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.

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

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 parámetros que contribuyen pueden ser relacionados a la solución polimérica, condiciones ambientales, y propias de la técnica.

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

Enfatizar en voltaje, tasa de flujo, distancia entre colector y capilar, y concentración de polímero (viscosidad)

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 la nanoescala, como nanopartículas, liposomas, nanotubos, nanofibras, entre otras.[5].

Las nanofibras son un material aplicado en la industria textil, de filtrado, biomédica y otras más [3].

Entre los métodos de síntesis más conocidos se encuentran el dibujado, el

autoensasmblaje, 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.

Para datos experimentales se ha encontrado que varían dependiendo el polímero o polímeros utilizados, así como los solventes en que se encuentran, nosotros trabajaremos con los datos obtenidos en el trabajo de

En la presente simulación se da por hecho que se trabaja en un sistema ideal en

3. Modelo propuesto

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

4. Simulación

La idea de la presente simulación se tomó de la práctica 11 del curso de simulación impartido por la Dra. Eisa Schaeffer

La optimización multiobjeto se imlementó 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 tomados de Alipour y colaboradores [10] quienes trabajaron con el polímero polivinil alcohol (PVA) a diferentes viscosidades y voltajes obteniendo diferentes diámetros para los distintos sistemas. Los datos se organizaron en un archivo .csv para leerlos en el programa de RStudio y obtener una regresión entre los parámetros

5. Evaluación

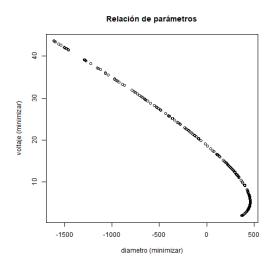


Ilustración 1. Grafica de relación de las funciones evaluadas

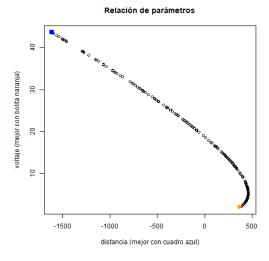


Ilustración 2. Grafica de las funciones evaluadas marcando con un cuadrado azul el mejor punto para el diámetro y con un circulo amarillo el mejor para voltaje

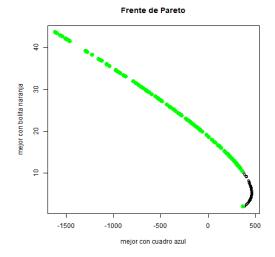


Ilustración 3. Frente de pareto de las soluciones dominantes

6. Conclusiones

7. Trabajo a futuro

Para complementar el trabajo relacionado se propone incluir más parámetros dentro de la simulación así como comparar los datos obtenidos en la simulación con mayor cantidad de datos experimentales.

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, "Nanoparticlestremendous 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 collagenchitosan 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] 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.