas.¹ Projetar as características dos compósitos para atender a um alvo específico é a vantagem mais importante.² A essência dos compósitos reside no fato de que dois ou mais materiais base podem ser combinados em arquiteturas específicas para criar um novo material com propriedades distintas e mensuráveis.³ Essas características de desempenho personalizadas superam as dos materiais convencionais como metais, cerâmicas ou polímeros isolados, bem como funcionalidades únicas, como resposta dinâmica a estímulos externos e morfologia responsiva.³ Na medicina, por exemplo, os compósitos de Poliamida-Politetrafluoroetileno (PA-PTFE) são preferíveis as ligas metálicas no tratamento de fratura óssea por fixação interna, devido à proximidade do módulo de resistência do osso, evitando o enfraquecimento ósseo.⁴

Devido à grande possibilidade de mistura de materiais, os compósitos fazem parte de uma classe muito vasta e diversa, sendo possível ser encontrada de forma natural como madeira (matriz de lignina reforçada com fibras celulósicas), osso (matriz mineral reforçada com fibras colágenas), entre outras.⁵ Tipicamente são classificados pelo material que forma a matriz, que é a fase contínua, podendo ser um metal, um polímero ou um cerâmico. Já a fase

dispersa é mais abrangente, podendo ser fibras naturais, nano particulados, outros polímeros etc.

Os métodos tradicionais para descobrir e projetar compósitos costumam ser caros, demorados e dependentes de tentativa e erro. Essas abordagens demandam grande esforço humano, conhecimento específico e, em certa medida, sorte. Como exemplo singular, o projeto de compósitos poliméricos resistentes ao desgaste envolve: Primeiro, a matriz deve ter alta resistência à temperatura e alta resistência coesiva. Para reduzir a adesão e o coeficiente de atrito, lubrificantes internos como politetrafluoretileno e flocos de grafite são frequentemente incorporados. Fibras curtas de aramida, vidro ou carbono são usadas para aumentar a resistência à fluência, a dureza e a resistência à compressão da matriz polimérica, e enchimentos adicionais que aumentam a condutividade térmica também são de grande vantagem. No processo de fabricação, alguns parâmetros-chave, como temperaturas de cura e velocidade de fabricação, que governam a qualidade final dos compósitos, também devem ser analisados.⁵⁻⁷

A correlação entre parâmetros simples e propriedades complexas podem ser descritas por modelos matemáticos derivados de dados experimentais, reduzindo drasticamente o trabalho experimental para o projeto de novos compósitos. Por esse motivo, tornou-se comum o uso de modelo de aprendizado de máquina (ML) de alta capacidade (redes neurais) para interpolar e generalizar todo o espaço de design a partir de um conjunto de dados de amostra rotulado com experimentos ou simulações.⁸ Novas aplicações de ML, capazes de processar grandes volumes de dados, identificar padrões e tomar decisões baseadas em algoritmos,

tornaram-se ferramentas poderosas para engenheiros e pesquisadores que atuam nos campos interdisciplinares da química, engenharia mecânica, ciência dos materiais, engenharia biomédica e manufatura.⁷⁻⁹ Ao utilizar técnicas de ML para avançar na análise de dados e modelagem computacional, o design de materiais compósitos experimentou avanços significativos, resultando em melhorias de desempenho, aumento de eficiência e maior confiabilidade, porém os métodos tradicionais de fabricação limitaram o design de compósitos devido à dificuldade de colar dois ou mais materiais de base com adesão forte.

As técnicas de fabricação de compósitos foram restritas a processos de dispersão ou laminação, nos quais camadas são sobrepostas para formar uma pilha laminada e a resina é aplicada às camadas secas após a laminação estar completa, limitando a complexidade das estruturas de compósitos fabricadas. No entanto, com os avanços da fabricação aditiva, agora é possível imprimir múltiplos materiais, permitindo a fabricação de compósitos que variam em material e propriedade em três direções espaciais, e com praticamente qualquer geometria e combinações complexas de materiais distintos.¹⁰ Esses novos materiais, chamados de materiais inteligentes (SMPs), compõem a nova geração de compósitos na indústria 4.0, em que a digitalização e a integração de tecnologias avançadas estão transformando os processos de fabricação. Esses materiais são projetados para se adaptar dinamicamente ao ambiente ou estímulos específicos, incorporando propriedades responsivas que podem ser controladas remotamente ou automaticamente.^{11,12}

TECNOLOGIA DE IMPRESSÃO 4D: DESENVOLVIMENTO E PRODUÇÃO DE COMPÓSITOS REPONSIVOS

Modelagem por deposição fundida (FDM)

A tecnologia de Modelagem por Deposição Fundida (FDM) é uma abordagem de impressão 4D acessível e de fácil utilização, que dispensa reações químicas durante o processo.¹² Neste método, ilustrado pela figura 1, filamentos sólidos termoplásticos são aquecidos e derretidos na extremidade de um bico controlado por computador, movendo-se em uma trajetória predefinida. Entre os materiais frequentemente empregados estão polímeros de ácido poliático (PLA), Policaprolactona (PCL), policarbonato, polietileno tereftalato e polifenilsulfóxido.¹³ Misturas de termoplásticos na extrusão formam compósitos, como succinato de polibutileno com PLA que apresentam propriedade de memória de forma e demonstra-se promissor no campo biomédico devido o processo de embolia em um modelo de aneurisma.¹⁴

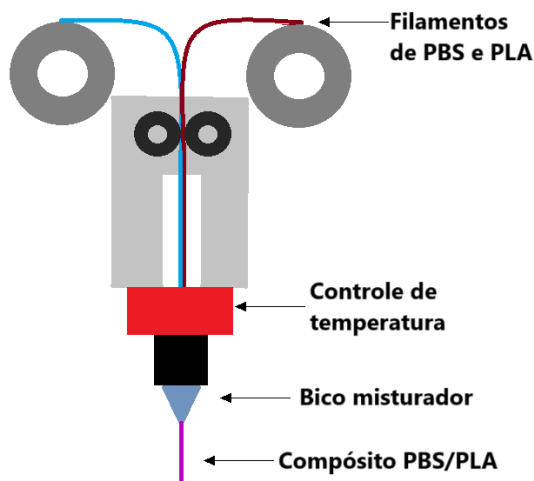


Figura 1. Preparação de filamentos compostos de PBS/PLA e o esquemático da impressão 3D por FDM

Sinterização seletiva a laser (SLS)

A sinterização seletiva a laser (SLS) é uma tecnologia de impressão 4D baseada no processo de fusão em leito de pó. Proposta pela primeira vez por C.R. Dechard em 1989, é uma das tecnologias de AM mais populares. O SLS utiliza dados de modelos 3D para aumentar seletivamente a temperatura de uma área específica no leito de pó usando um laser. Nesse método, ilustrado pela figura 2, um laser é utilizado para aquecer e fundir o material em pó, formando camadas que são sobrepostas até que o objeto esteja completo. Esse processo é mais rápido e permite a criação de peças mais resistentes, mas também é mais caro e requer materiais mais especializados. Compósitos podem ser formados pela mistura de pós de

polímeros com pós de ligas metálicas, como a mistura de neodímio–ferro–boro (NdFeB) e poliuretano (PU) termoplástico, que adquirem propriedade magnética após a SLS.¹⁵

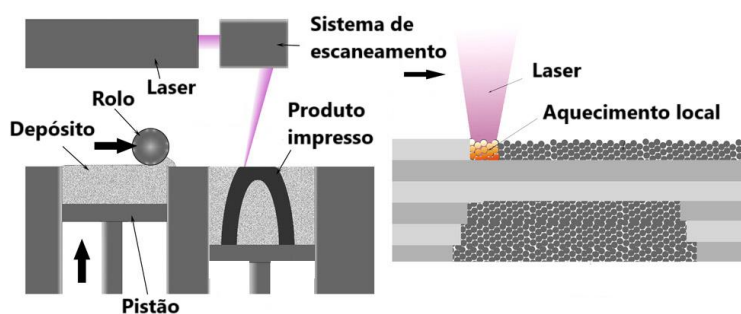


Figura 2. Representação do sistema de sinterização seletiva a laser

Impressão de múltiplos materiais (MM3DP)

Trabalhos recentes demonstram que estruturas digitais formadas por polímeros com diferentes temperaturas de transição vítrea (T_g), apresentam deformação previsível e dependente da temperatura.¹⁵ À medida que a tecnologia de impressão 4D evoluiu, surgiu a prática de combinar múltiplos materiais com sistemas de impressão cada vez mais sofisticados para fabricar estruturas multimateriais em um único processo. Esse avanço permite a criação de compósitos com propriedades únicas, conhecidos como materiais digitais, abrindo novas possibilidades de design e funcionalidade.¹⁶

Uma abordagem comum para a MM3DP envolve a alternância sequencial de bicos para depositar diferentes materiais de impressão. Um desafio significativo no método de alternância de bicos é a taxa lenta de troca de bicos, que prejudica a eficiência de produção.

Para lidar com esse problema, foram desenvolvidos designs de bicos, como bicos de mistura ativa, de canal duplo ou estruturados em núcleo–casca. Recentemente, uma nova abordagem de MM3DP com múltiplos bicos, baseada em extrusão, foi desenvolvida permitindo uma taxa de alternância de materiais de impressão de até 50 Hz. Essa impressora emprega atuadores pneumáticos de alta velocidade para agilizar a troca de materiais, assegurando um controle preciso e evitando qualquer mistura indesejada de tintas.

MATERIAIS DIGITAIS

O conceito de material digital (DM) é empregado para representar compósitos complexos e estruturas em grade de forma pixelada ou voxelizada, geralmente produzidos por meio da impressão 3D. A figura 3 ilustra a correlação entre os conceitos de pixel e voxel. Em estruturas planares 2D, cada pixel, e em estruturas 3D, cada voxel, representa uma grade de um elemento material. A disposição local de diferentes materiais possibilita a obtenção de propriedades materiais extraordinárias nesses compostos. No entanto, a vasta gama de possibilidades de combinação e distribuição de materiais torna a busca por combinações, uma tarefa crucial extremamente desafiadora.^{7,18}

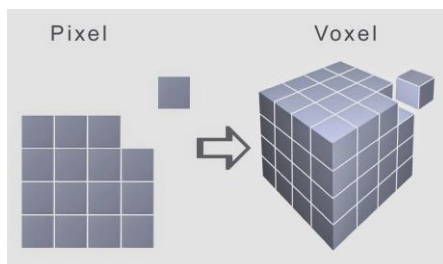


Figura 3. Correlação entre pixel em estruturas 2D e voxel em estruturas 3D

Pesquisadores têm explorado modelos de Inteligência Artificial (IA), onde pixels/voxels são utilizados como características de entrada para otimizar o processo de design de materiais digitais.^{7,16,19,20,24} Diversos modelos, desde regressão linear simples e algoritmos evolutivos até modelos mais complexos de aprendizado profundo em redes neurais, foram aplicados na previsão, otimização e design de propriedades de compósitos de DM, tais como rigidez, resistência e tenacidade.⁷ Abordagens de IA/ML foram empregadas para prever e otimizar compósitos de DM distribuindo seletivamente fases de materiais macios e duros. Diferentes voxels de material são codificados como características de entrada para se adequarem à forma matemática dos modelos. Essa abordagem pode ser estendida para prever a deformação sob várias distribuições de células unitárias, beneficiando o design de atuadores flexíveis.²⁴

INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL NO DESIGN DE MATERIAIS DIGITAIS 4D

A inteligência artificial (IA) é empregada para lidar com tarefas complexas de maneira análoga à forma como os humanos resolvem problemas. A figura 4 demonstra a variedade de métodos dessa área, incluindo machine learning (aprendizado de máquina), deep learning (aprendizado profundo) e ciência e dados. Essas abordagens capacitam os sistemas de IA a aprender e tomar decisões de forma autônoma para realizar tarefas específicas. No machine learning, os modelos de IA são treinados em grandes conjuntos de dados para identificar padrões e fazer previsões ou decisões sem instruções explícitas de programação. A aprendizagem profunda, um subconjunto do aprendizado de máquina, utiliza redes neurais artificiais com múltiplas camadas para processar eficientemente dados complexos. Por outro lado, a ciência de dados baseia-se em programação e com regras tradicionais e requer a definição explícita de um conjunto de regras e condições para os sistemas de IA seguirem. Ao combinar esses métodos diversos, os sistemas de IA podem demonstrar comportamento inteligente e resolver problemas desafiadores.²¹



Figura 4. Relação entre inteligência artificial, aprendizado de máquina e aprendizado profundo

Machine learning (ML)

O aprendizado de máquina (ML) é uma sub área da inteligência artificial (IA) que capacita algoritmos a aprender com dados e experiências anteriores, sem a necessidade de programação explícita. Essa capacidade permite que os algoritmos de ML desenvolvam modelos que se adequem ao conhecimento adquirido dos dados, os quais são posteriormente utilizados para fazer previsões ou tomar decisões. Esses algoritmos destacam-se na identificação de padrões e relacionamentos nos dados, o que lhes permite fazer previsões precisas ou tomar ações apropriadas quando apresentados com novas entradas, previamente não vistas. Essa capacidade de aprender com dados e generalizar para novas instâncias é uma característica chave do aprendizado de máquina, e sua aplicabilidade é vasta em diversos domínios.^{21,22}

Como mencionado na figura 3, os algoritmos de aprendizado de máquina podem ser geralmente classificados em quatro categorias principais: aprendizado supervisionado, aprendizado não supervisionado, aprendizado semi supervisionado e aprendizado por reforço. No aprendizado supervisionado, os algoritmos aprendem a partir de conjuntos de dados categorizados para fazer previsões ou tomar decisões sobre novos dados. As categorias são atribuídas manualmente, por exemplo, em um conjunto de imagens de animais, cada imagem pode ser categorizada com o nome de cada animal, como “cachorro” e “gato”. Essa abordagem é amplamente utilizada em tarefas de regressão e classificação, sendo fundamental na previsão de propriedades de materiais. Por outro lado, no aprendizado não supervisionado, os algoritmos aprendem a identificar padrões nos dados sem a necessidade de dados categorizados prévios, enquanto o aprendizado semi supervisionado combina os dois tipos no processo de treinamento, com um foco maior nos dados não categorizados. Não só isso, o aprendizado por reforço é uma abordagem distinta na qual os algoritmos interagem com ambientes dinâmicos, aprendendo por tentativa e erro para fazer previsões ou tomar decisões. Embora seja menos comum na previsão de propriedades de materiais, o aprendizado por reforço tem aplicações em áreas como robótica e jogos. No contexto da previsão de propriedades de materiais, o foco geralmente recai sobre os modelos de aprendizado supervisionado e não supervisionado, que podem ser adaptados para diversas tarefas, desde a otimização de processos até o desenvolvimento de novos materiais com propriedades específicas. Esses modelos têm impulsionado significativamente o avanço da ciência e da

tecnologia de materiais, permitindo uma abordagem mais ágil e precisa na concepção e na previsão de comportamentos de materiais em ambientes complexos e variáveis.²²

Algoritmo evolutivo (EA)

Os algoritmos evolutivos constituem um método não determinístico que utiliza técnicas biomiméticas baseadas na seleção natural e na evolução para buscar a produção de "indivíduos" cada vez melhores, que correspondem às soluções avaliadas, após cada geração. Além da seleção natural baseada em aptidão, também conhecida como "a sobrevivência do mais apto", conceitos como mutação e cruzamento, bem como populações contendo "pais" e "filhos", são apropriados e adaptados a cada problema. Um EA típico envolve três etapas principais: seleção, mutação e cruzamento. No início do algoritmo, é criada uma população de m soluções candidatas, que são avaliadas com base em um critério de otimização. Cada membro da população é avaliado por meio de uma função de aptidão (F), que representa quão bem o candidato se sai e é comparável a uma função objetivo em métodos de otimização baseados em gradiente tradicionais. Após a avaliação da população inicial, uma nova população é criada selecionando uma parte dos indivíduos com melhor desempenho da população original.²² Este método é especialmente eficaz para encontrar soluções ótimas ou aproximadamente ótimas em espaços de busca complexos ou quando as soluções não podem ser facilmente determinadas por métodos analíticos tradicionais. Ele imita a evolução biológica, permitindo que as soluções evoluam ao longo do tempo para se adaptar melhor às

condições do ambiente de busca. Ao explorar amplamente o espaço de busca e iterativamente melhorar as soluções ao longo de várias gerações, os algoritmos evolutivos demonstram uma capacidade notável de encontrar soluções eficazes para uma ampla gama de problemas de otimização.²³

Em 2019, foi publicada uma proposta de estratégia de design baseada em um algoritmo evolutivo, supervisionado por simulação de elementos finitos, para encontrar a distribuição ótima de um compósito digital constituído por um material termicamente responsivo e um elastômero simples.²² O objetivo do estudo foi atingir uma forma alvo pré determinada colocando os materiais em diferentes locais ao longo da estrutura. As formas pré definidas foram a parabólica e a sinusoidal. Para facilitar os estudos, trabalhou-se com estruturas planares que foram parametrizadas em voxels com dimensões de 0,5 mm x 0,5mm, rotulados com “0” para material passivo e “1” para material responsivo. A estrutura codificada é chamada de genoma. Para a avaliação dos modelos, foram utilizadas simulações de deformações finitas do software ABAQUS, sendo selecionada a expansão térmica para mimetizar o comportamento do material ativo. As mutações foram geradas pelo método de cruzamento de dois pontos bit-flip, que atribui a cada característica no genoma uma probabilidade de ser mutada. Os modelos gerados pelo algoritmo demonstraram que a distribuição das fases ativas não era intuitiva, reforçando a necessidade de um algoritmo para o design desses compósitos.

Em 2023, foi divulgada um avanço no modelo, sendo aplicado para dois compósitos constituídos de um material ativo, um utilizou um cristal líquido elastomérico e o outro um

hidrogel, um material passivo e buracos.²³ Os genomas foram construídos utilizando “0” para buraco, “1” para material passivo e “2” para material ativo. Para as simulações no ABAQUS, os parâmetros de expansão térmica e expansão anisotrópica do cristal líquido foram considerados como os de um material elástico, enquanto o hidrogel é considerado como um material neo-Hookeano incompressível. O estudo demonstrou com sucesso, uma estratégia de design simplificada e com maior variedade de aplicação, em que as formas foram definidas manualmente através de pontos de controle, excluindo a necessidade de formas com fórmulas matemáticas definidas, além de considerar os espaços vazios na estrutura.

CONCLUSÃO

A impressão 4D está permitindo a criação de compósitos da nova geração com estruturas extremamente complexas e capacidades funcionais inovadoras. A nova classe de compósitos, possibilitada pela impressão 4D, são os materiais digitais responsivos, que possuem potencial de aplicação pouco explorado devido, principalmente, pelo vasto número de combinações possíveis, tornando o design desses materiais extremamente dependente de modelos gerados por inteligência artificial. Pesquisa contínua e avanços no framework de IA, algoritmos de ML e abordagens de modelagem híbrida irão aprimorar ainda mais nossa capacidade de projetar e desenvolver compósitos para aplicações cada vez mais específicas.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos docentes do Instituto de Química da Universidade de São Paulo Atualpa Albert Carmo Braga, Denise Freitas Siqueira Petri, e Paulo R. H. Moreno, pela oportunidade e orientação no desenvolvimento do presente artigo.

REFERÊNCIAS

1. Zhang, Z.; Friedrich, k.; *Compos Sci Technol* **2003**, *63*, 2029-2044
2. Choi, W. et al.; *MRS Commun* **2023**, *13*, 714-724
3. Chawla, K. K. *Composite materials: Science and engineering*; Springer Science & Business Media, 2012, cap.1
4. Kumar, P. A.; Irudhayam, J. S.; Naviin, D.; *Int J Eng Res Develop* **2012**, *5*, 40-43
5. Ventura, F.M.; Mafalda, A.; *Ciência & Tecnologia dos Materiais* **2009**, *21*, 10-19
6. Chen, C.T.; Gu, G. X.; *Adv Sci* **2020**, *7*, 1902607
7. Gao, C. et al. *Adv. Funct. Mat.* **2022**, *32*, 2108044
8. Zhang, Z; Gu, G. X.; *Theor Appl Mechan Letters* **2021**, *11*, 100220
9. Xu, H. et al.; *J Mechan Des* **2015**, *137*, 051403
10. Wu, H.; Wang, O.; Tian, Y.; Wang, M.; Su, B.; Yan, C.; Zhou, K.; Shi, Y.; *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2020**, *13*, 12679–12688
11. Gardan, J.; *Virtual Phys Prototyping* **2018**, *14*, 1-18
12. Jiang, Z. et al.; *Adv Sci* **2020**, *7*, 2001379
13. Yan, S. et al.; *Research* **2023**, *6*, 0234

14. Lin, C. et al.; *Comp Struct* **2022**, 279, 114729
15. Benyahia, K. et al.; *Procedia CIRP* **2023**, 119, 396-401
16. Kuang, X. et al.; *ACS Appl Mater. Interfaces* **2018**, 10, 7381-7388
17. Wu, J. et al.; *Sci Rep* **2016**, 6, 24224
18. Sharma, A.; Tripathi, R.; Kumar, R.; *Arch. Comput. Methods Eng* **2022**, 29, 3341-3385
19. Pahlavani, H.; Liu, Z.; Tan, S.; *Commun. Mater.* **2022**, 3, 46
20. Kim, N.; Lee, D.; Hong, Y.; *ACS Mater. Lett.* **2023**, 5, 730-737
21. Kibrete, F.; Trzepieciński, T.; Gebremedhen, H.; Woldemichael, D.; *J. Compos. Sci.* **2023**, 7, 364
22. Hamel, C. M., et al.; *Smart Mater. Struct.* **2019**, 28, 065005
23. Athinarayanarao, D., et al.; *npj Computat. Mater.* **2023**, 9, 1
24. Gu, G. X.; Wettermark, S.; Buehler, M. J.; *Addit. Manuf.* **2017**, 17, 47-54
25. Ramprasad, R.; Batra, R.; Pilania, G.; *npj Comput. Mater.* **2017**, 3, 54