

Optimización de parámetros para electrohilado usando frentes de Pareto

Edelin Posada^{a,*}

^aCentro de Innovación, Investigación y Desarrollo en Ingeniería y Tecnología, FIME, UANL, Monterrey Nuevo León, México

Resumen

Para el presente trabajo se utiliza un modelo de optimización multiobjeto para facilitar la elección de parámetros en la técnica de electrohilado, ya que existe una gran cantidad de estos que influyen en su implementación. Se asume que se trabaja en un sistema ideal de factores ambientales que pudieran afectar y sólo se toma en cuenta parámetros inherentes a la solución de polímero y propios del método de síntesis, eligiendo el voltaje y el diámetro en función de la viscosidad de la solución polimérica. Mediante datos experimentales se obtiene la relación entre los parámetros, su coeficiente de regresión y la ecuación de regresión correspondiente. Se determinan cuales de las soluciones tienen dominancia sobre otras y así se forma el frente de Pareto con las mejores soluciones.

1. Introducción

La nanotecnología se ha vuelto relevante en los últimos años debido a su posible aplicación para la innovación en ciencia y tecnología, esto debido a las propiedades fisicoquímicas que adquieren los materiales a escala nanométrica [1].

El desarrollo de nanofibras se ha incrementado debido a la demanda de nanomateriales [2]. Las nanofibras son un material aplicado en la industria textil, de filtrado, biomédica y otras más [3].

Como todos los procesos experimentales se necesita una optimización o estandarización de los parámetros relacionados a la implementación de la técnica, así en el electrohilado los factores que contribuyen pueden ser relacionados a la solución polimérica, condiciones ambientales, y propias de la técnica.

En este trabajo se opta por el diámetro y el voltaje en función de la viscosidad, que es una propiedad inherente de la solución polimérica

1. Antecedentes

Cuando los materiales tienen un tamaño debajo de la escala micrométrica se ha observado que presentan características que no se obtienen en el material en estado masivo, esto debido a la elevada relación superficie-volumen que en general vuelve al material más reactivo al medio que lo rodea [4].

Una gran cantidad de nanoestructuras han sido desarrolladas debido a las propiedades intrínsecas de materiales a nanoescala, como nanopartículas, liposomas, nanotubos, nanofibras, entre otras.[5].

Algunos autores definen las nanofibras como fibras menores a 100 nm aunque mediante la mayoría de las técnicas conocidas se sabe que se obtienen fibras submicrométricas, que pueden ser consideradas como nanofibras [3]. Su

síntesis ha sido desarrollada principalmente por la técnica de electrohilado.

Entre los métodos de síntesis más conocidos se encuentran el dibujado, el autoensamblaje, la síntesis por plantilla, la separación de fases y el electrohilado, siendo este último ampliamente implementado por ser escalable, genera nanofibras de longitud no limitada, puede sintetizar fibras núcleo-coraza, gran variedad de polímeros se han utilizado y es un método en un solo paso [4].

La técnica de electrohilado consiste en la formación de fibras de polímero utilizando fuerzas eléctricas mediante una diferencia de potencial que va desde un capilar, que es alimentado con el polímero, hasta un colector metálico donde son depositadas las nanofibras[4].

Los parámetros que provienen de la solución polimérica son viscosidad, peso molecular, tensión superficial, etc. Voltaje, distancia entre el capilar y el colector y tasa de flujo del polímero corresponden a factores de la técnica empleada [6]. También intervienen factores ambientales como temperatura, humedad y presión [7]; los cuales no se tomarán en cuenta para el presente trabajo.

2. Trabajos relacionados

Antes ya se ha buscado la optimización de los parámetros involucrados en la técnica de electrohilado mediante diversos modelos [8], [9]. En muchos de ellos se busca un modelo que relacione la mayor parte de los parámetros.

Los parámetros utilizados experimentalmente varían dependiendo el polímero o polímeros utilizados, así

como los solventes en que se encuentran [6], [10]–[12].

Los factores elegidos en la simulación fueron basados en lo reportado en la literatura como voltaje debido a su elevado precio y el peligro que conlleva el trabajar con elevados voltajes. El diámetro es un factor que determina la mayor parte de las propiedades que caracterizan a las nanofibras. Por último, la concentración que es un elemento correspondiente a la solución del polímero y la cual da pauta para gran parte de los parámetros de trabajo utilizados en electrohilado [10], [13]–[15].

3. Modelo propuesto

Se propone utilizar la optimización multiobjeto de funciones objetivo como restricciones en dónde se obtienen las soluciones y se filtran de acuerdo con las condiciones dadas, en dónde el implemento de un parámetro no empeore al otro, estas soluciones pertenecen al llamado frente de Pareto.

Para filtrar aún más la optimización se diversifican en base a la distancia euclidiana que separa cada solución, eliminando las que se encuentren dentro del umbral dado y así obtener un menor número de soluciones posibles.

4. Simulación

La idea de la presente simulación se tomó de la práctica 11 del curso de simulación impartido por la Dra. Eisa Schaeffer [16] y se llevó a cabo mediante el programa RStudio (Version 1.0.153 – © 2009-2017 RStudio, Inc.) con el uso del lenguaje R.

La optimización multiobjeto se implementó con los parámetros de voltaje y diámetro en función de la

viscosidad. Se asume que se trabaja en un sistema ideal en cuanto a los factores ambientales que pudieran afectar.

Se utilizaron datos experimentales de Alipour y colaboradores [17] quienes trabajaron con el polímero polivinil alcohol (PVA) a diferentes viscosidades y voltajes obteniendo distintos diámetros para los sistemas implementados. Los datos se organizaron en un archivo de texto delimitado por comas (.csv) para leerlos mediante el programa de RStudio y obtener las regresiones lineal, exponencial y polinomial entre los parámetros, se determinó la que se ajusta mayormente mediante su coeficiente de regresión (R^2); dónde a mayor coeficiente más se ajusta.

Así se obtuvo del resumen de la regresión elegida los datos para implementar la ecuación correspondiente y así interpolar mediante datos al azar de viscosidad.

5. Evaluación

En la simulación se obtuvo una regresión de tipo polinomial para ambos parámetros con R^2 de 0.98 para el voltaje y 0.99 para el diámetro.

Se obtuvieron los componentes de la ecuación a través del resumen de la regresión. Posteriormente se evaluó las funciones obtenidas con doscientas soluciones obtenidas al azar entre 800 y 4500 centipoises de viscosidad, rango según lo reportado en la literatura [7]. Se graficaron las evaluaciones de las funciones correspondientes al voltaje y al diámetro como se muestra en **Ilustración 1** en dónde se puede observar que la distribución de las soluciones en pequeña.

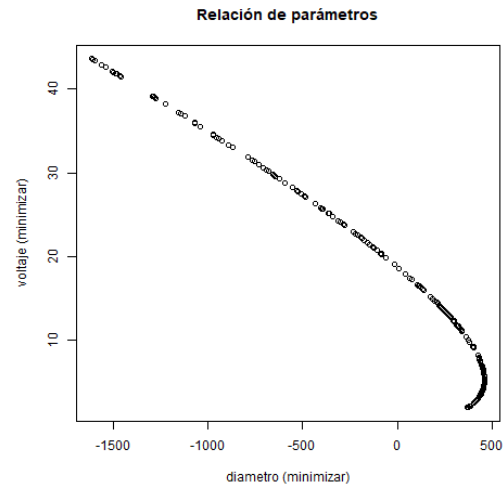


Ilustración 1. Grafica de relación de las funciones evaluadas

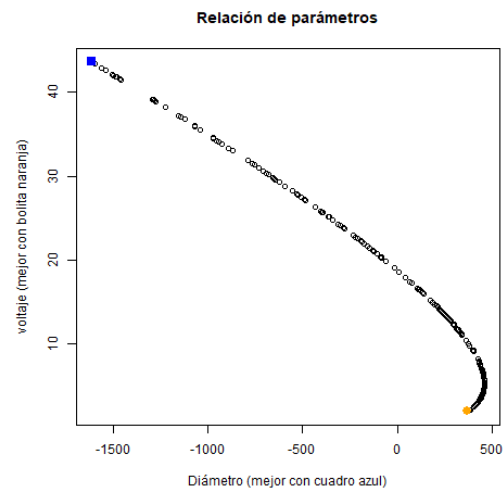


Ilustración 2. Grafica de las funciones evaluadas marcando con un cuadrado azul el mejor punto para el diámetro y con un círculo naranja el mejor para voltaje

Se determinaron los mejores puntos obtenidos para cada función objetivo. En la **Ilustración 2** se observa con un cuadrado azul el mejor punto del diámetro y con un círculo naranja el mejor punto para voltaje.

Para determinar las evaluaciones pertenecientes al frente de Pareto se determinaron cuáles de estas no son dominadas por alguna otra. Se graficó con puntos verdes sobre la gráfica original el frente como se representa en la **Ilustración 3**. Debido a la estrecha

distribución de los puntos evaluados la mayoría de estos pertenecen al frente de Pareto.

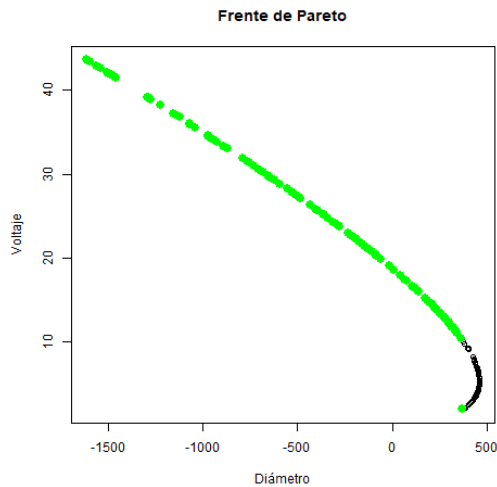


Ilustración 3. Frente de Pareto de las soluciones dominantes

Se buscó diversificar el frente determinando la distancia euclidiana entre soluciones, así mediante una distancia umbral se determina cuales pertenecen al nuevo frente. En la **Ilustración 4** se representa con puntos azules las soluciones correspondientes al frente de Pareto y con puntos rojos las del nuevo frente diversificado, como se puede observar ya que la mayoría de las soluciones pertenecen al frente no es posible realizar la diversificación.

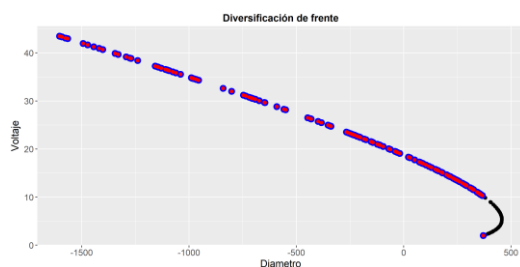


Ilustración 4. Frente de Pareto diversificado. En azul los puntos pertenecientes al frente y en rojo los puntos diversificado

Como se corrobora en la gráfica del nuevo frente mostrado en la **Ilustración**

5 dónde los puntos son iguales a los graficados en la **Ilustración 4**.

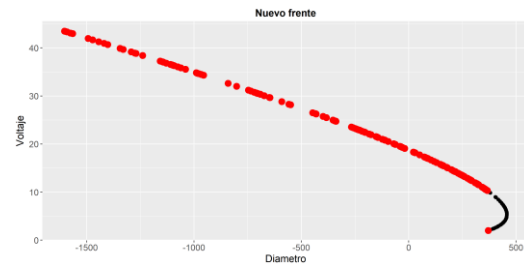


Ilustración 5. Frente de Pareto diversificado.

Para eficientizar la simulación se realizó en paralelo, mediante la herramienta *doparallel* del lenguaje R la elección de la mejor regresión, las evaluaciones de las funciones y la determinación de las soluciones dominantes para realizar el frente.

6. Conclusiones

Se realizó un programa base en dónde al ingresar dos parámetros se determina la mejor regresión entre ellos.

Obteniendo la ecuación de regresión adecuada se pueden elegir las soluciones que no son dominadas por otras y así formar el frente de Pareto.

Para los parámetros de diámetro y voltaje en función de la viscosidad no es posible diversificar el frente de Pareto ya que todas las soluciones pertenecen a dicho frente.

7. Trabajo a futuro

Para complementar el trabajo realizado se propone incluir más parámetros dentro de la simulación, así como comparar los datos obtenidos en la simulación con mayor cantidad de datos experimentales para comprobar la fidelidad de la simulación a datos reales.

Estudiar el efecto de la distribución de las soluciones en la determinación del

frente de Pareto y su posible diversificación.

8. Agradecimiento

El presente trabajo fue realizado durante el curso de simulación computacional de nanoestructuras durante el semestre de agosto a diciembre del año 2017, bajo la supervisión de la Dra. Elisa Schaeffer.

9. Referencias

- [1] A. S. Manmode, D. M. Sakarkar, and N. M. Mahajan, "Nanoparticles-tremendous therapeutic potential: A review," *International Journal of PharmTech Research*. 2009.
- [2] J. Pelipenko, P. Kocbek, and J. Kristl, "Critical attributes of nanofibers: Preparation, drug loading, and tissue regeneration," *Int. J. Pharm.*, vol. 484, no. 1–2, pp. 57–74, 2015.
- [3] P. Kamble, B. Sadarani, A. Majumdar, and S. Bhullar, "Nanofiber based drug delivery systems for skin: A promising therapeutic approach," *J. Drug Deliv. Sci. Technol.*, vol. 41, pp. 124–133, 2017.
- [4] N. Bhardwaj and S. C. Kundu, "Electrospinning: A fascinating fiber fabrication technique," *Biotechnol. Adv.*, vol. 28, no. 3, pp. 325–347, 2010.
- [5] F. E. Meléndez and L. Chávez, "Nanobiomateriales," *Ingenierías*, vol. XIX, no. 70, pp. 55–68, 2016.
- [6] X. Mo, Z. Chen, and H. J. Weber, "Electrospun nanofibers of collagen-chitosan and P(LLA-CL) for tissue engineering," *Front. Mater. Sci. China*, vol. 1, no. 1, pp. 20–23, 2007.
- [7] V. Pillay *et al.*, "A Review of the Effect of Processing Variables on the Fabrication of Electrospun Nanofibers for Drug Delivery Applications," vol. 2013, 2013.
- [8] R. Van Vught, "Simulating the dynamical behaviour of electrospinning processes," pp. 15–16, 2010.
- [9] S. Saehana, F. Iskandar, and M. Abdullah, "Optimization of Electrospinning Parameter by Employing Genetic Algorithm in Order to Produce Desired Nanofiber Diameter," *Int. J. Chem. Nucl. Metall. Mater. Eng.*, vol. 7, no. 1, pp. 78–83, 2013.
- [10] C. Paper, "Understanding the Effect of Electrospinning Distance on the morphology of the PAN nanofibers," no. May 2012, 2014.
- [11] N. Davidenko, M. D. Blanco, C. Peniche, L. Becherán, S. Guerrero, and J. M. Teijón, "Effects of different parameters on the characteristics of Chitosan-Poly(acrylic acid) nanoparticles obtained by the method of coacervation," *J. Appl. Polym. Sci.*, 2009.
- [12] H. Shao, J. Fang, H. Wang, and T. Lin, "Effect of electrospinning parameters and polymer concentrations on mechanical-to-electrical energy conversion of randomly-oriented electrospun poly(vinylidene fluoride) nanofiber mats," *RSC Adv.*, vol. 5, no. 19, pp. 14345–14350, 2015.
- [13] B. da S. Vaz, J. A. V. Costa, and M. G. de Moraes, "Production of polymeric nanofibers with different conditions of the electrospinning process," *Rev. Mater.*, vol. 22, no. 2, pp. 11–15, 2017.
- [14] P. Shard, A. Bhatia, and D. Sharma, "Optimization and effects of physico-chemical parameters on synthesis of chitosan nanoparticles by ionic gelation technique," *Int. J. Drug Deliv.*, 2014.

- [15] C. J. Thompson, G. G. Chase, A. L. Yarin, and D. H. Reneker, "Effects of parameters on nanofiber diameter determined from electrospinning model," *Polymer (Guildf)*, vol. 48, no. 23, pp. 6913–6922, 2007.
- [16] E. Schaeffer, "P11 — R paralelo — Schaeffer." [Online]. Available: <http://elisa.dyndns-web.com/teaching/comp/par/p11.html>. [Accessed: 12-Dec-2017].
- [17] S. M. Alipour, M. Nouri, J. Mokhtari, and S. H. Bahrami, "Electrospinning of poly(vinyl alcohol)-water-soluble quaternized chitosan derivative blend," *Carbohydr. Res.*, vol. 344, no. 18, pp. 2496–2501, 2009.