

BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA

**“APLICACIÓN DE REDES NEURONALES ARTIFICIALES PARA LA
PREDICCIÓN DEL DIÁMETRO Y MORFOLOGÍA
DE FIBRAS POLIMÉRICAS EMPLEANDO UN INYECTOR SIMPLE”**

**TESIS QUE PARA OBTENER
EL GRADO DE
DOCTORA EN INGENIERÍA QUÍMICA**

PRESENTA:

“GUADALUPE CUAHUIZO HUITZIL”

DIRECTOR(A) DE TESIS

“DRA. VERÓNICA SANTACRUZ VÁZQUEZ”

CODIRECTOR(A) DE TESIS

“DRA. CLAUDIA SANTACRUZ VÁZQUEZ”

BUAP

H. Puebla de Z, Puebla a 3 de junio 2024

AGRADECIMIENTOS

Agradezco a Dios por darme la vida.

A la Dra. Verónica Santacruz Vázquez y Dra. Claudia Santacruz Vázquez por haberme brindado la oportunidad de trabajar en su proyecto de investigación y por el tiempo dedicado durante la realización del proyecto.

Dr. Crescencio Octavio Olivares Xometl y Dra. Paulina Arellanes Lozada por asesorarme en la elaboración de los artículos publicados de este trabajo de investigación.

Dr. Francisco Javier Meléndez Bustamante y Dra. María Eugenia Castro por su tiempo en el envío y edición del primer artículo.

Dra. Nancy Tepale Ochoa y Dr. Jocksan Ismael Morales Camacho por sus observaciones realizadas para mejorar el trabajo de investigación

AGRADECIMIENTOS

Al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías (CONAHCYT) por la beca otorgada para obtener el grado de doctora, y por brindarme esta oportunidad para desarrollarme profesionalmente.

Al Centro Universitario de Vinculación y Transferencia de Tecnología BUAP por el análisis de las imágenes de las fibras electrohiladas mediante microscopía electrónica de barrido parte importante en la elaboración de este proyecto de investigación

A la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla por darme una formación profesional.

ÍNDICE

PRESENTACIÓN	VIII
PRODUCCIÓN ACADÉMICA ASOCIADA A ESTE TRABAJO	X
RESUMEN	XIII
PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	XV
JUSTIFICACIÓN	XVII
HIPÓTESIS	XVIII
OBJETIVO GENERAL	XIX
OBJETIVOS ESPECÍFICOS	XIX
CAPÍTULO 1 REDES NEURONALES ARTIFICIALES	1
1.1. Redes neuronales artificiales (RNA)	1
1.2. Aprendizaje de las RNA	2
1.3. Funciones de activación	4
1.4. Arquitectura de las RNA	6
1.5. Etapas para construir un modelo RNA	10
CAPÍTULO 2 PROCESO DE ELECTROHILADO	17
2.1. Componentes del electrohilado	18
2.2. Propiedades de las fibras electrohiladas	19
2.3. Parámetros que afectan el proceso de electrohilado	19
2.4. Diámetro de las fibras electrohiladas	21
2.5. Porosidad	23
2.6. Dimensión fractal (DF)	26
2.7. Predicción y modelado del electrohilado	29
2.8. Biopolímeros y aceites electrohilados	39
CAPÍTULO 3 MATERIALES Y MÉTODOS	47
3.1. Preparación de soluciones/emulsiones para el electrohilado	47
3.2. Caracterización de las soluciones/emulsiones	48
3.3. Cálculo del diámetro de las fibras electrohiladas	50
3.4. Determinación de la orientación de las fibras electrohiladas por análisis de imágenes	50
3.5. Análisis fractal de la textura de las micrografías de las fibras electrohiladas	51
3.6. Determinación de la porosidad digital (PD) (ϕD) de los velos electrohilados	52
3.7. Pasos para el diseño de la RNA	53
3.8. Identificación de la ecuación de normalización	57
3.9. Identificación de la configuración del modelo RNA	58

3.10. Cálculo de la contribución relativa de las variables de entrada.....	59
3.11. Modelo empírico de predicción porosidad digital (ϕ) y análisis de errores	59
CAPÍTULO 4 RESULTADOS Y DISCUSIONES	61
4.1. Determinación de las propiedades físicas en soluciones/emulsiones poliméricas	61
4.2. Determinar el diámetro y morfología de las fibras poliméricas electrohiladas	64
4.3. Arquitecturas con una capa oculta	86
4.4. Análisis de sensibilidad.....	89
4.5. Arquitecturas con dos capas ocultas.....	91
4.6. Arquitecturas con tres capas ocultas	92
4.7. Dimensión fractal de la superficie de los velos	96
4.8. Porosidad digital (PD).....	107
4.9. Modelo empírico para determinar la PD	112
CONCLUSIONES	117
Anexo A	119
Anexo B	120
Anexo C	124
BIBLIOGRAFÍA	129

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1.1. Neurona biológica.....	1
Figura 1.2. Neurona artificial	2
Figura 1.3. Red neuronal <i>feed forward</i>	7
Figura 1.4. La red de perceptrón multicapa (MLP).....	10
Figura 1.5. Comportamiento del sobreentrenamiento.....	15
Figura 1.6. Método de validación cruzada <i>k -fold</i>	16
Figura 2.1. Diagrama esquemático del proceso de electrohilado.....	18
Figura 2.2. Procesamiento de imágenes (A) y ejemplo del método de conteo de cajas (B) para determinar la dimensión fractal (DF) de la superficie de los velos.....	28
Figura 2.3. Proceso de electrohilado.	29
Figura 2.4. Estructura química del PVA	39
Figura 2.5. Estructura química del QS	40
Figura 2.6. Estructura química básica de la gelatina.....	41
Figura 2.7. Estructura química del α -tocoferol	42
Figura 2.8. Estructura química del ácido oleico.....	43
Figura 2.9. Estructura química del D-limoneno	44
Figura 2.10. Estructura química <i>trans</i> -anetol.....	45
Figura 2.11. Hoja de <i>aloe vera</i>	46
Figura 2.12. Estructura química de la aloína A a) y la aloína B b)	46
Figura 3.1. Estudio morfológico de las fibras electrohiladas	49
Figura 3.2. Etapas para la determinación del diámetro de las fibras.....	50
Figura 3.3. Etapas para la determinación de la orientación de las fibras	51
Figura 3.4. Etapas para la determinación de la DF	51
Figura 3.5. Etapas para la determinación de la PD	52
Figura 3.6. Etapas para el desarrollo del aprendizaje automático.	53
Figura 3.7. Diseño de la RNA en la ventana de comando de Matlab R2018b.....	56
Figura 4.1. Configuración de una sola capa oculta probada	87
Figura 4.2. Importancia de cada variable de entrada en la predicción de diámetro de las fibras electrohiladas.....	91
Figura 4.3. Configuraciones RNA a) 8-12 b)8-16	91
Figura 4.4. Configuraciones RNA a) 8-16-3 b) 8-16-5	93
Figura 4.5. Diámetro de la fibra predicho por la RNA vs. Diámetro de fibra experimental.....	96

Figura 4.6. Esquema de umbralización de las micrografías de los VE	100
Figura 4.7. Capas superficiales velo electrohilado umbral I.....	102
Figura 4.8. Arquitectura de la RNA seleccionada para la predicción de la DF de la superficie de los velos umbral I.....	104
Figura 4.9. Dimensión fractal predicha vs Dimensión fractal experimental empleando los datos del umbral I.....	104
Figura 4.10. Micrografía del PVA 8% p/p con diferentes umbrales.....	107
Figura 4.11. Porosidad digital predicha vs porosidad digital experimental de los VE empleando los datos del umbral III	111
Figura 4.12. Arquitectura de la RNA seleccionada para la predicción de la porosidad digital de los velos empleando el umbral III.....	111
Figura 4.13. Valores predichos y experimentales de PD para VE empleando los datos del Umbral I	114
Figura 4.14. Valores predichos y experimentales de PD para VE empleando los datos del Umbral II	114
Figura 4.15. Valores predichos y experimentales de PD para VE empleando los datos del Umbral III	114

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1.1. Tipos de funciones de activación	5
Tabla 1.2. Arquitectura redes neuronales	8
Tabla 2.1. Variables y parámetros que influyen en el proceso de electrohilado y sus efectos	20
Tabla 2.2. Determinación porosidad por análisis de imágenes	25
Tabla 2.3. Parámetros que han sido alimentos a las RNA para la predicción de propiedades de fibras electrohiladas.....	37
Tabla 2.4. Ácidos grasos en el aceite de oliva.....	44
Tabla 3.1. Formulaciones de las soluciones/emulsiones para el electrohilado.....	48
Tabla 3.2. Configuraciones probadas empleando una, dos y tres capas ocultas en RNA	59
Tabla 4.1. Parámetros de operación y propiedades físicas de las soluciones/emulsiones poliméricas previo al proceso de electrohilado y el diámetro de la fibra electrohilada.....	61
Tabla 4.2. Micrografías de fibras a partir de soluciones de PVA al 8, 10 y 12% p/p	65
Tabla 4.3. Micrografías de fibras de emulsiones de PVA al 10 % y AO 4, 8 y 12% p/p.....	68
Tabla 4.4. Micrografías de fibras de emulsiones de PVA al 10 % y AN 5, 7.5 y 10% p/p.....	72
Tabla 4.5. Micrografías de fibras de emulsiones de GA al 18, 20 y 22 % y AT 5, 7.5 y 10% p/p ..	75
Tabla 4.6. Micrografías de fibras de soluciones de PVA al 10 % y QS 0.5, 1, 1.5 y 2.0% p/p	80
Tabla 4.7. Micrografías de fibras de emulsiones de PVA al 10 % y AA 22% p/p.....	84
Tabla 4.8. Micrografías de fibras de soluciones de PVA al 10 % y AV 55% p/p.....	85
Tabla 4.9. Ecuaciones reportadas para el proceso de normalización	86
Tabla 4.10. Parámetros de electrohilado, influencia en el diámetro de la fibra y morfología.....	89
Tabla 4.11. Valores de R^2 y MSE de las configuraciones probadas empleando una capa oculta en RNA con variables de entrada (flujo, voltaje, viscosidad y conductividad) función activación logsig empleando la ecuación de normalización de Maurya <i>et al.</i> , (2020), Karimi <i>et al.</i> , (2015) y Ciaburro <i>et al.</i> , (2020)	92
Tabla 4.12. Configuraciones probadas empleando dos capas ocultas en RNA con variables de entrada (flujo, voltaje, viscosidad y conductividad)	93
Tabla 4.13. Configuraciones probadas empleando tres capas ocultas en RNA con variables de entrada (flujo, voltaje, viscosidad y conductividad)	94
Tabla 4.14. Configuraciones seleccionadas con cuatro variables de entrada (flujo, voltaje, viscosidad y conductividad)	94
Tabla 4.15. Valores de la DF de las micrografías SEM de las fibras electrohiladas empleando los umbrales I, II y III	97

Tabla 4.16. Configuraciones probadas empleando una capa oculta en RNA con variables de entrada (flujo, voltaje, viscosidad y conductividad) y función de activación logsig para la predicción de la DF de la superficie de los VE. Umbral I	103
Tabla 4.17. Configuraciones probadas empleando una capa oculta en RNA con variables de entrada (flujo, voltaje, viscosidad y conductividad) y función de activación logsig para la predicción de la DF de la superficie de los VE. Umbral II y III	106
Tabla 4.18. Valores de PD de las micrografías SEM de las fibras electrohiladas empleando los umbrales I, II y III	108
Tabla 4.19. Configuraciones probadas empleando una capa ocultas en RNA con variables de entrada (flujo, voltaje, viscosidad y conductividad) y función de activación logsig para la predicción de la PD de la superficie de los VE. Umbral I y II.....	109
Tabla 4.20. Configuraciones probadas empleando una capa ocultas en RNA con variables de entrada (flujo, voltaje, viscosidad y conductividad) y función de activación logsig para la predicción de la PD de la superficie de los VE. Umbral III	110
Tabla 4.21. Datos experimentales a un voltaje de 24 kV, distancia de 0.2 m y corriente eléctrica de 0.001 A, necesarios para alimentar el modelo empírico	113
Tabla 4.22. Criterios estadísticos para obtener la calidad del modelo empírico de ajuste	115

SIMBOLOGÍA

VE = velos electrohilados

PD = porosidad digital (%)

DF = dimensión fractal obtenida por el método de conteo de cajas.

R^2 = coeficiente de correlación

MSE = error cuadrático medio

RSS = suma residual de cuadrados

Pe = porcentaje de error

PD_p = porosidad digital predicha

MEB = microscopia electrónica de barrido

PVA = alcohol polivinílico

QS = quitosano

GA = gelatina tipo A

AT = α -tocoferol

AO = aceite de oliva

AN = Aceite de naranja

AA = aceite de anís

AV = *aloe vera*

PRESENTACIÓN

El objetivo general de este trabajo fue desarrollar una Red Neuronal Artificial (RNA) capaz de predecir el diámetro de las fibras y morfología de los velos electrohilados (VE) usando un inyector simple, que considere como datos de entrada a las condiciones de operación: voltaje, flujo, viscosidad y conductividad de las soluciones poliméricas.

El presente documento se organizó de la siguiente manera:

En el Capítulo 1 –Redes neuronales artificiales– se presenta una breve descripción y características de las RNA.

En el Capítulo 2 –Proceso de electrohilado– se describen las características más relevantes del proceso de electrohilado, también se presenta una descripción de la importancia y aplicaciones de los biopolímeros y aceites esenciales electrohilados, así como las propiedades físicas de porosidad y dimensión fractal (DF) de los velos electrohilados; posteriormente se presenta una breve recopilación de las diferentes metodologías que han sido propuestas para la determinación y predicción del diámetro de las fibras electrohiladas.

En el Capítulo 3 –Materiales y Métodos– se detallan los materiales y métodos empleados para la caracterización de las soluciones/emulsiones electrohiladas, así como las técnicas empleadas para la determinación de las características de las fibras electrohiladas incluyendo el diámetro experimental, la dimensión fractal (DF) y porosidad digital (PD) de los velos electrohilados (VE).

En el Capítulo 4 –Resultados y su discusión– en la primera sección se presenta una discusión sobre el efecto de la composición en las propiedades físicas (conductividad y viscosidad), de las emulsiones de gelatina tipo A (GA)/ α -tocoferol (AT), alcohol polivinílico (PVA)/aceite de oliva (AO), PVA/aceite naranja (AN) y PVA/aceite de anís (AA), así como de las soluciones PVA, PVA/quitosano (QS) y PVA/*aloe vera* (AV). También se presentan los valores del diámetro de las fibras y los descriptores DF y PD que describen la morfología de los VE.

En la segunda sección se muestra la secuencia para el diseño, construcción y validación de la RNA, empleada para predecir el diámetro de las fibras y los indicadores DF y PD de los VE.

Finalmente se reporta una expresión matemática empírica para predecir la PD de VE para soluciones PVA y emulsiones de PVA/AO y PVA/AN.

En el apartado –Conclusiones– se presentan las conclusiones generales del documento.

Anexo A – se muestra el diseño de la RNA en la ventana de comando de Matlab R2018b.

Anexo B – se presentan las combinaciones de variables de entrada empleadas en la predicción del diámetro de las fibras electrohiladas.

Finalmente en Anexo C– se presenta la producción académica asociada a este trabajo.

PRODUCCIÓN ACADÉMICA ASOCIADA A ESTE TRABAJO

Los detalles de las publicaciones y contancias de congresos se encuentran en el apéndice C.

Publicaciones

Se publicaron dos artículos en revistas internacionales indizadas, y cuyos resúmenes se presentan enseguida:

Artificial Neural Networks for Predicting the Diameter of Electrospun Nanofibers Synthesized from Solutions/Emulsions of Biopolymers and Oils

Guadalupe Cuahuizo-Huitzil¹, Octavio Olivares-Xometl¹, María Eugenia Castro², Paulina Arellanes-Lozada¹, Francisco J. Meléndez-Bustamante³, Ivo Humberto Pineda Torres⁴, Claudia Santacruz-Vázquez^{1*} and Verónica Santacruz-Vázquez^{1*}

<https://www.mdpi.com/1996-1944/16/16/5720>

In the present work, different configurations of artificial neural networks (ANNs) were analyzed in order to predict the experimental diameter of nanofibers produced by means of the electrospinning process and employing polyvinyl alcohol (PVA), PVA/chitosan (CS) and PVA/aloe vera (Av) solutions. In addition, gelatin type A (GT)/alpha-tocopherol (α -TOC), PVA/olive oil (OO), PVA/orange essential oil (OEO), and PVA/anise oil (AO) emulsions were used. The experimental diameters of the nanofibers electrospun from the different tested systems were obtained using scanning electron microscopy (SEM) and ranged from 93.52 nm to 352.1 nm. Of the three studied ANNs, the one that displayed the best prediction results was the one with three hidden layers with the flow rate, voltage, viscosity, and conductivity variables. The calculation error between the experimental and calculated diameters was 3.79%. Additionally, the correlation coefficient (R^2) was identified as a function of the ANN configuration, obtaining values of 0.96, 0.98, and 0.98 for one, two, and three hidden layer(s), respectively. It was found that an ANN configuration having more than three hidden layers did not improve the prediction of the experimental diameter of synthesized nanofibers.

Estimation of Digital porosity of Electrospun Veils by Image Analysis

Guadalupe Cuahuizo-Huitzil ¹, Octavio Olivares-Xometl ¹, Paulina Arellanes-Lozada ¹, José Oscar Laguna Cortés ², Janette Arriola Morales ¹, Claudia Santacruz-Vázquez ^{1,*}, Verónica Santacruz-Vázquez ^{1,*}

<https://www.mdpi.com/2073-4360/16/2/300>

The present work reports on an empirical mathematical expression for predicting the digital porosity (DP) of electrospun nanofiber veils, employing emulsions of poly(vinyl alcohol) (PVOH) and olive and orange oils. The electrospun nanofibers were analyzed by scanning electron microscopy (SEM), observing orientation and digital porosity (DP) in the electrospun veils. To determine the DP of the veils, the SEM micrographs were transformed into a binary system, and then the threshold was established, and the nanofiber solid surfaces were emphasized. The relationship between the experimental results and those obtained with the empirical mathematical expression displayed a correlation coefficient (R^2) of 0.97 by employing threshold II. The mathematical expression took into account experimental variables such as the nanofiber humidity and emulsion conductivity prior to electrospinning, in addition to the corresponding operation conditions. The results produced with the proposed expression showed that the prediction of the DP of the electrospun veils was feasible with the considered thresholds.

Capítulo de libro

A review on electrospinning technologies and their potential use in the Biomedical Industry Cuahuizo-Huitzil, Guadalupe†*, Santacruz-Vázquez, Claudia and Santacruz- Vázquez, Verónica. CIERMMI Women in Science Engineering and Technology”, *Handbooks T-XV*, editado por ECORFAN-México, S.C. (2021). Primera edición.

Electrospinning is a technique to obtain new fibrous structures from synthetic or natural polymers for the development of materials used in pharmaceutical and biomedical industries, among others. However, the low production rate of electrospinning has limited industrial application. This review comments on the various electrospinning technologies to increase productivity based on specific examples from the literature.

Congresos

Predicción del diámetro de fibras poliméricas electrohiladas mediante el uso de redes neuronales artificiales en el 1er Congreso de Estudiantes de Posgrado en Ingeniería Química, celebrado los días (17, 18 y 19 de noviembre de 2021) en la ciudad de Puebla, Pue. México.

Predicción del diámetro de fibras electrohiladas empleando redes neuronales artificiales en el congreso XLIII Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química A.C. (AMIDIQ), celebrado los días (23 al 24 de agosto de 2022) en Puerto Vallarta, Jalisco. México.

Determinación de la porosidad y orientación de fibras electrohiladas utilizando análisis de imágenes en el 2do Congreso Internacional de Estudiantes de Posgrado en Ingeniería Química, celebrado los días (9 al 11 de noviembre de 2022) en la ciudad de Puebla, Pue. México.

Efecto del uso de ecuaciones de normalización para modelar la relación entre los parámetros del proceso de electrohilado y el diámetro de las fibras mediante redes neuronales artificiales en el congreso XLIV Encuentro Nacional de la Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química A.C. (AMIDIQ), celebrado los días (30 de mayo al 2 de junio de 2023) en Huatulco, Oaxaca. México.

Determinación de la Dimensión Fractal de Fibras Electrohiladas empleando el Método de Conteo de Cajas en el 3er Congreso Internacional de Estudiantes de Posgrado en Ingeniería Química, celebrado los días (8, 9 y 10 de noviembre de 2023) en la ciudad de Puebla, Pue.

RESUMEN

En el presente trabajo se analizaron diferentes configuraciones de Redes Neuronales Artificiales (RNA) para predecir el diámetro de fibras electrohiladas de las soluciones de PVA, PVA/QS y PVA/AV, emulsiones de GA/AT, PVA/AO, PVA/AN y PVA/AA. El diámetro y orientación de las fibras fueron obtenidos a partir del análisis de imágenes de los VE obtenidos por MEB, empleando el software ImageJ y OrientationJ. Los diámetros de las fibras presentaron valores numéricos que oscilaron entre 93.52 nm y 492 nm y una orientación variable, con ángulos de 0 a 90°.

Para el diseño de la RNA que predice el diámetro de las fibras electrohiladas, se probaron múltiples configuraciones de 1, 2 y 3 capas ocultas con n neuronas. Los datos de entrada o *inputs* alimentados a la RNA fueron los valores numéricos normalizados de voltaje, flujo viscosidad y conductividad de las soluciones/emulsiones. La ecuación de Ciaburro *et al.* (2020) fue seleccionada para normalizar los datos, previo a su alimentación a la RNA.

La RNA que presentó mejores resultados para la predicción del diámetro de las fibras fue la configuración de tres capas ocultas con 8, 16 y 5 neuronas con un $R^2 = 0.98$ y porcentaje de error 3.79 %, con función de activación logsig en sus capas ocultas y lineal en la capa de salida; para mejorar la eficiencia de convergencia mediante el ajuste de los pesos de la RNA y para la etapa de entrenamiento se empleó el algoritmo de optimización Levenberg Marquardt. Se utilizó el 15% de los datos para evaluar el rendimiento del modelo y se empleó el método de validación cruzada *K-fold* para reducir el problema de sobreajuste.

Se identificaron las variables de mayor importancia en la formación de las fibras mediante un estudio de sensibilidad, siendo la viscosidad de las soluciones/emulsiones como la variable de entrada de mayor importancia en la predicción del diámetro con un valor del 29%, seguido por la conductividad de la soluciones 26%, voltaje 24% y el flujo de alimentación 20%.

Las imágenes de las VE obtenidas por MEB, fueron analizadas y se determinó la DF y la PD del velo electrohilado por técnicas de análisis de imágenes usando el software ImageJ. Las micrografías SEM fueron convertidas a sistema binario, se seleccionaron tres umbrales diferentes y se remarcaron los espacios vacíos para obtener la PD del velo electrohilado.

Para la predicción de los descriptores de la morfología de los VE DF y PD, se probó una RNA con una capa oculta y varias neuronas, con variables de entrada normalizadas de datos de voltaje, flujo, viscosidad y conductividad. Las configuraciones que presentaron mejores resultados de predicción para los descriptores, fueron las arquitecturas de 8 y 10 neuronas con R^2 de 0.78 y 0.86 respectivamente.

En este estudio también se reporta una expresión matemática empírica para predecir la PD de velos de fibras electrohiladas de soluciones de PVA y emulsiones de PVA/AO y PVA/AN, dicha expresión matemática consideró las variables experimentales como el contenido de humedad de la fibra y conductividad de la emulsión previo al electrohilado, además, de las condiciones de operación del electrohilado. La relación entre los valores de la PD obtenidos a partir de la expresión matemática empírica y los valores de PD experimentales mostraron un coeficiente de correlación R^2 0.97 empleando el umbral II.

En general se concluye que la técnica RNA es una opción factible para predecir el diámetro de fibras electrohiladas, así como los descriptores de la morfología de los VE DF y PD a partir de datos numéricos normalizados de viscosidad y conductividad de las soluciones y/o emulsiones y de los parámetros de proceso como flujo de la solución y el voltaje.

PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

El electrohilado, también conocido como *electrospinning*, es un proceso de fabricación que se utiliza para producir fibras ultrafinas mediante la aplicación de un campo eléctrico a una solución líquida o un polímero fundido. Este método es ampliamente utilizado en la fabricación de materiales avanzados con aplicaciones en diversos campos, como la medicina, industria textil, filtración y la electrónica, entre otros (Islam *et al.*, 2019).

El proceso de electrohilado implica el uso de una boquilla conectada a una fuente de alta tensión. La solución líquida se suministra a través de esta boquilla, y la fuerza eléctrica aplicada provoca la formación de un chorro delgado que se estira mientras viaja hacia el colector. Durante este proceso, las partículas cargadas eléctricamente contenidas en la solución se repelen, creando un estiramiento adicional y resultando en fibras extremadamente finas con diámetros en la escala de micrómetros o nanómetros (Anusiya *et al.*, 2022, Ray *et al.*, 2019).

Existen diferentes configuraciones en los equipos de electrohilado y eso incluye inyectores y colectores diferentes. El inyector más común es el inyector de aguja o inyector simple que consiste en la colocación de una aguja capilar conectada al polo positivo del sistema, mientras que en los colectores, la configuración más común es el colector tambor, configuración empleada en este trabajo de investigación (Vass *et al.*, 2020).

La porosidad, área superficial de los VE y el diámetro de sus fibras pueden ser controlados a partir de la composición y propiedades de las soluciones poliméricas, así como de las condiciones de operación del equipo de electrohilado. Por ello de la importancia del electrohilado, dado que esta técnica permite la formulación de velos con propiedades específicas como andamios para ingeniería de tejidos, filtros de aire de alta eficiencia, materiales para liberación controlada de fármacos, y componentes para dispositivos electrónicos, entre otros (Lim *et al.*, 2017). El electrohilado continúa siendo objeto de investigación y desarrollo para aprovechar sus aplicaciones en diversas áreas de la ciencia y la tecnología (Rafique *et al.*, 2016, Herrero-Herrero *et al.*, 2018, Long *et al.*, 2019).

Es importante resaltar que la obtención de velos y fibras con diámetro y alineación específicos, implica un largo camino experimental de laboratorio, siendo necesario la

búsqueda de herramientas predictivas para optimar dichos procesos durante la elaboración de materiales poliméricos con una aplicación concreta.

Referente al modelado del proceso de electrohilado y la predicción de las características de los VE y de las fibras que los constituyen, en la literatura se reporta un número reducido de modelos que describen este proceso; debido a que el electrohilado es un proceso complejo que involucra procesos electrostáticos y procesos de transferencia de momento y masa. Se encontraron modelos que describen la formación del cono de Taylor y su relación con el fenómeno electrostático (Fridrikh *et al.*, 2003), se reporta un modelo empírico predictivo del diámetro de la fibra que considera a las variables de operación y las propiedades de la solución, método que emplea los números adimensionales para describir los fenómenos de transferencia de masa y calor implicados en el electrohilado (Stepanyan *et al.* 2014; Stepanyan *et al.* 2016). No obstante estos modelos descriptivos y predictivos son limitados, siendo necesaria la búsqueda de herramientas matemáticas que permitan la predicción de la morfología de los VE y el diámetro de las fibras a partir de diferentes polímeros electrohilables para una mejor comprensión y aplicación industrial del fenómeno.

JUSTIFICACIÓN

En la presente investigación se plantea el uso de las RNA para la predicción de la morfología de los velos electrohilados y el diámetro de sus fibras, debido a que las RNA son aplicadas para resolver problemas complejos y no lineales (Ghritlahre *et al.*, 2018). Maurya *et al.* (2020), Sarkar *et al.* (2009), Hamadneh *et al.* (2019) reportaron el uso de las RNA como una herramienta para la predicción de las propiedades (diámetro, porosidad, conductividad térmica y módulo de elasticidad) de las fibras, debido a la existencia de patrones no lineales de las variables voltaje, flujo, distancia inyector-colector, velocidad de rotación del colector, viscosidad y tensión superficial característicos del proceso de electrohilado.

Este proyecto de investigación se centra en la implementación de una RNA capaz de predecir el diámetro de las fibras y la morfología de los VE empleando como variables de entrada datos numéricos de voltaje, flujo, viscosidad y conductividad de las soluciones/emulsiones, empleando un inyector simple.

Para este trabajo se ha considerado el empleo de biopolímeros naturales como PVA, QS, GA y aceites esenciales cuyas mezclas podrán ser una opción para el desarrollo de las fibras electrohiladas que servirán como fuente de datos experimentales para el modelo predictivo.

Por todo lo mencionado anteriormente, la predicción del diámetro de las fibras y morfología de los VE, reviste importancia para las exploraciones predictivas de condiciones no experimentadas en el laboratorio, además de conocer con mayor profundidad acerca de las relaciones no lineales entre variables de operación, y las características de los velos y sus fibras durante el proceso de electrohilado.

HIPÓTESIS

Es factible el desarrollo de una RNA eficiente para la predicción de la dimensión fractal y porosidad digital, descriptores de la morfología de los VE y del diámetro de sus fibras poliméricas; a partir de datos normalizados de entrada, voltaje, flujo de la solución, conductividad y viscosidad obtenidos a partir de electrohilar soluciones de PVA, PVA/QS, PVA/AV y emulsiones GA/AT, PVA/AO, PVA/AN y PVA/AA.

OBJETIVO GENERAL

Desarrollar una RNA capaz de predecir la dimensión fractal y porosidad digital, como descriptores de la morfología de los VE y el diámetro de las fibras, con datos normalizados de alimentación, voltaje, flujo, viscosidad y conductividad de las soluciones PVA, PVA/QS, PVA/AV y emulsiones GA/AT, PVA/AO, PVA/AN y PVA/AA.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

1. Determinar las propiedades físicas de conductividad y viscosidad, en las soluciones PVA, PVA/QS, PVA/AV y emulsiones GA/AT, PVA/AO, PVA/AN y PVA/AA.
2. Determinar la dimensión fractal y porosidad digital descriptores de la morfología de los velos electrohilados (VE) y el diámetro de sus fibras poliméricas obtenidos a partir de electrohilar soluciones/emulsiones, empleando un equipo de electrohilado con un inyector simple.
3. Diseñar una RNA a partir de un conjunto de datos experimentales, para la predicción del diámetro de las fibras electrohiladas, dimensión fractal y porosidad digital, que incluya los datos de entrada voltaje, flujo de la solución, conductividad y viscosidad de las soluciones/ emulsiones poliméricas.

CAPÍTULO 1 REDES NEURONALES ARTIFICIALES

1.1. Redes neuronales artificiales (RNA)

Las RNA son un modelo computacional inspirado en la estructura y el funcionamiento del sistema nervioso biológico, específicamente en la manera en que las neuronas en el cerebro humano procesan información. Estas redes han demostrado ser especialmente eficientes en tareas de reconocimiento de patrones, aprendizaje automático y toma de decisiones (Krogh, 2008).

Las RNA simulan el mecanismo de aprendizaje de las neuronas biológicas del cerebro humano. Una neurona biológica (Figura 1.1) tiene tres tipos de componentes: dendritas, el cuerpo de la célula o soma y el axón. Las neuronas están conectadas entre sí mediante axones y dendritas, y la región de conexión entre estos dos componentes se denomina sinapsis. Las conexiones sinápticas cambian en respuesta a estímulos externos y producen el aprendizaje en los organismos vivos (Aggarwall *et al.*, 2018).

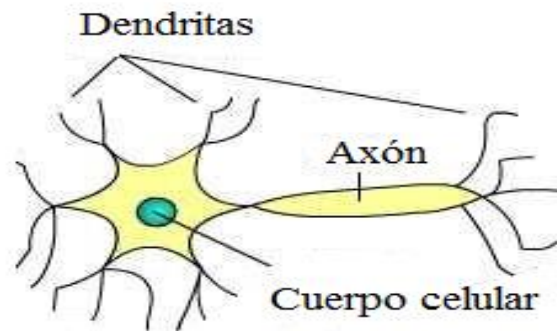


Figura 1.1. Neurona biológica (Gupta, 2013).

El proceso de aprendizaje en una RNA implica el ajuste de los pesos de las conexiones entre las neuronas, esto se logra mediante algoritmos de entrenamiento que utilizan conjuntos de datos para enseñar a la red a realizar una tarea específica (Da silva *et al.*, 2017).

Durante el proceso de aprendizaje en una neurona artificial, se cuenta con un conjunto de entradas-*inputs* (X_m) y una salida- *output* (y_k); las sinapsis se modelan mediante un peso, de manera que cada entrada ($X_1, X_2 \dots X_m$) se multiplica por su peso ($W_{k1}, W_{k2} \dots W_{km}$) antes

de ser enviado a la neurona artificial (Figura 1.2). Aquí, las señales ponderadas se suman para proporcionar la entrada, luego se calcula una función de activación, que puede ser: función escalonada, tangente hiperbólica, sigmoidea, etc. Y finalmente se devuelve un valor como salida (Hajian & Styles, 2018, Gurney, 2018).

Las RNA, proporcionan los elementos mediante los que se puede conseguir que un ordenador aprenda y construya modelos informáticos formados por múltiples unidades relativamente simples a las que denominan neuronas artificiales. Estas neuronas artificiales, o elementos de procesamiento, se conectan entre sí para formar una RNA (Berzal, 2018).

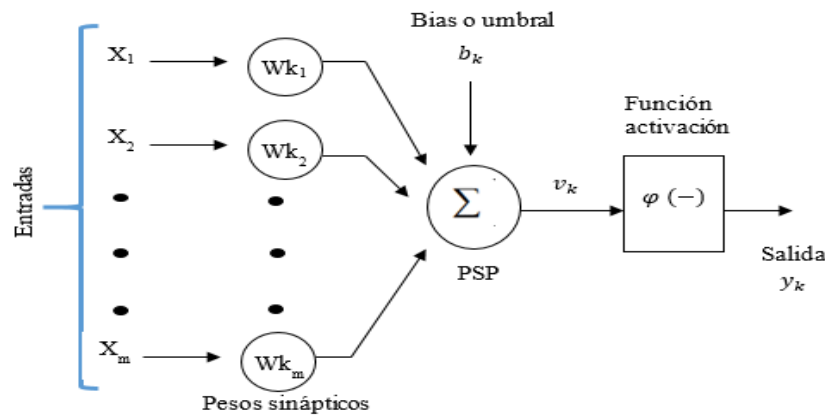


Figura 1.2. Neurona artificial (Gupta, 2013).

1.2. Aprendizaje de las RNA

Entre las diferentes propiedades de las RNA, se encuentra la propiedad para “*aprender*” a partir de su entorno por medio de un proceso iterativo que le permite ajustar los pesos sinápticos y los umbrales aplicados a la red. Esto implica que en el proceso de aprendizaje se realiza la siguiente secuencia de eventos:

- La red de neuronas aprende de su entorno.
- La red de neuronas experimenta un cambio como resultado de los datos de entrada de su entorno.
- La red de neuronas responde de una nueva manera al entorno, debido a los cambios que han ocurrido en su estructura interna (Alarcón, 2008).

Un algoritmo de aprendizaje automático es un proceso computacional que utiliza datos de entrada para lograr una tarea deseada, automáticamente adaptan su arquitectura a través de la repetición para optimar la salida deseada. El proceso de adaptación se llama entrenamiento, proceso en el que se proporcionan muestras de datos de entrada junto con los resultados deseados, posterior al entrenamiento, el algoritmo está en condiciones de originar resultados deseados a partir de elementos nuevos (El Naqa & Murphy, 2015). Existen diferentes algoritmos de aprendizaje como el aprendizaje supervisado, el aprendizaje no supervisado y el aprendizaje por refuerzo (Amrutha & Ajai, 2018).

- En el aprendizaje automático supervisado se utiliza un conjunto de datos donde se le proporciona a la RNA, las entradas y las salidas deseadas. El algoritmo de esta red, ajusta los pesos para minimizar la diferencia entre las salidas predichas y las salidas deseadas (Di Franco & Santurro, 2021). El objetivo del aprendizaje automático es que el modelo aprenda a realizar la tarea específica asociando correctamente las entradas con las salidas conocidas. En otras palabras, durante el proceso de entrenamiento, el modelo ajusta sus parámetros para minimizar la diferencia entre las predicciones que realiza y las respuestas reales proporcionadas en el conjunto de datos de entrenamiento. El aprendizaje supervisado se utiliza en una variedad de aplicaciones, como clasificación, regresión: y reconocimiento de patrones y es eficaz cuando se dispone de un conjunto de datos etiquetado. Este modelo puede proporcionar información precisa sobre la relación entre las entradas y las salidas esperadas. Sin embargo, pueden existir limitaciones si el conjunto de datos no es representativo o si hay sesgo en las etiquetas, ya que el modelo puede aprender patrones incorrectos (Haykin, 2009).
- Aprendizaje no supervisado (o aprendizaje por observación), en este algoritmo se proporciona como entrada a la RNA, una gran cantidad de datos y características de cada observación, para que la red genere los datos de salida. Generalmente se emplea el aprendizaje no supervisado para clasificar y diferenciar imágenes en función de algunas características como el color, tamaño, forma, para la clasificación y separación en grupos de los datos (Dike *et al.*, 2018).

- Aprendizaje por refuerzo, en esta técnica se considera una variación de las técnicas de aprendizaje supervisado, cuyo proceso de aprendizaje se realiza mediante prueba y error, generando una respuesta satisfactoria o insatisfactoria por parte de la RNA para cada entrada. Si es satisfactorio, los pesos y umbrales sinápticos se incrementan gradualmente para reforzar (recompensar) esta condición de comportamiento involucrada con el sistema (Da silva *et al.*, 2017).

1.3. Funciones de activación

Durante el proceso de aprendizaje se aplican las funciones de activación que se definen como ecuaciones matemáticas que procesan los datos alimentados a la neurona. Algunas funciones de activación comunes utilizadas en redes neuronales son la función Sigmoide, función Tangente Hiperbólica (tanh), Rectified Linear Unit (ReLU), Leaky rectified linear Unit (Leaky ReLU), entre otras (Liew *et al.*, 2016). La elección de la función de activación depende del tipo de problema que se está abordando y puede requerir experimentación para determinar cuál funciona mejor para cada caso específico.

Las funciones de activación se pueden clasificar en:

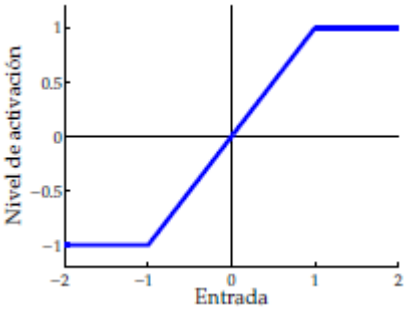
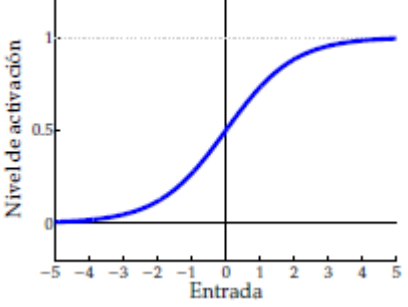
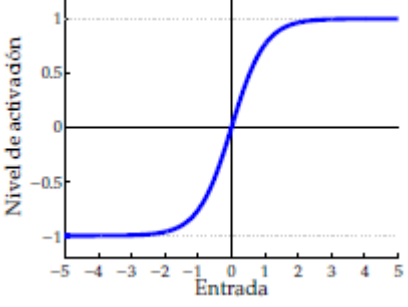
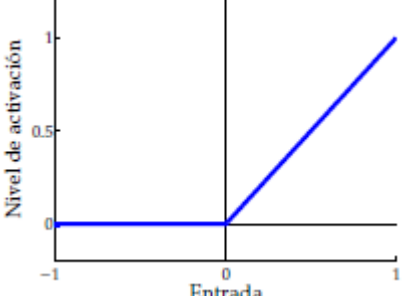
- Funciones de activación discretas - La salida de la neurona solo puede tomar un conjunto finito de valores. Normalmente, se utilizan dos valores 0 o 1, por lo que se consideran neuronas binarias, este tipo de funciones de activación discretas facilitan y reducen la complejidad de las implementaciones de redes neuronales en hardware (Plagianakos *et al.*, 2001).
- Funciones de activación continuas - La salida de la neurona puede tomar cualquier valor dentro de un intervalo. Generalmente, el rango de ese intervalo está limitado, $[0, 1]$ o bien al intervalo $[-1, 1]$ (Berzal, 2018, Rosamoelina *et al.*, 2020).

La función de activación juega un papel importante en el entrenamiento de redes neuronales, ya que proporcionan la no linealidad necesaria del modelo para poder aprender relaciones complejas entre los datos de entrada y salida (Rosamoelina *et al.*, 2020). Dentro de las funciones de activación continuas se pueden utilizar funciones de activación lineales (función

identidad) como funciones no lineales. En la Tabla 1.1, se presentan algunas de las funciones de activación más empleadas en la construcción de las RNA.

Tabla 1.1. Tipos de funciones de activación (Liew *et al.*, 2016).

	Función Activación	Rango	Grafica
Lineal	$y = z$	$[-\infty, +\infty]$	
Función umbral	$y = u(x)$	$\begin{cases} 1 & \text{si } z \geq 0 \\ 0 & \text{si } z < 0 \end{cases}$	
Función signo	$y = \text{sgn}(x)$	$\begin{cases} 1 & \text{si } z \geq 0 \\ -1 & \text{si } z < 0 \end{cases}$	
Saturación binario	$y = \begin{cases} 1 & \text{si } z > 1 \\ z & \text{si } 0 \leq z \leq 1 \\ 0 & \text{si } z < 0 \end{cases}$	$[0, +1]$	

<p>Saturación simétrica</p>	$y = \begin{cases} 1 & \text{si } z > 1 \\ z & \text{si } -1 \leq z \leq 1 \\ -1 & \text{si } z < -1 \end{cases}$	<p>$[-1,+1]$</p>	
<p>Sigmoidal</p>	$y = \frac{1}{1 + e^{-z}}$	<p>$[0,+1]$</p>	
<p>Tangente hiperbólica</p>	$y = \tanh(z)$ $y = \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}}$	<p>$[-1,+1]$</p>	
<p>Función lineal rectificadora</p>	$y = f_{relu}(z)$	$\begin{cases} z & \text{si } z \geq 0 \\ 0 & \text{si } z < 0 \end{cases}$	

1.4. Arquitectura de las RNA

La estructura básica de una RNA puede expresarse como Capa de Entrada - Capas Ocultas - Capa de Salida. Cada conexión entre nodos tiene un peso asociado que se ajusta durante el

entrenamiento de la red para aprender la representación y la relación entre las entradas y las salidas (Essa *et al.*, 2020, Al-Shathr *et al.*, 2021, Asha *et al.*, 2021).

Las capas de una red multicapa se dividen en dos categorías: capas visibles y capas ocultas, las capas visibles son la de entrada y de salida de la red neuronal. Todas las capas intermedias diferentes a las capas de entrada y de salida reciben el nombre de capas ocultas (Figura 1.3). El número de capas ocultas y su respectivo número de neuronas dependen de la naturaleza y complejidad del problema que está mapeando la red, así como de la cantidad y calidad de los datos disponibles sobre el problema (Da Silva *et al.*, 2017).

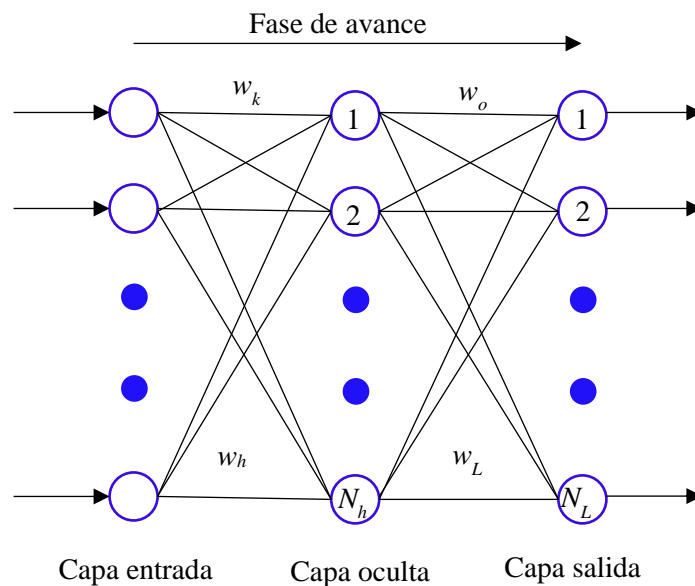


Figura 1.3. Red neuronal *feed forward* (Hemeida *et al.*, 2020).

Clasificación por su conexión

La configuración de una RNA se refiere a su estructura y diseño, incluyendo la disposición de las capas, el número de neuronas en cada capa, la conexión entre ellas y otros aspectos específicos. Las RNA se pueden clasificar según su conexión en; función de base radial, redes recurrente, *feed forward*, y otras (Hemeida *et al.*, 2020).

- Redes neuronales de función base radial.- Se consideran una forma especial de redes neuronales multicapa que contienen solo una capa oculta con funciones de activación

basadas en Gauss, se han aplicado en la clasificación de fallas de procesos, control no lineal y pronósticos de series de tiempo (Aljarah *et al.*, 2018).

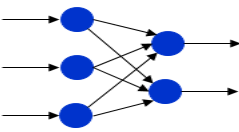
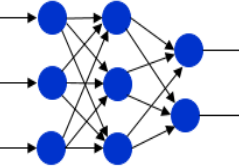
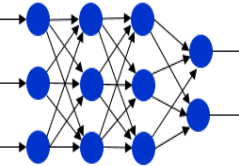
- Redes recurrentes.- Las conexiones entre las neuronas forman ciclos, permitiendo que la información se retroalimente en la red (Salinas *et al.*, 2020).

Red neuronal de alimentación hacia adelante (*feedforward*), es la arquitectura más básica y común. La información fluye en una sola dirección, desde la capa de entrada a través de las capas ocultas hasta la capa de salida. No hay retroalimentación de las salidas a las entradas durante el proceso de entrenamiento (Hemeida *et al.*, 2020).

Las redes neuronales *feedforward* se componen: una capa de entrada, capas ocultas y una capa de salida. Cada capa consta de varias neuronas, como se muestra en la Figura 1.3. Las distintas capas se conectan entre sí de tal forma que la salida de la capa i se utiliza como entrada en la capa $i + 1$. Las salidas de las neuronas en la capa de salida representan la salida de la red (Hemeida *et al.*, 2020).

En una red neuronal de tipo *feedforward*, podemos encontrar varias arquitecturas dependiendo del número de capas ocultas que se utilicen ver Tabla 1.2.

Tabla 1.2. Configuraciones redes neuronales (Da Silva *et al.*, 2017).

Tipo	Características	Diagrama
Redes simples o unicapa	Las neuronas de la capa de entrada, se limitan a recibir las señales de entrada provenientes del exterior, redistribuyen esas entradas a las neuronas de la capa de salida.	
Redes multicapa, con una capa oculta	Si se añaden nuevas capas intermedias, estas capas ya no serán visibles desde el exterior, lo que obligará a utilizar algoritmos como <i>backpropagation</i> para ajustar sus parámetros internos.	
Redes profundas, con varias capas ocultas	Las capas ocultas le permiten a la red neuronal construir un modelo interno de la forma en que los patrones de datos de entrada están relacionados con las salidas deseadas.	

El desempeño de la RNA se ve afectado por la función de transferencia y la configuración (Hemeida *et al.*, 2020). Sin embargo, no es posible determinar teóricamente cuántas capas o neuronas ocultas se necesitan para cada problema (Benardos & Vosniakos, 2007; Rezakazemi *et al.*, 2011).

En este trabajo de investigación se empleó la red de perceptrón multicapa (MLP, por sus siglas en inglés), arquitectura que se encuentra clasificada como arquitectura *feedforward* de múltiples capas y cuyo entrenamiento se realiza con un proceso supervisado (Da Silva *et al.*, 2017).

Las MLP presentan, al menos, una capa neuronal intermedia (oculta), que se coloca entre la capa de entrada y la capa de salida respectiva. Las redes MLP es un modelo simple que toma múltiples entradas, aplica pesos a esas entradas, suma esos productos ponderados y luego aplica una función de activación al resultado para producir una salida. Esta arquitectura fue aplicada en este trabajo de investigación.

Funcionamiento de una RNA- Proceso de entrenamiento

El proceso de entrenamiento de una RNA consiste en modificar los pesos en las conexiones entre las capas y neuronas de la red para lograr el valor de la salida esperado. El objetivo de entrenar una RNA es minimizar el error entre las salidas de la red y los valores deseados. El algoritmo de entrenamiento reduce el error ajustando pesos y sesgos de la red. Después del entrenamiento, los pesos y sesgos ya no son modificados y la red estará en condiciones de responder adecuadamente a las entradas que se le presente (Mustafa *et al.*, 2012; Amrutha & Ajai, 2018).

El algoritmo de aprendizaje empleado durante el proceso de entrenamiento de un MLP es el de retropropagación, que consta de dos etapas como se muestran en la Figura 1.4, la primera etapa se llama propagación hacia adelante entre neuronas de cada capa oculta, posteriormente las respuestas producidas por las salidas de la red se comparan con respuestas deseadas, si los resultados no son satisfactorios se aplica la segunda etapa la retropropagación, donde los pesos sinápticos de todas las neuronas de la red se modifican en sentido contrario.

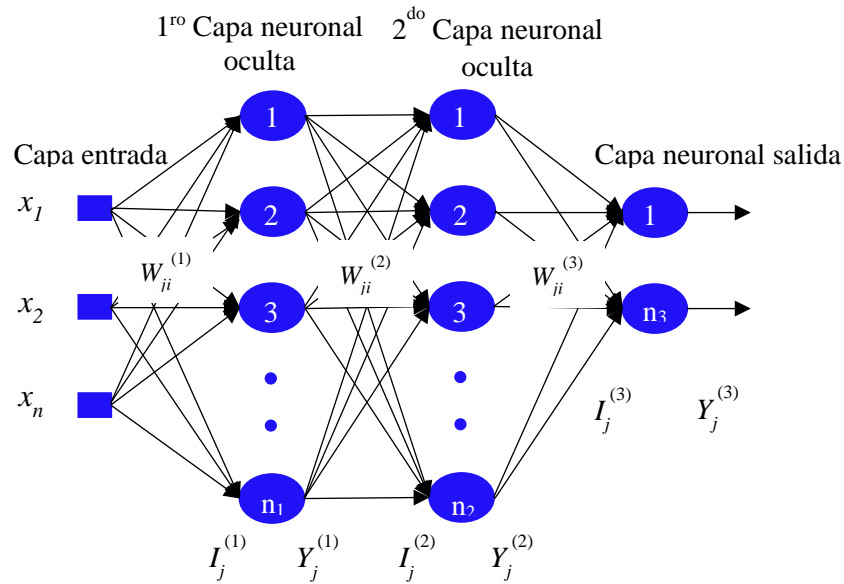


Figura 1.4. La red de perceptrón multicapa (MLP) (Da Silva *et al.*, 2017).

Se han propuesto variaciones del método de retropropagación para mejorar la eficiencia de convergencia. Entre estas variaciones, se puede encontrar el descenso de gradiente, descenso de gradiente con impulso, gradiente conjugado escalado y Levenberg Marquardt, cada algoritmo tiene sus propias características, y es difícil conocer cual algoritmo de entrenamiento es más adecuado para el modelo de RNA en particular. La selección depende en gran medida de la complejidad del problema en cuestión, y del conjunto de datos utilizados para el entrenamiento y la configuración (Mustafa *et al.*, 2012).

1.5. Etapas para construir un modelo RNA

Para la construcción de una RNA se consideran los procesos de entrenamiento, validación y prueba. El proceso de entrenamiento consiste en elegir un modelo que permita aprender patrones y relaciones a partir de los datos de entrada, donde los pesos del modelo se ajustan iterativamente mediante la retropropagación y el descenso del gradiente para minimizar la función de costo en este conjunto (Haykin, 2009).

El proceso de validación se utiliza para decidir cuándo detener el entrenamiento y con ello evitar el sobreajuste y finalmente el proceso de prueba permite evaluar la capacidad

predictiva y proporcionar una estimación objetiva de cómo el modelo generaliza a datos no vistos y no utilizados en el proceso de entrenamiento (Dayhoff *et al.*, 2001).

Inicialmente los datos de entrada se dividen en tres conjuntos distintos para realizar los procesos de entrenamiento, validación y prueba. Es necesario asegurarse que el valor máximo y el valor mínimo de cada variable de entrada se encuentren presente en el conjunto de entrenamiento de lo contrario, si dichos valores se asignan en el conjunto de prueba, la MLP podría generar errores significativos (Zhang *et al.*, 1999). Khatti *et al.* (2019) propuso una división aleatoria de los datos experimentales en una proporción 70, 15 y 15% para los tres conjuntos, mientras que Kalantary *et al.* (2019) propuso una división aleatoria de 60, 20 y 20% para el conjunto de entrenamiento, validación y prueba respectivamente. Por otro lado Solis-Rios *et al.* (2023) propone una división 75, 15 y 10 para los conjuntos de entrenamiento, validación y prueba respectivamente.

Profundizando sobre el proceso de entrenamiento de una red, este consta de varias etapas, la primera es el ajuste de los pesos sinápticos de la capa de salida, seguido del ajuste de los pesos sinápticos de las capas intermedias y finalmente el ajuste los pesos sinápticos de la primera capa oculta, los cuales se describen en seguida.

Parte I: Ajuste de los pesos sinápticos de la capa de salida

La función de error cuadrático medio ecuación 1.1 se emplea para medir el desempeño asociado con los resultados producidos por las neuronas de salida con respecto a la muestra dada, es decir:

$$E(k) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{n_3} (d_j(k) - Y_j^{(3)}(k))^2 \quad ec. 1.1$$

donde $Y_j^{(3)}(k)$ es el valor producido por la j -ésima neurona de salida de la red para la k -ésima muestra de entrenamiento, mientras que $d_j(k)$ es el valor deseado.

El objetivo del proceso de entrenamiento de la capa neuronal de salida consiste en ajustar la matriz de peso $W_{ji}^{(3)}$ para minimizar el error entre las salidas producidas por la red con respecto a las salidas deseadas.

$$\nabla E^{(3)} = \frac{\partial E}{\partial W_{ji}^{(3)}} = \frac{\partial E}{\partial Y_j^{(3)}} \cdot \frac{\partial Y_j^{(3)}}{\partial I_j^{(3)}} \cdot \frac{\partial I_j^{(3)}}{\partial W_{ji}^{(3)}} \quad \text{ec. 1.2}$$

$$\frac{\partial I_j^{(3)}}{\partial W_{ji}^{(3)}} = Y_i^{(2)} \quad \text{ec. 1.3} \quad \frac{\partial Y_j^{(3)}}{\partial I_j^{(3)}} = g'(I_j^{(3)}) \quad \text{ec. 1.4} \quad \frac{\partial E}{\partial Y_j^{(3)}} = -(d_j - Y_j^{(3)}) \quad \text{ec. 1.5}$$

donde $g'(I_j^{(3)})$ denota la derivada de primer orden de la función de activación empleada.

Reemplazando (1.3), (1.4) y (1.5) en (1.2), obtenemos ecuación 1.6:

$$\frac{\partial E}{\partial W_{ji}^{(3)}} = -(d_j - Y_j^{(3)}) \cdot g'(I_j^{(3)}) \cdot Y_i^{(2)} \quad \text{ec. 1.6}$$

El ajuste de la matriz de pesos $W_{ji}^{(3)}$ debe realizarse en la dirección opuesta al gradiente para minimizar el error, como lo muestra la ecuación 1.7:

$$\Delta W_{ji}^{(3)} = -\eta \cdot \frac{\partial E}{\partial W_{ji}^{(3)}} \quad \Leftrightarrow \quad \Delta W_{ji}^{(3)} = \eta (d_j - Y_j^{(3)}) \cdot g'(I_j^{(3)}) \cdot Y_i^{(2)} \quad \text{ec. 1.7}$$

donde η es la tasa de aprendizaje del algoritmo de retropropagación.

Parte II: Ajuste de los pesos sinápticos de las capas intermedias

A diferencia de las neuronas que pertenecen a la capa de salida de la red MLP, las neuronas de las capas intermedias no tienen acceso a los valores deseados de las salidas. El ajuste de sus pesos sinápticos se realiza mediante estimaciones de los errores de salida causados por aquellas neuronas de la capa posterior, que ya han sido ajustadas.

$$\nabla E^{(2)} = \frac{\partial E}{\partial W_{ji}^{(2)}} = \frac{\partial E}{\partial Y_j^{(2)}} \cdot \frac{\partial Y_j^{(2)}}{\partial I_j^{(2)}} \cdot \frac{\partial I_j^{(2)}}{\partial W_{ji}^{(2)}} \quad \text{ec. 1.8}$$

De las definiciones anteriores se obtiene la ecuación 1.9, 1.10 y 1.11:

$$\frac{\partial I_j^{(2)}}{\partial W_{ji}^{(2)}} = Y_i^{(1)} \quad \text{ec. 1.9} \quad \frac{\partial Y_j^{(2)}}{\partial I_j^{(2)}} = g'(I_j^{(2)}) \quad \text{ec. 1.10} \quad \frac{\partial E}{\partial Y_j^{(2)}} = - \sum_{k=1}^{n_3} \delta_k^{(3)} \cdot W_{kj}^{(3)} \quad \text{ec. 1.11}$$

Sustituyendo la ecuación 1.9, 1.10 y 1.11 en 1.8 obtenemos la ecuación 1.12:

$$\frac{\partial E}{\partial W_{ji}^{(2)}} = - \left(\sum_{k=1}^{n_3} \delta_k^{(3)} \cdot W_{kj}^{(3)} \right) \cdot g'(I_j^{(2)}) \cdot Y_i^{(1)} \quad \text{ec. 1.12}$$

donde $\delta_j^{(3)}$ se define como el gradiente local relacionado con la j -ésima neurona en la capa de salida, y está dado por la ecuación 1.13:

$$\delta_j^{(3)} = (d_j - Y_j^{(3)}) \cdot g'(I_j^{(3)}) \quad \text{ec. 1.13}$$

Por tanto, el ajuste de la matriz de pesos W_{ji}^2 debe realizarse en la dirección opuesta al gradiente para minimizar el error como lo muestra la ecuación 1.14:

$$\Delta W_{ji}^{(2)} = -\eta \cdot \frac{\partial E}{\partial W_{ji}^{(2)}} \quad \Leftrightarrow \quad \Delta W_{ji}^{(2)} = \eta \cdot \left(\sum_{k=1}^{n_3} \delta_k^{(3)} \cdot W_{kj}^{(3)} \right) \cdot g'(I_j^{(2)}) \cdot Y_i^{(1)} \quad \text{ec. 1.14}$$

Ajustar los pesos sinápticos de la primera capa oculta

$$\nabla E^{(1)} = \frac{\partial E}{\partial W_{ji}^{(1)}} = \frac{\partial E}{\partial Y_j^{(1)}} \cdot \frac{\partial Y_j^{(1)}}{\partial I_j^{(1)}} \cdot \frac{\partial I_j^{(1)}}{\partial W_{ji}^{(1)}} \quad \text{ec. 1.15}$$

De las definiciones anteriores se obtiene ecuación 1.16, 1.17 y 1.18:

$$\frac{\partial I_j^{(1)}}{\partial W_{ji}^{(1)}} = x_i \quad \text{ec. 1.16} \quad \frac{\partial Y_j^{(1)}}{\partial I_j^{(1)}} = g'(I_j^{(1)}) \quad \text{ec. 1.17} \quad \frac{\partial E}{\partial Y_j^{(1)}} = - \sum_{k=1}^{n_2} \delta_j^{(2)} \cdot W_{kj}^{(2)} \quad \text{ec. 1.18}$$

Sustituyendo ecuaciones 1.16, 1.17 y 1.18 en 1.15, obtenemos la ecuación 1.19:

$$\frac{\partial E}{\partial W_{ji}^{(1)}} = - \left(\sum_{k=1}^{n_2} \delta_k^{(2)} \cdot W_{kj}^{(2)} \right) \cdot g'(I_j^{(1)}) \cdot x_i \quad \text{ec. 1.19}$$

donde $\delta_j^{(2)}$ se define como el gradiente particular con respecto a la j -ésima neurona de la segunda capa intermedia, ecuación 1.20:

$$\delta_j^{(2)} = - \left(\sum_{k=1}^{n_3} \delta_k^{(3)} \cdot W_{kj}^{(3)} \right) \cdot g'(I_j^{(2)}) \quad \text{ec. 1.20}$$

Por tanto, el ajuste de la matriz de pesos $W_{ji}^{(1)}$ debe realizarse en la dirección opuesta al gradiente para minimizar el error, empleando la ecuación 1.21:

$$\Delta W_{ji}^{(1)} = -\eta \cdot \frac{\partial E}{\partial W_{ji}^{(1)}} \quad \Leftrightarrow \quad \Delta W_{ji}^{(1)} = \eta \cdot \left(\sum_{k=1}^{n_2} \delta_k^{(2)} \cdot W_{kj}^{(2)} \right) \cdot g'(I_j^{(1)}) \cdot x_i \quad \text{ec. 1.21}$$

Proceso de validación y prueba de las RNA

El proceso de validación se utiliza para decidir cuándo detener el entrenamiento y con ello evitar el sobreajuste que ocurre cuando el modelo se ha sobreentrenado. En la Figura 1.5 se describe dicho comportamiento, se ilustra el error cuadrático medio (MSE) de un conjunto de entrenamiento y prueba, en función del número de iteraciones. Se puede observar que el MSE en el conjunto de entrenamiento y en el conjunto de prueba disminuye a medida que se incrementa hasta cierto número de iteraciones sucesivas (n_1), posteriormente el MSE del

conjunto de prueba comienza a aumentar mientras que el MSE del conjunto de entrenamiento continua disminuyendo, esta última región presenta un sobreentrenamiento.

Para evitar dicho fenómeno, se suspende el entrenamiento cuando el MSE en el conjunto de prueba es mínimo, lo que ocurre en n_1 iteraciones como se muestra en la Figura 1.5 (Dayhoff *et al.*, 2001).

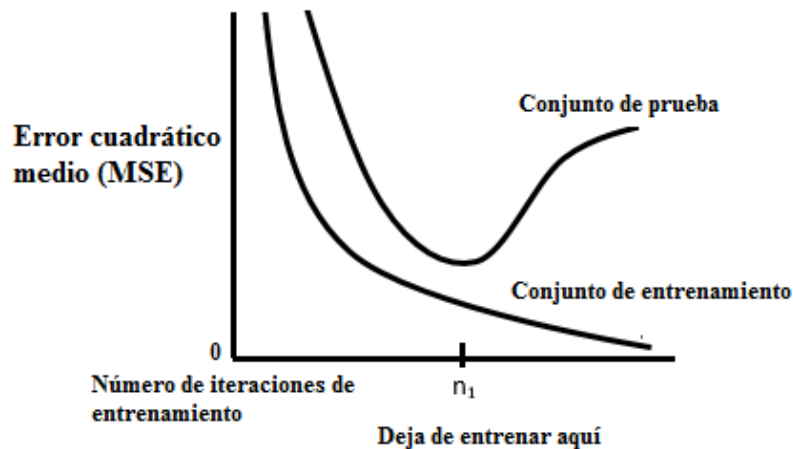


Figura 1.5. Comportamiento del sobreentrenamiento (Dayhoff *et al.*, 2001).

La división aleatoria de una muestra en conjuntos de entrenamiento y prueba puede introducir sesgos en la selección y evaluación del modelo, en el sentido de que las características de la prueba pueden ser muy diferentes a las del entrenamiento, especialmente cuando se trata de muestras de tamaño pequeño. Por esta razón, es necesario emplear la validación cruzada para describir con precisión el rendimiento predictivo de las RNA (Zhang *et al.*, 1999, Karimi *et al.*, 2015).

La validación cruzada es una técnica basada en la división de datos para realizar evaluaciones predictivas de modelos estadísticos, consiste en dividir los datos disponibles en un conjunto de entrenamiento y uno de prueba, donde el modelo se ajusta a los datos de entrenamiento y posteriormente se evalúa en función de sus predicciones sobre los datos de prueba. Al repetir este proceso para muchas divisiones diferentes de los datos, se estima el rendimiento predictivo promedio de uno o más modelos (Yates *et al.*, 2023).

Se ha empleado el método de validación cruzada *K-fold* para reducir el problema de sobreajuste (cuando el modelo se ajusta bien a los datos de entrenamiento, pero cuando se

emplea el conjunto de prueba como entrada a la red, genera un error significativo) (Bui *et al.*, 2018). El método de validación cruzada *K-fold* consiste en dividir el conjunto de muestras total en k particiones, donde $(k-1)$ particiones se usarán para componer el subconjunto de entrenamiento y la partición restante se usará para componer el subconjunto de prueba. En la Figura 1.6 se muestra el procedimiento para 20 muestras, con $k=5$.

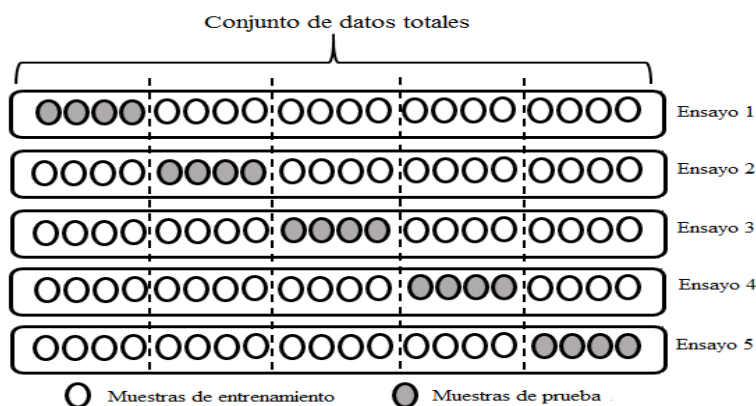


Figura 1.6. Método de validación cruzada k -fold (Da silva *et al.*, 2016).

Después de esta división, el proceso de aprendizaje se repite k veces, hasta que todas las particiones se hayan utilizado como subconjunto de prueba.

Finalmente el conjunto de prueba se emplea para evaluar la validez de los datos nuevos de la RNA, independiente del conjunto de entrenamiento de la RNA, y se utiliza para determinar la validez de los resultados de la RNA sobre nuevos datos.

De la información presentada en este capítulo se puede resumir que las RNA son sistemas de procesamiento de información, inspirados en el modelo biológico del sistema nervioso, y que tienen una característica fundamental referente a su habilidad para aprender a partir de datos externos o datos de entrada, mediante el ajuste de sus interconexiones.

El aprendizaje de la red está relacionado con su topología o configuración, es decir, del número de capas, del número de neuronas en cada capa y del esquema de conexiones, El desempeño de la RNA se ve afectado por la función de transferencia y la configuración (Hemeida *et al.*, 2020). Sin embargo, no es posible determinar teóricamente cuántas capas o neuronas ocultas se necesitan para cada problema (Benardos & Vosniakos, 2007; Rezakazemi *et al.*, 2011).

CAPÍTULO 2 PROCESO DE ELECTROHILADO

Los materiales poliméricos nanofibrosos y microfibrosos están ganando terreno en la última década debido a sus amplias aplicaciones en la industria farmacéutica, catálisis, sensores, bioingeniería y aplicaciones medio ambientales (García-Zamora *et al.*, 2019). Estos materiales deben poseer propiedades de superficie como alta permeabilidad, alta relación de superficie-volumen y diámetro pequeño de fibra (Babitha *et al.*, 2017).

Entre los métodos utilizados para la fabricación de fibras se encuentran el autoensamblaje, separación de fases, síntesis de plantillas, dibujo, hilatura centrífuga y el electrohilado. Esta última tecnología es un proceso sencillo, versátil y eficiente en comparación con los métodos convencionales, que permite la obtención de películas compuestas de fibras continuas con diámetro controlado (Anusiya *et al.*, 2022, Ray *et al.*, 2019).

El proceso de electrohilado o *electrospinning* permite la producción de fibras con diámetros ajustables de nanómetros a micrómetros (Wan *et al.*, 2022) y se lleva a cabo utilizando una solución polimérica que se coloca en una aguja cargada eléctricamente. Cuando se aplica un campo eléctrico, la fuerza electrostática supera la tensión superficial del polímero, formando un chorro fino que se estira y seca antes de llegar al colector conectado a tierra (Luraghi *et al.*, 2021).

Debido a sus propiedades como alta relación superficie- volumen y estructura porosa, las fibras electrohiladas se utilizan en una variedad de campos, como: filtración, ingeniería biomédica, transporte de fármacos, aplicaciones eléctricas, adsorción de iones metálicos y energías renovables (Islam *et al.*, 2019).

Los componentes básicos de un equipo de electrohilado son las fuentes de poder, el inyector y el colector. En la Figura 2.1, se presentan los componentes de un electrohilador.

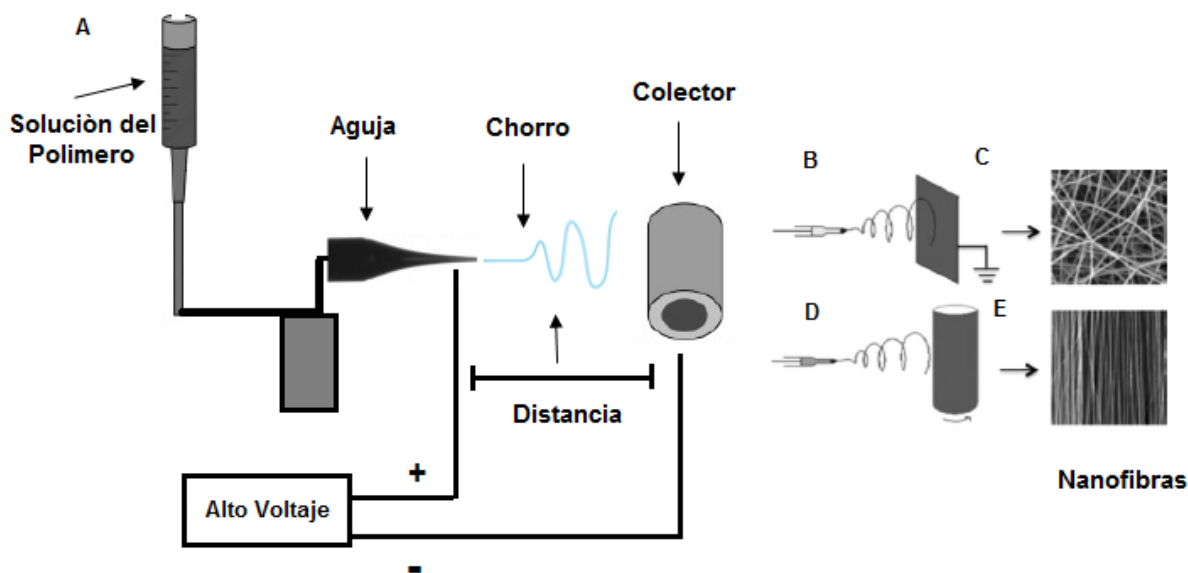


Figura 2.1. (A) Diagrama esquemático del proceso de electrohilado. (B) Colector metálico estacionario. (C) fibras orientadas al azar recogidas en el recolector estacionario. (D) Colector de tambor giratorio. (E) fibras alineadas recogidas en el colector de tambor giratorio (Jiang, Carbone, & Lo, 2015).

2.1. Componentes del electrohilado

Existen dos configuraciones en un equipo de electrohilado, la horizontal y vertical; refiriéndose a la posición relativa del inyector y colector. De igual forma los inyectores presentan modificaciones en su configuración, como el inyector simple, de aguja o también denominado capilar, el inyector coaxial y el multi-inyector (Yao, Chang, Ahmad, & Li, 2016).

El inyector de aguja es la configuración más empleada y fue el primer inyector diseñado para el proceso de electrohilado (Huang, Zhang, Kotaki, & Ramakrishna, 2003). Este consiste en un embolo o jeringa que tiene acoplado un capilar cargado eléctricamente y que sirve como ducto para la alimentación del fluido a electrohilar (Tang *et al.*, 2016; Vyslouzilova *et al.*, 2017).

2.2. Propiedades de las fibras electrohiladas

Las fibras electrohiladas poseen varias propiedades que las hacen interesantes para diversas aplicaciones. Algunas de estas propiedades incluyen:

- **Diámetro controlado.** El diámetro de las fibras electrohiladas se puede controlar con facilidad, en una escala métrica o micrométrica (Kumar *et al.*, 2019).
- **Gran área superficial:** Las fibras electrohiladas tienden a tener una gran área superficial debido a su estructura porosa y a su disposición final, lo que puede ser útil para aplicaciones como la filtración, la adsorción y la liberación controlada de sustancias. Liu *et al.* (2020) reportan que el diámetro de las fibras afecta significativamente la superficie específica de la fibra, así como una gran cantidad de sitios para interactuar con el entorno de manera más efectiva.
- **Tamaño de poro ajustable.** El tamaño de los poros de los velos electrohiladas puede controlarse ajustando los parámetros del proceso de electrohilado. Esta propiedad es importante en aplicaciones como la ingeniería de tejidos, donde se busca una estructura porosa similar a la matriz extracelular y en la liberación controlada de fármacos ya que pueden actuar como matrices para encapsular y liberar sustancias de manera gradual (Ameer *et al.*, 2019, Luraghi *et al.*, 2021).
- **Flexibilidad y adaptabilidad:** Las fibras pueden ser producidas a partir de una variedad de materiales, cerámicas, metales, óxidos metálicos, compuestos de polímeros naturales y sintéticos (tanto orgánicos como inorgánicos) lo que proporciona flexibilidad en términos de propiedades mecánicas y químicas, adaptándose a diferentes necesidades y entornos de aplicación (Wang *et al.*, 2019).

2.3. Parámetros que afectan el proceso de electrohilado

Los parámetros que influyen en el proceso de electrohilado se clasifican:

- Solución
- Proceso
- Ambientales

Los parámetros mencionados anteriormente tienen influencia en el diámetro de la fibra electrohilada y en la morfología de sus velos (Ibrahim & Klingner, 2020, Ahmadian *et al.*, 2021). En la Tabla 2.1, se resume el efecto de las propiedades de las soluciones a electrohilar y los parámetros de proceso en las características de las fibras electrohiladas.

Tabla 2.1. Variables y parámetros que influyen en el proceso de electrohilado y sus efectos (Sanchez, 2013).

Parámetros	Variable de control	Efecto	Variable de respuesta
Solución	Concentración	El aumento en la concentración eleva la viscosidad de la solución y por consecuencia el diámetro de la fibra. Por el contrario, si la solución es poco concentrada, ésta rompe en gotas generando una inestabilidad en el cono de Taylor impidiendo su electrohilado.	Tamaño y morfología de la fibra
	Tensión superficial	La tensión superficial es afectada por la concentración del polímero y el disolvente.	Uniformidad del velo
	Conductividad	Experimentalmente se ha demostrado que al aumento de la conductividad se refleja en una disminución del diámetro de las fibras.	Diámetro de la fibra
	Efecto dieléctrico del disolvente	Cuando se cuenta con una constante dieléctrica elevada, se reduce la posibilidad de generarse gotas en las fibras y el diámetro de estas se disminuye.	Formación de la fibra
Proceso	Voltaje	Parámetro de gran importancia, debido a que un alto voltaje favorece la formación de fibras más delgadas y evita la formación de gotas.	Diámetro de fibra
	Flujo de salida	Un bajo flujo de salida permite que se genere el cono de Taylor estable en el sistema, evaporando el solvente de forma gradual, evitando la formación de defectos en la fibra. Al aumentarse el flujo de salida, el diámetro de la fibra también se eleva.	Uniformidad del velo
	Distancia Inyector vs. Colector	Esta variable está relacionada con las propiedades de la solución, debe determinarse de manera experimental, de forma que no genere daños en la estructura o rompimiento de las fibras.	Morfología de las fibras
Ambientales	Humedad	Al aumentarse la humedad se favorece la existencia de poros circulares en la superficie de las fibras.	Uniformidad del velo

2.4. Diámetro de las fibras electrohiladas

El diámetro de las fibras electrohiladas varía significativamente y puede controlarse ajustando varios parámetros durante el proceso de electrohilado. Como se mencionó anteriormente, las fibras electrohiladas son conocidas por su tamaño extremadamente pequeño, generalmente en el rango de nanómetros (Kumar *et al.*, 2019).

La capacidad para ajustar el diámetro de las fibras es una ventaja clave de la técnica de electrohilado y es fundamental para adaptar las propiedades de las fibras según las necesidades específicas de diversas aplicaciones, como la filtración (Islam *et al.*, 2019), la liberación controlada de fármacos, (Luraghi *et al.*, 2021), la ingeniería de tejidos (Ameer *et al.*, 2019), entre otras. Los factores que influyen en el diámetro de las fibras electrohiladas incluyen la concentración de la solución de polímero, la velocidad de extrusión, la distancia entre la aguja y el colector, y el voltaje aplicado durante el proceso de electrohilado (Ibrahim & Klingner, 2020). La optimización de estos parámetros permite a los investigadores controlar y ajustar el diámetro de las fibras según sus objetivos específicos, siendo este un proceso experimental extremadamente largo y complejo.

El diámetro de las fibras electrohiladas influye en las propiedades de los velos.

Porosidad y Tamaño de Poro: El tamaño de los poros puede estar directamente relacionado con el diámetro de las fibras y el tiempo de proceso del electrohilado. Velos con poros más pequeños son efectivos para retener partículas y solutos (Wang *et al.*, 2017).

Área Superficial Específica: El diámetro más pequeño de las fibras resulta en una mayor área superficial específica en el velo, lo que implica una mayor interacción con sustancias en la superficie del velo, característica importante en procesos de adsorción y filtración (Cui *et al.*, 2020).

Permeabilidad y Capacidad de Filtración: La permeabilidad de los VE puede verse afectada por el diámetro de las fibras, en general, velos con fibras más delgadas pueden tener una menor resistencia al flujo y una mayor capacidad de filtración para partículas más pequeñas (Lyu *et al.*, 2021).

Resistencia Mecánica: Las fibras electrohiladas más delgadas suelen resultar en velos más flexibles, pero también pueden tener una resistencia mecánica menor. La resistencia del velo dependerá no solo del diámetro de las fibras, sino también de la estructura y entrecruzamiento de las fibras (Rashid *et al.*, 2021).

Aplicaciones Biomédicas: En aplicaciones biomédicas, el diámetro de las fibras electrohiladas puede afectar la interacción con células y tejidos. Fibras más delgadas pueden facilitar la adhesión celular y la migración (Ameer *et al.*, 2019).

La porosidad de los velos se refiere a la presencia de espacios o poros en su estructura, y es una propiedad crucial que afecta directamente la capacidad del velo para permitir o bloquear el paso de diferentes sustancias. La porosidad se expresa típicamente como el porcentaje del volumen total de la membrana ocupado por espacios abiertos o poros. En velos electrohilados la porosidad, puede ajustarse y controlarse durante su fabricación para adaptarse a requisitos específicos de aplicaciones. En el caso de velos electrohilados, la porosidad puede variar según los parámetros del proceso, como la concentración de la solución, la velocidad de extrusión y la distancia entre la aguja y el colector (Ameer *et al.*, 2019). La porosidad controlada de los velos tiene grandes usos, entre ellos:

Filtración y separación: La porosidad es crucial en aplicaciones de filtración y separación, donde se utiliza los velos para retener partículas o sustancias de ciertos tamaños mientras permite el paso de otras. Velos altamente porosos son eficientes para la retención de partículas finas (Liu *et al.*, 2020).

Liberación controlada de sustancias: En aplicaciones como la liberación controlada de fármacos o la entrega de sustancias, la porosidad del velo puede influir en la velocidad y la eficacia de la liberación (Wu *et al.*, 2020).

Capacidad de adsorción: La porosidad puede influir en la capacidad del velo para adsorber sustancias en su superficie, lo cual es relevante en aplicaciones como la catálisis y la purificación (Mohammad *et al.*, 2020).

Es importante destacar que, aunque la porosidad es una propiedad clave, la distribución y la forma de los poros también son importantes en las características específicas del velo; el

control preciso de la porosidad es esencial para ajustar las propiedades de los velos según las necesidades específicas de la aplicación (Liu *et al.*, 2020).

2.5. Porosidad

La porosidad es una medida de la fracción vacía en un material. La porosidad total (ϕ) se define por la relación del volumen de vacío espacio (V_v) al volumen total del material (V_T) ecuación 2.1 (Lawrence & Jiang, 2017).

$$\phi = \frac{V_v}{V_T} \text{ ec. 2.1}$$

Existen varios métodos que proporcionan información sobre la distribución del tamaño de los poros como: Porosimetría de intrusión de mercurio, Dispersión de rayos X, Microscopía electrónica u óptica, Porosimetría centrífuga, etc. (Kononenko *et al.*, 2017).

Los métodos de laboratorio como Brunauer-Emmett-Teller (BET), porosimetría de intrusión de mercurio y el método microscópico tienen sus limitaciones:

- (i) La muestra puede dañarse durante el experimento.
- (ii) Estos métodos no pueden proporcionar un modelo tridimensional virtual para determinar las propiedades geométricas y físicas de la estructura porosa.
- (iii) No brindan información directa sobre la forma o el tamaño de cada poro.

Uno de los principales inconvenientes de la porosimetría de intrusión de mercurio es que requiere presiones muy elevadas. Por lo tanto, existe una gran posibilidad de que velos con baja resistencia mecánica se destruyan con el uso de presiones altas. Esto es especialmente complicado en el caso de los velos fibrosos electrohilados, ya que no son lo suficientemente rígidos (Ghasemi - Mobarakeh *et al.*, 2007).

Debido a las limitaciones de los métodos experimentales mencionados anteriormente, los métodos de análisis de imágenes se han aplicado ampliamente para analizar las

propiedades estructurales y térmicas de los materiales porosos con baja resistencia mecánica (Mohammadimehr *et al.*, 2020).

Análisis de Imágenes

Existen varios métodos de obtención de imágenes para describir la naturaleza de la porosidad en materiales. Dentro de las técnicas 2D se pueden emplear: microscopía óptica de luz (OM), microscopía electrónica de barrido (SEM) con espectroscopia de rayos X de dispersión de energía (EDX), microscopía electrónica de barrido por emisión de campo (FESEM), haz de iones enfocado (FIB), microscopía electrónica transmisión (TEM). Las técnicas 3D incluye: resonancia magnética nuclear (RMN), microscopía de fuerza atómica (AFM) y tomografía de rayos X (Lawrence & Jiang, 2017).

Debido a que el tamaño medio de los poros afecta significativamente la permeabilidad en los VE (AlMarzooqui *et al.*, 2016) es necesario determinar dicha porosidad. En la Tabla 2.2 se muestran algunas metodologías para determinar la porosidad de velos mediante el análisis de imágenes.

El análisis de imágenes se ha convertido en una técnica importante para la investigación de la porosidad, determinación del tamaño y distribución de los poros (Tomić *et al.*, 2019, Suryamathi *et al.*, 2019). Esta técnica consiste en identificar las áreas de los poros en las imágenes estudiadas, para posteriormente calcular la superficie total que ocupan respecto al área total estudiada. De esta forma, se establece la abundancia de poros o PD en términos porcentuales (%A), donde ϕ es la abundancia de poros o PD, A_p es el área de poros, y A_{tot} es el área total ecuación 2.2. Este concepto se empleó para la caracterización morfológica de los VE.

$$\phi = \frac{A_p}{A_{tot}} \times 100 \quad ec. 2.2$$

Tabla 2.2. Determinación porosidad por análisis de imágenes.

Autor	Formula
Ghasemi-Mobarakeh <i>et al.</i> , 2007	$P = \left(1 - \frac{n}{N}\right) \times 100$ <p>Donde n es el número de píxeles blancos, N es el número total de píxeles en la imagen binaria y P es el porcentaje de porosidad de la imagen binaria.</p>
Ziabari <i>et al.</i> , 2008	$\varepsilon_A = \frac{A_o}{A_t} \times 100$ <p>ε_A=porosidad A_o=Área abierta A_t=Área total</p>
Ziel <i>et al.</i> , 2008	<p>La "fracción de área porosa" se define por el área de los poros dividida por el área total de la imagen. La "fracción de área porosa" no corresponde directamente a un "tamaño poro", sino a una "porosidad local".</p>
AlMarzooqui <i>et al.</i> , 2016	<p>Las imágenes SEM se convirtieron a imágenes binarias de 8 bits (blanco y negro), las áreas negras representan los poros y las áreas blancas representan la superficie sólida (polímero matriz). Las imágenes fueron ajustadas antes de convertirlas a imágenes binarias, alterando su brillo y contraste para lograr un resolución de la imagen. La imagen binaria se analizó usando la herramienta "analizar partículas" integrada en ImageJ.</p>
Hossen <i>et al.</i> , 2020	$P = \frac{A_p}{A_t}$ <p>Donde P= Porosidad A_p=Área poros A_t=Área total de la imagen.</p>

Krohn & Thompson (1986) encontraron que los poros tienen características fractales, y la DF puede emplearse para describir las estructuras complejas de los medios porosos fractales. La DF ha sido ampliamente utilizada para caracterizar la compleja geometría del espacio poroso de las rocas de yacimiento (Wang *et al.*, 2020, Xia *et al.*, 2019). Nathani *et al.* (2018) analizó la naturaleza mesoporosa de las fibras de poli(bloque de estireno-metilmacrilato) (PS-b-PMMA) mediante análisis de DF. Shou *et al.* (2014) propuso un modelo analítico, basado en la teoría fractal, para cuantificar la difusión de gases a través de medios fibrosos compuestos por nanofibras y microfibras.

Algunos autores reportan valores de la DF y metodologías que consideran la complejidad de distribución del tamaño, el área de la superficie (D_s) y la tortuosidad de los poros (D_T) (Wang *et al.*, 2021, Jin *et al.*, 2017). El modelo fractal se expresa en términos de área de poros y DF de tortuosidad, lo que permite la cuantificación estadística de las

estructuras geométricas de los medios fibrosos. Es por ello que la teoría fractal se consideró para el estudio de los VE.

2.6. Dimensión fractal (DF)

Hoy en día, el análisis de imágenes puede revelar información importante sobre los materiales, como el tamaño y la forma de los componentes de las estructuras y puede ser una herramienta que permita estudiar los cambios estructurales de los materiales durante su procesamiento. Aguilera (1996) estudió la posibilidad de determinar características de imágenes microscópicas de alimentos y materiales biológicos, utilizando programas informáticos especializados. Parámetros como la circularidad, el diámetro y los volúmenes de los poros, la concentración de algún componente durante el secado puede determinarse cuantitativamente mediante el análisis de imágenes.

La determinación de la PD y DF de la superficie de los velos, podría ser una opción para comprender mejor el electrohilado, así como los factores que afectan a las características de los VE, su microestructura y complejidad, desempeñan un papel importante en los fenómenos de transporte, mecanismos de difusión y otros parámetros asociados a la transferencia de masa.

La geometría fractal es una herramienta matemática empleada para estudiar sistemas complejos que no tienen una escala de longitud característica (escala invariable), estos sistemas se caracterizan por dimensiones no enteras denominadas "fractales" (Bunden *et al.*, 1994). Mandelbrot en 1977, en su obra "La Geometría Fractal de la Naturaleza", describió las diferentes formas irregulares y fragmentadas que nos rodean y las llamo fractales, también identificó que estas formas son semejantes a todas las escalas. Los fractales son estructuras autoescalables que se clasifican en deterministas y aleatorios (Praveena *et al.*, 2019).

Los fractales se caracterizan por la *autosimilitud* o invariancia de escala y son formas geométricas fragmentadas que se pueden segmentar en partes más pequeñas, donde cada una de las cuales representa una copia en miniatura de todo el objeto. Cada elemento de estas copias reducidas puede dividirse posteriormente en partes más pequeñas, y luego estas

dividido en más elementos más pequeños, y así hasta el infinito, proporcionando subestructuras todas caracterizadas por autosimilitud estadística (Grizzi *et al.*, 2019).

Métodos para calcular la dimensión fractal

Cuando se utiliza la DF para representar las características de los objetos fractales, primero se extraen las características fractales de los objetos y luego se calcula su DF. Los principales métodos para obtener imágenes de objetos son el microscopio electrónico de barrido (SEM), el microscopio electrónico de transmisión (TEM), el microscopio de fuerza atómica (AFM) y otras técnicas de imagen. Cuando el objeto es una imagen, después del procesamiento de grises, se lleva a cabo el procesamiento binario y finalmente, la DF del objeto se puede calcular mediante un algoritmo gráfico de DF (Duan *et al.*, 2021).

Los métodos comunes para calcular la DF incluyen el método de conteo de cajas, el método de dimensión de correlación, el método del índice de Hurst, método de isla de hendidura, método de vara de medir, método de área-perímetro, método de alfombra de Sierpiński, método de semivarianza y método de densidad espectral de potencia (Duan *et al.*, 2021, Florio *et al.*, 2019).

Método de conteo de cajas

El método de conteo de cajas consiste en el uso de algoritmos de geometría cuadrangular de diferentes tamaños, en el cual se mide el perímetro o área que ocupa la imagen, de tal forma que se mide la cantidad (N) de cuadros de tamaño “r” para abarcar el perímetro o área del objeto en estudio. La ecuación que determina la DF se obtiene de la ecuación 2.3, a partir de un gráfico logarítmico de N(r), vs. (r) (Mandelbrot, 1977).

$$N(r) = L_{DF} R^{-DF} \quad \text{ec. 2.3}$$

donde:

$N(r)$ = número de cuadros usados para abarcar la imagen

r = tamaño del cuadro

L_{DF} = constante de proporcionalidad

DF =dimensión fractal obtenida por el método de conteo de cajas

Los algoritmos usados pueden no solo usar geometría cuadrada, sino también con forma triangulares o circulares.

En la Figura 2.2 se presenta el procedimiento del conteo de cajas aplicado a la determinación de la DF de la superficie de los velos en las micrografías obtenidas en este estudio.

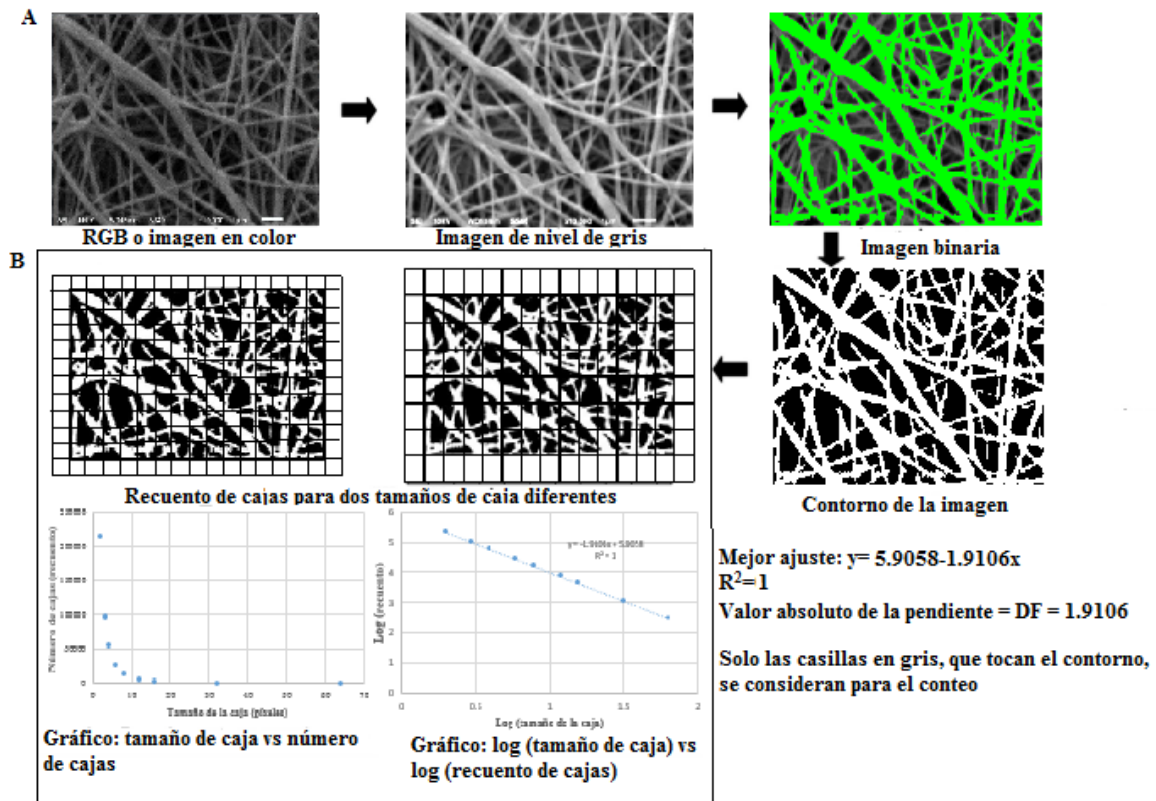


Figura 2.2. Procesamiento de imágenes (A) y ejemplo del método de conteo de cajas (B) para determinar la DF de la superficie de los velos.

En aplicaciones prácticas la determinación de la dimensión de conteo de cajas se puede estimar a partir de la pendiente de la línea de regresión de un gráfico logarítmico trazado para una colección discreta adecuada de escalas δ . (Fernández- Martínez *et al.*, 2014). De igual forma que el concepto de DF se aplicó a la superficie de los velos, este concepto fue considerado para interpretar la PD de las fibras electrohiladas.

2.7. Predicción y modelado del electrohilado

Debido a la complejidad y las relaciones no lineales entre los parámetros que afectan el diámetro de las fibras electrohiladas, se ha propuesto un número reducido de modelos teóricos empíricos y numéricos para su predicción, dado que el electrohilado es un proceso complejo que involucra procesos electrostáticos, procesos de transferencia de momento y masa (Mohammadzadehmoghadam *et al.*, 2016). A continuación se describen algunos de los modelos reportados en la literatura.

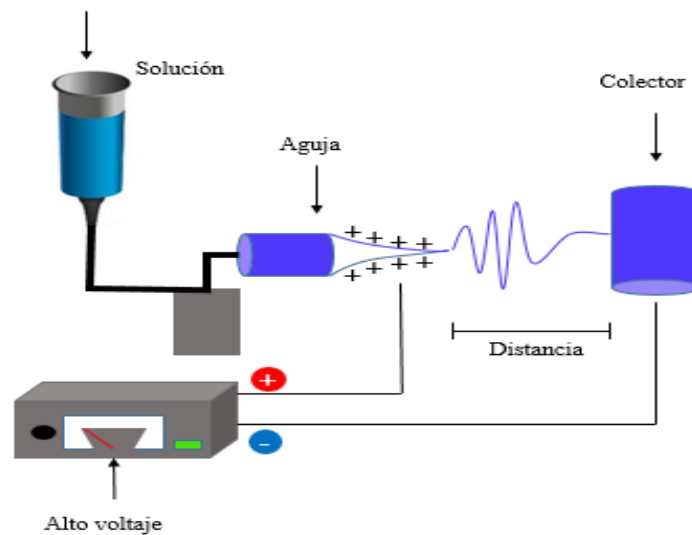


Figura 2.3. Proceso de electrohilado.

Modelo de Fridrikh

El modelo de Fridrikh *et al.* (2003) predice que el diámetro final del chorro del fluido surge de un equilibrio de fuerza entre tensión superficial y carga electrostática de repulsión. Este modelo establece ecuaciones de movimiento para el chorro, en función de las propiedades del material [conductividad (k), permitividad dieléctrica (ϵ), viscosidad dinámica (μ), tensión superficial (γ) y densidad (ρ)] así como las características de operación [caudal o flujo (Q), campo eléctrico aplicado (E_∞) y corriente eléctrica (I)]. Además asume que el fluido es newtoniano y descuida los efectos elásticos debido al secado del chorro. El medio exterior tiene una constante dieléctrica $\bar{\epsilon}$ y no contempla efectos elásticos y

evaporación de solvente y también asume un adelgazamiento de chorro mínimo después de la saturación de la inestabilidad de azotes.

Ecuación 2.4 movimiento del jet:

$$\rho\pi h^2 \ddot{x} = 2\pi\dot{h}\sigma_0 E_\infty \cdot \hat{\xi} + \left(\pi\gamma + \frac{h\bar{\varepsilon}}{2}\beta(E_\infty \cdot \hat{t})^2\right) + \frac{2\pi^2 h\sigma_0^2}{\bar{\varepsilon}}(3 - 2\ln x) \frac{h}{R} \quad ec. 2.4$$

donde \hat{t} y $\hat{\xi}$ son los vectores unitarios tangenciales y normales a la línea central del chorro $\beta = \varepsilon/(\bar{\varepsilon} - 1)$ y $x \sim R/h$ es la longitud de onda adimensional de la inestabilidad responsable de los desplazamientos normales. Corriente de advección $\sigma_0 = hI/2Q$.

La ecuación 2.5 mostrada a continuación predice el diámetro final del jet, controlado por el caudal, la corriente eléctrica.

$$h_t = \left(\gamma \bar{\varepsilon} \frac{Q^2}{I^2} \frac{2}{\pi(2\ln x - 3)} \right)^{1/3} \quad ec. 2.5$$

Modelo de Stepanyan

El modelo de Stepanyan *et al.* (2014), considera la cinética de alargamiento y evaporación, que rige el diámetro de las nanofibras, en lugar del equilibrio entre la repulsión electrostática entre las cargas en la superficie del jet y la tensión superficial del líquido (ecuación 2.6). La estimación se basa en el supuesto de que la solución polimérica puede describirse como un fluido newtoniano y, por lo tanto, la viscosidad elongacional es simplemente tres veces su viscosidad de corte.

$$r_f \sim (k\rho_s\eta_0)^{1/3} \left(\frac{Q}{I}\right)^{2/3} \quad ec. 2.6$$

donde k : Velocidad de evaporación.

η_0 : Viscosidad de la solución.

ρ_s : Densidad de la solución.

Q : Flujo volumétrico.

I : Intensidad de corriente.

r_f : Diámetro final fibra.

El modelo Stepanyan *et al.* (2016) propone que la carga eléctrica q ecuación 2.7 no cambia en el transcurso de la deformación del jet.

$$q = V_0 I / Q \quad \text{ec. 2.7}$$

donde V_0 es el volumen inicial jet ecuación 2.8, I corriente eléctrica y Q es la velocidad flujo volumétrico de la solución polímero.

$$V_0 = 2\pi^2 R_0 r_0^2 \quad \text{ec. 2.8}$$

Balance Momento

La ecuación 2.9 representa un equilibrio de momento, que rige la evolución del radio r (t) de la fibra. Su lado izquierdo corresponde a las tensiones que surgen de la electrostática, tensión superficial y fuerzas viscoelásticas y el lado derecho representa los efectos inerciales.

$$\pi r^2 \left(\frac{q}{V}\right)^2 \ln \frac{4V}{\pi^2 e^{3/2} r^3} - \frac{\gamma}{r} - N_1 = \frac{\rho V^2}{2\pi^4} \left(\frac{3\dot{r}^2}{r^6} - \frac{\ddot{r}}{r^5}\right) \quad \text{ec. 2.9}$$

Balance de masa

Asumen que la masa y el volumen de la fibra se reduce por la evaporación de la solución durante el transporte de la fibra del inyector al colector (ecuación 2.10).

$$\dot{V} = -\frac{2V}{r} \Phi \quad \text{ec. 2.10}$$

donde Φ es el flujo de evaporación y V es volumen de la fibra.

Para la solución numérica, se introdujo un radio adimensional $x = r / r_0$ en la ecuación de momento y de masa como se muestra en la ecuación 2.11 y 2.12.

$$\frac{x^2}{\psi^2} \ln \frac{8\chi\psi}{\pi^2 e^{3/2} x^3} - \frac{x_s^3}{x} - N_1 \frac{\tau_v}{\eta_0} = \left(\frac{\tau_i}{\tau_v}\right)^2 \left[\frac{3x'^2}{x^6} - \frac{x''}{x^5}\right] \psi^2 \quad \text{ec. 2.11}$$

$$\psi' = -\frac{\tau_v}{\tau_{ev}} \frac{\psi}{x} \left(1 - \frac{\omega_{p0}}{\psi}\right) \quad \text{ec. 2.12}$$

x' , ψ' denota las derivadas de tiempo con respecto a la variable de tiempo dimensional $\theta = t/\tau_v$ y un atajo $x_s^3 = \gamma/(\pi r_0^3)(Q/I)^2$ ha sido introducido. Los tiempos característicos τ_v , τ_i

y τ_{ev} ecuación 2.13, 2.14 y 2.15 respectivamente corresponden a los valores electroviscosos, electroinercial y la evaporación escalas de tiempo, tomando un $r=r_0$.

$$\tau_v = \frac{\eta_0}{\pi r_0^2} \left(\frac{Q}{I} \right)^2 \quad ec. 2.13$$

$$\tau_i = \left(\frac{2\rho\chi^2}{\pi} \right)^{1/2} \frac{Q}{I} \quad ec. 2.14$$

$$\tau_{ev} = \frac{r_0}{2k\rho_s} \quad ec. 2.15$$

Pai *et al.* (2011) propuso dos modelos cuantitativos basados en la microestructura de fibras rectas y fibras curva para estudiar el efecto de la curvatura de la fibra sobre el módulo elástico de una malla electrohilada. Su estudio mostró que, la porosidad, el módulo de elasticidad de las fibras, el diámetro promedio de las fibras y la curvatura de las fibras son factores importantes que afectan sus propiedades mecánicas.

Números Adimensionales

El proceso de electrohilado consta de tres etapas que corresponden al comportamiento del chorro electrohilado: Primera etapa: formación del cono de Taylor, donde la superficie de la gota que se mantiene en la punta de la aguja debido a la tensión superficial se carga electrostáticamente debido a la aplicación del alto voltaje aplicado, la segunda etapa se refiere a la expulsión del chorro recto y la tercer etapa considera la región de chorro de azote inestable (Angamma & Jayaram, 2011), de tal manera que el chorro se rige por cuatro ecuaciones de estado estacionario que representan: conservación de masa, cargas eléctricas, equilibrio de momento lineal y la ley de Coulomb para el campo eléctrico (Feng, 2002). Las ecuaciones 2.16, 2.17 y 2.18 describen el comportamiento del chorro son:

Conservación Masa

$$\pi R^2 v = Q \quad ec. 2.16$$

donde Q es un caudal volumétrico constante, R radio del chorro y v es la velocidad.

Conservación carga

$$\pi R^2 KE + 2\pi R v \sigma = I \quad \text{ec. 2.17}$$

donde E es el campo eléctrico, K es la conductividad del líquido, I es la corriente total constante en el jet.

Balance momento

$$\rho v v' = \rho g + \frac{3}{R^2} \frac{d}{dz} (\eta R^2 v') + \frac{\gamma R'}{R^2} + \frac{\sigma \sigma'}{\bar{\epsilon}} + (\epsilon - \bar{\epsilon}) E E' + \frac{2\sigma E}{R} \quad \text{ec. 2.18}$$

donde σ es la densidad de carga superficial, ϵ y $\bar{\epsilon}$ son las constantes dieléctricas del chorro y el aire, respectivamente.

A partir de ecuaciones de conservación de masa, momento y carga eléctrica aplicados al chorro de electrohilado de un fluido newtoniano en estado estacionario, se identificaron cuatro grupos adimensionales, estas ecuaciones se muestran a continuación respectivamente:

$$R^2 v = 1 \quad \text{ec. 2.19}$$

$$v v' = \frac{1}{Fr} + \frac{3}{Re} \frac{1}{R^2} \frac{d(\eta R^2 v')}{dz} + \frac{1}{We} \frac{R'}{R^2} + \psi \left(\sigma \sigma' + \beta E E' + \frac{2E\sigma}{R} \right) \quad \text{ec. 2.20}$$

$$E R^2 + Pe R v \sigma = 1 \quad \text{ec. 2.21}$$

Donde los grupos adimensionales son los siguientes:

$$Pe = \frac{2\bar{\epsilon} v_0}{KR_0}, \quad Re = \frac{\rho v_0 R_0}{\eta_0}, \quad We = \frac{\rho v_0^2 R_0}{\gamma}, \quad \psi = \frac{\bar{\epsilon} E_0^2}{\rho v_0^2}$$

El número de Peclet (Pe) es una relación entre la conducción eléctrica y las escalas de tiempo convectivas, que representa el movimiento de las cargas libres en relación con el movimiento del chorro.

El número de Reynolds del chorro (Re) es una relación entre las tensiones inerciales y las viscosas, que representa la energía cinética del chorro en relación con la disipación viscosa.

El número de Weber (We) es una relación entre las fuerzas inerciales y tensión superficial por unidad de longitud de la superficie.

Finalmente, la intensidad de campo adimensional (ψ) es una relación de tensiones electrostáticas a inerciales.

Estos grupos adimensionales son funciones de la permitividad dieléctrica de la atmósfera ($\bar{\epsilon}$); conductividad (K), densidad (ρ), viscosidad de corte cero (η_0); tensión superficial de fluido (γ); campo eléctrico aplicado (E_0); y radio característico del chorro (R_0); la velocidad (v_0); Densidad carga superficial (σ_0). La intensidad del campo eléctrico característico E_0 se toma como el voltaje (Φ_0) dividido por la distancia entre la punta del capilar y el colector (L), Φ_0/L (Helgeson & Wagner, 2007, Rutledge & Fridrikh, 2007).

La velocidad de alimentación (v_0), la intensidad del campo eléctrico y densidad carga superficial (σ_0) ecuaciones 2.22, 2.23 y 2.24 respectivamente, se determinan experimentalmente a partir de los valores numéricos de las propiedades de la solución polimérica y los parámetros de proceso en el equipo de electrohilado.

$$v_0 = \frac{Q}{\pi R_0^2} \text{ ec. 2.22} \quad E_0 = \frac{I}{\pi R_0^2 K} \text{ ec. 2.23} \quad \sigma_0 = \bar{\epsilon} E_0 \text{ ec. 2.24}$$

Donde se resume que el diámetro final de la fibra depende de los parámetros de solución y procesamiento y del sistema polímero-solvente utilizado, implicando interacciones complejas entre la dinámica de fluidos, la electrodinámica y la reología. Dada esta complejidad, es difícil derivar un modelo matemático para el proceso completo (Gadkari, 2014).

Otro enfoque propuesto para controlar las variables del proceso del electrohilado fue el desarrollado por Helgeson & Wagner (2007) quienes desarrollaron una correlación para predecir el diámetro de la fibra mediante un análisis dimensional. Utilizando el número de Ohnesorge (ecuación 2.25) que relaciona las fuerzas viscosas y las fuerzas de tensión

superficial de la solución en el inyector. Un grupo adimensional Π_1 (ecuación 2.26) que incluye el número Reynolds (relación entre las tensiones inerciales y las viscosas, que representa la energía cinética del chorro en relación con la disipación viscosa), Peclet (relación entre la conducción eléctrica y las escalas de tiempo convectivas, que representa el movimiento de las cargas libres en relación con el movimiento del chorro y intensidad de campo adimensional (ψ) (relación de tensiones electrostáticas a inerciales).

$$Oh = \frac{\eta_0}{\sqrt{\rho\gamma R_o}} \quad ec. 2.25$$

donde η_0 viscosidad de corte cero; ρ densidad; γ tensión superficial; R_o radio característico del chorro, unidades η_0 (Pa·s), ρ (kg/m³), γ (N/m), R_o (m).

$$\Pi_1 = \frac{2\bar{\epsilon}^2 E_o^2}{k\eta_0} \quad ec. 2.26$$

Este nuevo número adimensional ecuación 2. 26 está en función de permitividad dieléctrica de la atmósfera ($\bar{\epsilon}$), conductividad (K), viscosidad de corte cero (η_0); campo eléctrico aplicado (E_o). La intensidad del campo eléctrico característico E_o se toma como el voltaje (Φ_0) dividido por la distancia entre la punta del capilar y el colector (L). Se puede interpretar como un esfuerzo adimensional que impulsa el alargamiento del chorro. Las unidades de $\bar{\epsilon}$ (C²/Nm²), K (S/m), η_0 (Pa·s), Φ_0 (V), L (m) respectivamente.

Después de realizar arreglos entre las variables, la ecuación 2.27 fue empleada para la predicción de las fibras durante el electrohilado.

$$\Pi_1 Oh = \frac{2\bar{\epsilon}^2 \Phi_0^2}{KL^2(\rho\gamma R_{jet})^{1/2}} \quad ec. 2.27$$

Superficies respuesta

Otra propuesta para predecir el diámetro y orientación de la fibras, es el método de Superficie de respuesta (RSM), combinación de técnicas matemáticas y estadísticas, útil para la modelación estadística y el análisis de problemas en los que se pretende optimizar una

respuesta de interés, afectada por varias variables (Li *et al.*, 2014). He *et al.* (2020) analizó la influencia de los parámetros del proceso sobre el diámetro y la orientación de las fibras electrohiladas con corriente alterna (CA), utilizando la metodología RSM. El experimento se diseñó con cuatro parámetros del proceso: concentración de la solución, distancia, voltaje y velocidad de recolección. Sus resultados indicaron que la concentración de la solución y la velocidad de recolección tienen una influencia similar en el diámetro y la orientación de la fibra. Angel *et al.* (2020) investigaron el efecto de tres parámetros del electrohilado, concentración de la solución de acetato celulosa, voltaje y la distancia del inyector al colector, utilizando principios de optimización de procesos y metodología de superficie de respuesta, reportó que los diámetros aumentaron al incrementar la concentración de la solución polimérica.

Redes Neuronales Artificiales (RNA)

Las RNA son herramientas de modelado para resolver casos complejos, control de calidad, minería de datos y problemas de regresión multivariante lineal y no lineal y en este trabajo de tesis se proponen para modelar la relaciones de variables que participan en el electrohilado, principalmente para predecir el diámetro de las fibras (Kalantary *et al.*, 2020, Khatti *et al.*, 2019).

Enfocando el uso de las RNA para la predicción de propiedades de los materiales electrohilados, se realizó una búsqueda bibliográfica de la literatura del electrohilado, las variables que afectan al proceso y el uso de las RNA para la predicción de las propiedades, misma que se presenta en la Tabla 2.3.

Tabla 2.3. Parámetros que han sido alimentos a las RNA para la predicción de propiedades de fibras electrohiladas.

Título	Variables Entrada	Variables Salida
Hacia la predicción de la piezoelectricidad y las propiedades fisicoquímicas de los nanogeneradores electrohilados de P (VDF-TrFE) utilizando una red neuronal artificial. (Abolhasani <i>et al.</i> , 2018)	Concentración de la solución de polímero, voltaje, flujo y el tiempo de electrohilado.	Diámetro medio de las fibras, el contenido de fase β , el voltaje generado y la cristalinidad.
Estrategias de fusión de datos para la mejora del rendimiento de una plataforma de tecnología analítica de procesos que consta de cuatro instrumentos: Un estudio de caso de electrohilado. (Casian <i>et al.</i> , 2019)	Datos de espectroscopia de infrarrojo cercano, espectroscopia Raman, colorimetría y análisis de imágenes.	Cuantificar ingrediente farmacéutico activo.
Modelos basados en redes neuronales artificiales para predecir el coeficiente de absorción de sonido del compuesto de poli (vinilpirrolidona) / sílice electrohilado. (Ciaburro <i>et al.</i> , 2020)	Datos de frecuencia.	Coefficiente de absorción de sonido del material.
Predicción de conductividades térmicas de fibras nanocompuestas electrohiladas de poliacrilonitrilo utilizando una red neuronal artificial y un algoritmo de depredador presa. (Hamadneh <i>et al.</i> , 2019)	Peso molecular y concentración de iones metálicos.	Conductividad térmica de PAN.
Detección de vapores de alquilamina utilizando una matriz de sensores nanocompuestos híbridos PPy-ZnO y una red neuronal artificial (Jamalabadi <i>et al.</i> , 2018)	Concentración de aminas, metilamina, etilamina, propilamina y n-butilamina.	Respuesta del sensor.
Nueva estimación del comportamiento morfológico de nanofibras electrohiladas con sistema de inteligencia artificial (AIS) (Nasouri, 2018)	Concentración de la solución de polímero, PVP (polivilpirrolidona), voltaje y distancia del inyector al colector.	Diámetro medio de las nanofibras de PVP.
Estimación cuantitativa del diámetro de la membrana de nanofibra de poli (metacrilato de metilo) mediante redes neuronales artificiales. (Sadan <i>et al.</i> , 2016)	Concentración de la solución de polímero, distancia del inyector al colector, temperatura, flujo y voltaje.	Diámetro nanofibras de poli (metacrilato de metilo).

Un modelo de red neuronal para la predicción numérica del diámetro de nanofibras de óxido de polietileno electrohiladas. (Sarkar <i>et al.</i> , 2009)	Concentración de la solución del polímero, conductividad, flujo y la intensidad del campo eléctrico.	Diámetro nanofibras oxido polietileno.
Modelo basado RNA para analizar el módulo de elasticidad de fibras electrohiladas policaprolactona / gelatina. (Vatankhah <i>et al.</i> , 2014)	Relación de peso del polímero, diámetro de la fibra y la orientación de la fibra.	Módulo elástico.
Fabricación de fibras coaxiales utilizando clorhidrato de tetraciclina (TCH) como núcleo y poli (L-lactida-co-glicólido) (PLGA) o policaprolactona(PCL) como corteza. (Maleki <i>et al.</i> , 2014)	Densidad, hidrofiliidad, flujo del núcleo y corteza, concentración del polímero núcleo y corteza, contribución de TCH en el núcleo y el campo eléctrico.	Predecir las constantes de Peppas
Modelado de la relación entre los parámetros del proceso de electrohilado y el diámetro de nanofibras magnéticas de ferrofluido / alcohol polivinílico mediante redes neuronales artificiales. (Maurya <i>et al.</i> , 2020)	Voltaje, flujo, distancia inyector al colector y velocidad de rotación del colector.	Diámetro de la fibra de ferrofluido/alcohol polivinílico.
Técnicas de aprendizaje profundo para la predicción del peso molecular de la policaprolactona mediante el proceso de polimerización enzimática. (You <i>et al.</i> , 2020)	Parámetros de reacción, tiempo y temperatura de reacción.	Peso molecular policaprolactona.

Del análisis de la Tabla 2.3, la gran mayoría de los trabajos publicados acerca del uso y construcción de las RNA para la predicción del fenómeno de electrohilado, emplean un solo polímero electrohilable, diferentes datos de entrada: concentración de la solución de polímero, voltaje aplicado, flujo de la solución. Y un menor número de trabajos alimenta a la RNA datos como conductividad, hidrofiliidad y densidad de la solución, e intensidad del campo eléctrico, y velocidad de rotación del colector.

A continuación, se presenta una descripción sobre los biopolímeros y aceites esenciales empleados para la obtención de las fibras electrohiladas en nuestro estudio.

2.8. Biopolímeros y aceites electrohilados

Alcohol polivinílico (PVA)

El PVA es un polímero sintético soluble en agua, producido por polimerización de acetato de vinilo a acetato de polivinilo, y una sucesiva hidrólisis parcial o total de grupos acetato (Rodríguez *et al.*, 2020). El PVA existe en diferentes presentaciones para una variedad de aplicaciones, incluidas las farmacéuticas, biomédicos y otros (Aslam *et al.*, 2018).

- Hidrogeles de PVA
- Películas de PVA
- Velos de PVA
- Fibras de PVA

El PVA se ha investigado para la producción de andamios de ingeniería de tejidos debido a su excelente biocompatibilidad, biodegradabilidad, rendimiento mecánico y lo más importante, debido a su capacidad para disolverse en soluciones acuosas (Teixeira *et al.*, 2019). Siendo la solubilidad una propiedad importante para su aplicación en la industria, que está fuertemente asociada con el grado de hidrólisis.

Los grados comerciales de PVA se clasifican en parcialmente hidrolizados (10 a 15% mol de grupos acetato) y completamente hidrolizado (1–2 % mol de grupos acetato) como se muestra en la Figura 2.4 respectivamente. El PVA totalmente hidrolizado tiene una baja solubilidad en agua en comparación con el PVA parcialmente hidrolizado (Aruldass *et al.*, 2019).

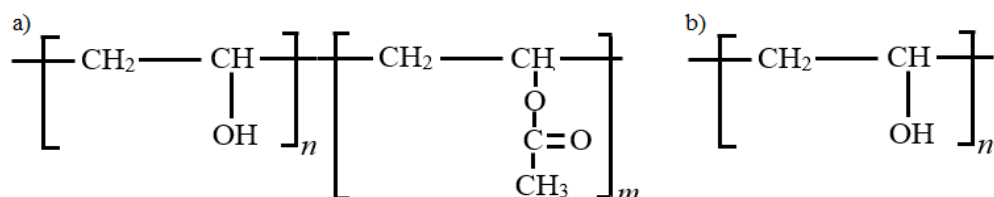


Figura 2.4. Estructura química del PVA a) parcialmente hidrolizado; b) completamente hidrolizado (Rodríguez *et al.*, 2020).

Quitosano (QS)

El QS se puede obtener de los caparazones de crustáceos, como langostas, cangrejos y camarones, así como de escamas de peces y muchos otros tipos de organismos (insectos y hongos) (Kumari *et al.*, 2020). El QS es un polímero lineal formado por monómeros de β -1,4-D-glucosamina y en menor medida de N-acetil-D-glucosamina (Figura 2.5). La fracción molar de las unidades repetidas N -acetiladas se define como el grado de acetilación, mientras que el porcentaje de unidades repetidas de β -1,4-D-glucosamina en los polisacáridos se define como el grado de desacetilación (Kou *et al.*, 2021).

La presencia de grandes cantidades de grupos protonados $-NH_2$ en la estructura del QS explica su solubilidad en medios ácidos acuosos. La solubilidad del QS también depende de diferentes factores como el peso molecular del biopolímero, el grado de acetilación, el pH, la temperatura y la cristalinidad del biopolímero (Aranaz *et al.*, 2021).

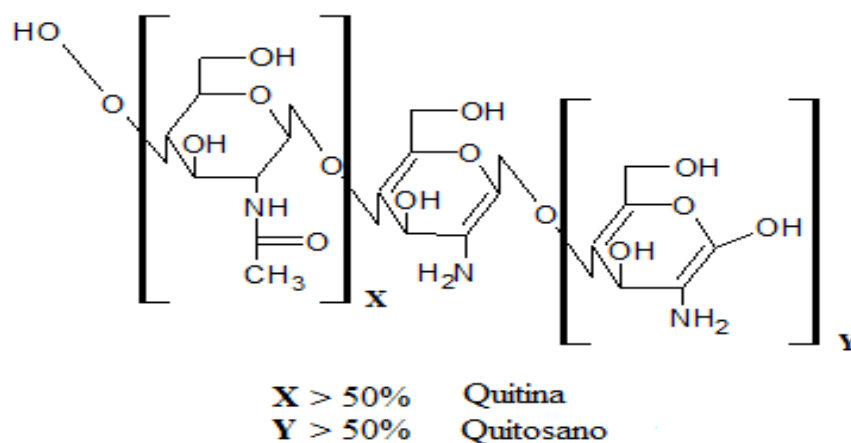


Figura 2.5. Estructura química del QS (Rinaudo *et al.*, 2006).

El QS es un polímero no tóxico, biocompatible, biodegradable, antiinflamatorio, antibacteriano, antitumoral, antifúngico, hemostático y analgésico (Azmana *et al.*, 2021) debido a las propiedades antes mencionadas el QS tiene diferentes aplicaciones, como su aplicación en la industria maderera y papelera, cosmética, agricultura, tecnología alimentaria, biotecnología, química, medicina, textil, etc. (Gal *et al.*, 2023).

Gelatina

La gelatina es una proteína que se obtiene por desnaturalización térmica del colágeno (Gaspar-Pintiliescu *et al.*, 2019), se pueden producir dos tipos de gelatina basándose en el pretratamiento de colágeno: gelatina tipo A y gelatina tipo B. La gelatina de tipo A se obtiene mediante hidrólisis parcial del colágeno con un ácido, mientras que la gelatina de tipo B con un tratamiento alcalino. Generalmente, la gelatina tipo A se obtiene de cerdos, aves y pescado, mientras que la gelatina tipo B se obtiene de fuentes bovinas (Alipal *et al.*, 2021, Baydin *et al.*, 2022), en la Figura 2.6 se muestra su estructura química básica.

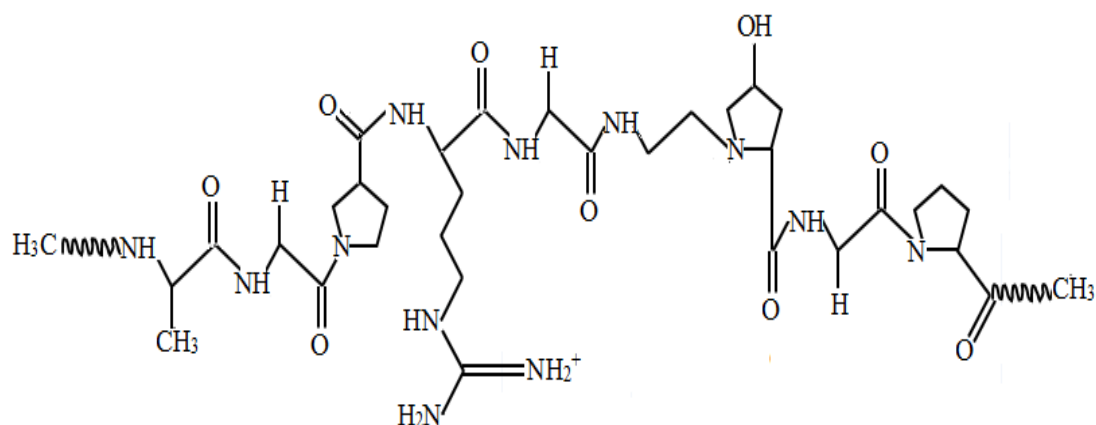


Figura 2.6. Estructura química básica de la gelatina (Molina & Flórez-Castillo, 2020).

La gelatina se compone de 18 variedades de aminoácido, los principales compuestos son glicina, alanina y prolina (Sultana *et al.*, 2018), y se ha utilizado regeneración de tejidos, entrega de medicamentos (Echave *et al.*, 2019), también se ha empleado en la industria alimentaria, sin embargo las películas de gelatina son sensibles a la humedad y se disuelven fácilmente cuando entran en contacto con el agua, lo que limita su uso en envases de alimentos. Para resolver este inconveniente, se han incorporado diversos materiales naturales y sintéticos en las películas de gelatina para mejorar su estabilidad mecánica y térmica, elasticidad y flexibilidad (Luo *et al.*, 2022).

Vitamina E o α - tocoferol

La vitamina E se encuentra en aceites vegetales, aceite de palma, salvado de arroz, germen de trigo, oliva, cebada, soya, nueces y cereales. Esta vitamina es liposoluble y su estructura consta de dos grupos principales: tocoferoles y tocotrienoles. Cada grupo se puede dividir en cuatro isómeros diferentes (alfa, beta, gamma y delta), dependiendo de la posición de los grupos metilo como cadena lateral. En la Figura 2.7 se muestra su estructura química (Mohd Zaffarin *et al.*, 2020).

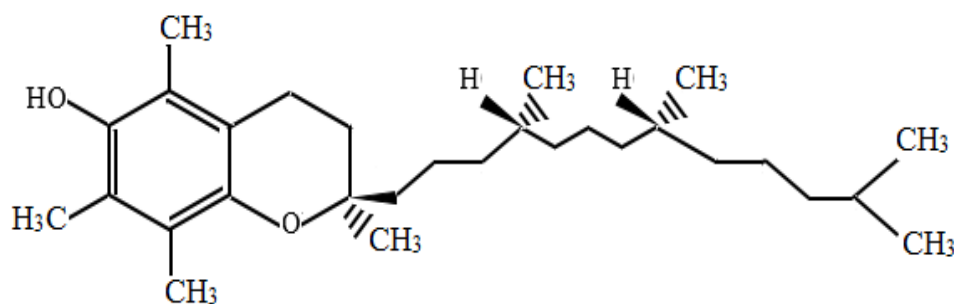


Figura 2.7. Estructura química del α - tocoferol (Kline *et al.*, 2004).

La vitamina E es sensible a alta temperatura, luz, oxígeno y condiciones alcalinas, presenta una baja solubilidad en agua, limitando sus aplicaciones. La encapsulación surge como una opción adecuada para la protección de la vitamina E, permitiendo su futura incorporación en productos funcionales para la industria alimentaria, cosmética y farmacéutica (Ribeiro *et al.*, 2021).

Aceites esenciales

Los aceites esenciales son una mezcla compleja de sustancias aromáticas responsable de las fragancias de las flores y se obtienen mediante arrastre de vapor de agua (Franz & Novak, 2020). Los aceites esenciales presentan propiedades antimicrobianas y antioxidantes; tienen aplicaciones en las industrias farmacéuticas, cosmética y alimentaria (Dehghani *et al.*, 2020). Actualmente los aceites esenciales están siendo empleados en la industria alimentaria por su actividad antimicrobiana natural, debido a que estos aceites constan de componentes fenólicos que dañan la membrana citoplasmática de los microorganismos, lo que provoca una

fuga del contenido celular y el agotamiento de la fuerza motriz de protones en la célula microbiana. Se ha investigado la eficacia de los aceites esenciales contra las células bacterianas que residen en las matrices de biopelículas.

Man *et al.* (2019) probaron los efectos inhibidores y bactericidas de seis aceites esenciales (cienso, mirto, tomillo, limón, orégano y lavanda) contra *Staphylococcus aureus*, *Enterococcus faecalis*, *Escherichia coli*, *Klebsiella pneumoniae* y *Pseudomonas aeruginosa*. Khalil *et al.* (2018) reportaron que los aceites esenciales de comino, alcaravea y cilantro tienen una actividad bactericida contra las cepas bacterianas Gram- *E. coli* y *Bordetella bronchiseptica*.

Se carece de información acerca de materiales que contienen aceites esenciales en fibras electrohiladas, por ello, la importancia de este trabajo para predecir los diámetros de fibras a partir dichas emulsiones, usando diferentes configuraciones de RNA, con el objeto de desarrollar nuevos materiales con propiedades antimicrobianas aplicables a la industria.

Aceite de oliva

El aceite de oliva es una grasa vegetal líquida obtenida por diferentes sistemas mediante maceración, extracción asistida por microondas, extracción asistida por ultrasonido, extracción de líquidos a presión, etc., a partir de frutos del olivo *Olea europaea L.* (Zaroual *et al.*, 2022, Otero *et al.*, 2021). El aceite de oliva se caracteriza por su alta composición de ácido oleico. En la Figura 2.8 se muestra su estructura química.

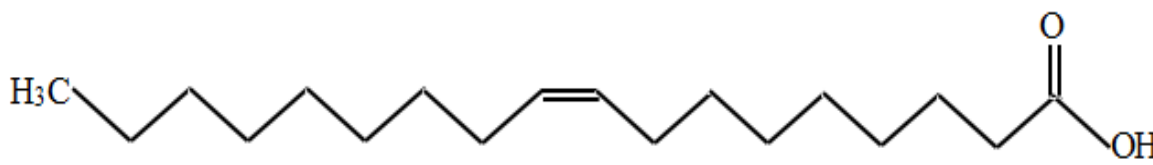


Figura 2.8. Estructura química del ácido oleico (Mishra *et al.*, 2010).

Los lípidos más frecuentes en el aceite de oliva son los ácidos grasos monoinsaturados que comprenden aproximadamente entre el 72% y el 77%, Los ácidos grasos saturados que constituyen aproximadamente el 14% del contenido del aceite de oliva. El aceite de oliva

tiene un bajo contenido de ácidos grasos poliinsaturados; en la Tabla 2.4 se muestra la composición de los ácidos grasos presentes en este aceite (Guo *et al.*, 2018). Es empleado en la industria alimentaria y cosmética.

Tabla 2.4. Ácidos grasos en el aceite de oliva (Guo *et al.*, 2018).

Ácidos grasos	Numero de lípidos	Valor medio (%)
Mirístico	C14:0	0.010
Palmítico	C16:0	12.09
Palmitoleico	C16:1	1.15
Margárico	C17:0	0.05
Margaroleico	C17:1	0.10
Estearico	C18:0	3.01
Oleico	C18:1	72.77
Linoleico	C18:2	9.47

Aceite de naranja

El aceite esencial de naranja es obtenido a partir de la cáscara de la fruta de naranja (*Citrus sinensis*) por hidrodestilación, sus principales compuestos presentes en el aceite de cáscara de naranja son D-limoneno (92.42%), linalool (2.13%) y mirceno (1.30%). En la Figura 2.9 se muestra la estructura química del D-limoneno (Hassan *et al.*, 2021).

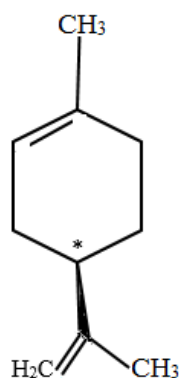


Figura 2.9. Estructura química del D-limoneno (Akhavan-Mahdavi *et al.*, 2022).

El aceite de naranja ha sido utilizado en la conservación de alimentos como agente antimicrobiano, productos farmacéuticos y cosméticos (Gavahian *et al.* 2019).

Aceite de anís

El aceite de anís es extraído del anís (*Pimpinella anisum* L.) mediante ultrasonido, hidrodestilación, extracción con agua subcrítica entre otros métodos (Nasir *et al.*, 2023). Sus componentes principales son *trans*-anetol (82.1%), γ -Himachaleno (7%), α -Himachaleno (0.71%), δ -elemeno (0.45), estragol (0.33%) entre otros componentes (Sun *et al.*, 2019). En la Figura 2.10 se muestra la estructura química del *trans*-anetol.

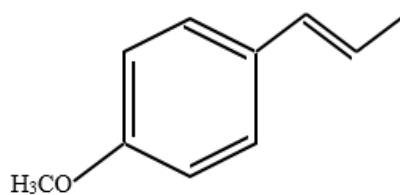


Figura 2.10. Estructura química *trans*-anetol (Ghosh *et al.*, 2019).

El aceite esencial de anís tiene propiedades antibacterianas, antifúngicas, antioxidantes y antiinflamatorias (Dumitrescu *et al.*, 2023). Debido a sus propiedades se ha utiliza a menudo como aromatizantes y conservadores en una amplia gama de industrias diferentes, incluidas la farmacéutica, la alimentaria, la de bebidas y la cosmética (Azam *et al.*, 2023).

Aloe vera

La planta de *Aloe vera* está compuesta por más del 98% de agua y sus hojas tienen más de setenta y cinco componentes diferentes, incluidas vitaminas, minerales, enzimas, simples y complejos (Lima *et al.*, 2020). La hoja de *Aloe vera* (Figura 2.11) se puede dividir en dos partes: *Aloe látex de vera* que contiene principalmente antraquinonas (incluyen aloína A, aloína B, aloe-emodina, crisofanol, aloenina), gel de hoja de aloe vera contiene polisacárido de *Aloe*, el más común es el polisacárido de glucosa-manosa (Gao *et al.*, 2019).

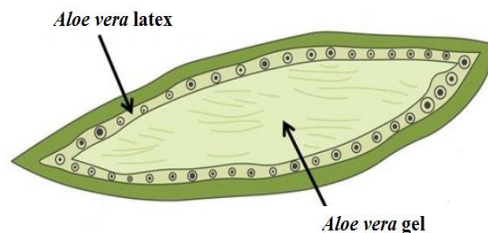


Figura 2.11. Hoja de *aloe vera* (Gao *et al.*, 2019).

La aloína es el componente principal del *Aloe vera*, consistente en una mezcla de dos diastereoisómeros, aloína A y aloína B como se muestra en la Figura 2.12 (Lima *et al.*, 2020).

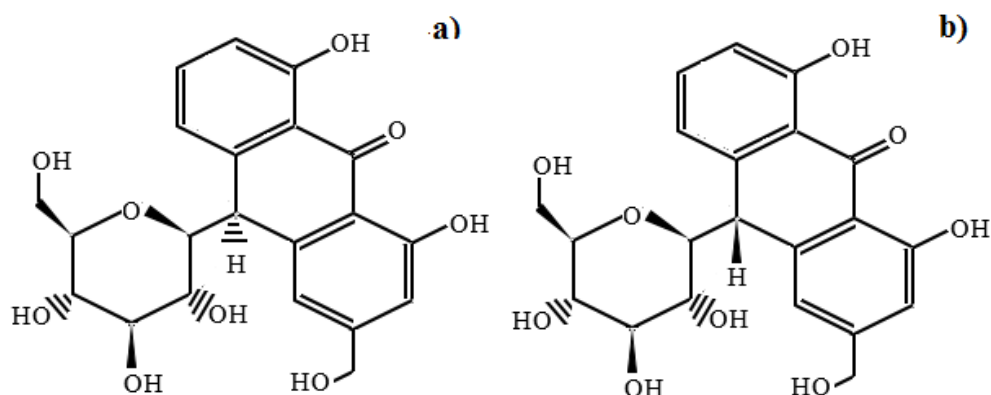


Figura 2.12. Estructura química de la aloína A a) y la aloína B b) (Xiao *et al.*, 2022).

El gel de *aloe vera* se ha aplicado cicatrización de heridas, también se ha utilizado como fuente de alimentos funcionales en bebidas como leche, helados, etc., estos productos tienen beneficios para la salud como reducir el cáncer, la diabetes (Gao *et al.*, 2019).

En este trabajo de investigación se construyeron varias RNA para la predicción del diámetro de las fibras y la morfología de los velos empleando su PD y DF, alimentando datos de voltaje, flujo de la solución/emulsión y otras variables de entrada como viscosidad y conductividad de la solución polimérica.

CAPÍTULO 3 MATERIALES Y MÉTODOS

La metodología planteada para la realización de esta tesis, está en correspondencia con los objetivos de la misma.

OBJETIVO 1

Determinar las propiedades físicas conductividad y viscosidad, en soluciones PVA, PVA/QS, PVA/AV y emulsiones GA/AT, PVA/AO, PVA/AN y PVA/AA.

3.1. Preparación de soluciones/emulsiones para el electrohilado

La Tabla 3.1 muestra el procedimiento de preparación de diferentes soluciones/emulsiones poliméricas acuosas cuyas propiedades físicas fueron determinadas antes del proceso de electrohilado.

Las soluciones de PVA se prepararon dispersando el PVA en agua destilada con agitación de 600 rpm y $80 \pm 1^\circ\text{C}$, durante 30 minutos (Elkasaby *et al.*, 2018; Lan *et al.*, 2019). Posteriormente, a $25 \pm 1^\circ\text{C}$ se incorporó los aceites esenciales (AO, AN o AA) para formar la emulsión y se sometió a agitación mecánica durante 5 min.

La solución de GA fue dispersada en una solución de ácido acético y agua destilada, con agitación de 600 rpm y temperatura de $90 \pm 1^\circ\text{C}$, durante 1 hora. Posteriormente, a $25 \pm 1^\circ\text{C}$ se incorporó el AT emulsificándose por agitación mecánica durante 5 min (Tavassoli Kafrani *et al.*, 2018). Para las soluciones PVA/QS, se preparó una solución al 10% p/p de PVA y otra de QS utilizando una solución acuosa de ácido acético al 2%, posteriormente se mezclaron las dos soluciones a temperatura de $25 \pm 1^\circ\text{C}$ durante 1 h, previo al proceso de electrohilado (Cay *et al.*, 2014) y finalmente las soluciones de PVA/AV fueron homogenizadas a temperatura $25 \pm 1^\circ\text{C}$ durante 1 h.

Las soluciones a temperatura ambiente se inyectaron en un equipo de electrohilado modelo espin-50kV marca SEV. Para el proceso de electrohilado se empleó un rango de voltaje de 20 a 30 kV, el equipo se conectó en serie y la distancia entre el inyector-colector osciló entre los 10 a 20 cm.

La concentración de los biopolímeros (PVA, QS y GA) empleada para la obtención de cada una de las soluciones/emulsiones, así como las condiciones de operación del electrohilador, fueron identificadas previamente y solo se reporta en este estudio, aquellas condiciones que presentaron un velo denso constituido por las fibras electrohiladas.

Tabla 3.1. Formulaciones de las soluciones/emulsiones para el electrohilado.

Soluciones/Emulsiones	Procedimiento
PVA	Solución acuosa preparada de PVA (% w/w): 8 y 10
PVA/AO	Emulsión formada con 10 (% p/p) de PVA con AO. Composición (% p/p): 96 (PVA) con 4 (AO) y 92 (PVA) con 8 (AO).
PVA/AN	Emulsión formada con 10 (% p/p) de PVA con AN. Composición (% p/p): 95 (PVA) con (AN), 92.5 (PVA) con 7.5 (AN) y 90 (PVA) con 10 (AN).
GA/AT	Emulsiones de GA en ácido acético (AC) y agua destilada (A). Composiciones (%p/p): [18 gr GA; 5 AT; 30 AC; 47 A]; [20 gr GA; 5 AT; 30 AC; 45 A]; [22 gr GA; 5 AT; 30 AC; 43 A]; [22 gr GA; 7.5 AT; 30 AC; 41 A]; [22 gr GA; 10 AT; 30 AC; 38 A].
PVA/QS	Soluciones con composición (% p/p): 10 (PVA) con 0.5 (QS), 10 (PVA) con 2 (QS), 10 (PVA) con 1 (QS) y 8 (PVA) con 1.5 (QS).
PVA/AA	Emulsiones con composición (% p/p): 10 (PVA) con 22 (AA).
PVA/AV	Soluciones con composición (% p/p): 10 (PVA), 90 (A) y 55 (AV).

Se identificaron las condiciones favorables para la obtención de los VE, referente a las variables de operación del equipo (voltaje, flujo), así como las variables relacionadas con la solución/emulsión a electrohilar (composición, viscosidad, conductividad) y diámetro de las fibras de los velos.

3.2. Caracterización de las soluciones/emulsiones

La viscosidad de las soluciones/emulsiones estudiadas se determinó mediante un Reómetro de Anton Paar modelo RheolabQC a $25 \pm 1^\circ\text{C}$, utilizando la configuración de cilindros concéntricos DG24 y el software Star Rheoplus 3.0x. Mientras que la conductividad fue determinada en un equipo Conductronic modelo PC18 a $25 \pm 1^\circ\text{C}$.

La viscosidad y conductividad de las emulsiones de PVA incorporado con los aceites esenciales y emulsiones de GA/AT y soluciones de PVA/QS y PVA/AV se determinó previo al proceso de electrohilado.

La determinación de la humedad final de los VE se realizó por el método de secado en estufa, empleando la ecuación 3.1. Se obtuvo una muestra de los VE con dimensiones de 7 cm de ancho por 7 cm largo, se removió el papel aluminio de la fibra y posteriormente se deshidrataron por triplicado a $70 \pm 1^\circ\text{C}$ durante 24 h, siguiendo la ecuación siguiente:

$$\text{Humedad (\%)} = \left(\frac{m_h - m_s}{m_s - m_r} \right) \times 100 \quad \text{ec. 3.1}$$

donde m_h es la masa del recipiente más la muestra húmeda (g), m_s es la masa del recipiente más la muestra seca (g) y m_r masa del recipiente (g).

OBJETIVO 2

Determinar la dimensión fractal y porosidad digital descriptores de la morfología de los velos electrohilados (VE) y el diámetro de sus fibras poliméricas obtenidos a partir de electrohilar soluciones/emulsiones, empleando un equipo de electrohilado con un inyector simple.

En la Figura 3.1 se muestran las etapas empleadas para determinar las características morfológicas de diámetro, orientación, DF y PD de las fibras electrohiladas.

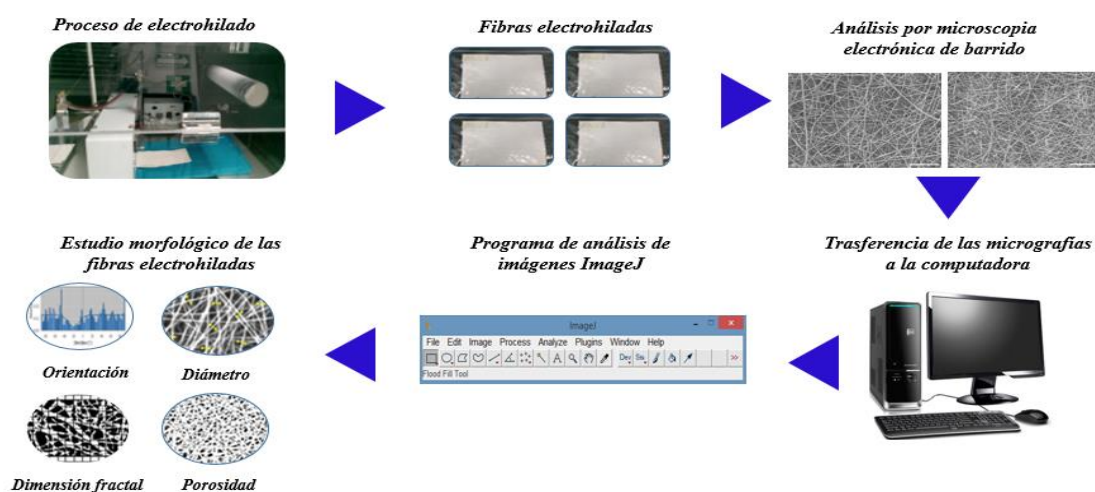


Figura 3.1 Estudio morfológico de las fibras electrohiladas.

3.3. Cálculo del diámetro de las fibras electrohiladas

Las estructuras de los VE fueron analizadas por microscopía electrónica de barrido (SEM) en un microscopio modelo JSM-6610LV. El procesamiento de las imágenes se realizó con el software ImageJ v1.51j8, con el cual se determinó el diámetro experimental de las fibras y corresponde al promedio aritmético de 100 mediciones realizadas a diferentes fibras obtenidas por SEM, las etapas se muestra en la Figura 3.2 (Liu *et al.*, 2019). El análisis estadístico de los diámetros de las fibras se realizó mediante la prueba t de Student con el software OrginPro (2022 SR1, OriginLab, EE.UU.). Para todas las pruebas, la significación se fijó en $p < 0.05$.

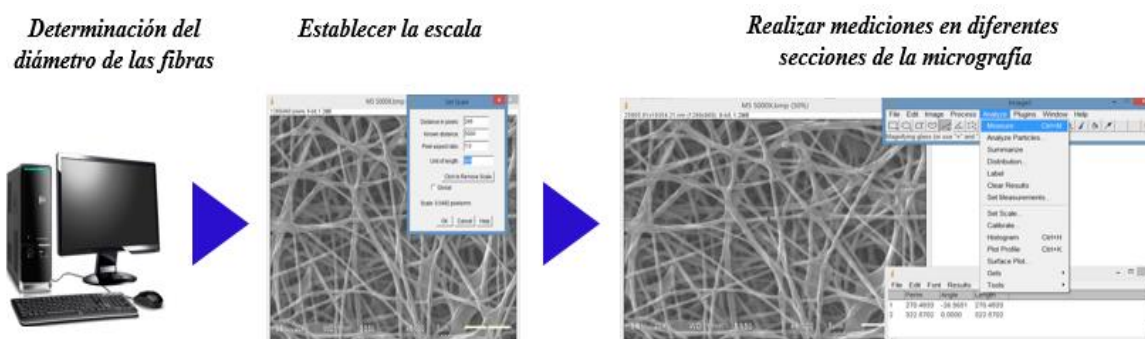


Figura 3.2. Etapas para la determinación del diámetro de las fibras.

3.4. Determinación de la orientación de las fibras electrohiladas por análisis de imágenes

Para la determinación de la orientación de las fibras se empleó el algoritmo OrientationJ como un complemento del software ImageJ v1.51j8. Este algoritmo analiza la imagen de la micrografía electrónica de barrido de las fibras en formato binario de 8 bits, y se utiliza para inferir la orientación de las fibras presentes en la imagen de entrada. Calcula un histograma que indica la cantidad de estructuras en una dirección dada, cuyos ángulos se reportan en su sentido matemático común, es decir: 0° es la dirección este y la orientación es en sentido contrario a las agujas del reloj ver Figura 3.3.



Figura 3.3. Etapas para la determinación de la orientación de las fibras.

3.5. Análisis fractal de la textura de las micrográficas de las fibras electrohiladas

Cada una de las micrográficas (MEB) obtenidas de las velos con las fibras electrohiladas fue transferida digitalizada y posteriormente analizada utilizando el programa ImageJ v1.51j8, del cual se obtuvo una matriz numérica cuyos valores fueron de la intensidad de los pixeles en escala de grises (0-255), en seguida se calculó la DF empleando el método de conteo de cajas con el software ImageJ. El valor de la DF se obtiene de la pendiente de la regresión lineal de mínimos cuadrados del gráfico log (tamaño de caja) vs log (recuento de cajas), en la Figura 3.4 se muestra las etapas para la determinación de la DF.

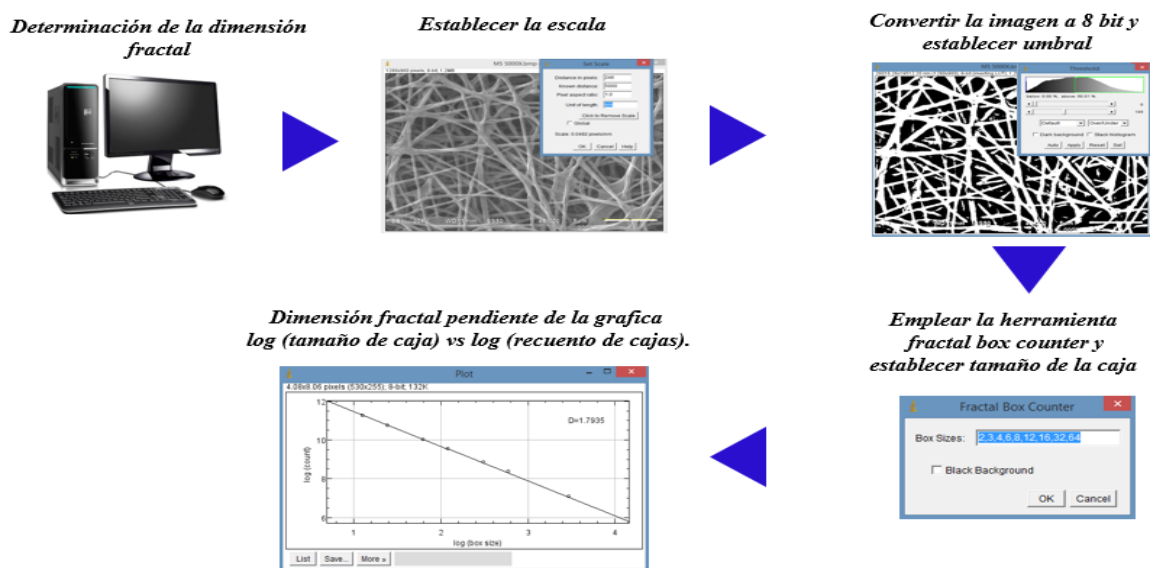


Figura 3.4. Etapas para la determinación de la DF.

3.6. Determinación de la porosidad digital (PD) (ϕ_D) de los velos electrohilados

Las micrografías digitales se analizaron con el software de procesamiento de imágenes ImageJ v1.51j8 para determinar la PD (ϕ_D) de los velos, siguiendo el siguiente procedimiento ver Figura 3.5: Las imágenes SEM originales de los VE se convirtieron en escala de grises, se estableció la escala (5 μm), como unidad de medida, posteriormente se procedió a la conversión de las imágenes en escala de grises a imágenes binarias (blanco y negro) de 8 bits. Se aplicó un filtro para reducir el ruido y un proceso de umbralización basado en la agrupación o reducción de un nivel de gris a una imagen binaria. Tras fijar el umbral, se obtuvo la segmentación de las regiones medibles a partir de las imágenes binarias, es decir, el color negro representa la región porosa, mientras que el color blanco representa la región sólida. Se utilizó la herramienta "analizar partículas" para determinar las áreas porosas, ya que el software permite la recopilación de los datos obtenidos en una hoja de cálculo, dichos datos fueron procesados para el análisis estadístico (Mohammadimehr *et al.*, 2020).

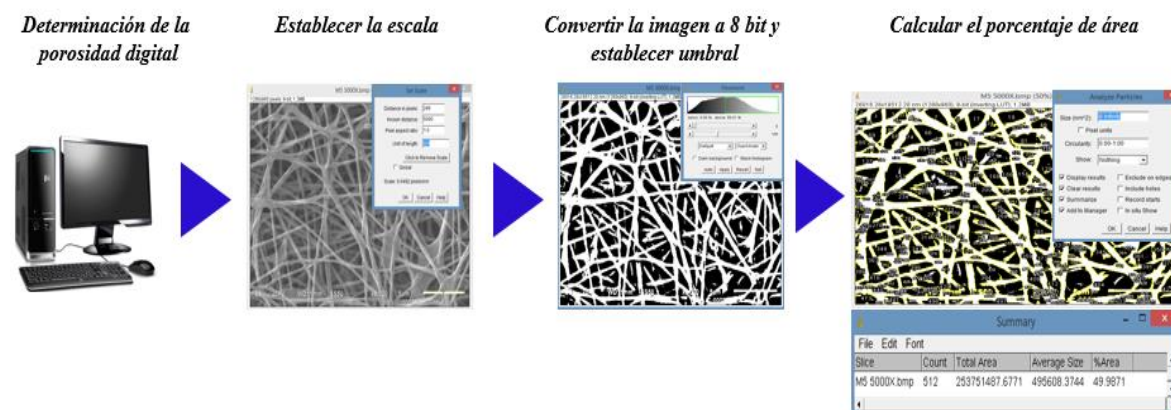


Figura 3.5. Etapas para la determinación de la PD.

OBJETIVO 3

Diseñar una RNA a partir de un conjunto de datos experimentales, para la predicción del diámetro de las fibras electrohiladas, dimensión fractal y porosidad digital, que incluya los datos de entrada voltaje, flujo de la solución, conductividad y viscosidad de las soluciones/emulsiones poliméricas.

3.7. Pasos para el diseño de la RNA

El aprendizaje automático de una RNA es una secuencia de procesos ordenados, (Alarcón, 2008, El Naqa & Murphy, 2015) mismos que se presentan en el diagrama de flujo (Figura 3.6).

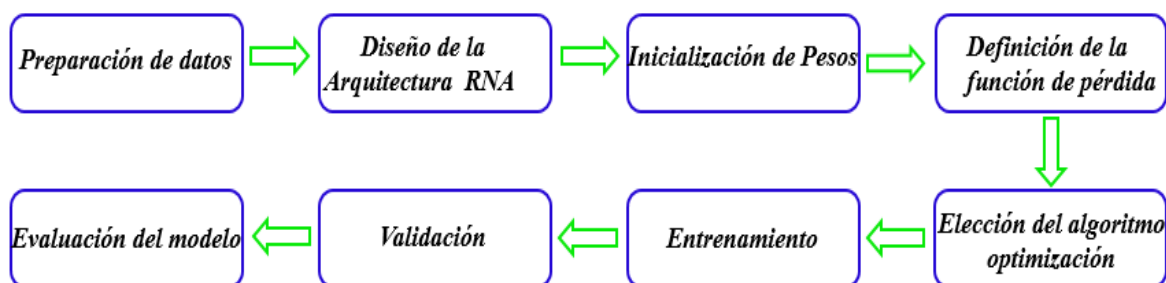


Figura 3.6. Etapas para el desarrollo del aprendizaje automático.

Proceso 1. Preparación de datos.- En esta etapa la información experimental obtenida en la etapa anterior referente a la conductividad y viscosidad de las soluciones/emulsiones así como los datos de voltaje y flujo durante el proceso de electrohilado fueron preparados previo a su alimentación a la RNA. Los datos anteriormente mencionados se dividieron en conjuntos de entrenamiento, prueba y validación para evaluar la eficiencia de la RNA, en una proporción 70, 15, 15, según lo reportado por Khatti *et al.*, (2019). Los datos experimentales fueron sometidos a un proceso de normalización, mediante las ecuaciones de normalización de Maurya *et al.*, (2020), Karimi *et al.*, (2015) y Ciaburro *et al.*, (2020).

Proceso 2. Diseño de la arquitectura de la RNA.- En la etapa diseño de la RNA, se decide la arquitectura de la RNA, incluyendo el número de capas, el número de neuronas en cada capa y las funciones de activación.

Para el caso de la RNA propuesta en este trabajo se usó la red MLP, con función de activación sigmoidea (logsig) en sus capas ocultas (ecuación 3.2) y lineal en la capa de salida (ecuación 3.3) Sohrabi *et al.*, 2023; Putra *et al.*, 2022, reportaron que la función de activación logsig es la función que mejores resultados presentó para la predicción del diámetro de fibras de poliamida-6 para uso en filtros de aire.

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad \text{ec. 3.2}$$

$$g(x) = x \quad \text{ec. 3.3}$$

Proceso 3. Inicialización de pesos.-La inicialización de pesos en una RNA es un paso crucial en el proceso de entrenamiento, ya que puede afectar significativamente la convergencia y el rendimiento del modelo. La manera en que los pesos se inicializan puede influir en la capacidad de la red para aprender y generalizar correctamente. En el presente trabajo, los procesos de inicialización de pesos fueron identificados por el software Matlab de forma aleatoria y después de iteración estos fueron establecidos para lograr la convergencia de los resultados de salida de la RNA (Cao *et al.*, 2018).

Proceso 4. Definición de la función de pérdida.-Las funciones de pérdida, también conocidas como funciones objetivo o criterios de costo, son utilizadas en el entrenamiento de modelos de aprendizaje automático para evaluar la discrepancia entre las predicciones del modelo y las etiquetas reales del conjunto de datos. Se seleccionó el MSE ecuación 3.4, como un parámetro para identificar la diferencia entre las predicciones del modelo y los valores reales (Al Bataineh *et al.*, 2018, de Naurois *et al.*, 2019).

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad \text{ec. 3.4}$$

donde N es el número total de datos, y_i es el resultado deseado y \hat{y}_i es el predicho.

Proceso 5. Elección del algoritmo de optimización.- Se seleccionó el algoritmo de optimización Levenberg Marquardt (trainlm), para mejorar la eficiencia de convergencia mediante el ajuste de los pesos de la RNA y minimizando la función de pérdida, además de presentar una convergencia estable en poblaciones de tamaño pequeño y mediano (Yu *et al.*, 2018). El método de Levenberg-Marquardt es un algoritmo de optimización utilizado

principalmente para ajustar un modelo no lineal a un conjunto de datos minimizando la diferencia entre las predicciones del modelo y los datos observados. Este algoritmo combina aspectos del método del gradiente y la aproximación de la matriz hessiana inversa. Existen en la literatura un gran número de autores que reportan el uso de este algoritmo para el diseño de RNA (Nasouri *et al.*, 2018, You *et al.*, 2020, Karimi *et al.*, 2015, Khatti *et al.*, 2019).

Proceso 6. Entrenamiento.-En esta etapa, los datos de entrenamiento se introdujeron en la RNA. El algoritmo de aprendizaje empleado durante el proceso de entrenamiento fue la red neuronal perceptron multicapa (MLP por sus siglas en inglés), que consta de dos etapas, la primera etapa se llama propagación hacia adelante entre neuronas de cada capa oculta, posteriormente las respuestas producidas por las salidas de la red se comparan con respuestas deseadas, si los resultados no son satisfactorios se aplica la segunda etapa la retropropagación, donde los pesos sinápticos de todas las neuronas de la red se modifican en sentido contrario (Da Silva *et al.*, 2017).

Proceso 7. Validación.- Se utilizó un conjunto de datos de validación correspondiente al 15% de los datos para evaluar el rendimiento del modelo durante el entrenamiento. Se empleó el método de validación cruzada *K-fold* para reducir el problema de sobreajuste (Dayhoff *et al.*, 2001).

Proceso 8. Evaluación o prueba del modelo.- Una vez que los procesos de entrenamiento y validación finalizaron, se evaluó el modelo en un conjunto de datos de prueba independiente para medir su rendimiento en datos no vistos.

En la Figura 3.7 se presenta la conformación de la RNA en la ventana de comando de Matlab R2018b.

```
net = feedforwardnet([8,16,5]);
net.layers{1}.transferFcn='logsig';
net.layers{2}.transferFcn='logsig';
net.layers{3}.transferFcn='logsig';
net.layers{4}.transferFcn='purelin';
```

Diseño de la arquitectura RNA

```
a=net.IW{1,1};
b=net.LW{2,1};
c=net.LW{3,2};
d=net.LW{4,3};
e=net.b{1};
f=net.b{2};
g=net.b{3};
```

Inicialización de Pesos

```
net.performFcn = 'mse';
```

Definición de la función perdida

```
net.trainFcn = 'trainlm';
```

Elección del algoritmo optimización

```
net.trainParam.epochs =1000;
net.trainParam.max_fail = 100;
net.trainParam.goal = 1e-5;
net.trainParam.mu = 0.4;
net.trainParam.mu_dec = 0.1;
net.trainParam.mu_inc= 10;
net.trainParam.mu_max=10000000000;
net.trainParam.min_grad = 1e-12;

for i=1:k
    [net,tr] = train(net,trainMatrix{i}(:,1:4)',trainMatrix{i}(:,5)');
    outputs = net(trainMatrix{i}(:,1:4)');
    errors = gsubtract (trainMatrix {i} (:, 5)', outputs);
    performance = perform (net, trainMatrix {i} (:, 5)', outputs);
    trainTargets = trainMatrix {i} (:, 5)' .*tr.trainMask {1};
    testTargets = trainMatrix {i} (:, 5)' .*tr.testMask {1};
    valTargets = trainMatrix {i} (:, 5)' .* tr.valMask{1};
    trainPerformance = perform (net, trainTargets, outputs)
    testPerformance = perform (net, testTargets, outputs)
    valPerformance = perform(net,valTargets,outputs)
end
```

Entrenamiento

```
k = 5;
cv = cvpartition(length(input1),'kfold',k);
for i=1:k
    trainIdxs{i} = find(training(cv,i));
    testIdxs{i} = find(test(cv,i));
    trainMatrix{i} = [input1(trainIdxs{i}) input2(trainIdxs{i}) input3(trainIdxs{i})
input4(trainIdxs{i}) output(trainIdxs{i})];
    validMatrix{i} = [input1(testIdxs{i}) input2(testIdxs{i}) input3(testIdxs{i})
input4(testIdxs{i}) output(testIdxs{i})];
end
```

Validación

Figura 3.7. Diseño de la RNA en la ventana de comando de Matlab R2018b.

3.8. Identificación de la ecuación de normalización

Los datos experimentales de conductividad y viscosidad de las soluciones y/o emulsiones, así como el voltaje y flujo, se expresan en diferentes unidades y magnitudes, por lo que fue necesario realizar la normalización de los datos a fin de que las variables sean semejantes aunque pertenezcan a diferentes distribuciones. La normalización, previo al entrenamiento de una RNA, es importante para obtener resultados satisfactorios y reducir el tiempo de cálculo (Reddy *et al.*, 2021, Khatti *et al.*, 2019).

Para nuestro estudio se probaron tres ecuaciones de normalización, la primera ecuación que contiene pesos arbitrarios propuesta por Maurya *et al.*, (2020) ecuación 3.5 y dos ecuaciones que emplean datos de la misma población muestral propuestas por Karimi *et al.*, (2015) ecuación 3.6 y Ciaburro *et al.*, (2020) ecuación 3.7, empleando 49 datos y como variables de entrada flujo, voltaje, viscosidad y conductividad.

$$x_n = \frac{(x - x_{min}) * 0.8}{(x_{max} - x_{min})} + 0.1 \quad ec. 3.5$$

donde x_n es el valor normalizado de x ; x_{max} y x_{min} son los valores máximo y mínimo de x , respectivamente, en todo los conjuntos de datos.

$$y_{norm} = (y_{max} - y_{min})(x - x_{min}) / (x_{max} - x_{min}) + (y_{min}) \quad ec. 3.6$$

donde y_{min} y y_{max} son iguales a -1 y 1, respectivamente, x son los datos que deben normalizarse, y x_{max} y x_{min} son los valores máximo y mínimo de x , respectivamente.

$$x_n = \frac{x - mean(x)}{sd(x)} \quad ec. 3.7$$

donde x_n es el valor normalizado de x variables de entrada: $mean(x)$ es la media de x y $sd(x)$ es la desviación estándar de x .

3.9. Identificación de la configuración del modelo RNA

Se presenta el análisis de la configuración de la RNA seleccionada, a partir de las siguientes consideraciones:

- El aprendizaje de la RNA, es un proceso relacionado con la topología de la RNA, es decir, del número de capas, del número de neuronas y del esquema de conexiones, es un proceso que no tiene reglas claras para su conformación.
- Número de capas ocultas: Un aumento del número de capas de neuronas ocultas se traduce en un cambio en la estructura de la red, pudiéndose obtener resultados diferentes.
- Número de neuronas de la capa oculta: Generalmente un aumento de neuronas ocultas aumenta la eficacia del aprendizaje. Sin embargo, hay que tener en cuenta que existe un margen óptimo en el número de neuronas ocultas, es decir, fuera de ese intervalo los resultados pueden empeorar. Con un error elevado en la salida, un aumento del número de neuronas ocultas puede hacer que disminuya dicho error.
- Numero de datos de entrada: Un aumento del número de datos de entrada hace que la RNA tenga un mejor aprendizaje, y que por tanto cuando se muestren a la RNA datos desconocidos (diferentes de los utilizados en el entrenamiento) el error en el cálculo de las salidas sea más pequeño.

Se emplearon cuatro neuronas en la capa de entrada correspondientes a las cuatro variables de electrohilado (voltaje, flujo viscosidad y conductividad) y una neurona en la capa de salida, correspondiente al diámetro fibra electrohilada. Se probaron diferentes configuraciones para una, dos y tres capas ocultas como se muestra en la Tabla 3.2. La configuración seleccionada del modelo RNA se determinó con base en el valor mínimo del MSE ecuación 3.8 de los conjuntos de entrenamiento, prueba y validación (AlBataineh *et al.*, 2018; de Naurois *et al.*, 2019).

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad ec. 3.8$$

donde N es el número total de datos, y_i es el resultado deseado y \hat{y}_i es el predicho.

Tabla 3.2. Configuraciones probadas empleando una, dos y tres capas ocultas en RNA.

Variables de entrada	Número de Neuronas		
	Capa 1	Capa 2	Capa 3
Flujo	2	4	3
Voltaje	4	8	4
Viscosidad	6	12	5
Conductividad	8	16	6
	10	20	
	12		
	14		

3.10. Cálculo de la contribución relativa de las variables de entrada

La contribución relativa de cada variable de entrada fue calculada mediante el algoritmo propuesto por (Olden *et al.*, 2002) de acuerdo con la ecuación 3.9.

$$CR_p = \frac{\sum_{j=1}^n \frac{|w_{jp}| |v_j|}{\sum_{k=1}^I |w_{jk}|}}{\sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^n \frac{|w_{jp}| |v_j|}{\sum_{k=1}^I |w_{jk}|}} \text{ ec. 3.9}$$

donde CR_p es el porcentaje de aportación de cada entrada a la salida de la RNA; p es la entrada de la variable para conocer su contribución relativa, n es el número de las neuronas ocultas, j es la j -ésima neurona oculta, I es el número de entradas de la RNA, w_{jp} es el peso sináptico de la entrada p hacia la neurona j , v_j es el peso sináptico de la neurona j hacia la salida y w_{jk} es el peso sináptico de la entrada k hacia la neurona j .

3.11. Modelo empírico de predicción porosidad digital (ϕ) y análisis de errores

Se estableció el modelo de predicción PD (ϕ) considerando como variables los parámetros de operación (voltaje, distancia inyector-colector y corriente eléctrica), de solución (conductividad) del proceso de electrohilado, así como el contenido de humedad inicial y final del velo electrohilado y el tiempo de electrohilado, mediante un método de ajuste, y se utilizaron los criterios estadísticos, como porcentaje de error (Pe) ecuación 3.10, el coeficiente de determinación (R^2) ecuación 3.11, la suma residual de cuadrados (RSS)

ecuación 3.12 y el error cuadrático medio (RSME) ecuación 3.13 para obtener la calidad del ajuste.

$$Pe = \frac{|\phi_{Dexp} - \phi_{Dpred}|}{\phi_{Dexp}} \times 100\% \quad ec. 3.10$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (\phi_{Dexp} - \phi_{Dpred})^2}{\sum_{i=1}^N (\phi_{Dexp} - \phi_{Dm})^2} \quad ec. 3.11$$

$$RSS = \sum_{i=1}^N (\phi_{Dexp} - \phi_{Dpred})^2 \quad ec. 3.12$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\phi_{Dexp} - \phi_{Dpred})^2} \quad ec. 3.13$$

donde ϕ_{Dexp} es el valor experimental; ϕ_{Dpred} es el valor predicho; ϕ_{Dm} es la media de los valores experimentales.

CAPÍTULO 4 RESULTADOS Y DISCUSIONES

Los resultados se presentan en el orden de los objetivos planteados.

OBJETIVO 1

Determinar las propiedades físicas conductividad y viscosidad, en soluciones PVA, PVA/QS, PVA/AV y emulsiones GA/AT, PVA/AO, PVA/AN y PVA/AA.

4.1. Determinación de las propiedades físicas en soluciones/emulsiones poliméricas

En la Tabla 4.1 se presentan las propiedades físicas en las soluciones y emulsiones poliméricas previas al proceso de electrohilado.

Tabla 4.1. Parámetros de operación y propiedades físicas en las soluciones y emulsiones poliméricas previo al proceso de electrohilado y el diámetro de la fibra electrohilada.

Sistema	Flujo (mL/h)	Voltaje (kV)	Viscosidad (Pa·s)	Conductividad (mS/cm)	Distancia (cm)	Diámetro (nm)
PVA 8%	0.1	24	0.28	0.58	20	178.59±22.84 ^a
PVA 8%	0.1	24	0.28	0.58	20	172.77±31.90 ^a
PVA 10%	0.1	24	0.43	0.49	20	298.39±42.85 ^b
PVA 10%	1.8	24	0.55	0.48	20	289.82±63.14 ^b
PVA 10%	1.8	24	0.55	0.48	20	307.47±69.57 ^b
PVA 10%	0.1	24	0.80	0.23	20	175.00±56.55 ^c
PVA 12%	0.1	24	0.90	0.26	20	182.00±46.55 ^c
PVA10%/AO4%	0.1	24	0.39	0.55	20	207.68 ±45.28 ^d
PVA10%/AO4%	0.1	24	0.39	0.55	20	217.44±72.55 ^d
PVA10%/AO4%	0.1	24	0.39	0.55	20	209.59±57.19 ^d
PVA10%/AO8%	0.1	24	0.43	0.52	20	289.75±51.20 ^e
PVA10%/AO8%	0.1	24	0.43	0.52	20	285.31±29.22 ^e
PVA10%/AO8%	0.1	24	0.43	0.52	20	297.87±70.49 ^e
PVA10%/AO12%	0.1	24	0.46	0.49	20	478.62±74.47 ^f
PVA10%/AO12%	0.1	24	0.46	0.49	20	491.77±178.15 ^f
PVA10%/AN5%	0.6	24	0.62	0.45	20	270.17±56.21 ^g
PVA10%/AN5%	0.6	24	0.62	0.45	20	266.49±69.46 ^g
PVA10%/AN5%	0.6	24	0.62	0.45	20	270.02±36.70 ^g
PVA10%/AN7.5%	1.2	24	0.71	0.43	20	300.50±55.93 ^h
PVA10%/AN7.5%	1.2	24	0.71	0.43	20	266.92±45.22 ^h
PVA10%/AN7.5%	1.2	24	0.71	0.43	20	270.63±38.41 ^h

PVA10%/AN10%	1.8	24	0.75	0.43	20	343.61±61.47 ⁱ
PVA10%/AN10%	1.8	24	0.75	0.43	20	327.46±68.58 ⁱ
PVA10%/AN10%	1.8	24	0.75	0.43	20	352.01±51.61 ⁱ
GA18%/AT5%	0.02	30	0.28	2.63	12	247.81±51.28 ^j
GA18%/AT5%	0.02	30	0.28	2.63	12	266.49±45.02 ^j
GA18%/AT5%	0.02	30	0.28	2.63	12	237.25±53.50 ^j
GA20%/AT5%	0.02	30	0.44	2.73	12	194.94±34.10 ^k
GA20%/AT5%	0.02	30	0.44	2.73	12	229.70±32.89 ^k
GA20%/AT5%	0.02	30	0.44	2.73	12	222.81±25.30 ^k
GA22%/AT5%	0.02	30	0.50	2.89	12	239.97±46.10 ^l
GA22%/AT5%	0.02	30	0.50	2.89	12	203.84±33.23 ^l
GA22%/AT7.5%	0.02	30	0.53	1.99	12	173.28±28.02 ^m
GA22%/AT7.5%	0.02	30	0.53	1.99	12	169.90±25.86 ^m
GA22%/AT7.5%	0.02	30	0.53	1.99	12	175.36±22.92 ^m
GA22%/AT10%	0.02	30	0.60	1.88	12	223.27±51.35 ⁿ
GA22%/AT10%	0.02	30	0.60	1.88	12	202.67±31.80 ⁿ
PVA10%/QS 0.5%	0.1	26	0.19	0.50	20	279.17±41.62 ^o
PVA10%/QS 0.5%	0.1	26	0.19	0.50	20	257.82±60.38 ^o
PVA10%/QS 2%	0.1	26	0.39	1.27	20	209.31±51.89 ^p
PVA10%/QS 2%	0.1	26	0.39	1.27	20	249.06±56.02 ^p
PVA10%/QS 1%	0.14	21	0.22	0.59	20	275.18±46.51 ^q
PVA10%/QS 1%	0.14	21	0.22	0.59	20	257.64±51.03 ^q
PVA10%/QS 1.5%	0.1	26	0.25	1.16	20	268.94±36.30 ^r
PVA10%/QS 1.5%	0.1	26	0.25	1.16	20	242.36±35.06 ^r
PVA10%/AA 22%	0.6	24	0.32	0.47	20	103.48±19.28 ^s
PVA10%/AA 22%	0.6	24	0.32	0.47	20	93.52±15.87 ^s
PVA10%/AV 55%	1	24	0.08	1.77	12	103.51±13.74 ^t
PVA10%/AV 55%	1	24	0.08	1.77	12	103.52±14.08 ^t

Valores (media±desviación estándar) en la misma columna con letras diferentes son significativamente diferentes ($p \leq 0.05$).

El análisis estadístico efectuado a través de la prueba t de Student, mostró que existe diferencia significativa entre los diámetros de las fibras electrohiladas, para un intervalo de confianza del 95%, para todas las condiciones estudiadas.

Para lograr la obtención de las fibras se procedió a preparar soluciones acuosas a diferentes concentraciones (Tabla 4.1), mismas que fueron sometidas a pruebas reológicas, para su posterior electrohilado. Las concentraciones de PVA en la solución acuosa fueron 8, 10 y

12% p/p. Estas soluciones presentaron valores de conductividad eléctrica entre 0.26 a 0.58 a mS/cm, la disminución de la conductividad es debido a que el PVA es un polímero no iónico de acuerdo a la literatura y las soluciones con estas propiedades pueden ser exitosamente electrohiladas (Rósic *et al.*, 2013).

De igual manera se determinó el valor de la conductividad eléctrica para las soluciones de GA reportando valores de (2.63 mS/cm a 2.89 mS/cm). Los datos experimentales mostraron una relación directa entre la concentración del biopolímero diluido en la emulsión y los valores de la conductividad, debido a la mayor concentración de GA en la solución, existe una mayor cantidad de monómeros residuales con carga, lo que se ve repercutido en un incremento de la conductividad de las emulsiones (Okutan *et al.*, 2014).

Con respecto a la viscosidad este es un parámetro importante para la formación de las fibras, debido a que es la resistencia para el flujo de la muestra en el inyector. Se reportan valores de viscosidad para las soluciones de PVA y emulsiones de GA entre (0.28 a 0.9) y (0.28 a 0.60) Pa·s respectivamente, condiciones que permiten la formación de las fibras, de acuerdo a lo reportado por Li *et al.* (2016) electrohilo soluciones de gelatina/vitamina E con una viscosidad de 0.254 Pa·s, mientras que Okutan *et al.* (2014) electrohilo soluciones de gelatina al 7 y 22 % p/v con una viscosidad de 0.04 y 1.49 Pa·s respectivamente, finalmente Park *et al.* (2010) electrohilo soluciones de PVA en el rango de 8 a 12% en peso cuya viscosidad era menor a 1 Pa·s.

Para las soluciones de PVA/QS al incremento de la concentración QS se presentó un aumento en la conductividad, debido a la protonación de los grupos aminos presentes en la molécula de QS, superando el entrelazamiento del sistema polimérico y los abundantes enlaces de hidrogeno en la solución (Vu *et al.*, 2022). También la concentración de QS condujo a un incremento de la viscosidad, debido a la repetición de grupos polares en el polímero, el aumento de los enlaces de hidrógeno se ve afectado (Antaby *et al.*, 2021).

Se observó también que para las emulsiones de PVA/AO y PVA/AN, al incremenar la concentración de los aceites esenciales en las emulsiones originó un incremento de su

viscosidad y disminución en la conductividad, dicho efecto fue reportado por Arik *et al.* (2022).

El cambio de viscosidad y conductividad se puede correlacionar con el diámetro de la fibra como los trabajos reportados por Kalantary *et al.* (2020), confirmando que el mayor peso en la predicción de diámetros de fibras recae en la concentración del polímero en la solución electrohilable. Mientras que Keirouz *et al.* (2020) establecen una relación directa entre el diámetro de las fibras con respecto a la viscosidad. Así mismo, Ibrahim *et al.* (2020) propone una relación inversa entre la conductividad de las soluciones poliméricas y diámetro de las fibras.

OBJETIVO 2

Determinar la dimensión fractal y porosidad digital descriptores de la morfología de los velos electrohilados (VE) y el diámetro de sus fibras poliméricas obtenidos a partir de electrohilar soluciones/emulsiones, empleando un equipo de electrohilado con un inyector simple.

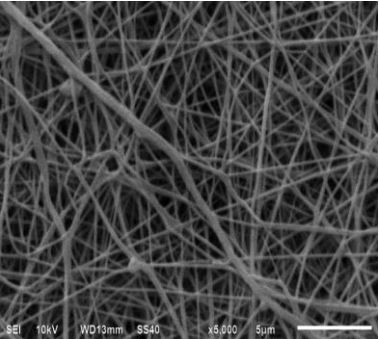
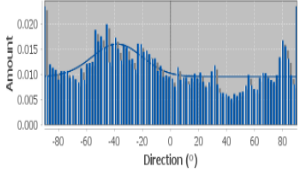
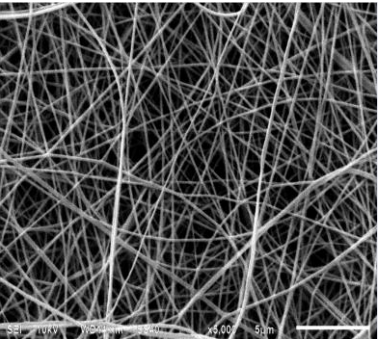
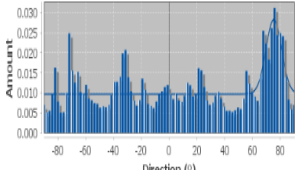
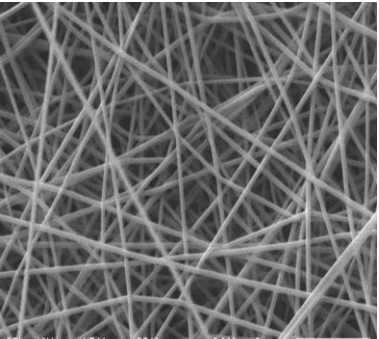
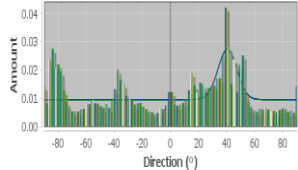
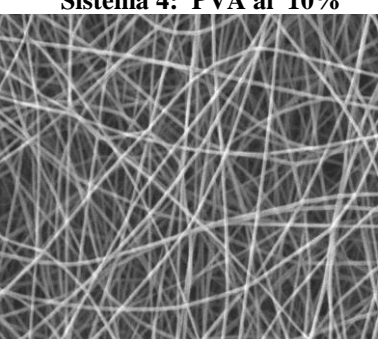
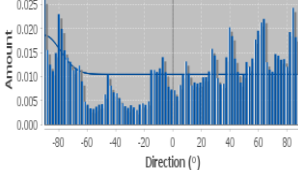
4.2. Determinar el diámetro y morfología de las fibras poliméricas electrohiladas

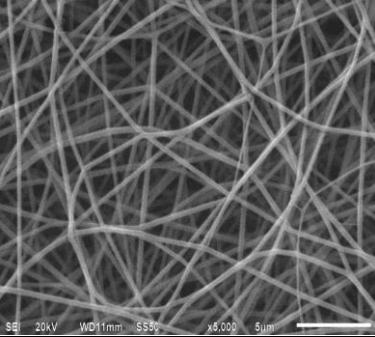
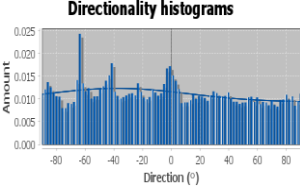
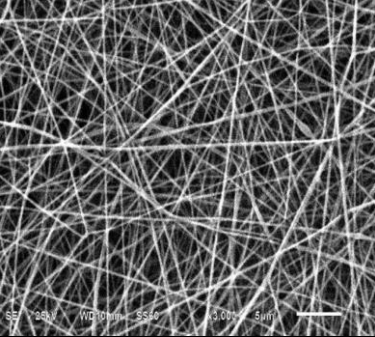
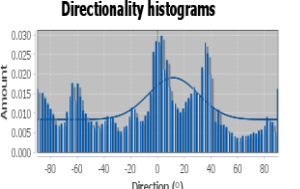
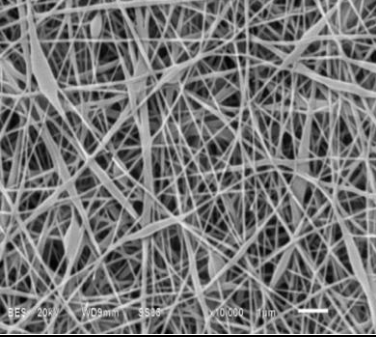
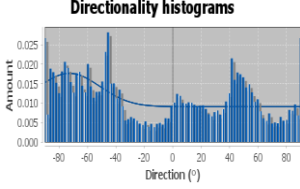
Análisis de micrografías de los sistema 1-7

En la Tabla 4.2 se muestran las micrografías correspondientes al alcohol polivinílico (PVA) al 8, 10 y 12% p/p.

Las fibras con concentraciones al 8% (sistemas 1 y 2) presentaron morfologías aplanadas o listones, cuyos diámetros promedios fueron 175.68 ± 27.37 nm. En las micrografías se puede observar que las fibras de alcohol polivinílico al 10% (sistemas 3 al 6) presentan una morfología homogénea con diámetros promedios de 300.26 ± 58.94 nm, mientras que el sistema 7 cuya concentración fue del 12% p/p, se observa fibras deformadas, defectuosas con agregaciones o perlas, con diámetros promedio de 182.00 ± 86.55 nm.

Tabla 4.2. Micrografías de fibras a partir de soluciones de PVA al 8, 10 y 12% p/p.

Micrografía	Parámetros electrohilado	Propiedades
<p>Sistema 1: PVA 8%</p>  <p>SEI 10kV WD13mm SS40 x5,000 5µm</p>	<p>Flujo (mL/h): 0.1 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.28 Conductividad (mS/cm):0.58 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 178.59 Dirección (°)= -38.10 Dispersión (°)= 17.81</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 2: PVA 8%</p>  <p>SEI 10kV WD13mm SS40 x5,000 5µm</p>	<p>Flujo (mL/h): 0.1 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.28 Conductividad (mS/cm):0.58 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 172.77 Dirección (°)= 75.28 Dispersión (°)= 5.62</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 3: PVA al 10%</p>  <p>SEI 10kV WD11mm SS40 x5,000 5µm</p>	<p>Flujo (mL/h): 0.1 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.43 Conductividad (mS/cm):0.49 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 298.39 Dirección (°)= 40.52 Dispersión (°)= 6.75</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 4: PVA al 10%</p>  <p>SEI 20kV WD11mm SS50 x6,000 5µm</p>	<p>Flujo (mL/h): 1.8 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.55 Conductividad (mS/cm):0.48 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 289.82 Dirección (°) = -89.88 Dispersión (°)= 11.17</p> <p>Directionality histograms</p> 

<p>Sistema 5: PVA 10%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 1.8 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.55 Conductividad (mS/cm):0.48 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 307.47 Dirección (°) = -37.40 Dispersión (°)= 49.33</p> 
<p>Sistema 6: PVA 10%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 1.8 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.55 Conductividad (mS/cm):0.48 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 305.35 Dirección (°) =11.86 Dispersión (°)=18.69</p> 
<p>Sistema 7: PVA 12%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.1 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.9 Conductividad (mS/cm):0.26 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 182.00 Dirección (°)= -72.62 Dispersión (°)= 21.43</p> 

El aspecto aplanado en las fibras de los sistemas 1 y 2 puede ser atribuido a un exceso en su contenido de humedad, esto es que durante el proceso de electrohilado y el transporte de la fibra hacia el rodillo colector la humedad de la fibra no fue evaporada. Este contenido de humedad en exceso generó que las fibras se deformaran al chocar con el rodillo colector, y con ello sus formas aplanadas.

Con respecto al sistema 7 se observó que los diámetros de las fibras presentaron una distribución amplia, dado que se observaron fibras de diversos diámetros como resultado del incremento de la concentración de PVA en la solución y con ello de su viscosidad y tensión

superficial. Estas condiciones dificultaron el proceso de electrohilado y la aparición de las perlas descritas.

Se observó en general que las variables relacionadas con la naturaleza de la solución afectaron al diámetro, entre ellas el incremento de la concentración del polímero PVA, incremento de la viscosidad y un decremento de la conductividad, que contribuyeron a un incremento significativo del diámetro para la concentración del 8 y 10%, no obstante para el sistema 7 (concentración al 12%) no se reporta claramente tal efecto, en virtud de que en este último sistema se obtuvieron una mayor número de fibras defectuosas.

Estos resultados están acordes con los reportados por Kalantary *et al.* (2020) que establece que la mayor contribución en el diámetro de las fibras es la concentración del polímero en la solución electrohilable, Xu *et al.* (2017), también reporta que el incremento de la viscosidad se refleja en un mayor diámetro de las fibras, y Khajavi *et al.* (2017) que el decremento de la conductividad aumenta el diámetro de las fibras; debido a que el PVA, es un polímero que se caracteriza por tener monómeros residuales cargados negativamente donde el radical, OH^- distribuye la polaridad que se ve reflejada en la disminución de la conductividad de la muestra.

Los diámetros aquí reportados son próximos a los obtenidos por Wen *et al.* (2016) para fibras electrohiladas de PVA al 8 y 10% cuyos diámetros eran de 270 y 390 nm respectivamente.

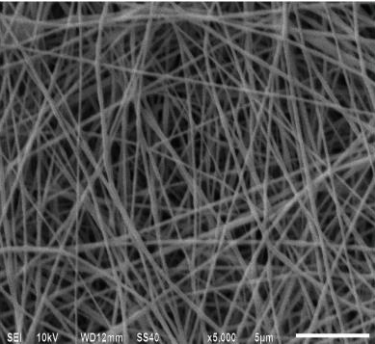
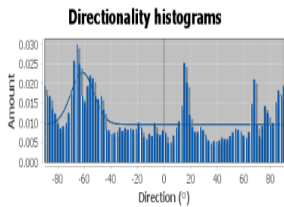
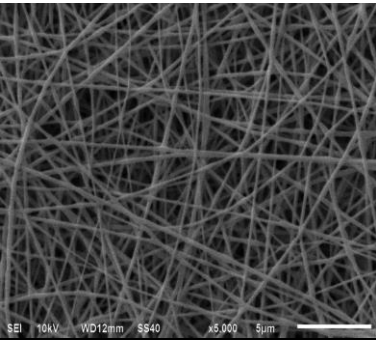
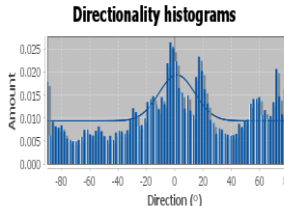
Referente a la orientación de las fibras, el análisis de las imágenes SEM de los sistemas estudiados a través del software ImageJ y OrientationJ evidenció que las fibras se orientan aleatoriamente en diferentes ángulos a lo largo de la muestra recolectada. Se observa que las fibras de los sistemas 1 al 7 presentan anisotropía, con una orientación promedio de aproximadamente -15.76° , dado que las micrografías con contenido completamente anisotrópico presentan un histograma plano o multimodal, mientras que las imágenes en las que hay una orientación preferida se espera que el histograma presente un pico en esa orientación.

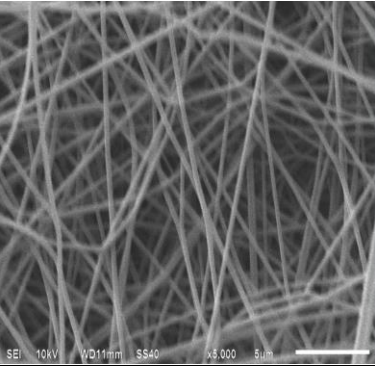
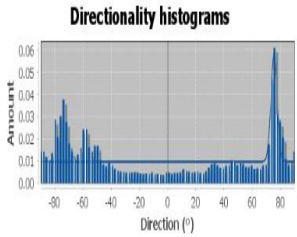
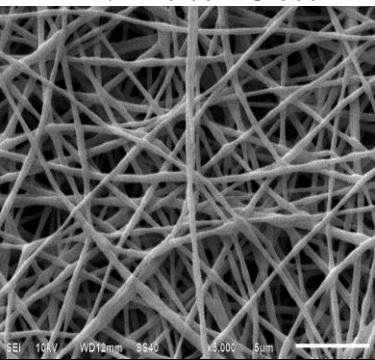
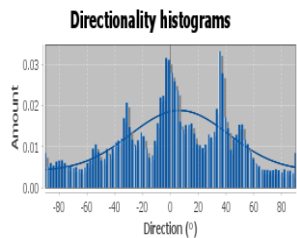
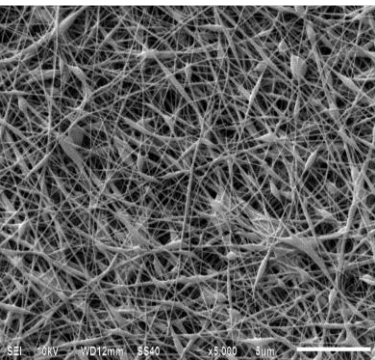
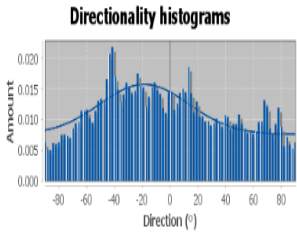
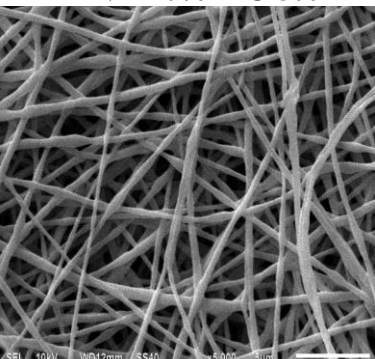
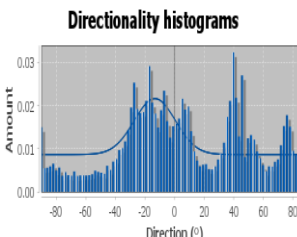
Este resultado era esperado dado que la orientación aleatoria se presenta al usar un colector rotatorio. La velocidad de rotación del colector fue 150 rpm, y por ello las fibras recolectadas tenían una orientación aleatoria, dado que durante el proceso de electrohilado las fibras no tuvieron suficiente velocidad lineal para estirarse en una orientación alineada. Resultados similares fueron reportados por Nitti, *et al.* (2018), en los cuales reporta que la velocidad de rotación del tambor rotatorio, afecta de manera importante en la orientación de las fibras, así como de sus propiedades mecánicas anisotrópicas (Baker & Mauk 2007, Li *et al.*, 2007).

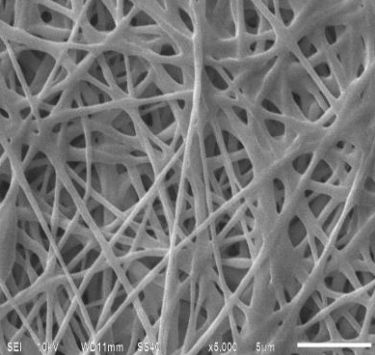
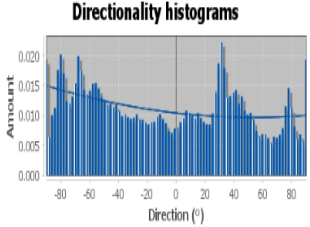
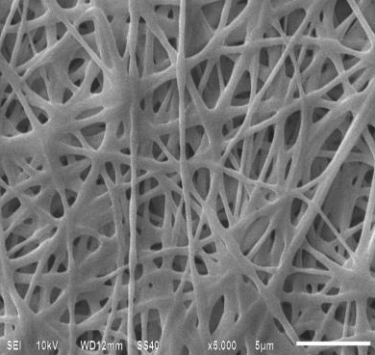
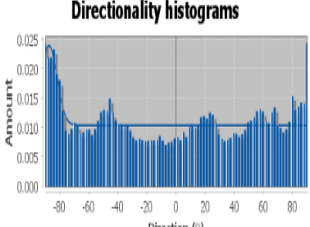
Análisis de micrografías de los sistemas 8-15

Las micrografías de las fibras de los sistemas 8-15 corresponden a fibras de PVA al 10% con aceite de oliva encapsulado. En la Tabla 4.3 se muestran las micrografías correspondientes a emulsiones de alcohol polivinílico (PVA) al 10% p/p adicionadas con AO al 4, 8 y 12% p/p.

Tabla 4.3. Micrografías de fibras de emulsiones de PVA al 10 % y AO 4, 8 y 12% p/p.

Micrografías	Parámetros electrohilado	Propiedades
<p>Sistema 8 PVA 10%-AO 4%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.1 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.39 Conductividad (mS/cm):0.55 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 207.68 Dirección (°)= -61.42 Dispersión (°)= 8.58</p> 
<p>Sistema 9 PVA 10% -AO 4%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.1 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.39 Conductividad (mS/cm):0.55 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 217.44 Dirección (°)= 1.55 Dispersión (°)= 12.65</p> 

<p>Sistema 10 PVA 10%-AO 4%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.1 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.39 Conductividad (mS/cm):0.55 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 209.59 Dirección (°)= 75.59 Dispersión (°)= 2.24</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 11 PVA 10 %-AO 8%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.1 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.43 Conductividad (mS/cm):0.52 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 289.75 Dirección (°)= 6.63 Dispersión (°)= 35.28</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 12 PVA 10%-AO 8%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.1 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.43 Conductividad (mS/cm):0.52 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 285.31 Dirección (°)= -18.52 Dispersión (°)= 31.84</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 13 PVA 10% -AO 8%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.1 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.43 Conductividad (mS/cm):0.52 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 297.87 Dirección (°)= -13.35 Dispersión (°)= 13.89</p> <p>Directionality histograms</p> 

<p>Sistema 14 PVA 10%- AO 12%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.1 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.46 Conductividad (mS/cm):0.49 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 478.62 Dirección (°)= 53.91 Dispersión (°)= 18433.01</p> 
<p>Sistema 15 PVA 10%-AO 12%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.1 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.46 Conductividad (mS/cm):0.49 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 491.77 Dirección (°)= -87.33 Dispersión (°)= 5.54</p> 

Las fibras PVA al 10% y AO al 4% p/p (sistemas 8, 9, 10) presentaron morfologías lisas y una minoría con abultamientos pequeños, con diámetro promedio de 211.57 ± 58.34 nm. Dado que la medición se realizó en forma manual, las fibras medidas fueron seleccionadas, y se evitó aquellas que presentaron abultamientos, estos últimos debido a la encapsulación del aceite de oliva en la fibra.

Con respecto a las fibras de las sistemas 11, 12 y 13, sistemas de PVA al 10% con AO al 8% p/p tienen fibras lisas y otras con mayor abultamiento, como resultado del aceite encapsulado. Su diámetro promedio de 290.98 ± 50.30 nm. De igual forma, durante la medición se seleccionaron las fibras con menores abultamientos.

Los sistemas 14 y 15, fibras de PVA al 10% con AO al 12% p/p presentaron fibras con diámetros de 485.19 ± 126.31 nm con morfología irregular y no definida en comparación con los sistemas 8 al 13, debido a la mayor concentración de aceite de oliva (12%). Se observa para estos sistemas un efecto claro del incremento de la composición de aceite, entre ellos un

aumento de la viscosidad de la solución y un decremento de la conductividad, condiciones que generaron diámetros de las fibras significativamente mayores.

El AO, tiene una mayor composición de ácido oleico, estructura lineal de 18 carbonos altamente hidrófoba, atribuido a la disminución de la conductividad eléctrica durante la adición del aceite en la solución de PVA.

En general, los diámetros de los sistemas 8 al 15 son mayores en comparación con los obtenidos con las fibras de PVA, debido a la disminución de la conductividad de las emulsiones con aceite. Este efecto de la adición de aceites en el diámetro de la fibras fue reportado por Pan *et al.* (2019) y por Lee & Lee (2020), para fibras de PVA, ciclodextrinas y aceite de canela, cuyos diámetros son similares a los reportados para los sistemas 14 y 15.

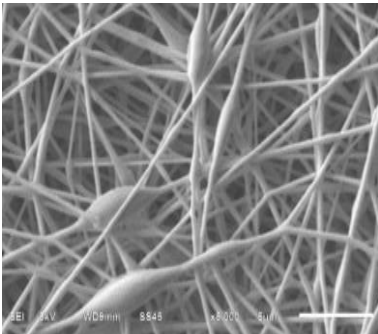
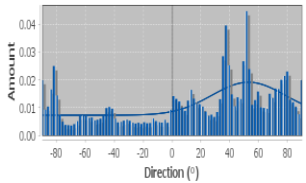
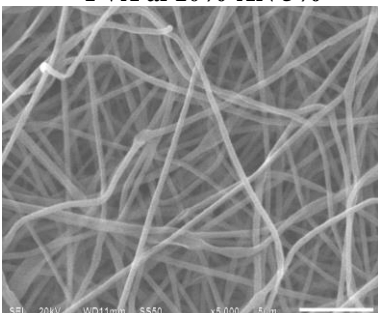
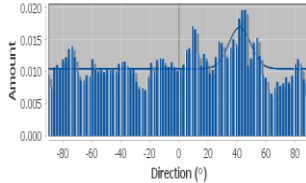
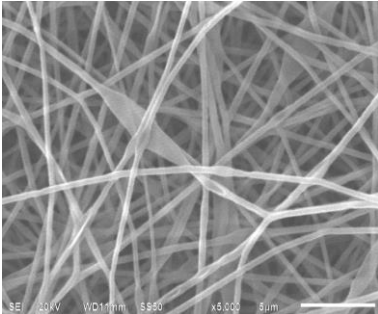
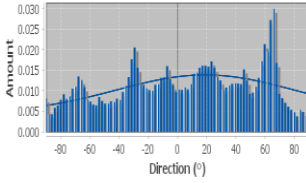
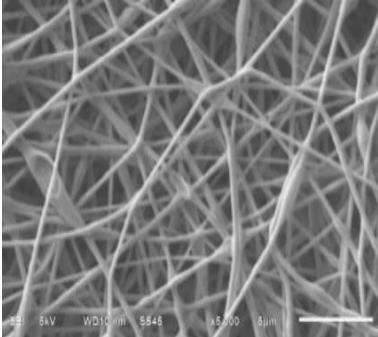
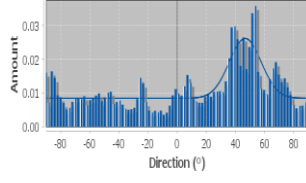
En los sistemas 8 al 15 se reporta que las fibras electrohiladas no se encuentran alineadas y su orientación es aleatoria, con un valor de -5.61° . Dichas fibras son anisotrópicas, dado que sus histogramas presentan distribuciones multimodales.

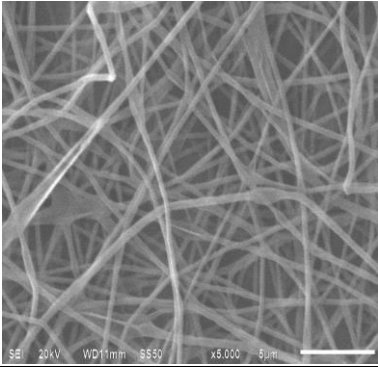
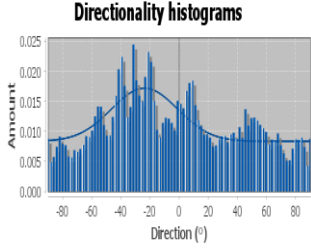
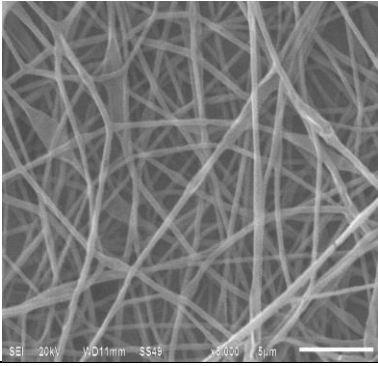
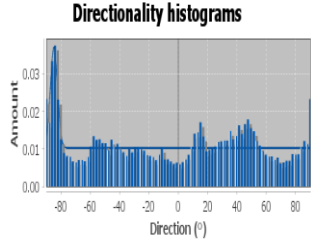
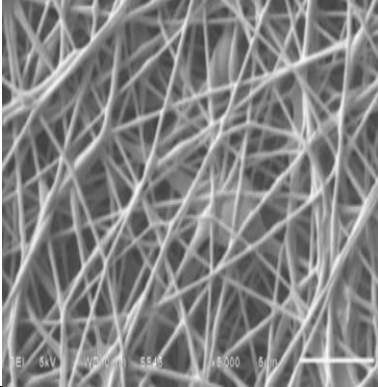
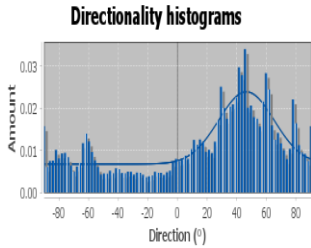
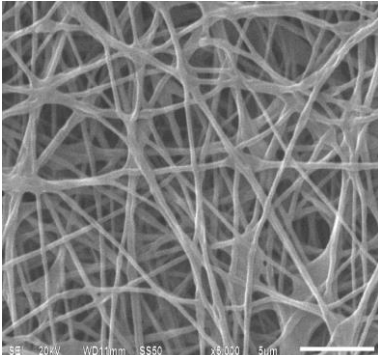
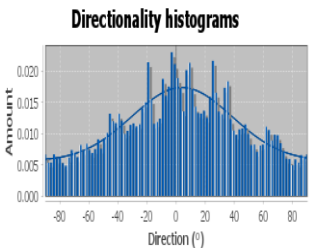
Análisis de micrografías de los sistemas 16-24

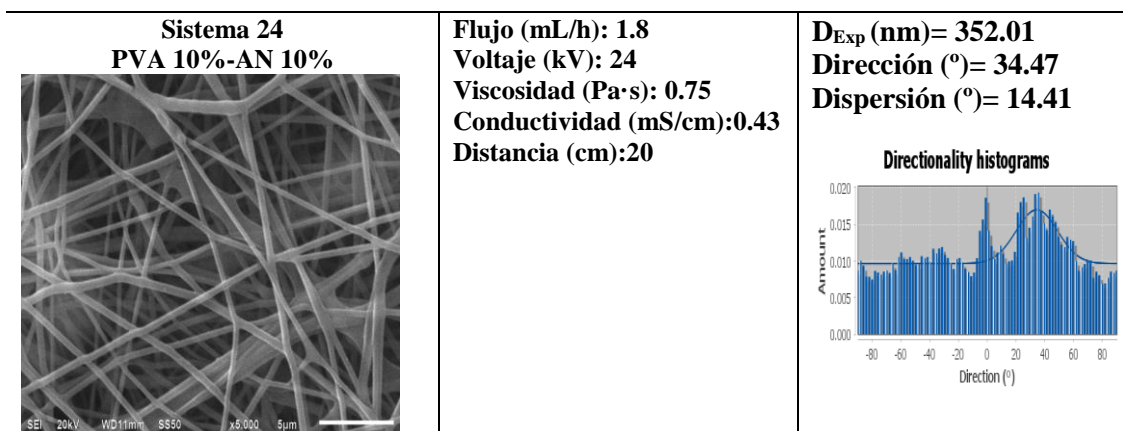
En la Tabla 4.4 se muestran las micrografías correspondientes a fibras de PVA al 10% con AN al 5, 7.5 y 10% p/p.

En los sistemas 16, 17 y 18 correspondiente a fibras de PVA al 10% y AN al 5% p/p se observan fibras lisas en su mayoría y algunas con ligeros abultamientos, resultado de la encapsulación del AN, su diámetro promedio fue 268.90 ± 54.12 nm. De igual forma a los sistemas 8 al 15, la medición del diámetro de las fibras se realizó en forma manual, en donde las fibras medidas fueron seleccionadas, y se evitó aquellas que presentaron mayores abultamientos.

Tabla 4.4. Micrografías de fibras de emulsiones de PVA al 10 % y AN 5, 7.5 y 10% p/p.

Micrografías	Parámetros electrohilado	Propiedades
<p>Sistema 16 PVA 10%-AN 5%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.6 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.62 Conductividad (mS/cm):0.45 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 270.17 Dirección (°)= 53.08 Dispersión (°)= 25.37</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 17 PVA al 10%-AN 5%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.6 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.62 Conductividad (mS/cm):0.45 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 266.49 Dirección (°)= 41.81 Dispersión (°)= 7.58</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 18 PVA 10%-AN 5%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.6 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.62 Conductividad (mS/cm):0.45 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 270.02 Dirección (°)= 18.96 Dispersión (°)= 61.07</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 19 PVA 10%-AN 7.5%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 1.2 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.71 Conductividad (mS/cm):0.43 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 300.50 Dirección (°)= 46.70 Dispersión (°)= 10.95</p> <p>Directionality histograms</p> 

<p>Sistema 20 PVA 10%-AN 7.5%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 1.2 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.71 Conductividad (mS/cm):0.43 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 266.92 Dirección (°)= -23.73 Dispersión (°)= 22.71</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 21 PVA 10%-AN 7.5%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 1.2 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.71 Conductividad (mS/cm):0.43 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 270.63 Dirección (°)= -89.73 Dispersión (°)= 2.43</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 22 PVA 10%-AN 10%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 1.8 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.75 Conductividad (mS/cm):0.43 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 343.61 Dirección (°)= 46.46 Dispersión (°)= 18.72</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 23 PVA 10%-AN 10%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 1.8 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.75 Conductividad (mS/cm):0.43 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 327.46 Dirección (°)= 3.96 Dispersión (°)= 34.42</p> <p>Directionality histograms</p> 



Con respecto a las fibras de las sistemas 19, 20 y 21, sistemas de PVA al 10% con AN al 7.5% p/p se presentan un menor número de fibras lisas y un incremento en las fibras con abultamiento. Su diámetro promedio de 279.35 ± 46.52 nm. Los sistemas 22, 23 y 24, sistemas de PVA al 10% con AN al 10% p/p cuyos diámetros son 341.03 ± 60.55 nm presentaron morfología irregular y no definida en comparación con los sistemas 16 al 18, debido a la mayor concentración de aceite de naranja (10%) presente.

Se observa un efecto claro de la composición de aceite, a mayor concentración se presenta diámetros significativamente mayores. Este resultado fue similar al identificado para las fibras de PVA y AO.

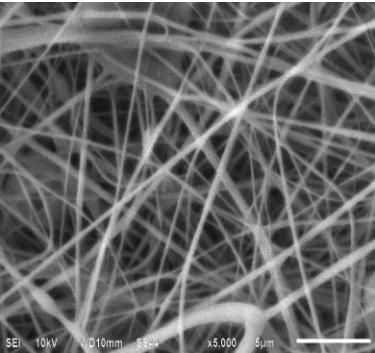
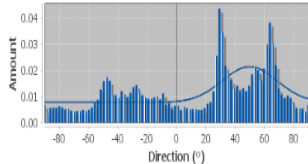
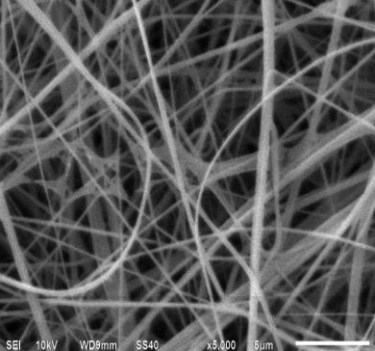
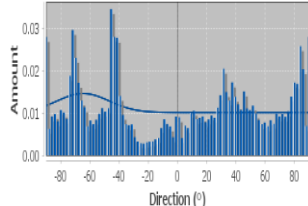
El AN encapsulado en las fibras, contiene d-limoneno, monoterpenos, transdihidrocarvona, trans-p-metano, entre otros compuestos hidrofóbicos, que disminuyeron la conductividad de la muestra y disminución de los grupos polares, además de un incremento en el punto de evaporación y decremento de constante dieléctrica de la solución (176 °C; 2,3), por lo que la evaporación fue más lenta, lo que resultó en fibras con mayor diámetro promedio (Lan *et al.*, 2019). Otro factor importante fue el incremento del flujo necesario para electrohilar, causando que se presentara defectos de perlado en las fibras (Tampau *et al.*, 2020).

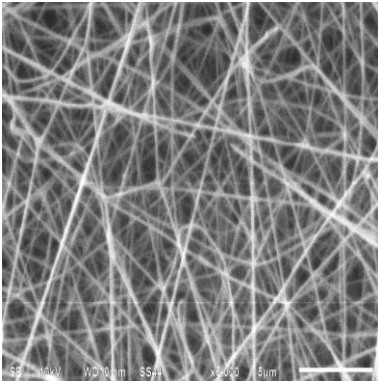
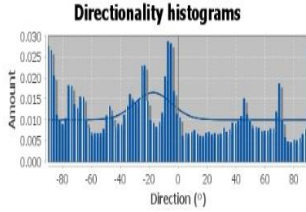
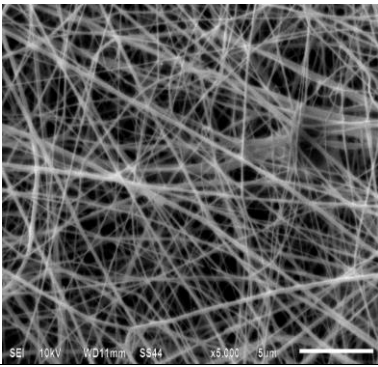
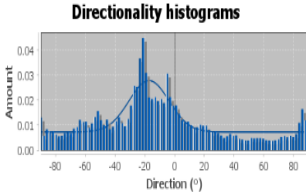
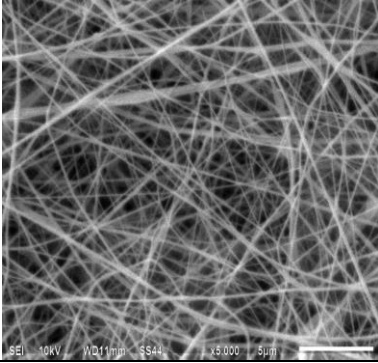
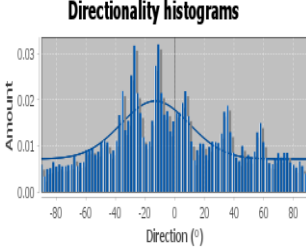
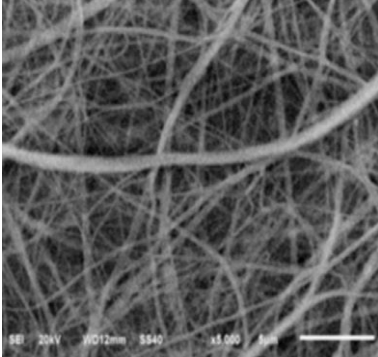
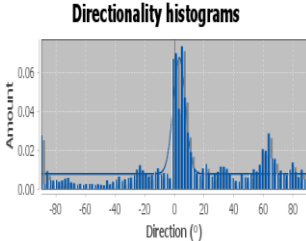
Referente a la orientación de las fibras en los sistemas 16 al 18 se presenta una orientación de 37.95° , para los sistemas 19 al 21, de -22.25° y para los sistemas 22 al 24 de 28.29° . De los resultados se concluye que las fibras electrohiladas no se encuentran alineadas y su orientación es aleatoria y anisotrópica. Los resultados muestran que las fibras para los sistemas 16 al 24 no se estiraron hacia una dirección específica, producto de la baja velocidad de rotación del colector. Se observa que las fibras de los sistemas 16, al 24 presentan anisotropía, dado que los histogramas presentan una distribución multimodal.

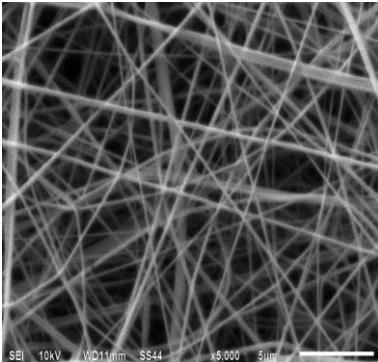
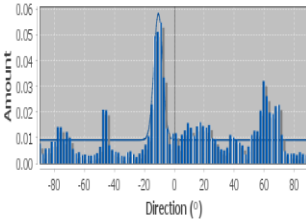
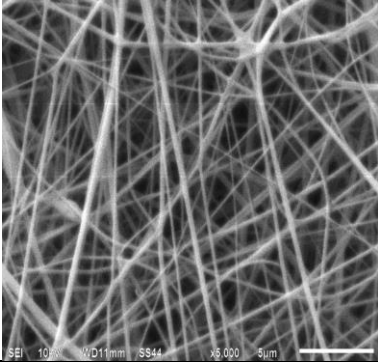
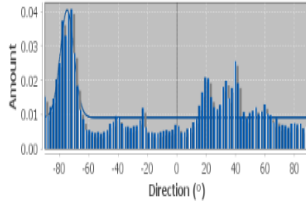
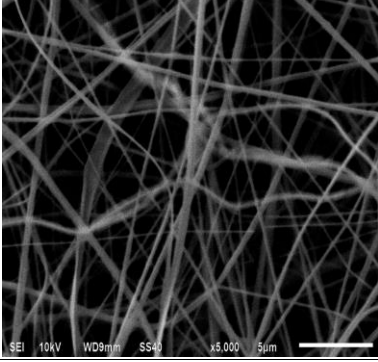
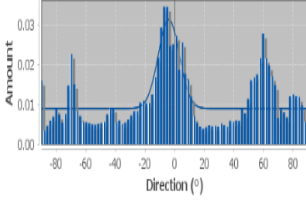
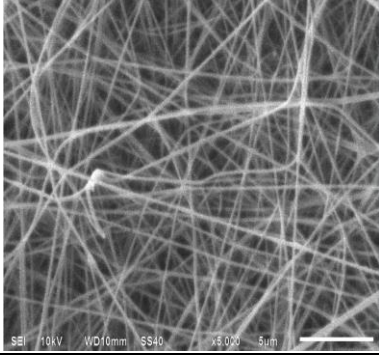
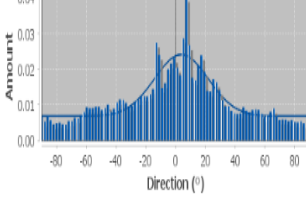
Análisis de micrografías de los sistemas 25-37

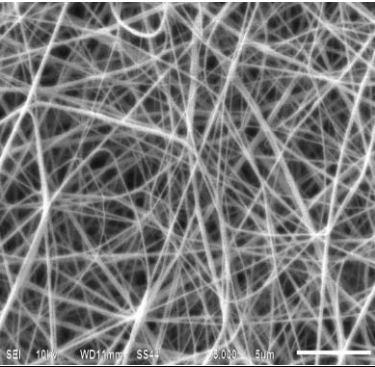
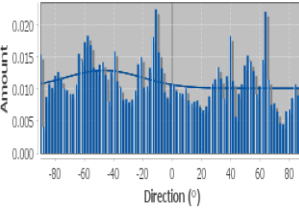
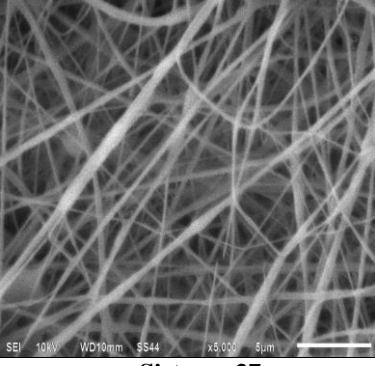
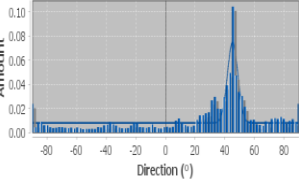
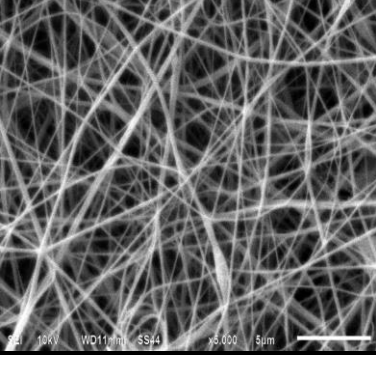
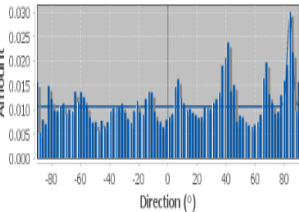
En la Tabla 4.5 se muestran las micrografías correspondientes a emulsiones de GA al 18, 20 y 22% p/p adicionadas con AT de 5, 7.5 y 10% p/p.

Tabla 4.5. Micrografías de fibras de emulsiones de GA al 18, 20 y 22 % y AT 5, 7.5 y 10% p/p.

Micrografías	Parámetro electrohilado	Propiedades
<p>Sistema 25 GA 18%- AT 5%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.02 Voltaje (kV): 30 Viscosidad (Pa·s): 0.28 Conductividad (mS/cm):2.63 Distancia (cm):12</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 247.81 Dirección ($^\circ$)= 49.90 Dispersión ($^\circ$)=18.66</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 26 GA 18%- AT 5%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.02 Voltaje (kV): 30 Viscosidad (Pa·s): 0.28 Conductividad (mS/cm):2.63 Distancia (cm):12</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 266.49 Dirección ($^\circ$)= -64.59 Dispersión ($^\circ$)= 17.87</p> <p>Directionality histograms</p> 

<p>Sistema 27 GA 18%- AT 5%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.02 Voltaje (kV): 30 Viscosidad (Pa·s): 0.28 Conductividad (mS/cm):2.63 Distancia (cm):12</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 237.25 Dirección (°)= -17.40 Dispersión (°)= 12.81</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 28 GA 20%-AT 5%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.02 Voltaje (kV): 30 Viscosidad (Pa·s): 0.44 Conductividad (mS/cm):2.73 Distancia (cm):12</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 194.94 Dirección (°)= -17.18 Dispersión (°)= 13.44</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 29 GA 20%-AT 5%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.02 Voltaje (kV): 30 Viscosidad (Pa·s): 0.44 Conductividad (mS/cm):2.73 Distancia (cm):12</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 229.70 Dirección (°)= -13.24 Dispersión (°)= 23.05</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 30 GA 20%-AT 5%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.02 Voltaje (kV): 30 Viscosidad (Pa·s): 0.44 Conductividad (mS/cm):2.73 Distancia (cm):12</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 222.81 Dirección (°)= 3.22 Dispersión (°)= 4.12</p> <p>Directionality histograms</p> 

<p>Sistema 31 GA 22%-AT 5%</p>  <p>SEI 10kV WD11mm SS44 x5,000 5µm</p>	<p>Flujo (mL/h): 0.02 Voltaje (kV): 30 Viscosidad (Pa·s): 0.50 Conductividad (mS/cm):2.89 Distancia (cm):12</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 239.97 Dirección (°)= -10.69 Dispersión (°)= 2.91</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 32 GA 22%-AT 5%</p>  <p>SEI 10kV WD11mm SS44 x5,000 5µm</p>	<p>Flujo (mL/h): 0.02 Voltaje (kV): 30 Viscosidad (Pa·s): 0.50 Conductividad (mS/cm):2.89 Distancia (cm):12</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 203.84 Dirección (°)= -74.69 Dispersión (°)= 4.70</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 33 GA 22%- AT 7.5%</p>  <p>SEI 10kV WD9mm SS40 x5,000 5µm</p>	<p>Flujo (mL/h): 0.02 Voltaje (kV): 30 Viscosidad (Pa·s): 0.53 Conductividad (mS/cm):1.99 Distancia (cm):12</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 173.28 Dirección (°)= -4.01 Dispersión (°)= 7.06</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 34 GA 22%- AT 7.5%</p>  <p>SEI 10kV WD10mm SS40 x5,000 5µm</p>	<p>Flujo (mL/h): 0.02 Voltaje (kV): 30 Viscosidad (Pa·s): 0.53 Conductividad (mS/cm):1.99 Distancia (cm):12</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 169.90 Dirección (°)= 3.85 Dispersión (°)= 18.09</p> <p>Directionality histograms</p> 

<p>Sistema 35 GA 22%- AT 7.5%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.02 Voltaje (kV): 30 Viscosidad (Pa·s): 0.53 Conductividad (mS/cm):1.99 Distancia (cm):12</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 175.36 Dirección (°)= -46.65 Dispersión (°)= 26.14</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 36 GA 22%- AT 10 %</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.02 Voltaje (kV): 30 Viscosidad (Pa·s): 0.60 Conductividad (mS/cm):1.88 Distancia (cm):12</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 223.27 Dirección (°)= 45.36 Dispersión (°)= 3.50</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 37 GA 22%- AT 10%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.02 Voltaje (kV): 30 Viscosidad (Pa·s): 0.60 Conductividad (mS/cm):1.88 Distancia (cm):12</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 202.67 Dirección (°)= 83.97 Dispersión (°)= 1.83</p> <p>Directionality histograms</p> 

En los sistemas 25, 26 y 27 correspondiente a fibras de GA al 18% y AT al 5% p/p se observan fibras regulares, de superficie lisa no contraída y sin pliegues, con estructura entrecruzada. Las fibras fueron homogéneas morfológicamente y permitieron la formación de un velo denso. Las fibras de gelatina y α tocoferol no presentaron aplanamiento alguno y su diámetro promedio fue 250.52 ± 49.93 nm.

Con respecto a las fibras de las sistemas 28, 29 y 30 correspondiente a fibras de GA al 20% y AT al 5% p/p se reporta que presentaron características similares a los sistemas 25 al 27 pero con un diámetro significativamente menor de 215.82 ± 30.76 . De igual forma se reporta una disminución del diámetro de 221.91 ± 39.63 nm, para los sistemas 31 y 32 correspondientes a fibras de GA al 22% con AT al 5% p/p.

Los sistemas 33 al 35 correspondiente a fibras de GA al 22% enriquecido con alfa-tocoferol al 7.5% p/p presentaron una morfología regular y bien definida con diámetros de las fibras son 172.85 ± 25.60 nm. En los sistemas 36 al 37 correspondiente a fibras de GA al 22% enriquecido con alfa-tocoferol al 10% p/p presentaron una morfología regular, lisa y bien definida cuyos diámetros de las fibras son 212.97 ± 41.58 nm.

Se observa que el uso de mayor concentración de gelatina en la solución permitió la obtención de fibras más delgadas, contrario a lo expresado por los reportes acerca del efecto de la concentración del polímero. Este efecto de disminución en el diámetro es atribuible al uso de ácido acético durante la formación de la solución proteica previo al proceso de electrohilado. Considerando que la gelatina es una proteína anfótera que contiene aminoácidos, entre ellos glicina, alanina, prolina e hidroxiprolina, y algunos otros monómeros residuales cargados positivamente por los radicales NH_3^+ , y carboxilo que imparten una naturaleza polar que se ve reflejada en la alta conductividad de la muestra y que es dependiente del pH de la solución y de la concentración de solventes como es el ácido acético, condiciones que permitieron generar fibras con un menor diámetro (García Ceja & López Malo, 2012).

Posiblemente el ácido acético contribuyó a la desnaturalización de la gelatina protonando los grupos aminos (Choktaweessap *et al.*, 2007), así como mejoró sus propiedades funcionales, entre ellas el incremento su capacidad emulsionante, permitiendo la formación de una emulsión estable de alfa tocoferol y gelatina, y con ello fibras delgadas y homogéneas. Li *et al.* (2016) reportaron valores de los diámetros de 600 nm para fibras de gelatina tipo A y 428 nm para fibras de gelatina tipo A y alfa-tocoferol, resultados diferentes a los reportados en este estudio, pero la diferencia es atribuida al voltaje empleado de 10kV.

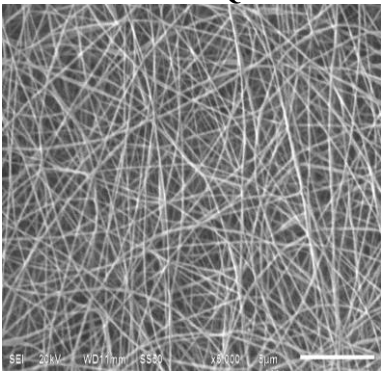
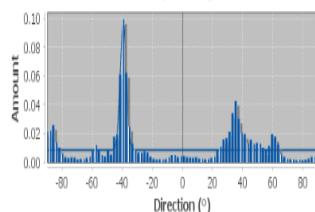
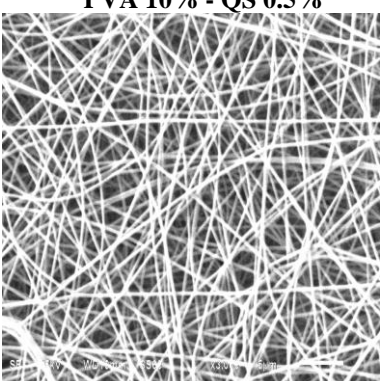
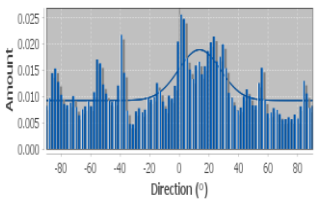
Referente a la orientación de las fibras en los sistemas 25 al 37 se presenta una orientación de -4.78° . De los resultados se concluye que las fibras electrohiladas no se encuentran alineadas y su orientación es aleatoria y anisotrópica (Gaharwar *et al.*, 2014).

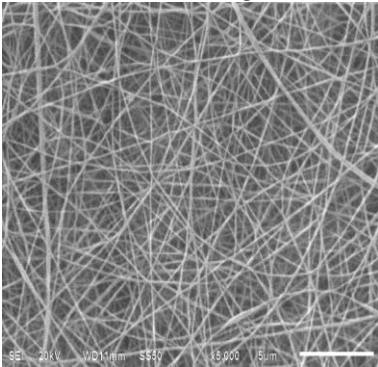
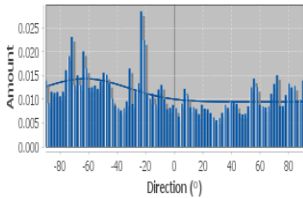
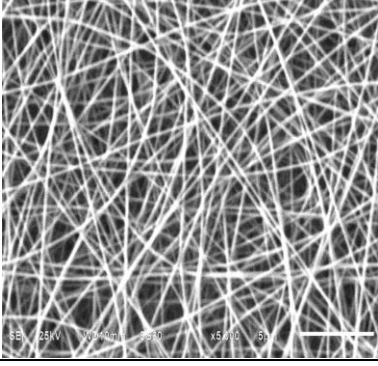
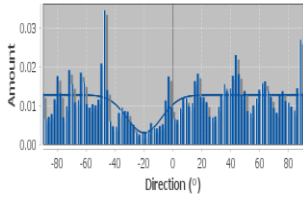
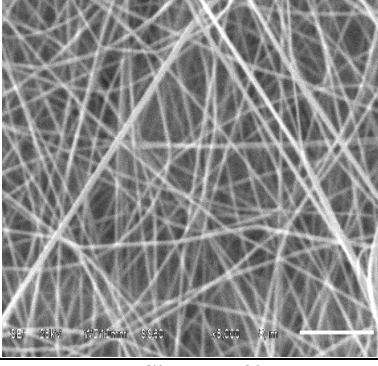
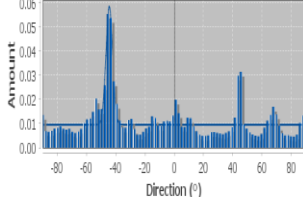
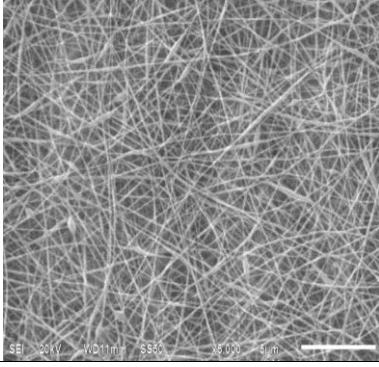
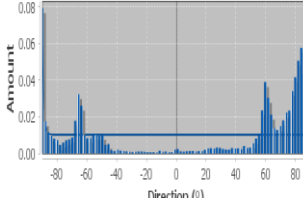
Análisis de micrografías de los sistemas 38-45

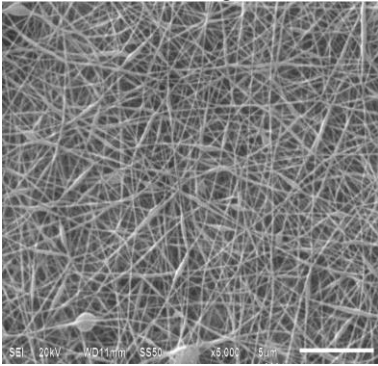
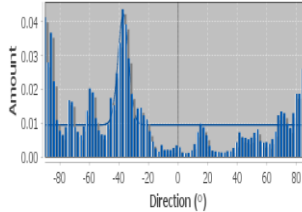
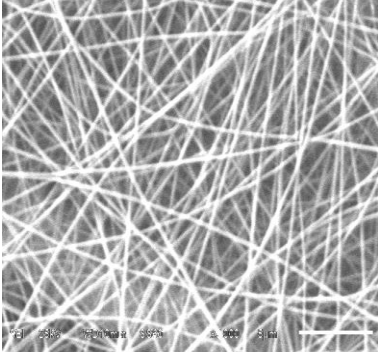
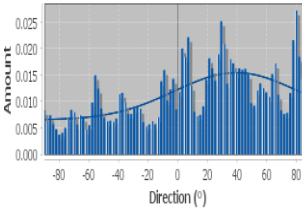
En la Tabla 4.6 se muestran las micrografías correspondientes a soluciones de PVA al 10% p/p y adicionadas con QS al 0.5, 1, 1.5 y 2.0% p/p.

En los sistemas 38 a la 45 correspondiente a las micrografías de PVA/QS se observan fibras regulares, de superficie lisa no contraída y sin pliegues, con estructura entrecruzada. Las fibras fueron homogéneas y permitieron la formación de un velo denso.

Tabla 4.6. Micrografías de fibras de soluciones de PVA al 10 % y QS 0.5, 1, 1.5 y 2.0% p/p.

Micrografías	Parámetros electrohilado	Propiedades
<p>Sistema 38 PVA 10% - QS 0.5%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.1 Voltaje (kV): 26 Viscosidad (Pa·s): 0.19 Conductividad (mS/cm): 0.50 Distancia (cm): 20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 279.17 Dirección ($^\circ$)= -39.38 Dispersión ($^\circ$)= 2.05</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 39 PVA 10% - QS 0.5%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.1 Voltaje (kV): 26 Viscosidad (Pa·s): 0.19 Conductividad (mS/cm): 0.50 Distancia (cm): 20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 257.82 Dirección ($^\circ$)= 13.58 Dispersión ($^\circ$)= 14.14</p> <p>Directionality histograms</p> 

<p>Sistema 40 PVA 10% - QS 2%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.1 Voltaje (kV): 26 Viscosidad (Pa·s): 0.39 Conductividad (mS/cm):1.27 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 209.31 Dirección (°)= -62.47 Dispersión (°)=30.07</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 41 PVA 10%- QS 2%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.1 Voltaje (kV): 26 Viscosidad (Pa·s): 0.39 Conductividad (mS/cm):1.27 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 249.06 Dirección (°)= -19.92 Dispersión (°)= 11.94</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 42 PVA 10%- QS 1%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.14 Voltaje (kV): 21 Viscosidad (Pa·s): 0.22 Conductividad (mS/cm):0.59 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 275.18 Dirección (°)= -44.47 Dispersión (°)= 2.2</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 43 PVA 10% - QS 1%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.14 Voltaje (kV): 21 Viscosidad (Pa·s): 0.22 Conductividad (mS/cm):0.59 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 257.64 Dirección (°)= -739.65 Dispersión (°)= 24.30</p> <p>Directionality histograms</p> 

<p>Sistema 44 PVA 8%- QS 1.5%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.1 Voltaje (kV): 26 Viscosidad (Pa·s): 0.25 Conductividad (mS/cm):1.16 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 268.94 Dirección (°)= -37.00 Dispersión (°)= 3.66</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 45 PVA 8%- QS 1.5%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.1 Voltaje (kV): 26 Viscosidad (Pa·s): 0.25 Conductividad (mS/cm):1.16 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 242.36 Dirección (°)= 39.46 Dispersión (°)= 42.03</p> <p>Directionality histograms</p> 

Los diámetros obtenidos para los sistemas 38 y 39 (PVA/ QS al 0.5%) fueron 268.50 ± 51.00 nm, para los sistemas 40 y 41 de PVA/ QS al 2% de 229.18 ± 53.95 nm, para los sistemas 42 y 43 de PVA/ QS al 1 % de 266.41 ± 48.77 nm. para los sistemas 44 y 45 de PVA/ QS al 1.5% de 255.65 ± 35.68 nm.

En los sistemas 38 a la 45 se observó una disminución del diámetro de las fibras a medida que la concentración de QS se incrementó. Además se registró un incremento de la conductividad debido a los grupos amino NH_3 presentes en la solución. El QS es un polímero lineal formado por monómeros de glucosamina y en menor medida de N-acetil-D-glucosamina unidos por enlaces β 1-4, con elevada proporción de grupos amino libres (Rodríguez *et al.*, 2009, Kumirska *et al.*, 2011).

Varios autores estudiaron el efecto de la conductividad de la solución, ya que determina la densidad de carga de la solución de polímero, que a su vez controla la repulsión y el grado de flexión durante el electrohilado. Cay *et al.* (2014) electrohilieron soluciones con diferentes

conductividades e investigaron su efecto en la morfología de las fibras (presencia de perlas, diámetro medio de fibras), reportando que cuanto mayor era la conductividad, menor era el diámetro de las fibras.

Triyana *et al.* (2015) y Koosha, & Mirzadeh, (2015) reportaron diámetros de sistema de PVA y QS entre 120 a 223 nm y estos autores atribuyen la disminución de diámetro en función del incremento de la conductividad de las soluciones.

Este fenómeno se presenta dado que durante el electrohilado el QS genera una mayor densidad de carga en la superficie del chorro, produciendo un mayor estiramiento en las fibras. Es decir las cargas transportadas por el chorro aumentan y con ello el alargamiento de las fibras al someterse al campo eléctrico, resultando en una disminución en el diámetro de las fibras (Cay *et al.*, 2014, Jia *et al.*, 2007, Ignotova *et al.*, 2007, Gholipour *et al.*, 2009).

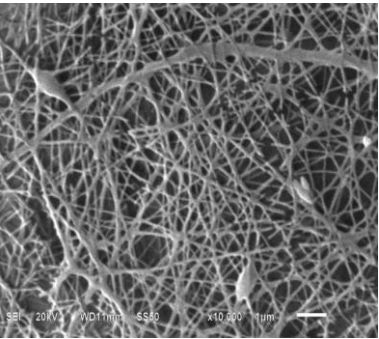
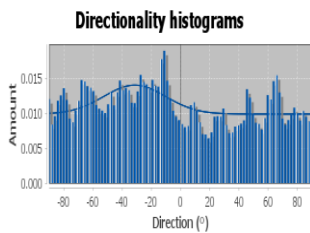
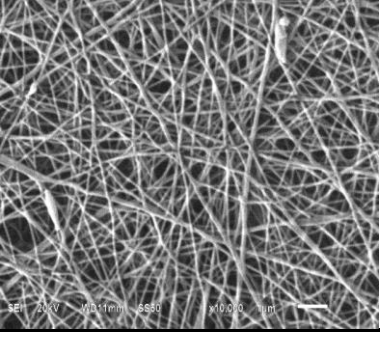
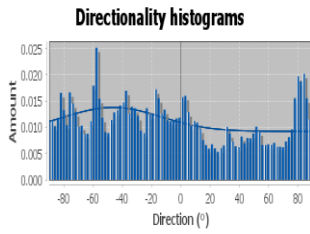
Se observa que las fibras de los sistemas 38 al 45 presentan anisotropía, dado que las micrografías presentaron un histograma plano y multimodal, ya que la orientación de las fibras electrohiladas no se encuentran alineadas y son aleatorias en todos los sistemas estudiados con una orientación promedio de -111.23° .

Análisis de micrografías de los sistemas 46 y 47

En la Tabla 4.7 se muestran las micrografías correspondientes a emulsiones de PVA al 10% p/p adicionadas con AA al 20% p/p.

En los sistemas 46 y 47 correspondiente a las micrografías de las fibras PVA y AA con una concentración (20 %), y diámetro promedio de las fibras de 98.50 ± 17.57 nm. Se logra apreciar que las fibras lograron encapsular el aceite ya que presentaron ligeros abultamientos, un comportamiento similar a los reportados para los sistemas PVA y AO. La orientación de las fibras electrohiladas de los sistemas 46 y 47 no se encuentran alineadas y son aleatorias con una orientación promedio de -38.88° .

Tabla 4.7. Micrografías de fibras de emulsiones de PVA al 10 % y AA 20% p/p.

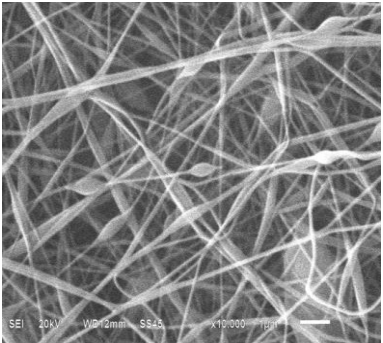
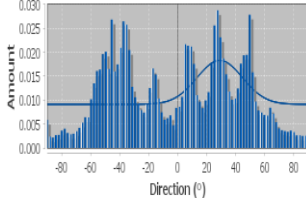
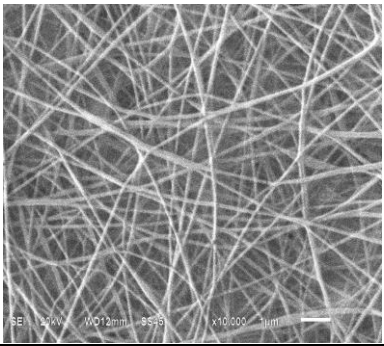
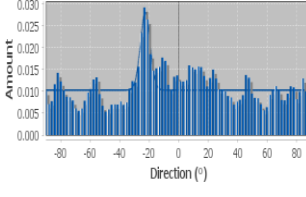
Micrografías	Parámetro electrohilado	Propiedades
<p>Sistema 46 PVA 10%-AA 20%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.6 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.32 Conductividad (mS/cm):0.47 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 103.48 Dirección (°)= -31.37 Dispersión (°)= 21.25</p> <p>Directionality histograms</p> 
<p>Sistema 47 PVA 10%-AA 20%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 0.6 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.32 Conductividad (mS/cm):0.47 Distancia (cm):20</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 93.52 Dirección (°)= -46.40 Dispersión (°)= 32.86</p> <p>Directionality histograms</p> 

Análisis de micrografías de los sistemas 48 y 49

En la Tabla 4.8 se muestran las micrografías correspondientes a soluciones de PVA al 10% p/p adicionadas con extractos de AV al 55% p/p.

En las micrografías de las fibras de PVA al 10% y AV al 55% (sistemas 48 y 49), se aprecian fibras continuas, lisas y algunas de ellas presentan abultamientos debido a la encapsulación del extracto de AV, comportamiento similar a los reportados para los sistemas PVA con los diferentes aceites encapsulados de oliva y naranja. El diámetro promedio de las fibras fue 103.52 ± 13.91 nm.

Tabla 4.8. Micrografías de fibras de soluciones de PVA al 10 % y AV 55% p/p.

Micrografías	Parámetros electrohilado	Propiedades
<p style="text-align: center;">Sistema 48 PVA 10%-AV 55%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 1 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.08 Conductividad (mS/cm):1.77 Distancia (cm):12</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 103.5146 Dirección (°)= 28.96 Dispersión (°)= 15.69</p> <p style="text-align: center;">Directionality histograms</p> 
<p style="text-align: center;">Sistema 49 PVA 10%- AV 55%</p> 	<p>Flujo (mL/h): 1 Voltaje (kV): 24 Viscosidad (Pa·s): 0.08 Conductividad (mS/cm):1.77 Distancia (cm):12</p>	<p>D_{Exp} (nm)= 103.52 Dirección (°)= -22.66 Dispersión (°)= 3.32</p> <p style="text-align: center;">Directionality histograms</p> 

El extracto de AV contiene aloína, glucósido antraquinónico polihidroxiado, que se caracteriza por tener estructura muy larga de cadenas de carbonos, por lo que se explica el valor alto de la conductividad eléctrica de la solución electrohilada (Isfahani *et al.*, 2017) (Tabla 4.8). Se observa que las fibras electrohiladas no se encuentran alineadas y son aleatorias con una orientación promedio de 3.15°.

El diámetro experimental de las fibras electrohiladas está relacionada con los parámetros de solución entre ellos la concentración, viscosidad y conductividad.

Después de analizar las micrografías de las fibras consideradas en este trabajo se observó que las variables conductividad y viscosidad de la solución y/o emulsión fueron significativas para el proceso de electrohilado y con ello sobre la distribución del diámetro de las fibras y su orientación espacial.

OBJETIVO 3

Diseñar una RNA a partir de un conjunto de datos experimentales, para la predicción del diámetro de las fibras electrohiladas, dimensión fractal y porosidad digital, que incluya los datos de entrada voltaje, flujo de la solución, conductividad y viscosidad de las soluciones/emulsiones poliméricas.

En este apartado solamente se presentan las configuraciones de las RNA que presentaron los mejores resultados en cuanto a la predicción del diámetro de las fibras electrohiladas. Se probaron un gran número de configuraciones, ecuaciones de normalización y combinación de variables de entrada, no obstante los resultados de R^2 , fueron muy bajos, reportando su baja capacidad para predecir el diámetro de las fibras electrohiladas (Anexo B).

4.3. Arquitecturas con una capa oculta

Se usó una arquitectura de la RNA con una sola capa oculta de neuronas, y después de un análisis matemático de sensibilidad (ecuación 3.9) se determinó los datos y variables de entrada que contribuyen con mayor peso a la predicción del dato de salida.

Para este estudio inicialmente se utilizaron cuatro variables de entrada relacionadas con el proceso de electrohilado: flujo, voltaje, viscosidad y conductividad y como variable de salida el diámetro de las fibras. Dichas variables fueron seleccionadas debido a la relevancia reportada en la literatura (Sadan *et al.*, 2016, Khatti *et al.*, 2019) (Tabla 4.9).

Tabla 4.9. Parámetros de electrohilado, incluida su influencia en el diámetro de la fibra y morfología (Brooks & Tucker, 2015).

Grupo	Parámetros	Reportado en la literatura	Efecto en el diámetro
Polímero	Peso molecular	Fuerte	El diámetro de la fibra aumenta con el peso molecular.
	Polidispersidad	Moderado	El aumento de la polidispersidad da como resultado fibras más gruesas.
	Viscosidad intrínseca	Fuerte	El diámetro de la fibra aumenta con la viscosidad intrínseca.
	Parámetros de solubilidad	Fuerte	Interacción débil entre las moléculas de polímero y solvente, pueden producir fibras con cuentas.
Solvente	Densidad del disolvente	Débil	El incremento de la densidad conduce a disminución en el diámetro.

	Presión de vapor	Moderada	Mayor presión de vapor fibras no uniformes e irregulares.
	Constante dieléctrica	Fuerte	Incremento de constante dieléctrica genera diámetros más pequeños.
	Conductividad	Fuerte	Incremento de la conductividad genera diámetros más pequeños.
	Momento dipolar	Fuerte	Incremento del momento dipolar genera una disminución en el diámetro.
	Tensión superficial	Débil	Alta tensión superficial produce gotas en las fibras.
Solución	Concentración	Fuerte	Al aumentar la concentración de la solución, el diámetro de la fibra aumenta.
	Viscosidad	Fuerte	Incremento de la viscosidad mayor diámetro de las fibras.
	Presión de vapor	Moderada	Disminución de la presión de vapor disminución en el diámetro.
	Conductividad	Fuerte	Aumento de la conductividad reducción en el diámetro.
	Tensión superficial	Débil	Al reducir la tensión superficial existe una disminución en la formación de perlas.
	Densidad carga	Fuerte	Aumento de la densidad de carga reducción en el diámetro.
Experimental	Flujo	Débil	Si el flujo es alto se formarían fibras con diámetros más gruesos y con perlas.
	Distancia	Débil	A mayor distancia diámetros más pequeños.
	Voltaje	Moderado	Incremento del voltaje genera una disminución en el diámetro.
	Geometría del colector	Moderado	Influye en la alineación de las fibras.

Con las cuatro variables de entrada previamente seleccionadas, la RNA comprendió una capa oculta con un número variable de neuronas de 2 a 14, como se muestra en la Figura 4.1.

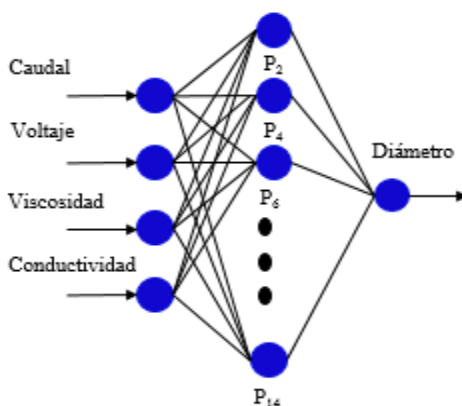


Figura 4.1. Configuración de una sola capa oculta probada.

De las ecuaciones de normalización estudiadas, la que presentó mayor eficiencia en la predicción del diámetro de las fibras electrohiladas, fue la ecuación de Ciaburro *et al.*, (2020) como se muestran en la Tabla 4.10, debido a que los valores de los MSE de la etapa de entrenamiento, prueba y validación fueron significativamente menores en comparación con los resultados obtenidos con las ecuaciones de normalización de Maurya *et al.* (2020) y Karimi *et al.* (2015).

De igual forma, para la predicción de los valores de salida diámetros de las fibras, el valor de R^2 , fue mayor empleando la ecuación de Ciaburro *et al.* (2020), en comparación con los valores obtenidos de R^2 al emplear las ecuaciones de normalización de Maurya *et al.* (2020) y Karimi *et al.* (2015).

Razón por la cual se estableció que la ecuación de normalización empleada en este trabajo de investigación fue la ecuación de Ciaburro *et al.* (2020), misma que fue empleada para la normalización de los datos de entrada de otras configuraciones de RNA probadas en este trabajo.

Con respecto a las configuraciones reportados en la Tabla 4.10, el uso de la ecuación de normalización de Ciaburro *et al.* (2020), se observaron valores mayores de los MSE en la etapa prueba en las configuraciones de RNA de 2, 4, 12 y 14 neuronas, mientras que la configuración de 8 neuronas presentó valores significativamente menores de MSE (0.03, 0.08, 0.04) con una R^2 de 0.96 y un porcentaje de error de 4.44% respectivamente. Confirmando que el uso de 8 neuronas permite una mayor aproximación a los datos de los diámetros de las fibras experimentales obtenidos por SEM.

Los resultados obtenidos (Tabla 4.10) empleando la ecuación de normalización de Ciaburro *et al.* (2020) mostraron dos vertientes importantes en la predicción del diámetro de las fibras en función del número de neuronas en la capa oculta. En primer lugar, si el número es demasiado pequeño, el modelo no puede aproximar con la exactitud el valor de salida. Segundo, se observó que un incremento en el número de neuronas en la capa oculta no garantiza una mejor estimación de los datos de salida, además, se puede producir un sobreajuste, que evita que el proceso de generalización en la fase de prueba y genera un modelo sobreparametrizado. Este tipo de problemas en el uso de RNA también ha sido reportado por otros autores en la predicción de datos (Da Silva *et al.*, 2017).

Tabla 4.10. Valores de R^2 y MSE de las configuraciones probadas empleando una capa oculta en RNA con variables de entrada (flujo, voltaje, viscosidad y conductividad) empleando la ecuación de normalización de Maurya *et al.*, (2020), Karimi *et al.*, (2015) y Ciaburro *et al.*, (2020).

Ecuación de normalización de Maurya <i>et al.</i>, (2020)								
Número de neuronas		2	4	6	8	10	12	14
R^2	Entrenamiento	0.85	0.94	0.96	0.96	0.94	0.95	0.94
	Prueba	0.63	0.41	0.65	0.81	0.78	0.48	0.58
	Validación	0.69	0.92	0.91	0.94	0.92	0.92	0.91
	Total	0.82	0.91	0.94	0.93	0.94	0.91	0.91
MSE	Entrenamiento	0.15	0.06	0.01	0.08	0.05	0.09	0.06
	Prueba	0.25	0.29	0.18	0.07	0.14	0.16	0.17
	Validación	0.23	0.05	0.09	0.06	0.08	0.07	0.07
Ecuación de normalización de Karimi <i>et al.</i>, (2015)								
Número de neuronas		2	4	6	8	10	12	14
R^2	Entrenamiento	0.82	0.93	0.95	0.95	0.94	0.91	0.92
	Prueba	0.60	0.39	0.61	0.82	0.79	0.57	0.54
	Validación	0.60	0.90	0.91	0.93	0.94	0.91	0.92
	Total	0.80	0.89	0.92	0.92	0.92	0.94	0.92
MSE	Entrenamiento	0.14	0.08	0.09	0.04	0.07	0.06	0.07
	Prueba	0.28	0.21	0.15	0.09	0.17	0.18	0.14
	Validación	0.29	0.08	0.07	0.05	0.04	0.07	0.06
Ecuación de normalización de Ciaburro <i>et al.</i>, (2020)								
Número de neuronas		2	4	6	8	10	12	14
R^2	Entrenamiento	0.88	0.96	0.97	0.97	0.97	0.97	0.98
	Prueba	0.63	0.43	0.66	0.82	0.80	0.59	0.64
	Validación	0.70	0.95	0.93	0.96	0.97	0.96	0.96
	Total	0.84	0.92	0.95	0.96	0.95	0.95	0.96
MSE	Entrenamiento	0.13	0.04	0.03	0.03	0.03	0.03	0.02
	Prueba	0.23	0.27	0.12	0.08	0.10	0.15	0.13
	Validación	0.21	0.03	0.04	0.04	0.03	0.03	0.03

Diferentes configuraciones de modelos de RNA de una sola capa oculta han sido empleadas en la predicción de datos (Ciaburro *et al.*, 2020; Hamadneh *et al.*, 2019), tal es el caso del trabajo realizado por You *et al.* (2020), quien empleo este tipo de configuración para predecir el peso molecular de policaprolactona del proceso de polimerización enzimática, con la configuración de una capa oculta con 20 neuronas, obteniéndose un R^2 de 0.99.

4.4. Análisis de sensibilidad

Se ha reportado que el uso de una capa oculta puede favorecer la predicción de los datos (Siddique *et al.*, 2018), sin embargo, esta puede ser afectada en la precisión de la RNA y es posible que la red no se entrene correctamente; es decir, si se obtienen ajustes deficientes con

valor de $R^2 \leq 0.7$, es necesario un mayor entrenamiento con la modificación de capas y neuronas ocultas (Uzair *et al.*, 2020; Lau *et al.*, 2019).

La configuración de 8 neuronas y una capa permitió determinar la importancia de las variables relacionadas con las características de las soluciones/emulsiones poliméricas y las variables de operación de electrohilado en la predicción del diámetro de la fibra. Este tipo de análisis de sensibilidad también fue propuesto por Nasouri (2018) y Kalantary *et al.* (2020), donde las variables de entrada experimentales (concentración de la solución, distancia del inyector) tienen una mayor importancia en la predicción del diámetro de fibras de PVP (polivilpirrolidona) y poli(3-caprolactona) /gelatina respectivamente. Para poder identificar las variables de mayor importancia, los autores alimentaron los pesos sinápticos de las entradas y salida de la RNA optimizada con el uso de la Ecuación 3.9 de la sección de materiales y métodos.

La Figura 4.2 muestra la contribución relativa de la configuración de una capa oculta con 8 neuronas, observándose que la viscosidad de las soluciones/emulsiones es la variable de entrada de mayor importancia en la predicción del diámetro con un valor del 29%, esto se interpreta como una relación dependiente entre diámetro de la fibra y la viscosidad. Estos resultados concuerdan con los datos experimentales reportados en el objetivo uno, donde se evidenció que un incremento de la viscosidad de la solución/emulsión resultó en un mayor diámetro de la fibra. Además, esta variable está relacionada con la temperatura, composición y naturaleza química de los componentes de las soluciones/emulsiones poliméricas. Las variables con una menor relevancia corresponden a los datos de conductividad 26%, voltaje 24% y al flujo de alimentación 20%.

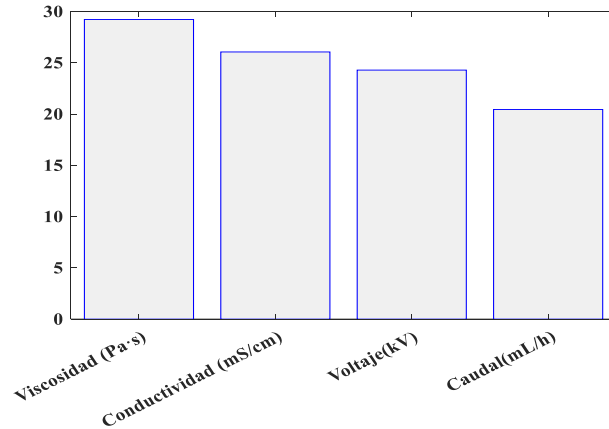


Figura 4.2. Importancia de cada variable de entrada en la predicción de diámetro de las fibras electrohiladas.

4.5. Arquitecturas con dos capas ocultas

Una vez estudiada la respuesta de una capa oculta en la predicción del diámetro de las fibras, se planteó estudiar el efecto de dos capas ocultas en una RNA, con el objetivo de obtener un R^2 más cercano a la unidad, que implica una mejor predicción de los diámetros de las fibras. Para ello, se propuso la configuración 8- n , que consistió en 8 neuronas en la primera capa oculta, mientras el término n (4, 8, 12, 16 y 20) denota la variación de neuronas correspondientes a la segunda capa oculta, teniendo las configuraciones que se muestran en el anexo B: 8-4, 8-8, 8-12, 8-16 y 8-20.

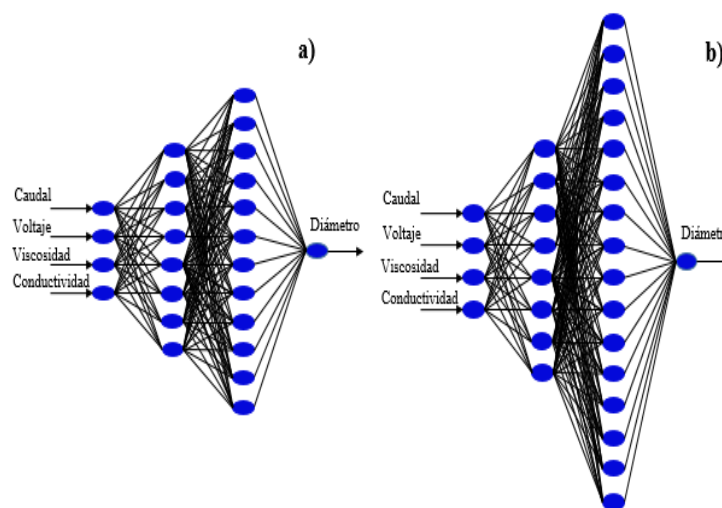


Figura 4.3. Configuraciones RNA a) 8-12 b)8-16.

Del análisis de los resultados MSE y R^2 de las etapas de entrenamiento prueba y validación, (Tabla 4.11) para las configuraciones 8- n , se observó que las RNA (8-12) y (8-16) presentaron valores menores del MSE para la configuración (8-12), (0.02, 0.05, 0.04) y (8-16) (0.02, 0.06, 0.03) respectivamente. Se observa que los valores de MSE de las RNA seleccionadas en este apartado son similares, sin embargo, la configuración (8-16) de la Figura 4.3 b resultó ser más eficiente en la predicción del diámetro de las fibras con un R^2 de 0.98 y un porcentaje de error promedio de 3.96%.

Tabla 4.11. Configuraciones probadas empleando dos capas ocultas en RNA con variables de entrada (flujo, voltaje, viscosidad y conductividad).

Número de neuronas		8-4	8-8	8-12	8-16	8-20
R^2	Entrenamiento	0.98	0.97	0.98	0.98	0.98
	Prueba	0.62	0.82	0.84	0.86	0.88
	Validación	0.96	0.96	0.95	0.98	0.97
	Total	0.95	0.96	0.97	0.98	0.97
MSE	Entrenamiento	0.03	0.03	0.02	0.02	0.02
	Prueba	0.20	0.08	0.05	0.06	0.09
	Validación	0.04	0.04	0.04	0.03	0.03

Resultados similares se presentaron en el estudio realizado por Khatti *et al.* (2019) quienes emplearon una configuración de dos capas ocultas con 11 y 5 neuronas, que predijeron el diámetro de fibras de policaprolactona con un R^2 de 0.97. Por lo tanto, la predicción del diámetro de las fibras con el uso de RNA es compleja y es función del sistema estudiado, disponibilidad y calidad de los datos de entrada.

Una vez analizado el efecto del uso de dos capas ocultas en la predicción de los datos de salida, se procedió al incremento de tres capas de neuronas ocultas.

4.6. Arquitecturas con tres capas ocultas

Con el análisis de la configuración de dos capas ocultas 8-16 se buscó incrementar el valor R^2 con una configuración adicional de tres capas ocultas de neuronas 8-16- n , donde n varía de 3 a 6 y cuales se muestran en el anexo B. Los resultados mostraron que la configuración 8-16-3 (Figura 4.4 a) y 8-16-5 (Figura 4.4.b) presentaron valores de R^2 de 0.98 para ambas RNA (Tabla 4.12).

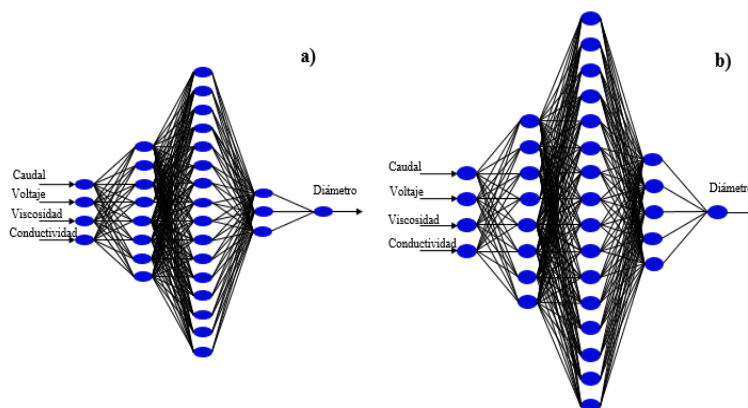


Figura 4.4. Configuraciones RNA a) 8-16-3 b) 8-16-5.

En cuanto a los valores de MSE de entrenamiento y validación ambas RNA 8-16-3 y 8-16-5 presentaron valores iguales, sin embargo, en la etapa de prueba, la configuración 8-16-5 presentó valores menores de MSE en comparación con la RNA 8-16-3, seleccionando esta configuración como la más eficiente en la predicción de los diámetros de las fibras electrohiladas.

Tabla 4.12. Configuraciones probadas empleando tres capas ocultas en RNA con variables de entrada (flujo, voltaje, viscosidad y conductividad).

Número de neuronas		8-16-3	8-16-4	8-16-5	8-16-6
R ²	Entrenamiento	0.99	0.98	0.98	0.97
	Prueba	0.92	0.88	0.93	0.87
	Validación	0.97	0.93	0.96	0.97
	Total	0.98	0.97	0.98	0.96
MSE	Entrenamiento	0.02	0.03	0.02	0.03
	Prueba	0.04	0.05	0.03	0.05
	Validación	0.03	0.03	0.03	0.04

Análisis comparativo de las configuraciones de las RNA seleccionadas

Se realizó un análisis comparativo de las RNA seleccionadas 8, 8-16 y 8-16-5, y se observó que la predicción de los diámetros con dos y tres capas ocultas es confiable de acuerdo con su valor de R² de 0.96, 0.98 y 0.98 respectivamente (Lebreton *et al.*, 2017). Se concluye de este apartado que no existe una diferencia significativa en la predicción de los diámetros entre dos y tres capas ocultas (Tabla 4.13). Resultados similares sobre la eficiencia de las RNA con dos y tres capas ocultas para la predicción de los diámetros de fibras empleando QS/PEO y QS/PVA fueron reportados por Ketabchi *et al.* (2017) y Karimi *et al.* (2015).

Tabla 4.13. Configuraciones seleccionadas con cuatro variables de entrada (flujo, voltaje, viscosidad y conductividad).

Numero capas ocultas		1	2	3
Configuraciones		8	8-16	8-16-5
R ²	Entrenamiento	0.97	0.98	0.98
	Prueba	0.82	0.86	0.93
	Validación	0.96	0.98	0.96
	Total	0.96	0.98	0.98
MSE	Entrenamiento	0.03	0.02	0.02
	Prueba	0.08	0.06	0.03
	Validación	0.04	0.03	0.03

En la Figura 4.5 se muestra la distribución de los diámetros de las fibras predichos con la RNA configuración 8-16-5 (Figura 4.4 b), confirmando que la RNA empleada es confiable para la predicción del diámetro de las fibras para las soluciones de PVA, PVA/QS y PVA/AV, así como de emulsiones de GA/AT, PVA/AO, PVA/AN y PVA/AA. Es por ello, que el modelo RNA de tres capas ocultas contribuye en comprender la jerarquía que tienen las variables experimentales en la predicción del diámetro de las fibras electrohiladas. En la Tabla 4.14 se presentan los diámetros de las fibras experimentales y los predichos por la RNA empleando tres capas ocultas (8-16-5).

Tabla 4.14. Diámetros predichos empleando la configuración (8-16-5).

	Diámetro experimental (nm)	Diámetro predicho (nm)
PVA 8%	178.59	175.21
PVA 8%	172.77	175.21
PVA 10%	298.40	311.19
PVA 10%	289.82	297.45
PVA 10%	307.47	297.45
PVA 10%	305.36	297.45
PVA 12%	182.00	198.69
PVA10%/AO4%	207.69	212.72
PVA10%/AO4%	217.45	212.72
PVA10%/AO4%	209.60	212.72
PVA10%/AO8%	289.76	290.04
PVA10%/AO8%	285.31	290.04
PVA10%/AO8%	297.87	290.04
PVA10%/AO12%	478.62	450.19

PVA10%/AO12%	491.77	452.00
PVA10%/AN5%	270.18	269.11
PVA10%/AN5%	266.49	269.11
PVA10%/AN5%	270.03	269.11
PVA10%/AN7.5%	300.51	271.46
PVA10%/AN7.5%	266.92	271.46
PVA10%/AN7.5%	270.63	271.46
PVA10%/AN10%	343.61	329.89
PVA10%/AN10%	327.47	329.89
PVA10%/AN10%	352.01	329.89
GA18%/AT5%	247.81	246.89
GA18%/AT5%	266.49	246.89
GA18%/AT5%	237.26	246.89
GA20%/AT5%	194.94	202.98
GA20%/AT5%	229.70	202.98
GA20%/AT5%	222.82	202.98
GA22%/AT5%	239.98	198.69
GA22%/AT5%	203.85	198.69
GA22%/AT7.5%	173.29	172.17
GA22%/AT7.5%	169.90	172.17
GA22%/AT7.5%	175.36	172.17
GA22%/AT10%	223.28	207.91
GA22%/AT10%	202.68	207.91
PVA10%/QS 0.5%	279.18	265.81
PVA10%/QS 0.5%	257.83	265.81
PVA10%/QS 2%	209.32	237.33
PVA10%/QS 2%	249.06	237.33
PVA10%/QS 1%	275.18	265.80
PVA10%/QS 1%	257.65	265.80
PVA10%/QS 1.5%	268.95	250.08
PVA10%/QS 1.5%	242.36	250.08
PVA10%/AA 22%	103.49	100.66
PVA10%/AA 22%	93.52	100.66
PVA10%/AV 55%	103.51	103.05
PVA10%/AV 55%	103.53	103.05

Los trabajos publicados acerca del uso y construcción de las RNA para la predicción del fenómeno de electrohilado, emplean un solo polímero electrohilable, y diferentes datos de entrada: concentración de la solución de polímero, voltaje aplicado y flujo, limitando su aplicación (Muarya *et al.*, 2020, Nasouri,2018, Ketabchi *et al.*, 2017, Sadan *et al.*, 2016, Karimi *et al.*, 2015, Sarkar *et al.*, 2006).

Es importante resaltar que la RNA propuesta en esta tesis, es capaz de predecir el diámetro de fibras electrohiladas de diferentes combinaciones de biopolímeros y aceites, lo que permite su aplicación en la industria alimentaria, farmacéutica, cosmética entre otras, en comparación con otras investigaciones reportadas en la literatura.

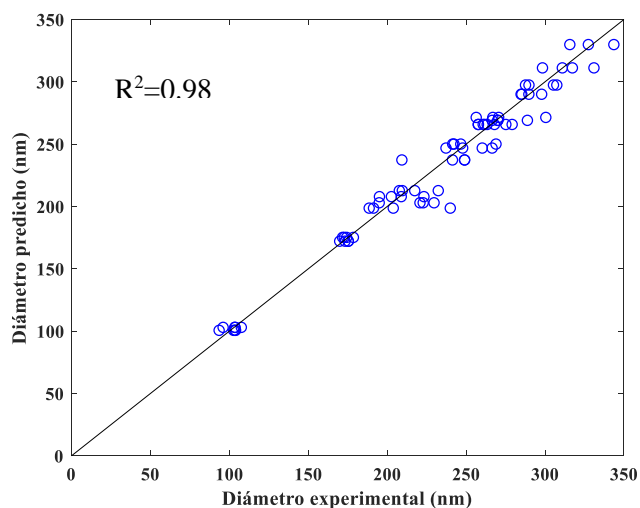


Figura 4.5. Diámetro de la fibra predicho por la RNA vs. Diámetro de fibra experimental.

De acuerdo al objetivo tres de esta tesis, acerca del diseño de una RNA para la predicción de la morfología de los VE, se consideró determinar la dimensión fractal (DF) y porosidad digital (PD) como parámetros cuantitativos de su morfología descriptiva.

4.7. Dimensión fractal de la superficie de los velos

Con el objeto de describir la morfología de los velos, se analizaron las imágenes de SEM obtenidas para las 49 muestras, según la metodología descrita en el capítulo cuatro. Las

imágenes fueron empleadas para obtener la DF de la superficie de los velos cuyos valores se reportan cercanos a 2 (Tabla 4.15).

Tabla 4.15. Valores de la DF de las micrografías SEM de las fibras electrohiladas empleando los umbrales I, II y III

Sistema Umbrales	Dimensión Fractal		
	I	II	III
1	1.77	1.88	1.91
2	1.78	1.88	1.91
3	1.80	1.88	1.90
4	1.80	1.87	1.90
5	1.81	1.88	1.91
6	1.80	1.88	1.92
7	1.81	1.88	1.91
8	1.80	1.88	1.91
9	1.78	1.88	1.90
10	1.83	1.87	1.91
11	1.79	1.87	1.91
12	1.81	1.89	1.91
13	1.82	1.88	1.90
14	1.81	1.88	1.91
15	1.83	1.87	1.91
16	1.78	1.88	1.91
17	1.79	1.88	1.91
18	1.78	1.88	1.91
19	1.78	1.87	1.90
20	1.78	1.88	1.91
21	1.78	1.88	1.91
22	1.77	1.88	1.90
23	1.81	1.90	1.92
24	1.80	1.89	1.91

Sistema Umbrales	Dimensión Fractal		
	I	II	III
25	1.77	1.87	1.90
26	1.78	1.87	1.90
27	1.78	1.88	1.90
28	1.77	1.88	1.91
29	1.78	1.88	1.90
30	1.78	1.88	1.91
31	1.77	1.88	1.91
32	1.78	1.88	1.90
33	1.78	1.87	1.90
34	1.78	1.88	1.91
35	1.78	1.88	1.90
36	1.77	1.87	1.91
37	1.78	1.88	1.91
38	1.77	1.88	1.91
39	1.79	1.88	1.91
40	1.80	1.90	1.92
41	1.78	1.88	1.91
42	1.78	1.88	1.91
43	1.77	1.87	1.90
44	1.78	1.87	1.90
45	1.78	1.88	1.91
46	1.79	1.88	1.91
47	1.79	1.88	1.91
48	1.78	1.88	1.91
49	1.78	1.88	1.91

El análisis de la fractalidad es una herramienta útil para caracterizar la morfología de la superficie de un alimento debido a que presentan estructuras altamente irregulares difíciles de cuantificar por métodos convencionales. La DF es una medida de la habilidad de un objeto para llenar un área o un espacio en el cual reside y es evaluada entre valores de 1 y 2 al evaluar la DF de imágenes bidimensionales y valor de DF de 2 y 3 para describir la capacidad de llenado de un volumen de superficies irregulares. En este trabajo se considero la DF de las superficies, dado que en las micrografías SEM son imágenes bidimensionales que pueden ser diferenciadas por el proceso de umbralización.

Los valores obtenidos de la DF de la superficie los VE muestran valores menores a dos en todos los tratamientos ensayados. Estos resultados están acordes a lo reportado por Koppelman (1988) en su estudio de reacciones de orden fractal, quien definió que aquellos sistemas con dimensiones fractales menores de dos, representan una distribución de zonas en una superficie, de tal forma que los valores de la DF obtenidos pudiesen interpretarse que durante el electrohilado, las fibras se depositaron en el colector, generando la formación de poros o espacios negros de forma aleatoria a lo largo de la formación del VE.

La DF representa la saturación de una imagen bidimensional y es un descriptor cuantitativo de la complejidad del velo, constituido este último por fibras de diversos diámetros sobrelapadas con diferentes orientaciones, así como la presencia de espacios irregulares vacíos denominados poros. Para este trabajo de investigación la DF de la superficie estima la distribución aproximada y las características morfológicas de los poros en la superficie de los VE. Se evidenció que las condiciones de tratamiento de las imágenes, específicamente el proceso de umbralización fue importante para la determinación de la DF de la superficie de los velos.

El proceso de umbralización es una técnica común utilizada en el procesamiento de imágenes, y es conocido como binarización o limiarización; está definido como un proceso de conversión de una imagen a configuración binaria, donde los objetos principales de la imagen fibras del velo en el primer plano se vuelven negros y los objetos secundarios en el fondo -poros se vuelven blancos. El proceso anteriormente comentado separa una imagen en

sus objetos principales, entendiéndose como una técnica de segmentación (Song *et al.*, 2021, de Mello, 2013).

La umbralización se utiliza normalmente para segmentar regiones claras y oscuras de una imagen (Bangare *et al.*, 2015). En este trabajo de investigación las imágenes SEM de los velos de fibras fueron analizadas en el software ImageJ, en el cual se llevó a cabo, el procesamiento de las imágenes, iniciando con el cambio de escala de grises donde las capas superior e inferior de los velos se identificaron en función de su región de intensidad y del cálculo del umbral apropiado. Se encontraron tres umbrales para convertir la imagen original a forma binaria, en función de la media (μ) y la desviación estándar (σ) de los valores de píxeles en las micrografías SEM (Ghasemi-Mobarakeh *et al.*, 2007).

La caracterización del umbral se realizó en función de la saturación de la imagen, siendo los umbrales siguientes: Umbral I (0-50%) que representó las capas superficiales ($\mu + \sigma$), umbral II (0-70%) capas superficiales e intermedias (μ) y umbral III (0-78%), todas las capas ($\mu - \sigma$). En este estudio se observó que la DF de la superficie de las fibras determinada por las técnicas de análisis de imágenes varió en función del umbral de la imagen, y al cambiar el umbral, se podían ver tres capas de las fibras, representando la deposición de las fibras a través del tiempo de electrohilado, dado que la reflexión de las capas superiores de fibras fue mayor que la de las capas inferiores.

En la Tabla 4.15, se presenta la DF de la superficie de los velos empleando los umbrales I, II y III que se asemeja a la de una superficie plana rugosa Figura 4.6.

La aplicación del concepto de umbralización fue útil para la obtención de la DF de las imágenes de los velos, dado que el empleo de diferentes umbrales permitió la diferenciación entre las diferentes capas de las fibras electrohiladas.

Para el umbral I se eliminan las capas inferiores y solo se obtienen las capas superficiales del velo, lo que produce un valor alto de la porosidad y con ello una menor DF de la superficie, mientras que en el segundo umbral representa la suma de las capas superficiales medias y que los valores de la DF se vean aumentados, con una consecuente saturación de la

imagen y finalmente el umbral III muestra todas las capas visibles y mayor saturación de la imagen y con ello valores superiores de la DF, en referencia con los umbrales I y II.

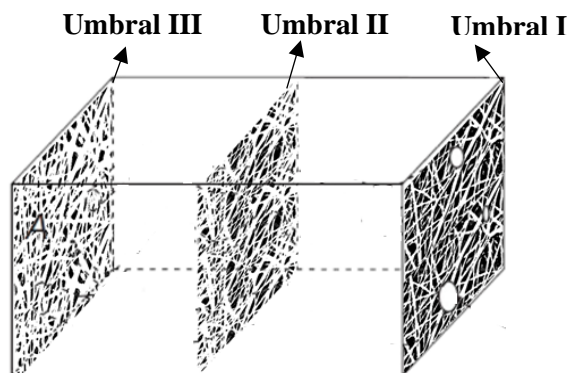


Figura 4.6. Esquema de umbralización de las micrografías de los VE.

De este apartado se puede enunciar que la DF es una medida cuantitativa de la rugosidad y complejidad de los velos, sugiriendo, que el comportamiento y formación del velo fue diferente para cada una de las condiciones de operación durante el proceso de electrohilado. Estos resultados concuerdan con los reportados en Prothon (2003), autor que describe que materiales que sufren procesos de deshidratación presentan deformación en su estructura, como es el caso de los VE. De la Tabla 4.15 se observa que los valores reportados para la DF de la superficie son cercanos entre ellos, sin embargo, estas pequeñas diferencias representan cambios significativos en la rugosidad de las micrografías de los velos. Peleng (1993) entre otros autores, han reportado en la literatura que pequeñas diferencias en los valores de la DF describen el comportamiento de fenómenos no lineales, situación que se presentó para los valores de la DF de las imágenes de los velos.

Los valores de la DF actualmente son interpretados como una medida de la rugosidad de un perfil o plano y describen cuantitativamente su discontinuidad.

Turk *et al.* (1987) obtuvieron los valores de la DF para perfiles típicos de rocas porosas y reportaron valores cercanos a 1.5. Estos autores estimaron que la geometría fractal y su dimensión debe interpretarse como la modelación de un proceso probabilístico. La naturaleza no está conformada por líneas rectas y/o círculos, por el contrario, se presentan variaciones que pueden descifrarse con una dimensión mayor que la dimensión topológica. Esta

interpretación ha dado pie al uso de técnicas estadísticas para interpretar la DF y su relación con fenómenos deterministas o aleatorios. De la interpretación probabilística, los valores de la DF son relacionados como:

$1 < DF < 1.5$ procesos con predominio de componentes determinísticos.

$DF = 1.5$ procesos aleatorios independientes.

$1.5 < DF < 2$ procesos con predominio de componentes aleatorias.

Entonces desde el punto de vista probabilístico, y los valores obtenidos de la DF de la superficie de los velos, establecen que el proceso de electrohilado y por ende la formación de sus velos, representa un fenómeno con componentes aleatorios y deterministas lo que indica la complejidad del proceso y por ello la dificultad para la predicción de las propiedades de los VE.

Zhu *et al.* (2013) reportó que la DF de un objeto aumenta con la disminución del tamaño de los poros, dado que el área empleada por las fibras se incrementa en comparación con la reducción del área empleada por los espacios vacíos.

Liu *et al.* (2018) prepararon cerámicas de alúmina porosa utilizando negro de humo como agente formador de poros, los resultados mostraron que el aumento del tamaño de los poros y la esfericidad de los poros conduce a una reducción de DF.

Bian *et al.* (2020) reporta la DF para las fibras electrohiladas de polivinilpirrolidona/nanopartículas de plata (PVP/AgNP) y polivinilpirrolidona/nanotubos de carbono (PVP/CNT) de 1.86, 1.87 y 1.84, respectivamente. Este autor menciona que valores de DF cercanos a un valor numérico de 2 indican buenas estructuras de autoorganización de una superficie plana.

Peng (2011) estableció que la DF permite caracterizar y describir las estructuras de poros de rocas. Esto es especialmente cierto para aquellas estructuras de poros con la misma relación de poros; por lo cual la DF reflejaría efectivamente su complejidad.

Siguiendo con la aplicación de las RNA y como parte del objetivo 3, se consideró identificar la configuración de la RNA más adecuada para la predicción de los valores de la DF de la superficie de los VE. Se empleó una configuración similar a la empleada para predicción del

diámetro de las fibras, empleando una configuración de una sola capa oculta, algoritmo de entrenamiento Trainlm (Levenberg-Marquardt backpropagation) y función de transferencia sigmoidea capas ocultas y purelin capa de salida y tasa de aprendizaje de 0.4.

Arquitectura con una capa oculta empleando el umbral I

Para este estudio se utilizaron cuatro variables de entrada: flujo, voltaje, viscosidad y conductividad de las soluciones/emulsiones y como variable de salida la DF de la superficie de los velos empleando el umbral I (Figura 4.7).

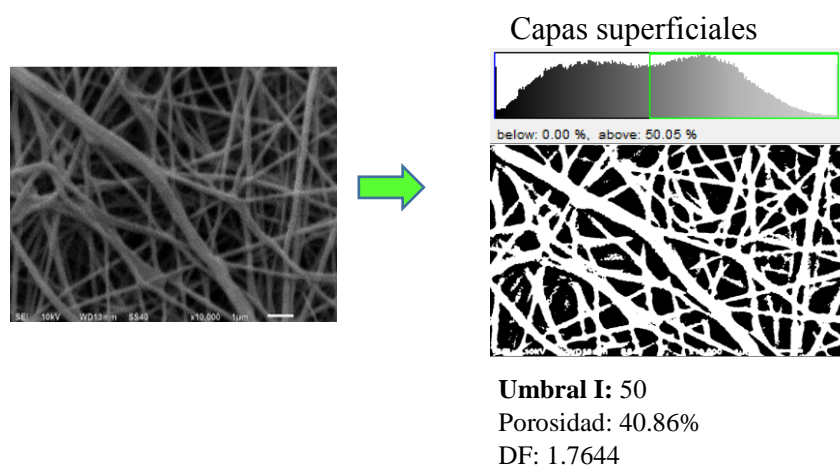


Figura 4.7. Capas superficiales velo electrohilado umbral I.

Como puede verse en la Figura 4.7, empleado el umbral I solo se pueden ver las capas superficiales del velo, reportando una mayor porosidad y una menor saturación de la imagen. Para el diseño de la RNA se utilizó una sola capa oculta con un número variable de neuronas que van desde 2 a 14. El análisis para la selección de la configuración más adecuada se basó en los valores numéricos de los estadísticos R^2 total y los errores de entrenamiento prueba y validación. (Ridho *et al.*, 2021, Zhang *et al.*, 2018). Se seleccionó la configuración que presentó un valor R^2 total próximo a la unidad, y que cuyos valores de los errores de entrenamiento prueba y validación fueran mínimos y próximos a cero.

En la Tabla 4.16 se resaltan las celdas cuyas arquitecturas presentaron mejores resultados, valores de los errores de entrenamiento prueba y validación de próximos a cero y valores R^2 próximos a la unidad.

Tabla 4.16. Configuraciones probadas empleando una capa oculta en RNA con variables de entrada (flujo, voltaje, viscosidad y conductividad) y función de activación logsig para la predicción de la DF de la superficie de los VE. Umbral I

Número de neuronas		2	4	6	8	10	12	14
R^2	Entrenamiento	0.38	0.70	0.71	0.81	0.77	0.64	0.76
	Prueba	0.58	0.22	0.43	0.44	0.15	0.03	0.02
	Validación	0.26	0.84	0.23	0.29	0.22	0.01	0.49
	Total	0.37	0.65	0.70	0.78	0.70	0.66	0.54
MSE	Entrenamiento	0.74	0.38	0.35	0.21	0.28	0.43	0.22
	Prueba	0.42	0.48	0.33	0.40	0.50	0.26	1.55
	Validación	0.36	0.40	0.05	0.05	0.43	0.07	0.29

De la Tabla 4.16 se observa que el incremento del número de neuronas en la capa oculta no necesariamente permite una mejor estimación de los datos y por ello la elección del número de neuronas en la capa oculta representa un compromiso, de forma que, si es demasiado pequeño, el modelo obtenido puede no aproximar con la exactitud deseada, pero si es demasiado grande, se puede producir un sobreajuste que evita el proceso de generalización en la fase de prueba, lo que genera un modelo sobreparametrizado. Efecto que se vio ejemplificado en los valores mayores de los errores de prueba de las arquitecturas de 4, 10 y 14 neuronas. Se observa que la arquitectura que presentó menores errores de prueba, entrenamiento y validación fue la arquitectura con ocho neuronas.

Referente a los valores de R^2 total se observa que las configuraciones con 8 neuronas presentaron valores de R^2 0.78, próximos a la unidad y superiores en comparación con las arquitecturas restantes. En la Figura 4.8 se presenta la arquitectura seleccionada para la predicción de la DF de la superficie de los velos.

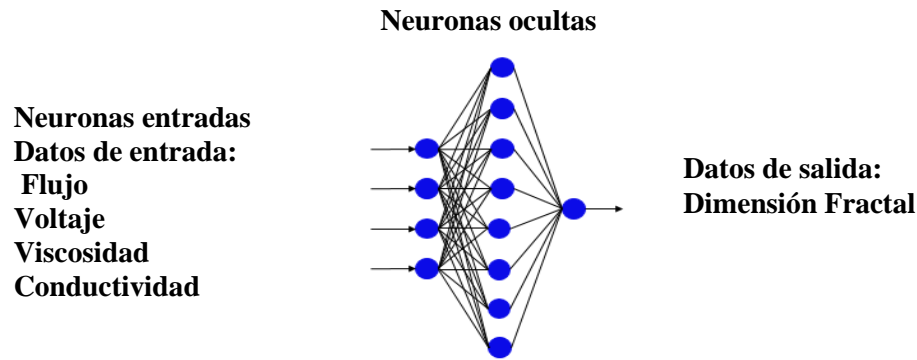


Figura 4.8. Arquitectura de la RNA seleccionada para la predicción de la DF de la superficie de los velos umbral I.

En la Figura 4.9 se muestra los datos de la DF predicha vs DF experimental de los VE empleando la RNA propuesta con datos alimentados de la DF umbral I.

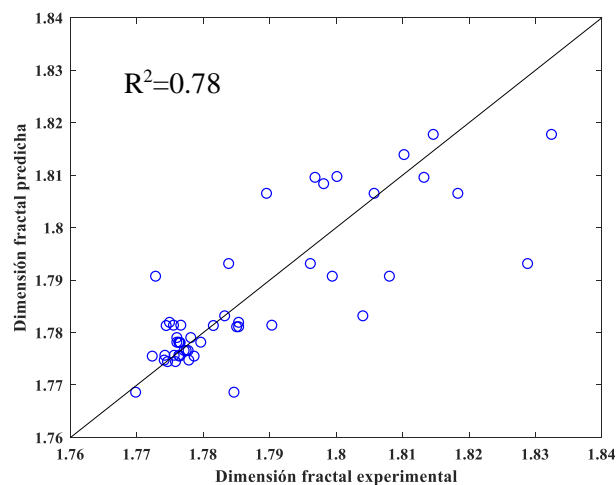


Figura 4.9. Dimensión fractal predicha vs Dimensión fractal experimental empleando los datos del umbral I.

El-sonbaty *et al.* (2008), desarrollaron modelos de redes neuronales artificiales (RNA) para el análisis y la predicción de la relación entre las condiciones de corte (velocidad de rotación, avance, profundidad de corte, desgaste de flanco y nivel de vibración.) en función de la DF para superficies metálicas producto de una operación de fresado frontal. El coeficiente de correlación reportado fue de 0.895 para la predicción de la DF.

Zhang *et al.* (2022) en su trabajo predijo la dimensión fractal 3D de los flóculos de hematita empleando el algoritmo de optimización de enjambre de partículas (PSO) optimizado con la red neuronal de propagación inversa (BP). El modelo propuesto considera cuatro factores, la

cantidad de floculante, el tiempo de floculación, la velocidad de agitación y la temperatura, como parámetros de entrada, el coeficiente de regresión reportado fue de 0.98 concluyendo que el modelo propuesto tiene alta precisión de predicción.

Como se aprecia en la Figura 4.9, y de acuerdo a los parámetros estadísticos descritos en la Tabla 4.16, los valores de la DF predicha presentan una baja correlación con los valores de la DF experimentales de los VE, mostrando que la RNA no presentó resultados satisfactorios. Se probaron otras configuraciones empleando la función de activación tansig, no obstante, los resultados no fueron mejores, con valores de $R^2 \leq 0.5$.

Arquitectura con una capa oculta empleando los umbrales II y III

Una vez analizado la relación existente entre la DF de la superficie de los velos del umbral I y las variables empleadas de flujo, voltaje, viscosidad y conductividad, se procedió al desarrollo de la RNA para la predicción de la DF utilizando el umbral II y III. Se utilizó una sola capa oculta con un número variable de neuronas que van desde 2 a 14. En la Tabla 4.17 se presentan los valores de R^2 entrenamiento, prueba, validación y total, así como los errores de entrenamiento, prueba y validación para el umbral II y III.

Se observa que los coeficientes de los umbrales II y III, aún con el incremento de las neuronas en la capa oculta no presentaron una mejor predicción de la DF de la superficie de los velos, dado que los valores de R^2 se encuentran alejados de la unidad ($R^2 \leq 0.5$), por tanto se puede concluir que la configuración de RNA probadas no presentaron resultados satisfactorios para los umbrales II y III.

De acuerdo a la Tabla 4.17, los errores de prueba para los umbrales II y III son excesivamente altos, debido a que durante el proceso de aprendizaje y entrenamiento de la red, la muestra de entrenamiento no presentó un equilibrio, esto se refiere que existe una desproporción en el número de muestras entre clases y por ello los errores son mayores y por ende la capacidad de predicción de la RNA es baja. La clase mayoritaria domina al proceso de entrenamiento y los elementos de la clase menos representada o minoritaria, pueden ser ignorados, en consecuencia, la convergencia de esta última clase es muy lenta. Otro posible factor que impactó en los valores reducidos de R^2 de las RNA probadas fue la pequeña variación de los

valores de la DF de la superficie, esto es que son cercanos entre ellos, sin embargo, estas pequeñas diferencias representan cambios significativos en la rugosidad y la complejidad de las superficies de los velos.

Tabla 4.17. Configuraciones probadas empleando una capa oculta en RNA con variables de entrada (flujo, voltaje, viscosidad y conductividad) y función de activación logsig para la predicción de la DF de la superficie de los VE. Umbral II y III.

Umbral II								
Número de neuronas		2	4	6	8	10	12	14
R ²	Entrenamiento	0.19	0.24	0.31	0.44	0.59	0.58	0.48
	Prueba	0.67	0.20	0.03	0.05	0.17	0.08	0.70
	Validación	0.05	0.06	0.90	0.45	0.59	0.35	0.29
	Total	0.15	0.20	0.25	0.39	0.38	0.43	0.40
MSE	Entrenamiento	0.58	0.75	0.70	0.40	0.18	0.35	0.56
	Prueba	0.50	1.18	1.05	0.43	1.90	0.90	1.30
	Validación	0.40	0.30	0.97	0.09	0.51	0.89	1.03
Umbral III								
Número de neuronas		2	4	6	8	10	12	14
R ²	Entrenamiento	0.22	0.26	0.33	0.46	0.62	0.57	0.50
	Prueba	0.77	0.32	0.00	0.08	0.20	0.10	0.73
	Validación	0.08	0.08	0.93	0.49	0.61	0.38	0.29
	Total	0.18	0.27	0.29	0.41	0.41	0.47	0.37
MSE	Entrenamiento	0.60	0.80	0.73	0.48	0.22	0.37	0.55
	Prueba	0.56	1.38	1.14	0.50	2.11	1.00	1.17
	Validación	0.46	0.33	1.02	0.07	0.61	0.95	1.16

Para el caso de los datos de la DF de la superficie de los velos, las RNA propuestas presentaron una baja eficiencia en la predicción de la DF, siendo necesario trabajar con diferentes configuraciones. Diversos trabajos han sido dirigidos para mejorar este problema. Anand (1995) propone que se emplee el algoritmo backpropagation y se acelere el proceso de convergencia de la red. La idea está centrada en el cálculo del vector gradiente y su dirección, de forma que permite que el error pueda decrecer en la dirección de ambas clases y se evite que la clase minoritaria pueda ser ignorada en el proceso de entrenamiento.

4.8. Porosidad digital (PD)

De acuerdo al objetivo 3 de esta tesis, acerca del diseño de una RNA para la predicción de la morfología de las fibras electrohiladas, se consideró determinar la PD de los velos, como un indicador adicional con el objeto de contribuir a la descripción y predicción de la morfología de los VE a partir de las variables de entrada como: diferencia de voltaje, flujo, conductividad y viscosidad de las soluciones poliméricas.

En la sección anteriormente comentada se estableció que una imagen puede ser caracterizada en función de los espacios vacíos detectados en las micrografías, a los que en este trabajo de investigación se les ha denominado como PD. De las imágenes SEM de los velos de fibras (Figura 4.10), empleado el umbral I solo se pueden ver las capas superficiales del velo, reportando una mayor porosidad, mientras que seleccionando el umbral II, las capas intermedias así como las capas más superficiales se unen y se reporta valores de la porosidad inferiores al del umbral I y finalmente el umbral III se observan todas las capas visibles del velo, muestras con una menor porosidad, resultado de la superposición de las fibras.

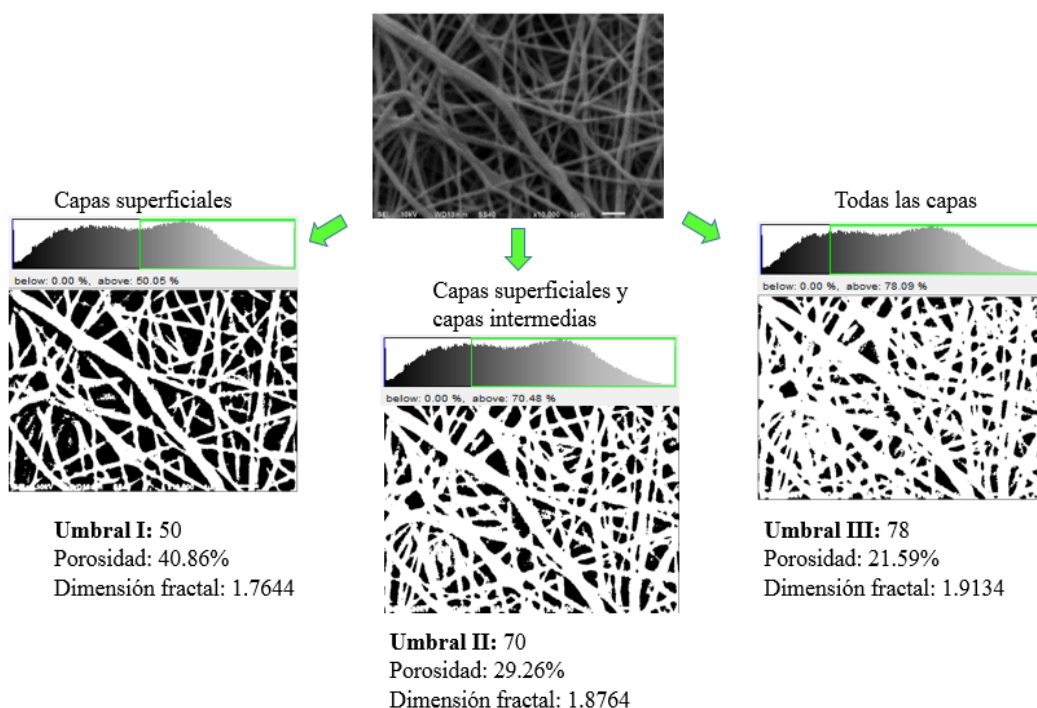


Figura 4.10. Micrografía del PVA 8% p/p con diferentes umbrales.

Los resultados del cálculo de PD de las micrografías SEM de los VE con los tres umbrales se muestran en la Tabla 4.18.

Tabla 4.18. Valores de PD de las micrografías SEM de las fibras electrohiladas empleando los umbrales I, II y III

Sistema Umbral	Porosidad (%)		
	I	II	III
1	40.86	29.26	21.59
2	45.37	30.12	21.45
3	40.25	27.72	19.25
4	36.58	26.22	18.75
5	40.28	28.64	19.98
6	41.16	28	19.52
7	38.13	26.8	19.46
8	43.54	29.32	20.14
9	32.75	26.54	18.63
10	41.97	27.51	19.25
11	38.42	26.74	18.37
12	43.15	26.7	20.86
13	40.87	27.16	20.98
14	33.97	24.95	17.85
15	34.97	25.1	17.89
16	36.12	25.562	19.34
17	43.25	28.6	21.12
18	41.67	27.51	20.11
19	40.25	27.12	19.46
20	43.38	27.61	20.74
21	43.64	27.64	19.21
22	45.36	28.48	21.10
23	42.93	28.37	21.62
24	44.38	28.38	21.02
25	40.36	27.33	21.00

Sistema Umbral	Porosidad (%)		
	I	II	III
26	43.65	28.27	21.12
27	47.63	29.08	21.76
28	45.96	28.82	22.22
29	43.80	27.97	21.18
30	34.78	25.72	19.75
31	47.35	28.58	20.91
32	45.08	28.65	21.55
33	40.58	26.73	21.23
34	45.16	28.50	21.38
35	46.62	28.91	22.02
36	44.57	27.61	20.67
37	42.67	28.04	21.43
38	42.97	28.18	22.05
39	44.22	26.94	21.14
40	44.97	29.68	21.58
41	45.56	28.45	21.69
42	40.88	27.13	21.23
43	38.53	27.47	21.19
44	42.69	27.93	21.23
45	42.65	28.08	22.10
46	38.52	27.72	21.28
47	40.75	28.74	20.91
48	38.87	26.92	20.46
49	43.90	27.19	21.53

Los resultados de porosidad para el umbral I se encontraron en el rango de 32.75% a 47.63%, para el umbral II de 24.95% a 30.12% y finalmente para el umbral III 17.85% a 22.22%.

Arquitectura con una capa oculta empleando el umbral I y II

Posteriormente se consideró identificar la configuración de la RNA más adecuada para la predicción de los valores de la PD de la superficie de los VE. Se empleó el algoritmo de entrenamiento Trainlm (Levenberg-Marquardt backpropagation) para el entrenamiento, función de transferencia sigmoidea en capas ocultas y purelin capa de salida y tasa de aprendizaje de 0.4.

Para este estudio inicialmente se utilizaron cuatro variables de entrada: flujo, voltaje, viscosidad y conductividad y como variable de salida la PD de los velos. Se utilizó una sola capa oculta con un número variable de neuronas que van desde 2 a 14 (Tabla 4.19), y la función de activación logsig en la capa oculta de las neuronas con el fin de observar el efecto en la predicción de PD.

Tabla 4.19. Configuraciones probadas empleando una capa ocultas en RNA con variables de entrada (flujo, voltaje, viscosidad y conductividad) y función de activación logsig para la predicción de la PD de la superficie de los VE. Umbral I y II

Umbral I								
Número de neuronas		2	4	6	8	10	12	14
R ²	Entrenamiento	0.11	0.29	0.24	0.52	0.45	0.49	0.46
	Prueba	0.49	0.56	0.00	0.20	0.14	0.04	0.33
	Validación	0.55	0.86	0.73	0.55	0.58	0.62	0.56
	Total	0.17	0.33	0.28	0.45	0.41	0.45	0.34
MSE	Entrenamiento	0.99	0.71	0.82	0.41	0.46	0.57	0.54
	Prueba	0.59	0.51	0.85	0.81	0.71	0.66	1.34
	Validación	0.52	0.20	0.33	0.37	0.29	0.41	0.54
Umbral II								
Número de neuronas		2	4	6	8	10	12	14
R ²	Entrenamiento	0.19	0.36	0.31	0.45	0.50	0.42	0.33
	Prueba	0.18	0.04	0.08	0.15	0.06	0.23	0.03
	Validación	0.68	0.23	0.80	0.70	0.61	0.65	0.56
	Total	0.20	0.33	0.24	0.37	0.38	0.42	0.30
MSE	Entrenamiento	0.74	0.78	0.73	0.59	0.44	0.66	0.74
	Prueba	0.73	0.65	1.35	1.24	1.03	0.46	0.81
	Validación	0.68	0.56	0.28	0.39	0.57	0.37	0.56

El análisis para la selección de la configuración más adecuada se basó en los valores numéricos de los estadísticos R^2 total y los errores de entrenamiento prueba y validación. (Ridho *et al.*, 2021, Zhang *et al.*, 2018). Se seleccionó la configuración que presentó un valor R total próximo a la unidad, y cuyos valores de los errores de entrenamiento prueba y validación fueran mínimos y próximos a cero.

En la Tabla 4.19 se observa que los coeficientes de los umbrales I y II, aún con el incremento de las neuronas en la capa oculta no presentaron una mejor predicción de la PD de los velos. De los valores de R^2 se puede concluir que las configuraciones de RNA probadas no presentaron resultados satisfactorios para los umbrales I y II.

Arquitectura con una capa oculta empleando el umbral III

Para este estudio inicialmente se utilizaron cuatro variables de entrada: flujo, voltaje, viscosidad y conductividad y como variable de salida la PD de los velos empleando el umbral III, se utilizó una sola capa oculta con un número variable de neuronas que van desde 2 a 14. De la Tabla 4.20 se observa que la arquitectura que presentó menores errores de entrenamiento, prueba y validación fue la arquitectura con diez neuronas, también se puede ver que esta configuración presentó un R^2 total cuyo valor es de 0.86 próximo a la unidad y superior en comparación con las arquitecturas restantes.

Tabla 4.20. Configuraciones probadas empleando una capa ocultas en RNA con variables de entrada (flujo, voltaje, viscosidad y conductividad) y función de activación logsig para la predicción de la PD de la superficie de los VE. Umbral III.

Número de neuronas		2	4	6	8	10	12	14
R^2	Entrenamiento	0.40	0.32	0.47	0.69	0.87	0.80	0.81
	Prueba	0.83	0.80	0.72	0.19	0.79	0.44	0.75
	Validación	0.26	0.94	0.96	0.68	0.49	0.68	0.60
	Total	0.38	0.38	0.51	0.67	0.86	0.74	0.77
MSE	Entrenamiento	0.43	1.57	0.63	0.39	0.17	0.25	0.17
	Prueba	0.25	0.23	0.27	0.23	0.23	0.57	0.37
	Validación	0.22	0.18	0.03	0.23	0.09	0.20	0.21

En la Figura 4.11 se muestra la porosidad digital predicha vs porosidad digital experimental de los VE empleando el umbral III.

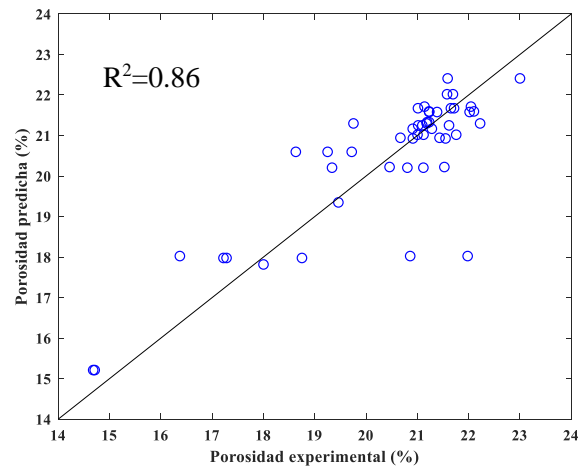


Figura 4.11. Porosidad digital predicha vs porosidad digital experimental de los VE empleando los datos del umbral III.

Con base en estos resultados, el modelo RNA con una arquitectura 10 neuronas (Figura 4.12) empleando el umbral III y función de activación logsig presenta los mejores resultados para la predicción de la PD de los VE.

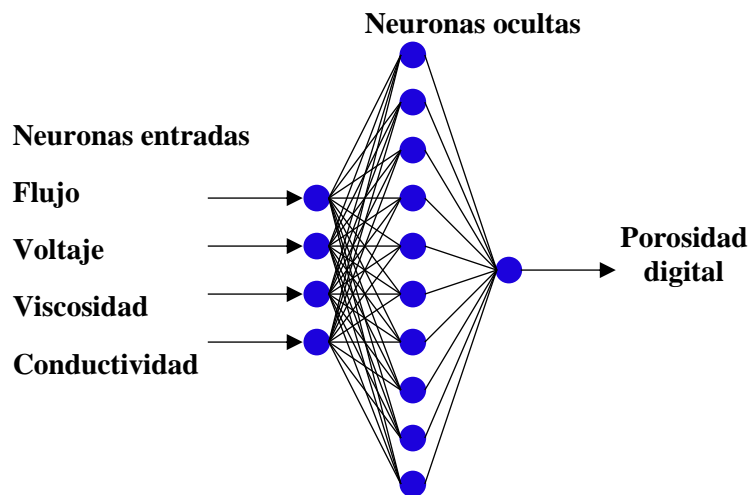


Figura 4.12. Arquitectura de la RNA seleccionada para la predicción de la porosidad digital de los velos empleando el umbral III.

En la Tabla 4.20 se resalta la configuración de la RNA propuesta para la predicción de la PD de los VE.

Resultados similares, referente a la baja eficiencia para la predicción de las PD por la RNA fueron obtenidos por Moghadam *et al.* (2015), desarrollaron modelos de redes neuronales artificiales (RNA) para la predicción de la porosidad empleando cuatro variables de entrada: concentración de la solución (peso), voltaje aplicado (kV), distancia de giro (cm) y caudal volumétrico (mL/h). El coeficiente de correlación R reportado fue de 0.892 para la predicción de la porosidad con una capa oculta de cinco neuronas.

4.9. Modelo empírico para determinar la PD

Con el análisis de las micrográficas de SEM y mediante la técnica de análisis de imagen se desarrolló un modelo matemático empírico, para predecir el efecto de los parámetros de procesamiento de electrohilado en la PD de los velos de PVA, PVA/AO y PVA/AN. El modelo de predicción propuesto en este trabajo de tesis (PD_p) se presenta en la Ecuación (4.1):

$$PD_p = \left(\frac{-\ln\left(\frac{V \times k \times d}{I}\right) \ln\left(\frac{W_f}{W_i}\right)}{e^\theta} \right)^n \quad ec. 4.1$$

donde (PD_p) Porosidad digita predicha, V es voltaje (V), k conductividad (S/m), W_f y W_i es la humedad final e inicial del velo (g H₂O)/(g b. s.), respectivamente, θ es tiempo de electrohilado (h), I es la corriente eléctrica (A), d es la distancia inyector-colector (m) y n es un exponente fractal.

La expresión matemática se estableció de acuerdo a los siguientes criterios:

En la literatura se ha reportado que la morfología y las propiedades de las nanofibras, incluido el diámetro, la porosidad, la alineación y el comportamiento mecánico, dependen de las propiedades de la solución del polímero (concentración, viscosidad, tensión superficial y propiedades dieléctricas), de los parámetros de procesamiento (voltaje, caudal volumétrico,

distancia inyector-colector y la intensidad del campo eléctrico aplicado) y condiciones ambientales (temperatura, presión atmosférica y humedad) (Moghadam *et al.*, 2015, Ibrahim & Klingner 2020, Ismail *et al.*, 2017).

Se consideró el tiempo de electrohilado, debido a que es una variable importante durante el proceso de electrohilado. Essalhi *et al.* (2013) reportaron que el tamaño medio del espacio entre nanofibras era más pequeño para un mayor tiempo de electrohilado.

Finalmente se consideró la humedad final del velo debido a que durante el electrohilado se produce un proceso de deshidratación de la solución como consecuencia de la volatilización de los disolventes (Zhang *et al.*, 2020).

Se observa que la ecuación 4.1 está en función de parámetros de proceso (voltaje, distancia inyector-colector) y de solución (conductividad) del proceso de electrohilado, así como, de la humedad de velos y el tiempo de electrohilado. La Tabla 4.21, muestra los valores introducidos en la Ecuación 4.1 para predecir la PD matemáticamente.

Tabla 4.21. Datos experimentales a un voltaje de 24 kV, distancia de 0.2 m y corriente eléctrica de 0.001 A, necesarios para alimentar el modelo empírico.

Muestra del velo	Conductividad K(S/m)	Humedad de la solución polimerica W_i	Velo electrohilado W_f	Tiempo de electrohilado (minutos)
1	0.058±0.001	11.50±0.02	0.02±0.002	60.00±1.00
2	0.048±0.001	9.00±0.02	0.01±0.001	62.25±2.06
3	0.055±0.001	6.35±0.02	0.01±0.001	61.67±3.51
4	0.052±0.001	4.81±0.02	0.01±0.001	60.00±1.00
5	0.049±0.001	3.80±0.02	0.01±0.001	61.50±0.71
6	0.045±0.001	5.89±0.02	0.01±0.001	61.00±3.61
7	0.043±0.001	4.97±0.02	0.01±0.001	58.67±1.15

Como se observa en las Figuras 4.13 y 4.15, los valores obtenidos $R^2=0.71$ (umbral I) y $R^2=0.66$ (umbral III) para la predicción de la PD muestran que la ecuación matemática, no puede predecir los tamaños de poro de la capa superficial y de todas las capas del velo electrohilado. Por otra parte, la Figura 4.14 muestra que la expresión matemática mejora la predicción ($R^2=0.97$) en el umbral II, cuando se emplean las capas superficiales e intermedias de la micrografía SEM del electrohilado, presentando los valores más bajos de RSS y RSME

(Tabla 4.22). Se cree que la baja predicción de la ecuación propuesta, para los datos de los umbrales I y III, estriba en los contrastes de color.

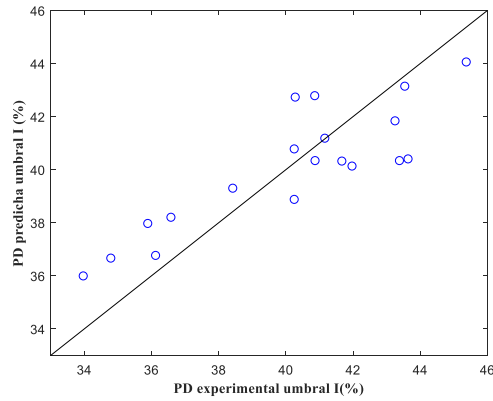


Figura 4.13. Valores predichos y experimentales de PD para VE empleando los datos del Umbral I.

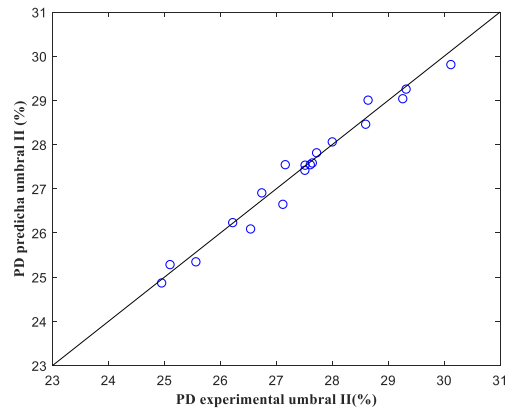


Figura 4.14. Valores predichos y experimentales de PD para VE empleando los datos del Umbral II.

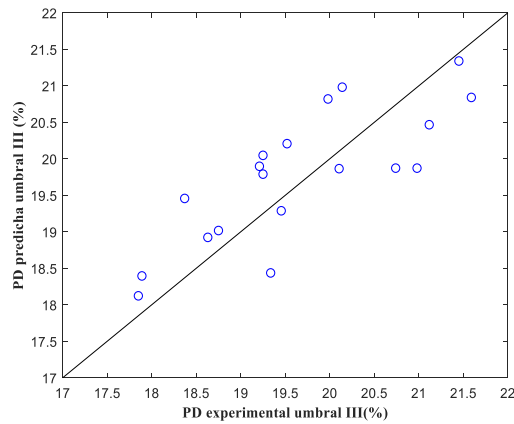


Figura 4.15. Valores predichos y experimentales de PD para VE empleando los datos del Umbral III.

Cabe destacar que, para cada umbral, el exponente fractal (n) de la expresión matemática es diferente. Los parámetros estadísticos (R^2 , R , RSS y $RMSE$) para determinar la correlación entre los datos experimentales con los predichos por la ecuación propuesta, se presentan en la Tabla 4.22.

Tabla 4.22. Criterios estadísticos para obtener la calidad del modelo empírico de ajuste.

Umbral	Exponente fractal	R^2	R	RSS	$RMSE$
I	1.10	0.71	0.84	56.70	1.68
II	0.99	0.97	0.98	1.01	0.22
III	0.89	0.66	0.81	8.82	0.66

Los parámetros estadísticos para el umbral II, indican que la ecuación ajusta correctamente los valores calculados, obteniendo un error de predicción aproximadamente del 3 %. Mientras que, la expresión matemática para el umbral I y III, el porcentaje de error de predicción fue de 31 ± 2 %. En un análisis similar a este trabajo de investigación, Powell *et al.* (2007), propusieron una correlación entre la porosidad de la fibra y la composición de la solución en fibras electrohiladas de gelatina, obteniendo $R^2 = 0.70$. Así mismo, por estudios de superficie de respuesta y RNA para la predicción de porosidad en fibras electrohiladas obtuvieron $R^2 = 0.94$ y 0.89 , respectivamente (Moghadam *et al.*, 2015). La interpretación del exponente fractal empleado en la expresión matemática propuesta, permite establecer desde el punto de vista probabilístico, que el proceso de electrohilado y por ende la formación de sus velos, representa un fenómeno con componentes aleatorios y deterministas, dado que son valores numéricos racionales (Bian *et al.*, 2020, Zhang, Wu & Fu, 2014).

Adicionalmente, la caracterización física de los velos electrohilados muestra que la concentración y viscosidad de la solución, son variables importantes para controlar la porosidad de la fibra. Otros factores como la velocidad de alimentación de la solución, la distancia entre el inyector-colector y voltaje pueden influir en la morfología del electrohilado (Ibrahim *et al.*, 2020). Así mismo, el voltaje y la conductividad afectan la porosidad de las fibras electrohiladas, ya que son variables involucradas en la ecuación; sin embargo, la humedad final de las fibras es el factor más importante, debido a que durante el electrohilado se produce un proceso de deshidratación de la solución como consecuencia de la volatilización de los disolventes. En cuanto al tiempo de electrohilado, este tiene una relación

inversamente proporcional con la PD, ya que a medida que aumenta el tiempo de electrohilado, la PD disminuye como consecuencia de un mayor solapamiento de las fibras en el velo.

CONCLUSIONES

En este trabajo de tesis se ha validado la hipótesis acerca de la factibilidad de desarrollar de una RNA eficiente para la predicción de la dimensión fractal y porosidad digital, descriptores de la morfología de los VE y del diámetro de sus fibras poliméricas; a partir de datos de entrada normalizados de voltaje, flujo de la solución, conductividad y viscosidad obtenidos de electrohilar soluciones PVA, PVA/QS, PVA/AV y emulsiones GA/AT, PVA/AO, PVA/AN y PVA/AA.

Se presentan las conclusiones por cada variable de salida y arquitectura RNA presentada en este trabajo de investigación:

- Las variables de entrada: voltaje, flujo, viscosidad y conductividad fueron normalizadas empleando la ecuación de Ciaburro *et al.* (2020).
- Para la elección de la RNA más eficiente, se consideró la configuración que presentó valores mínimos de MSE y valores máximos de R^2 , en los procesos de entrenamiento, prueba y validación.
- La configuración de la RNA cuya predicción del diámetro de la fibra es más cercano al diámetro experimental fue la que presentó tres capas ocultas, con un $R^2 = 0.98$, y un error de cálculo entre el diámetro de la fibra y el predicho por la RNA de 3.79%.
- Se comprobó que la variable de mayor peso en la predicción del diámetro de la fibra empleando la configuración de una capa oculta con ocho neuronas fue la viscosidad de la soluciones/emulsiones a electrohilar.
- La RNA propuesta en esta tesis, es capaz de predecir el diámetro de fibras electrohiladas de diferentes combinaciones de biopolímeros y aceites empleados en la industria alimentaria, farmacéutica, cosmética entre otras, en comparación con otras investigaciones reportadas en la literatura.
- La determinación de la DF y PD de la superficie de los velos, podría ser una opción para comprender mejor el electrohilado, así como los factores que afectan a las características de los VE. Durante el diseño de la RNA para la predicción de la DF de la superficie de los velos, se logró obtener un $R^2 = 0.75$ empleando una RNA con 8 neuronas, utilizando el umbral I.

- Para la predicción de la PD de la superficie de los velos se logró obtener un $R^2 = 0.86$ empleando una RNA con 10 neuronas y utilizando el umbral III que corresponde a todas las capas del velo. Se emplearon cuatro variables normalizadas de entrada voltaje, flujo, viscosidad y conductividad y función de activación logsig en las capas ocultas.
- El modelo empírico para estimar la PD en soluciones/emulsiones de PVA, PVA/AO, PVA/AN resultó altamente confiable en el umbral II cuando se consideran las capas superficiales e intermedias de la micrografía SEM de los VE, obteniéndose un $R^2=0.97$ con un error de predicción aproximadamente del 3 %.
- Los parámetros importantes a considerar en el modelo empírico propuesto para la determinación de la PD son el tiempo de electrohilado y la humedad de los velos expresada en b.s., ya que durante el proceso de electrohilado, se lleva a cabo la evaporación del solvente de la solución y con ello también un proceso de deshidratación en los velos.

Anexo A

Diseño de la RNA en la ventana de comando de Matlab R2018b

```

net = feedforwardnet([8,16,5]);
net.layers{1}.transferFcn='logsig';
net.layers{2}.transferFcn='logsig';
net.layers{3}.transferFcn='logsig';
net.layers{4}.transferFcn='purelin';

a=net.IW{1,1};
b=net.LW{2,1};
c=net.LW{3,2};
d=net.LW{4,3};
e=net.b{1};
f=net.b{2};
g=net.b {3};

net.performFcn = 'mse';
net.trainFcn = 'trainlm';
net.trainParam.epochs =1000;
net.trainParam.max_fail = 100;
net.trainParam.goal = 1e-5;
net.trainParam.mu = 0.4;
net.trainParam.mu_dec = 0.1;
net.trainParam.mu_inc= 10;
net.trainParam.mu_max=10000000000;
net.trainParam.min_grad = 1e-12;

for i=1:k
    [net,tr] = train(net,trainMatrix{i}(:,1:4)',trainMatrix{i}(:,5)');
    outputs = net(trainMatrix{i}(:,1:4)');
    errors = gsubtract (trainMatrix {i} (:, 5)', outputs);
    performance = perform (net, trainMatrix {i} (:, 5)', outputs);
    trainTargets = trainMatrix {i} (:, 5)' .*tr.trainMask {1};
    testTargets = trainMatrix {i} (:, 5)' .*tr.testMask {1};
    valTargets = trainMatrix {i} (:, 5)' .* tr.valMask{1};
    trainPerformance = perform (net, trainTargets, outputs)
    testPerformance = perform (net, testTargets, outputs)
    valPerformance = perform(net,valTargets,outputs)

end

k = 5;
cv = cvpartition(length(input1),'kfold',k);
for i=1:k
    trainIdxs{i} = find(training(cv,i));
    testIdxs{i} = find(test(cv,i));
    trainMatrix{i} = [input1(trainIdxs{i}) input2(trainIdxs{i})
input3(trainIdxs{i}) input4(trainIdxs{i}) output(trainIdxs{i})];
    validMatrix{i} = [input1(testIdxs{i}) input2(testIdxs{i})
input3(testIdxs{i}) input4(testIdxs{i}) output(testIdxs{i})];
end

```

Anexo B

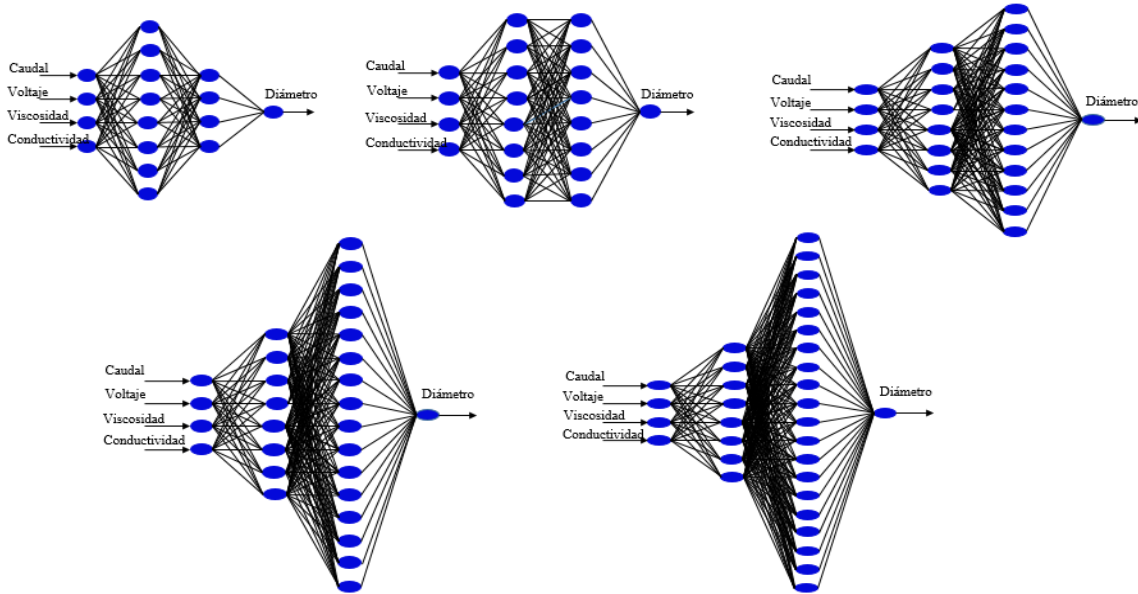


Figura 1. Configuraciones con dos capas ocultas.

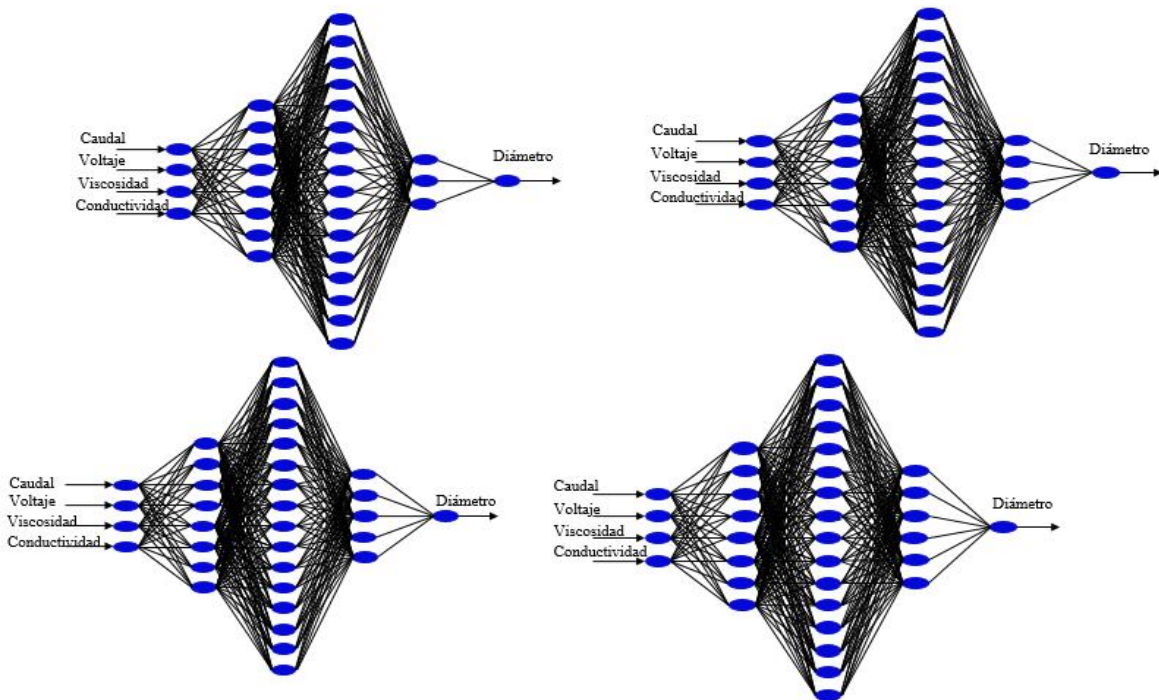


Figura 2. Configuraciones con tres capas ocultas.

Tablas 1. Parámetros de entrenamiento cuando se modificaron las diferentes entradas.

Algoritmo	Trainlm (Levenberg-Marquardt backpropagation)	
Función de transferencia	Sigmoidea capas ocultas y purelin capa de salida	
Tasa aprendizaje	0.4	
Objetivo de rendimiento	1e-5	
Número máximo épocas	1000	
Normalización	Ciaburro <i>et al.</i> , 2020	
Variables de salida	Diámetro de las fibras	
Prueba 1		
Variables de entrada	Flujo, Voltaje y Viscosidad	
Capas ocultas	1	
Numero neuronas	8	
	Error entrenamiento	0.2901
	Error prueba	0.0013
	Error validación	0.0025
	R²	0.718
Prueba 2		
Variables de entrada	Flujo, Voltaje y Viscosidad	
Capas ocultas	2	
Numero neuronas	8-16	
	Error entrenamiento	0.0509
	Error prueba	0.0441
	Error validación	0.0134
	R²	0.9504
Prueba 3		
Variables de entrada	Flujo, Voltaje y Viscosidad	
Capas ocultas	3	
Numero de neuronas	8-16-5	
	Error entrenamiento	0.0542
	Error prueba	0.8397
	Error validacion	0.0868
	R²	0.881
Prueba 4		
Variables de entrada	Conductividad, Voltaje y Viscosidad	
Capas ocultas	1	
Numero neuronas	8	
	Error entrenamiento	0.2422
	Error prueba	0.0520
	Error validación	0.0165
	R²	0.7043
Prueba 5		
Variables de entrada	Conductividad, Voltaje y Viscosidad	
Capas ocultas	2	
Numero neuronas	8-16	
	Error entrenamiento	0.0216
	Error prueba	1.0926
	Error validación	0.4378

	R²	0.6764
Prueba 6		
Variables de entrada	Conductividad, Voltaje y Viscosidad	
Capas ocultas	3	
Numero neuronas	8-16-5	
	Error entrenamiento	0.0843
	Error prueba	2.1943
	Error validación	0.0462
	R²	0.606
Prueba 7		
Variables de entrada	Flujo, Voltaje, Viscosidad y Porosidad	
Capas ocultas	1	
Numero neuronas	8	
	Error entrenamiento	2.6167e-07
	Error prueba	0.7734
	Error validación	0.0041
	R²	0.675
Prueba 8		
Variables de entrada	Flujo, Voltaje, Viscosidad y Porosidad	
Capas ocultas	2	
Numero neuronas	8-16	
	Error entrenamiento	0.1012
	Error prueba	0.0795
	Error validación	0.0267
	R²	0.7185
Prueba 9		
Variables de entrada	Flujo, Voltaje, Viscosidad y Porosidad	
Capas ocultas	3	
Numero neuronas	8-16-5	
	Error entrenamiento	0.4163
	Error prueba	1.5760
	Error validación	0.4723
	R²	0.4709
Prueba 10		
Variables de entrada	Conductividad, Voltaje, Viscosidad y Porosidad	
Capas ocultas	1	
Numero neuronas	8	
	Error entrenamiento	0.1871
	Error prueba	0.0346
	Error validación	0.0072
	R²	0.6686
Prueba 11		
Variables de entrada	Conductividad, Voltaje, Viscosidad y Porosidad	
Capas ocultas	2	
Numero neuronas	8-16	
	Error entrenamiento	0.1274
	Error prueba	0.3561
	Error validación	0.0225
	R²	0.5664

Prueba 12		
Variables de entrada	Conductividad, Voltaje, Viscosidad y Porosidad	
Capas ocultas	3	
Numero neuronas	8-16-5	
	Error entrenamiento	0.3257
	Error prueba	3.4416
	Error validación	0.0725
	R²	0.3264

Anexo C

PRODUCCIÓN ACADÉMICA ASOCIADA A ESTE TRABAJO



Article

Artificial Neural Networks for Predicting the Diameter of Electrospun Nanofibers Synthesized from Solutions/Emulsions of Biopolymers and Oils

Guadalupe Cuahuizo-Huitzil¹, Octavio Olivares-Xometl¹, María Eugenia Castro², Paulina Arellanes-Lozada¹, Francisco J. Meléndez-Bustamante³, Ivo Humberto Pineda Torres⁴, Claudia Santacruz-Vázquez^{1,*} and Verónica Santacruz-Vázquez^{1,*}

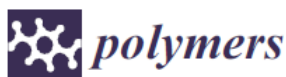
¹ Facultad de Ingeniería Química, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Av. San Claudio y 18 Sur, Puebla 72570, Mexico; guadalupe.cuahuizo@alumno.buap.mx (G.C.-H.); octavio.olivares@correo.buap.mx (O.O.-X.); paulina.arellanes@correo.buap.mx (P.A.-L.)

² Centro de Química, Instituto de Ciencias, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Av. San Claudio y 18 Sur, Puebla 72570, Mexico; mareug.castro@correo.buap.mx

³ Laboratorio de Química Teórica, Centro de Investigación, Departamento de Físicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma, Av. San Claudio y 18 Sur, Puebla 72570, Mexico; francisco.melendez@correo.buap.mx

⁴ Facultad de Ciencias de la Computación, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Av. San Claudio y 14 Sur, Puebla 72570, Mexico; ivopinedatorres@gmail.com

* Correspondence: claudia.santacruz@correo.buap.mx (C.S.-V.); veronica.santacruz@correo.buap.mx (V.S.-V.)



Article

Estimation of Digital Porosity of Electrospun Veils by Image Analysis

Guadalupe Cuahuizo-Huitzil¹, Octavio Olivares-Xometl¹, Paulina Arellanes-Lozada¹, José Oscar Laguna Cortés², Janette Arriola Morales¹, Claudia Santacruz-Vázquez^{1,*} and Verónica Santacruz-Vázquez^{1,*}

¹ Facultad de Ingeniería Química, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Av. San Claudio y 18 Sur, Puebla 72570, Mexico; guadalupe.cuahuizo@alumno.buap.mx (G.C.-H.); octavio.olivares@correo.buap.mx (O.O.-X.); paulina.arellanes@correo.buap.mx (P.A.-L.); janette.arriola@correo.buap.mx (J.A.M.)

² Departamento de Ciencias Básicas, Tecnológico Nacional de México—Instituto Tecnológico de Puebla, Av. Tecnológico 420, Puebla 72220, Mexico; jose.laguna@puebla.tecnm.mx

* Correspondence: claudia.santacruz@correo.buap.mx (C.S.-V.); veronica.santacruz@correo.buap.mx (V.S.-V.)



**SE CONCEDE LA PRESENTE CONSTANCIA
A**

CUAHUIZO HUITZIL, Guadalupe

Por su participación con el capítulo de libro titulado

A review on electrospinning technologies and their potential use in the biomedical industry.

En la 3ra edición de la convocatoria de CIERMMI, Mujeres en la Ciencia 2021, celebrado los días 27, 28 y 29 de octubre del presente año.

Dr. Ángel Marroquín de Jesús.
Presidente del CIERMMI 2021.



Ing. Luis Eduardo Cruz Carpio.
Coord. del CIERMMI 2021.



**SE OTORGA LA PRESENTE
CONSTANCIA
A**

CUAHUIZO HUITZIL, Guadalupe

Por su participación con la Video Ponencia Títulada.

A review on electrospinning technologies and their potential use in the biomedical industry.

En la 3ra edición de la convocatoria de CIERMMI, Mujeres en la Ciencia, dentro del marco de actividades realizado en los días 27, 28 y 29 de Octubre de 2021 a través del canal del congreso CIERMMI 2021.

Dr. Ángel Marroquín de Jesús.
Presidente del CIERMMI 2021.

Ing. Luis Eduardo Cruz Carpio.
Coordinador del. CIERMMI 2021



MInC-
068

La Facultad de Ingeniería Química de la Benemérita
Universidad Autónoma de Puebla

otorga la presente:

Constancia

A: Guadalupe Cuahuizo Huitzil, Claudia Santacruz Vázquez, Ivo Pineda
Torres, Verónica Santacruz Vázquez

Por la presentación de la ponencia titulada "Predicción del diámetro de fibras
poliméricas electrohiladas mediante el uso de redes neuronales artificiales" en
el 1er Congreso de Estudiantes de Posgrado en Ingeniería Química,
desarrollado de forma virtual los días 17, 18, y 19 de noviembre de 2021.

M.I.C. Ma. Gpe. Tita Vázquez Espinosa de los Monteros
Directora
Facultad de Ingeniería Química

Dra. Esmeralda Vidal Robles
Secretaria de Investigación y Estudios de Posgrado
Facultad de Ingeniería Química



AMIDIQ

Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química A.C.



XLIII Encuentro Nacional de la AMIDIQ
"La Ingeniería Química,
La Sostenibilidad y la Economía Circular"

La Academia Mexicana de Investigación y Docencia
en Ingeniería Química A.C.

otorga el presente

RECONOCIMIENTO

a:

Guadalupe Cuahuizo, Claudia Santacruz, Ivo Pineda, Verónica Santacruz

Por la presentación del trabajo en modalidad cartel:

**PREDICCIÓN DEL DIÁMETRO DE FIBRAS ELECTROHILADAS EMPLEANDO REDES NEURONALES
ARTIFICIALES**

ID: 603

XLIII Encuentro Nacional de la AMIDIQ
Puerto Vallarta, Jal., México. 23 al 26 de agosto de 2022

Dr. Jorge Ramón Robledo Ortiz
PRESIDENTE DE LA AMIDIQ Y DEL COMITÉ ORGANIZADOR

Dr. Tomás Verónica García
PRESIDENTE DEL COMITÉ TÉCNICO



Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ingeniería Química

OTORGA LA PRESENTE



Constancia

A: G. Cuahuizo-Huitzil, C. Santacruz-Vázquez y V. Santacruz-Vázquez

Por la presentación de la ponencia titulada: "DETERMINACIÓN DE LA POROSIDAD Y ORIENTACIÓN DE FIBRAS ELECTROHILADAS UTILIZANDO ANÁLISIS DE IMÁGENES" en el 2do. Congreso Internacional de Estudiantes de Posgrado en Ingeniería Química, llevado a cabo de forma virtual del 9 al 11 de noviembre de 2022.

M.I.C. María Guadalupe Tita Vázquez Espinosa
De los Monteros
Directora de la Facultad de Ingeniería Química-
BUAP

Dra. Esmeralda Vidal Robles
Secretaria de Investigación y Estudios de Posgrado
Facultad de Ingeniería Química

AMIDIQ

Academia Mexicana de Investigación y Docencia en Ingeniería Química A.C.



Investigación e industria: inclusión, retos y oportunidades
para la Ingeniería Química en México

La Academia Mexicana de Investigación y Docencia
en Ingeniería Química A.C.

otorga el presente

RECONOCIMIENTO

a:

Guadalupe Cuahuizo Huitzil, Claudia Santacruz Vázquez, José Oscar Laguna Cortes, Verónica Santacruz Vázquez.

Por la presentación del trabajo:

EFECTO DEL USO DE ECUACIONES DE NORMALIZACIÓN PARA MODELAR LA RELACIÓN ENTRE LOS PARÁMETROS DEL PROCESO DE ELECTROHILADO Y EL DIÁMETRO DE LAS NANOFIBRAS MEDIANTE REDES NEURONALES ARTIFICIALES

En el área de MATERIALES Y POLÍMEROS en modalidad ORAL
ID: 538

XLIV Encuentro Nacional de la AMIDIQ

UDLAP

Dr. Aaron Henyo Hernández
Presidente del Comité Organizador

Dr. Jorge Ramón Robledo Ortiz
Presidente Nacional de la AMIDIQ

Dr. Tomás Viveros García
Presidente del Comité Técnico

Huatuleo, Oaxaca, México 30 de mayo al 2 de junio de 2023



OTORGA LA PRESENTE
CONSTANCIA

A

CUAHUIZO-HUITZIL, Guadalupe

POR SU PARTICIPACIÓN CON EL ARTÍCULO DE INVESTIGACIÓN

Fibras electrohiladas de alcohol polivinílico y fluoresceína.

EN LA 8VA EDICIÓN DEL CONGRESO INTERNACIONAL INTERDISCIPLINARIO DE ENERGÍAS RENOVABLES, MANTENIMIENTO INDUSTRIAL, MECATRÓNICA E INFORMÁTICA, CIERMMI 2023 CELEBRADO EL PASADO JUEVES 26 Y VIERNES 27 DE OCTUBRE DEL 2023, EN LA CIUDAD DE SANTIAGO DE QUERÉTARO, MÉXICO.



Dr. Ángel Marroquín de Jesús
PRESIDENTE DEL CIER A.C

Ing. Luis Eduardo Cruz Carpio
COORD. GRAL CIERMMI 2023

Ing. Paola Gómez Vega
VOCERO DEL CIERMMI 2023



OTORGA LA PRESENTE

CONSTANCIA

A

Guadalupe, CUAHUIZO-HUITZIL

Por su ponencia con el artículo de investigación Titulada

FIBRAS ELECTROHILADAS DE ALCOHOL POLIVINÍLICO Y FLUORESCÉINA.

En la 8va Edición del Congreso Internacional Interdisciplinario de Energías Renovables, Mantenimiento Industrial, Mecatrónica e Informática, CIERMMI 2023, Celebrado los días 26, 27 de octubre del año 2023, en la ciudad de Santiago de Querétaro, México.

Dr. Ángel Marroquín de Jesús
PRESIDENTE
CIERMMI 2023.

Ing. Luis E. Cruz Carpio
COORDINADOR
CIERMMI 2023.

Ing. Paola Gómez Vega
COORDINADORA
CIERMMI 2023.



BIBLIOGRAFÍA

1. Abolhasani, M. M., Shirvanimoghaddam, K., Khayyam, H., Moosavi, S. M., Zohdi, N., & Naebe, M. (2018). Towards predicting the piezoelectricity and physiochemical properties of the electrospun P (VDF-TrFE) nanogenerators using an artificial neural network. *Polymer Testing*, 66, 178-188.
2. Aggarwal, C. C. (2018). *Neural networks and deep learning* 10, No (978). Cham: springer.
3. Aguilera, J.M & Lillford, P. (1996). Microstructural and imaging analysis as related to food engineering. En *Food Engineering 2000*. Editado por Ortega-Rodríguez. E. y Barbosa-Cánovas G. Chapman ITP. EUA.23-38.
4. Ahmadian, A., Shafiee, A., Aliahmad, N., & Agarwal, M. (2021). Overview of nano-fiber mats fabrication via electrospinning and morphology analysis. *Textiles*, 1(2), 206-226.
5. Akhavan-Mahdavi, S., Sadeghi, R., Esfanjani, A. F., Hedayati, S., Shaddel, R., Dima, C., ... & Jafari, S. M. (2022). Nanodelivery systems for d-limonene; techniques and applications. *Food Chemistry*, 384, 132479.
6. Alarcón Celis Jaime. (2008). Arquitectura inteligente basada en lógica reconfigurable aplicada a redes neuronales artificiales para la clasificación de información. Tesis doctorado, Universidad Politécnica de Madrid.
7. Al Bataineh, A., & Kaur, D. (2018). A comparative study of different curve fitting algorithms in artificial neural network using housing dataset. In *Naecon 2018-ieee national aerospace and electronics conference*, 174-178. IEEE.
8. Alipal, J., Pu'Ad, N. M., Lee, T. C., Nayan, N. H. M., Sahari, N., Basri, H., ... & Abdullah, H. Z. (2021). A review of gelatin: Properties, sources, process, applications, and commercialisation. *Materials Today: Proceedings*, 42, 240-250.
9. Aljarah, I., Faris, H., Mirjalili, S., & Al-Madi, N. (2018). Training radial basis function networks using biogeography-based optimizer. *Neural Computing and Applications*, 29, 529-553.
10. AlMarzooqi, F. A., Bilad, M. R., Mansoor, B., & Arafat, H. A. (2016). A comparative study of image analysis and porometry techniques for characterization of porous membranes. *Journal of materials science*, 51, 2017-2032.
11. Al-Shathr, A., Shakor, Z. M., Majdi, H. S., AbdulRazak, A. A., & Albayati, T. M. (2021). Comparison between artificial neural network and rigorous mathematical model in simulation of industrial heavy naphtha reforming process. *Catalysts*, 11(9), 1034.
12. Ameer, J. M., Pr, A. K., & Kasoju, N. (2019). Strategies to tune electrospun scaffold porosity for effective cell response in tissue engineering. *Journal of functional biomaterials*, 10(3), 30.
13. Amrutha, J., & Ajai, A. R. (2018). Performance analysis of backpropagation algorithm of artificial neural networks in verilog. In *2018 3rd IEEE International Conference on Recent Trends in Electronics, Information & Communication Technology (RTEICT)*, 1547-1550.
14. Anand, R., Mehrotra, K., Mohan, C.K., Ranka, S. (1995). Efficient classification for multiclass problems using modular neural networks. *IEEE Transactions on Neural Networks*. 6(1), 117-124.
15. Angamma, C. J., & Jayaram, S. H. (2011). A theoretical understanding of the physical mechanisms of electrospinning. In *Proc. ESA Annual Meeting on Electrostatics*, 14-16.

16. Angel, N., Guo, L., Yan, F., Wang, H., & Kong, L. (2020). Effect of processing parameters on the electrospinning of cellulose acetate studied by response surface methodology. *Journal of Agriculture and Food Research*, 2, 100015.
17. Antaby, E., Klinkhammer, K., & Sabantina, L. (2021). Electrospinning of chitosan for antibacterial applications—Current trends. *Applied Sciences*, 11(24), 11937.
18. Anusiya, G., & Jaiganesh, R. (2022). A review on fabrication methods of nanofibers and a special focus on application of cellulose nanofibers. *Carbohydrate Polymer Technologies and Applications*, 4, 100262.
19. Aranaz, I., Alcántara, A. R., Civera, M. C., Arias, C., Elorza, B., Heras Caballero, A., & Acosta, N. (2021). Chitosan: An overview of its properties and applications. *Polymers*, 13(19), 3256.
20. Arik, N., Horzum, N., & Truong, Y. B. (2022). Development and characterizations of engineered electrospun bio-based polyurethane containing essential oils. *Membranes*, 12(2), 209.
21. Aruldass, S., Mathivanan, V., Mohamed, A. R., & Tye, C. T. (2019). Factors affecting hydrolysis of polyvinyl acetate to polyvinyl alcohol. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 7(5), 103238.
22. Asha, R. B., & KR, S. K. (2021). Credit card fraud detection using artificial neural network. *Global Transitions Proceedings*, 2(1), 35-41.
23. Aslam, M., Kalyar, M. A., & Raza, Z. A. (2018). Polyvinyl alcohol: A review of research status and use of polyvinyl alcohol based nanocomposites. *Polymer Engineering & Science*, 58(12), 2119-2132.
24. Azam, F., Alqarni, M. H., Alnasser, S. M., Alam, P., Jawaid, T., Kamal, M., ... & Alam, A. (2023). Formulation, In Vitro and In Silico Evaluations of Anise (*Pimpinella anisum* L.) Essential Oil Emulgel with Improved Antimicrobial Effects. *Gels*, 9(2), 111.
25. Azmana, M., Mahmood, S., Hilles, A. R., Rahman, A., Arifin, M. A. B., & Ahmed, S. (2021). A review on chitosan and chitosan-based bionanocomposites: Promising material for combatting global issues and its applications. *International journal of biological macromolecules*, 185, 832-848.
26. Babitha, S., Rachita, L., Karthikeyan, K., Shoba, E., Janani, I., Poornima, B., & Sai, K. P. (2017). Electrospun protein nanofibers in healthcare: A review. *International journal of pharmaceuticals*, 523(1), 52-90.
27. Baker, M., & Mauck, R.L.(2007). The effect of nanofiber alignment on the maturation of engineered meniscus constructs, *Biomaterials*, 28, (11), 1967–1977.
28. Bangare, S. L., Dubal, A., Bangare, P. S., & Patil, S. (2015). Reviewing Otsu's method for image thresholding. *International Journal of Applied Engineering Research*, 10(9), 21777-21783.
29. Baydin, T., Aarstad, O. A., Dille, M. J., Hattrem, M. N., & Draget, K. I. (2022). Long-term storage stability of type A and type B gelatin gels: The effect of Bloom strength and co-solutes. *Food Hydrocolloids*, 127, 107535.
30. Benardos, P. G., & Vosniakos, G. C. (2007). Optimizing feedforward artificial neural network architecture. *Engineering applications of artificial intelligence*, 20(3), 365-382.
31. Berzal, F. (2018). *Redes Neuronales & Deep Learning*, Granada.
32. Bian, J., & Olesik, S. V. (2020). Polyvinylpyrrolidone composite nanofibers as efficient substrates for surface-assisted laser desorption/ionization mass spectrometry. *International Journal of Mass Spectrometry*, 448, 116253.
33. Brooks, H., & Tucker, N. (2015). Electrospinning predictions using artificial neural networks. *Polymer*, 58, 22-29.

34. Bui, D. K., Nguyen, T., Chou, J. S., Nguyen-Xuan, H., & Ngo, T. D. (2018). A modified firefly algorithm-artificial neural network expert system for predicting compressive and tensile strength of high-performance concrete. *Construction and Building Materials*, 180, 320-333.
35. Bunde, A., & Havlin, S. (1994). A brief introduction to fractal geometry. In *Fractals in science*, 1-26. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg.
36. Cao, W., Wang, X., Ming, Z., & Gao, J. (2018). A review on neural networks with random weights. *Neurocomputing*, 275, 278-287.
37. Casian, T., Farkas, A., Ilyés, K., Démuth, B., Borbás, E., Madarász, L., ... & Nagy, Z. K. (2019). Data fusion strategies for performance improvement of a Process Analytical Technology platform consisting of four instruments: An electrospinning case study. *International Journal of Pharmaceutics*, 567, 118473.
38. Çay, A., Miraftab, M., & Kumbasar, E. P. A. (2014). Characterization and swelling performance of physically stabilized electrospun poly (vinyl alcohol)/chitosan nanofibres. *European Polymer Journal*, 61, 253-262.
39. Choktaweasap, N., Arayanarakul, K., Aht-Ong, D., Meechaisue, C., & Supaphol, P. (2007). Electrospun gelatin fibers: effect of solvent system on morphology and fiber diameters. *Polymer journal*, 39(6), 622-631.
40. Ciaburro, G., Iannace, G., Passaro, J., Bifulco, A., Marano, A. D., Guida, M., ... & Branda, F. (2020). Artificial neural network-based models for predicting the sound absorption coefficient of electrospun poly (vinyl pyrrolidone)/silica composite. *Applied Acoustics*, 169, 107472.
41. Cui, J., Li, F., Wang, Y., Zhang, Q., Ma, W., & Huang, C. (2020). Electrospun nanofiber membranes for wastewater treatment applications. *Separation and Purification Technology*, 250, 117116.
42. Da Silva, I. N., Hernane Spatti, D., Andrade Flauzino, R., Liboni, L. H. B., dos Reis Alves, S. F., da Silva, I. N., ... & dos Reis Alves, S. F. (2017). *Artificial neural network architectures and training processes*, 21-28. Springer International Publishing.
43. Dayhoff, J. E., & DeLeo, J. M. (2001). Artificial neural networks: opening the black box. *Cancer: Interdisciplinary International Journal of the American Cancer Society*, 91(S8), 1615-1635.
44. Dehghani, S., Noshad, M., Rastegarzadeh, S., Hojjati, M., & Fazlara, A. (2020). Electrospun chia seed mucilage/PVA encapsulated with green cardamom essential oils: Antioxidant and antibacterial property. *International Journal of Biological Macromolecules*, 161, 1-9.
45. de Mello, C. A. B. (2013). Image thresholding. *Digital Document Analysis and Processing*, 71-98.
46. de Naurois, C. J., Bourdin, C., Stratulat, A., Diaz, E., & Vercher, J. L. (2019). Detection and prediction of driver drowsiness using artificial neural network models. *Accident Analysis & Prevention*, 126, 95-104.
47. Di Franco, G., & Santurro, M. (2021). Machine learning, artificial neural networks and social research. *Quality & quantity*, 55(3), 1007-1025.
48. Dike, H. U., Zhou, Y., Deveerasetty, K. K., & Wu, Q. (2018). Unsupervised learning based on artificial neural network: A review. In *2018 IEEE International Conference on Cyborg and Bionic Systems (CBS)*, 322-327. IEEE.
49. Duan, Q., An, J., Mao, H., Liang, D., Li, H., Wang, S., & Huang, C. (2021). Review about the application of fractal theory in the research of packaging materials. *Materials*, 14(4), 860.

50. Dumitrescu, E., Muselin, F., Tîrziu, E., Folescu, M., Dumitrescu, C. S., Orboi, D. M., & Cristina, R. T. (2023). Pimpinella anisum L. Essential Oil a Valuable Antibacterial and Antifungal Alternative. *Plants*, *12*(13), 2428.
51. Echave, M. C., Hernández-Moya, R., Iturriaga, L., Pedraz, J. L., Lakshminarayanan, R., Dolatshahi-Pirouz, A., ... & Orive, G. (2019). Recent advances in gelatin-based therapeutics. *Expert opinion on biological therapy*, *19*(8), 773-779.
52. Elkasaby, M., Hegab, H. A., Mohany, A., & Rizvi, G. M. (2018). Modeling and optimization of electrospinning of polyvinyl alcohol (PVA). *Advances in Polymer Technology*, *37*(6), 2114-2122.
53. El Naqa, I., & Murphy, M. J. (2015). What is machine learning?, 3-11. Springer International Publishing.
54. El-Sonbaty, I. A., Khashaba, U. A., Selmy, A. I., & Ali, A. I. (2008). Prediction of surface roughness profiles for milled surfaces using an artificial neural network and fractal geometry approach. *Journal of Materials Processing Technology*, *200*(1-3), 271-278.
55. Essa, F. A., Abd Elaziz, M., & Elsheikh, A. H. (2020). An enhanced productivity prediction model of active solar still using artificial neural network and Harris Hawks optimizer. *Applied Thermal Engineering*, *170*, 115020.
56. Essalhi, M., & Khayet, M. (2013). Self-sustained webs of polyvinylidene fluoride electrospun nanofibers at different electrospinning times: 2. Theoretical analysis, polarization effects and thermal efficiency. *Journal of membrane science*, *433*, 180-191.
57. Feng, J. J. (2002). The stretching of an electrified non-Newtonian jet: A model for electrospinning. *Physics of fluids*, *14*(11), 3912-3926.
58. Fernández-Martínez, M., & Sánchez-Granero, M. A. (2014). Fractal dimension for fractal structures. *Topology and its Applications*, *163*, 93-111.
59. Florio, B. J., Fawell, P. D., & Small, M. (2019). The use of the perimeter-area method to calculate the fractal dimension of aggregates. *Powder technology*, *343*, 551-559.
60. Franz, C., & Novak, J. (2020). Sources of essential oils. In *Handbook of essential oils*, 41-83. CRC Press.
61. Fridrikh, S. V., Jian, H. Y., Brenner, M. P., & Rutledge, G. C. (2003). Controlling the fiber diameter during electrospinning. *Physical review letters*, *90* (14), 144502.
62. Gadkari, S. B. (2014). Scaling analysis for electrospinning. *SpringerPlus*, *3*(1), 1-7.
63. Gaharwar, A. K., Nikkhah, M., Sant, S., & Khademhosseini, A. (2014). Anisotropic poly (glycerol sebacate)-poly (ϵ -caprolactone) electrospun fibers promote endothelial cell guidance. *Biofabrication*, *7*(1), 015001.
64. Gal, M. R., Rahmaninia, M., & Hubbe, M. A. (2023). A comprehensive review of chitosan applications in paper science and technologies. *Carbohydrate Polymers*, 120665.
65. Gao, Y., Kuok, K. I., Jin, Y., & Wang, R. (2019). Biomedical applications of Aloe vera. *Critical reviews in food science and nutrition*, *59*(sup1), S244-S256.
66. García Ceja, A., & López Malo, A. (2012). Biopolímeros utilizados en la encapsulación. *Temas selectos de ingeniería de alimentos*, 84 - 97.
67. García-Zamora, J. L., Santacruz-Vázquez, V., Valera-Pérez, M. Á., Moreira, M. T., Cardenas-Chavez, D. L., Tapia-Salazar, M., & Torres, E. (2019). Oxidation of flame retardant tetrabromobisphenol A by a biocatalytic nanofiber of chloroperoxidase. *International Journal of Environmental Research and Public Health*, *16*(24), 4917.
68. Gaspar-Pintilieșcu, A., Stefan, L. M., Anton, E. D., Berger, D., Matei, C., Negreanu-Pirjol, T., & Moldovan, L. (2019). Physicochemical and biological properties of gelatin extracted from marine snail *Rapana venosa*. *Marine drugs*, *17*(10), 589.

69. Gavahian, M., Chu, Y. H., & Mousavi Khaneghah, A. (2019). Recent advances in orange oil extraction: An opportunity for the valorisation of orange peel waste a review. *International Journal of Food Science & Technology*, 54(4), 925-932.
70. Ghasemi-Mobarakeh, L., Semnani, D., & Morshed, M. (2007). A novel method for porosity measurement of various surface layers of nanofibers mat using image analysis for tissue engineering applications. *Journal of applied polymer science*, 106(4), 2536-2542.
71. Gholipour, A., Bahrami, S.H., & Nouri, M. (2009). Chitosan-poly(vinyl alcohol) blend nanofibers: Morphology, biological and antimicrobial properties, *e-Polymers*, 133.
72. Ghosh, A., Saleh-e-In, M. M., Abukawsar, M. M., Ahsan, M. A., Rahim, M. M., Bhuiyan, M. N. H., ... & Naher, S. (2019). Characterization of quality and pharmacological assessment of Pimpinella anisum L.(Anise) seeds cultivars. *Journal of Food Measurement and Characterization*, 13, 2672-2685.
73. Ghritlehre, H. K., & Prasad, R. K. (2018). Application of ANN technique to predict the performance of solar collector systems-A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 84, 75-88.
74. Grizzi, F., Castello, A., Qehajaj, D., Russo, C., & Lopci, E. (2019). The complexity and fractal geometry of nuclear medicine images. *Molecular Imaging and Biology*, 21, 401-409.
75. Guo, Z., Jia, X., Zheng, Z., Lu, X., Zheng, Y., Zheng, B., & Xiao, J. (2018). Chemical composition and nutritional function of olive (*Olea europaea* L.): A review. *Phytochemistry Reviews*, 17, 1091-1110.
76. Gupta, N. (2013). Artificial neural network. *Network and Complex Systems*, 3(1), 24-28.
77. Gurney, K. (2018). An introduction to neural networks. CRC press.
78. Hajian & Styles. (2018). Application of Soft Computing and Intelligent Methods in Geophysics, Springer International Publishing AG, part of Springer Nature.
79. Hamadneh, N. N., Khan, W. S., & Khan, W. A. (2019). Prediction of thermal conductivities of polyacrylonitrile electrospun nanocomposite fibers using artificial neural network and prey predator algorithm. *Journal of King Saud University-Science*, 31(4), 618-627.
80. Hassan, M. F., El-Badawy, S. S., Draz, M. G., & Ibrahim, E. S. (2021). New acaricidal activities and chemical compositions of orange oil and extracts of (wild mint and henna) against *Tetranychus urticae* Koch (Acari.: Tetranychidae). *Archives of Phytopathology and Plant Protection*, 54(19-20), 1848-1863.
81. Haykin, S. (2009). *Neural networks and learning machines*, 3/E. Pearson Education India.
82. He, H., Wang, Y., Farkas, B., Nagy, Z. K., & Molnar, K. (2020). Analysis and prediction of the diameter and orientation of AC electrospun nanofibers by response surface methodology. *Materials & Design*, 194, 108902.
83. Helgeson, M. E., & Wagner, N. J. (2007). A correlation for the diameter of electrospun polymer nanofibers. *AIChE journal*, 53(1), 51-55.
84. Hemeida, A. M., Hassan, S. A., Mohamed, A. A. A., Alkhalaf, S., Mahmoud, M. M., Senjyu, T., & El-Din, A. B. (2020). Nature-inspired algorithms for feed-forward neural network classifiers: A survey of one decade of research. *Ain Shams Engineering Journal*, 11(3), 659-675.
85. Herrero-Herrero, M., Gómez-Tejedor, J. A., & Vallés-Lluch, A. (2018). PLA/PCL electrospun membranes of tailored fibres diameter as drug delivery systems. *European Polymer Journal*, 99, 445-455.
86. Hossen, M. R., Talbot, M. W., Kennard, R., Bousfield, D. W., & Mason, M. D. (2020). A comparative study of methods for porosity determination of cellulose based porous materials. *Cellulose*, 27, 6849-6860.

87. Huang, Z. M., Zhang, Y. Z., Kotaki, M., & Ramakrishna, S. (2003). A review on polymer nanofibers by electrospinning and their applications in nanocomposites. *Composites science and technology*, 63(15), 2223-2253.
88. Ibrahim, H. M., & Klingner, A. (2020). A review on electrospun polymeric nanofibers: Production parameters and potential applications. *Polymer Testing*, 90, 106647.
89. Ignatova, M., Starbova, K., Markova, N., Manolova, N., & Rashkov, I. (2007). Electrospun nano-fibre mats with antibacterial properties from quaternised chitosan and poly(vinyl alcohol). *Carbohydrate Research*, 341, 2098-2107.
90. Isfahani, F. R., Tavanai, H., & Morshed, M. (2017). Release of aloe vera from electrospun aloe vera-PVA nanofibrous pad. *Fibers and Polymers*, 18, 264-271.
91. Islam, M. S., Ang, B. C., Andriyana, A., & Afifi, A. M. (2019). A review on fabrication of nanofibers via electrospinning and their applications. *SN Applied Sciences*, 1, 1-16.
92. Ismail, N., Maksoud, F. J., Ghaddar, N., Ghali, K., & Tehrani-Bagha, A. (2017). A mathematical model to predict the effect of electrospinning processing parameters on the morphological characteristic of nano-fibrous web and associated filtration efficiency. *Journal of Aerosol Science*, 113, 227-241.
93. Jamalabadi, H., Mani-Varnosfaderani, A., & Alizadeh, N. (2018). Detection of alkyl amine vapors using PPy-ZnO hybrid nanocomposite sensor array and artificial neural network. *Sensors and Actuators A: Physical*, 280, 228-237.
94. Jia Y-T, Gong J, Gu X-H, Kim H-Y, Dong J, Shen X-Y. (2007) Fabrication and characterization of poly(vinyl alcohol)/chitosan blend nanofibers produced by electrospinning method. *Carbohydrate Polymers*, 67, 403-9.
95. Jiang, T., Carbone, E. J., Lo, K. W. H., & Laurencin, C. T. (2015). Electrospinning of polymer nanofibers for tissue regeneration. *Progress in polymer Science*, 46, 1-24.
96. Jin, S., Zhang, J., & Han, S. (2017). Fractal analysis of relation between strength and pore structure of hardened mortar. *Construction and Building Materials*, 135, 1-7.
97. Kalantary, S., Jahani, A., & Jahani, R. (2020). MLR and ANN approaches for prediction of synthetic/natural nanofibers diameter in the environmental and medical applications. *Scientific reports*, 10(1), 8117.
98. Kline, K., Yu, W., & Sanders, B. G. (2004). Vitamin E and breast cancer. *The Journal of nutrition*, 134(12), 3458S-3462S.
99. Kalantary, S., Jahani, A., Pourbabaki, R., & Beigzadeh, Z. (2019). Application of ANN modeling techniques in the prediction of the diameter of PCL/gelatin nanofibers in environmental and medical studies. *RSC advances*, 9(43), 24858-24874.
100. Karimi, M. A., Pourhakkak, P., Adabi, M., Firoozi, S., Adabi, M., & Naghibzadeh, M. (2015). Using an artificial neural network for the evaluation of the parameters controlling PVA/chitosan electrospun nanofibers diameter. *e-Polymers*, 15(2), 127-138.
101. Keirouz, A., Zakharova, M., Kwon, J., Robert, C., Koutsos, V., Callanan, A., ... & Radacsi, N. (2020). High-throughput production of silk fibroin-based electrospun fibers as biomaterial for skin tissue engineering applications. *Materials Science and Engineering: C*, 112, 110939.
102. Ketabchi, N., Naghibzadeh, M., Adabi, M., Esnaashari, S.S., Faridi-Majidi, R. (2017). Preparation and optimization of chitosan/polyethylene oxide nanofiber diameter using artificial neural networks, *Neural Comput & Applic*.
103. Khajavi, R., & Abbasipour, M. (2017). Controlling nanofiber morphology by the electrospinning process. In *Electrospun nanofibers*, 109-123, Woodhead Publishing.
104. Khalil, N., Ashour, M., Fikry, S., Singab, A. N., & Salama, O. (2018). Chemical composition and antimicrobial activity of the essential oils of selected Apiaceous fruits. *Future Journal of Pharmaceutical Sciences*, 4(1), 88-92.

105. Khatti, T., Naderi-Manesh, H., & Kalantar, S. M. (2019). Application of ANN and RSM techniques for modeling electrospinning process of polycaprolactone. *Neural Computing and Applications*, 31, 239-248.
106. Kononenko, N., Nikonenko, V., Grande, D., Larchet, C., Dammak, L., Fomenko, M., & Volfkovich, Y. (2017). Porous structure of ion exchange membranes investigated by various techniques. *Advances in Colloid and Interface Science*, 246, 196-216.
107. Koosha, M., & Mirzadeh, H. (2015). Electrospinning, mechanical properties, and cell behavior study of chitosan/PVA nanofibers. *Society For Biomateriales*, 3081-3093.
108. Koppelman, R. (1988). Fractal reaction kinetics. *Science*, 241:1620-1626.
109. Kou, S. G., Peters, L. M., & Mucalo, M. R. (2021). Chitosan: A review of sources and preparation methods. *International Journal of Biological Macromolecules*, 169, 85-94.
110. Krogh, A. (2008). What are artificial neural networks?. *Nature biotechnology*, 26(2), 195-197.
111. Krohn, C. E., & Thompson, A. H. (1986). Fractal sandstone pores: automated measurements using scanning-electron-microscope images. *Physical Review B*, 33(9), 6366.
112. Kumar, T. S. M., Kumar, K. S., Rajini, N., Siengchin, S., Ayrilmis, N., & Rajulu, A. V. (2019). A comprehensive review of electrospun nanofibers: Food and packaging perspective. *Composites Part B: Engineering*, 175, 107074.
113. Kumari, S., & Kishor, R. (2020). Chitin and chitosan: origin, properties, and applications. In *Handbook of chitin and chitosan*, 1-33.
114. Kumirska, J., Weinhold, M.X., Thöming, J., Stepnowski, P. (2011). Biomedical Activity of Chitin/Chitosan Based Materials—Influence of Physicochemical Properties Apart from Molecular Weight and Degree of *N*-Acetylation. *Polymers*, 3 1875-1901.
115. Lan, W., Liang, X., Lan, W., Ahmed, S., Liu, Y., & Qin, W. (2019). Electrospun polyvinyl alcohol/d-limonene fibers prepared by ultrasonic processing for antibacterial active packaging material. *Molecules*, 24(4), 767.
116. Lau, E. T., Sun, L., & Yang, Q. (2019). Modelling, prediction and classification of student academic performance using artificial neural networks. *SN Applied Sciences*, 1, 1-10.
117. Lawrence, M., & Jiang, Y. (2017). Porosity, pore size distribution, micro-structure. *Bio-aggregates based building materials: state-of-the-art report of the RILEM technical committee 236-BBM*, 39-71.
118. Lebreton, L. C., Van Der Zwet, J., Damsteeg, J. W., Slat, B., Andrady, A., & Reisser, J. (2017). River plastic emissions to the world's oceans. *Nature communications*, 8(1), 15611.
119. Lee, K., & Lee, S. (2020), Electrospun Nanofibrous Membranes with Essential Oils for Wound Dressing Applications, *Fibers and Polymers*, 21, (5), 999-1012.
120. Liew, S. S., Khalil-Hani, M., & Bakhteri, R. (2016). Bounded activation functions for enhanced training stability of deep neural networks on visual pattern recognition problems. *Neurocomputing*, 216, 718-734.
121. Liu, L., Xu, W., Ding, Y., Agarwal, S., Greiner, A., & Duan, G. (2020). A review of smart electrospun fibers toward textiles. *Composites Communications*, 22, 100506.
122. Liu, Q., Chen, Z., Pei, X., Guo, C., Teng, K., Hu, Y., ... & Qian, X. (2020). applications, effects and the prospects for electrospun nanofibrous mats in membrane separation. *Journal of Materials Science*, 55, 893-924.
123. Liu, Z., Ju, K., Wang, Z., Li, W., Ke, H., & He, J. (2019). Electrospun jets number and nanofiber morphology effected by voltage value: Numerical simulation and experimental verification. *Nanoscale research letters*, 14, 1-9.

124. Liu, J., Huo, W., Zhang, X., Ren, B. O., Li, Y., Zhang, Z., & Yang, J. (2018). Optimal design on the high-temperature mechanical properties of porous alumina ceramics based on fractal dimension analysis. *Journal of Advanced Ceramics*, 7, 89-98.
125. Li, W.J., Mauck, R., Cooper, J., Yuan, X., & Tuan, R. (2007). Engineering controllable anisotropy in electrospun biodegradable nanofibrous scaffolds for musculoskeletal tissue engineering, *Journal of Biomechanics*, 40 (8), 1686–1693.
126. Li, L., Jiang, Z., Xu, J., & Fang, T. (2014). Predicting poly (vinyl pyrrolidone)'s solubility parameter and systematic investigation of the parameters of electrospinning with response surface methodology. *Journal of Applied Polymer Science*, 131(11).
127. Li, H., Wang, M., Williams, G. R., Wu, J., Sun, X., Lv, Y., & Zhu, L. M. (2016). Electrospun gelatin nanofibers loaded with vitamins A and E as antibacterial wound dressing materials. *RSC advances*, 6(55), 50267-50277.
128. Lim, C. T. (2017). Nanofiber technology: current status and emerging developments. *Progress in polymer science*, 70, 1-17.
129. Lima, L. L., Bierhalz, A. C. K., & Moraes, Â. M. (2020). Influence of the chemical composition and structure design of electrospun matrices on the release kinetics of Aloe vera extract rich in aloin. *Polymer Degradation and Stability*, 179, 109233.
130. Long, Y. Z., Yan, X., Wang, X. X., Zhang, J., & Yu, M. (2019). Electrospinning: the setup and procedure. In *Electrospinning: Nanofabrication and applications*, 21-52. William Andrew Publishing.
131. Luo, Q., Hossen, M. A., Zeng, Y., Dai, J., Li, S., Qin, W., & Liu, Y. (2022). Gelatin-based composite films and their application in food packaging: A review. *Journal of Food Engineering*, 313, 110762.
132. Luraghi, A., Peri, F., & Moroni, L. (2021). Electrospinning for drug delivery applications: A review. *Journal of Controlled release*, 334, 463-484.
133. Lyu, C., Zhao, P., Xie, J., Dong, S., Liu, J., Rao, C., & Fu, J. (2021). Electrospinning of nanofibrous membrane and its applications in air filtration: A review. *Nanomaterials*, 11(6), 1501.
134. Man, A., Santacroce, L., Iacob, R., Mare, A., & Man, L. (2019). Antimicrobial activity of six essential oils against a group of human pathogens: A comparative study. *Pathogens*, 8(1), 15.
135. Mandelbrot, B. B. (1977). *The fractal geometry of nature*. New York. Freeman. 30-41.
136. Maleki, M., Amani-Tehran, M., Latifi, M., & Mathur, S. (2014). Drug release profile in core-shell nanofibrous structures: A study on Peppas equation and artificial neural network modeling. *Computer methods and programs in biomedicine*, 113(1), 92-100.
137. Maurya, A. K., Narayana, P. L., Bhavani, A. G., Jae-Keun, H., Yeom, J. T., & Reddy, N. S. (2020). Modeling the relationship between electrospinning process parameters and ferrofluid/polyvinyl alcohol magnetic nanofiber diameter by artificial neural networks. *Journal of Electrostatics*, 104, 103425.
138. Mishra, S., Chaturvedi, D., Kumar, N., Tandon, P., & Siesler, H. W. (2010). An ab initio and DFT study of structure and vibrational spectra of γ form of Oleic acid: Comparison to experimental data. *Chemistry and physics of lipids*, 163(2), 207-217.
139. Mohammadimehr, A., Solmus, İ., Ozyer, B., & Rees, D. A. S. (2020). Determination of physical properties and thermal conductivity of graphite foam with image analysis. *International Journal of Thermophysics*, 41, 1-21.
140. Mohammadzadehmoghadam, S., Dong, Y., & Davies, I. J. (2016). Modeling electrospun nanofibers: An overview from theoretical, empirical, and numerical approaches. *International Journal of Polymeric Materials and Polymeric Biomaterials*, 65(17), 901-915.

141. Moghadam, B. H., Haghi, A. K., Kasaei, S., & Hasanzadeh, M. (2015). Computational-based approach for predicting porosity of electrospun nanofiber mats using response surface methodology and artificial neural network methods. *Journal of Macromolecular Science, Part B*, 54(11), 1404-1425.
142. Mohammad, N., & Atassi, Y. (2020). Adsorption of methylene blue onto electrospun nanofibrous membranes of polylactic acid and polyacrylonitrile coated with chloride doped polyaniline. *Scientific Reports*, 10(1), 13412.
143. Mohd Zaffarin, A. S., Ng, S. F., Ng, M. H., Hassan, H., & Alias, E. (2020). Pharmacology and pharmacokinetics of vitamin E: Nanoformulations to enhance bioavailability. *International journal of nanomedicine*, 9961-9974.
144. Molina, A. B., & Flórez-Castillo, J. M. (2020). Biopolímeros como sistemas de bioencapsulación. *Research Gate*, 2-9.
145. Mustafa, M. R., Rezaur, R. B., Saiedi, S., & Isa, M. H. (2012). River suspended sediment prediction using various multilayer perceptron neural network training algorithms—a case study in Malaysia. *Water resources management*, 26, 1879-1897.
146. Nasir, A., Yabalak, E., Gizir, A. M., & Sangun, M. K. (2023). A comparison of the performance of conventional and eco-friendly extraction methods in the evaluation of total phenolics, antioxidant activity, and chemical composition of anise. *International Journal of Environmental Health Research*, 33(12), 1341-1356.
147. Nasouri, K. (2018). Novel estimation of morphological behavior of electrospun nanofibers with artificial intelligence system (AIS). *Polymer Testing*, 69, 499-507.
148. Nathani, A., Adaval, A., Karim, A., & Sharma, C. S. (2018). Poly (styrene-block-methylmethacrylate) derived electrospun mesoporous nanofibers. *Surfaces and Interfaces*, 12, 168-178.
149. Nitti, P., Gallo, N., Natta, L., Scalera, F., Palazzo, B., Sannino, A., & Gervaso, F. (2018). Influence of nanofiber orientation on morphological and mechanical properties of electrospun chitosan mats. *Journal of healthcare engineering*.
150. Okutan, N., Terzi, P., & Altay, F. (2014). Affecting parameters on electrospinning process and characterization of electrospun gelatin nanofibers. *Food Hydrocolloids*, 39, 19-26.
151. Olden, J. D., & Jackson, D. A. (2002). Illuminating the “black box”: a randomization approach for understanding variable contributions in artificial neural networks. *Ecological modelling*, 154(1-2), 135-150.
152. Otero, P., Garcia-Oliveira, P., Carpena, M., Barral-Martinez, M., Chamorro, F., Echave, J., ... & Prieto, M. A. (2021). Applications of by-products from the olive oil processing: Revalorization strategies based on target molecules and green extraction technologies. *Trends in Food Science & Technology*, 116, 1084-1104.
153. Pai, C. L., Boyce, M. C., & Rutledge, G. C. (2011). On the importance of fiber curvature to the elastic moduli of electrospun nonwoven fiber meshes. *Polymer*, 52(26), 6126-6133.
154. Pan, J., Ai, F., Shao, P., Chen, H., Gao, H. (2019). Development of polyvinyl alcohol/ β -cyclodextrin antimicrobial nanofibers for fresh mushroom packaging. *Food Chemistry*, 300, 125249.
155. Park, J. C., Ito, T., Kim, K. O., Kim, K. W., Kim, B. S., Khil, M. S., ... & Kim, I. S. (2010). Electrospun poly (vinyl alcohol) nanofibers: effects of degree of hydrolysis and enhanced water stability. *Polymer journal*, 42(3), 273-276.
156. Peleng, M. (1993). Fractals and Foods. *Critical Reviews Food Science Nutritional*. 33(2), 149-165.

157. Peng, R., Yang, Y., Ju, Y., Mao, L., & Yang, Y. (2011). Computation of fractal dimension of rock pores based on gray CT images. *Chinese science bulletin*, 56, 3346-3357.
158. Plagianakos, V. P., Magoulas, G. D., Nouis, N. K., & Vrahatis, M. N. (2001). Training multilayer networks with discrete activation functions. *IJCNN'01. International Joint Conference on Neural Networks. Proceedings*, 4, 2805-2810. IEEE.
159. Powell, H.M & Boyce, S.T. (2007). Fiber density of electrospun gelatin scaffolds regulates morphogenesis of dermal–epidermal skin substitutes, *Journal of Biomedical Materials Research Part A*, 1078-1086.
160. Praveena, A., & Ponnappalli, V. S. (2019). A review on design aspects of fractal antenna arrays. In *2019 International Conference on Computer Communication and Informatics (ICCCI)*, 1-3. IEEE.
161. Prothon, F., Ahmè, L. & Sjöholm, I. (2003). Mechanisms and prevention of plant tissue collapse during dehydration: A critical review, *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*. 43(4), 447-479.
162. Putra, V. G. V., & Mohamad, J. N. (2022). Adaptive neuro-fuzzy inference systems (ANFIS) and artificial neural networks (ANNs) for optimizing electrospun PVA/TiO₂ fiber diameter. *The Journal of The Textile Institute*, 1-11.
163. Rafique, A., Zia, K. M., Zuber, M., Tabasum, S., & Rehman, S. (2016). Chitosan functionalized poly (vinyl alcohol) for prospects biomedical and industrial applications: A review. *International journal of biological macromolecules*, 87, 141-154.
164. Rasamoelina, A. D., Adjailia, F., & Sinčák, P. (2020). A review of activation function for artificial neural network. In *2020 IEEE 18th World Symposium on Applied Machine Intelligence and Informatics (SAMII)*, 281-286. IEEE.
165. Rashid, T. U., Gorga, R. E., & Krause, W. E. (2021). Mechanical properties of electrospun fibers—a critical review. *Advanced Engineering Materials*, 23(9), 2100153.
166. Ray, S. S., Chen, S. S., Nguyen, N. C., & Nguyen, H. T. (2019). Electrospinning: A versatile fabrication technique for nanofibrous membranes for use in desalination. *Nanoscale Materials in Water Purification*, 247-273.
167. Reddy, B. S.; In, K. H.; Panigrahi, B. B.; Paturi, U. M. R.; Cho, K. K.; Reddy, N. S. (2021) Modeling tensile strength and suture retention of polycaprolactone electrospun nanofibrous scaffolds by artificial neural networks. *Mater. Today Commun.* 2021, 26, 102115.
168. Rezakazemi, M., Razavi, S., Mohammadi, T., & Nazari, A. G. (2011). Simulation and determination of optimum conditions of pervaporative dehydration of isopropanol process using synthesized PVA–APTEOS/TEOS nanocomposite membranes by means of expert systems. *Journal of Membrane Science*, 379(1-2), 224-232.
169. Ribeiro, A. M., Estevinho, B. N., & Rocha, F. (2021). The progress and application of vitamin E encapsulation—A review. *Food hydrocolloids*, 121, 106998.
170. Ridho BKA, A.M., Ngamkhanong, C., Wu, Y., & Kaewunruen, S. (2021). Recycled Aggregates Concrete Compressive Strength Prediction Using Artificial Neural Networks (ANNs), *infrastructures*, 6, 17.
171. Rinaudo, M. (2006). Chitin and chitosan: Properties and applications. *Progress in polymer science*, 31(7), 603-632.
172. Rodríguez-Pedroso, A.T., Ramírez-Arrebato, M.A., Rivero-González, D. E. Bosquez-Molina, E., Barrera-Necha, L.L & Bautista-Baños, S. (2009). Propiedades Químico-Estructurales y Actividad Biológica de la Quitosana en Microorganismos Fitopatógenos. *Revista Chapingo Serie Horticultura*. 15(3), 307-317.

173. Rodríguez-Rodríguez, R., Espinosa-Andrews, H., Velasquillo-Martínez, C., & García-Carvajal, Z. Y. (2020). Composite hydrogels based on gelatin, chitosan and polyvinyl alcohol to biomedical applications: A review. *International Journal of Polymeric Materials and Polymeric Biomaterials*, 69(1), 1-20.
174. Rošic, R., Pelipenko, J., Kristl, J., Kocbek, P., Bešter-Rogač, M., & Baumgartner, S. (2013). Physical characteristics of poly (vinyl alcohol) solutions in relation to electrospun nanofiber formation. *European polymer journal*, 49(2), 290-298.
175. Rutledge, G. C., & Fridrikh, S. V. (2007). Formation of fibers by electrospinning. *Advanced drug delivery reviews*, 59(14), 1384-1391.
176. Sadan, M. K., Ahn, H. J., Chauhan, G. S., & Reddy, N. S. (2016). Quantitative estimation of poly (methyl methacrylate) nano-fiber membrane diameter by artificial neural networks. *European Polymer Journal*, 74, 91-100.
177. Salinas, D., Flunkert, V., Gasthaus, J., & Januschowski, T. (2020). DeepAR: Probabilistic forecasting with autoregressive recurrent networks. *International Journal of Forecasting*, 36(3), 1181-1191.
178. Sarkar, K., Ghalia, M. B., Wu, Z., & Bose, S. C. (2009). A neural network model for the numerical prediction of the diameter of electro-spun polyethylene oxide nanofibers. *Journal of materials processing technology*, 209(7), 3156-3165.
179. Sanchez, L. D., Rodriguez, L., & López, M. (2013). Electrospinning: la era de las nanofibras.
180. Shou, D., Fan, J., Mei, M., & Ding, F. (2014). An analytical model for gas diffusion through nanoscale and microscale fibrous media. *Microfluidics and nanofluidics*, 16, 381-389.
181. Siddique, M. A. B., Khan, M. M. R., Arif, R. B., & Ashrafi, Z. (2018). Study and observation of the variations of accuracies for handwritten digits recognition with various hidden layers and epochs using neural network algorithm. In *2018 4th International Conference on Electrical Engineering and Information & Communication Technology (iCEEICT)* 118-123. IEEE.
182. Sohrabi, M., Razbin, M., Pourtavvaf, M., Bagherzadeh, R., & Mehdipour Mirmahale, M. (2023). Exercising hybrid model to design an optimized electrospun polyamide-6 nanofibrous mat for air filtration applications. *The Journal of The Textile Institute*, 114(11), 1667-1681.
183. Solis-Rios, D., Villarreal-Gómez, L. J., Goyes, C. E., Fonthal Rico, F., Cornejo-Bravo, J. M., Fong-Mata, M. B., ... & Mejía-Medina, D. A. (2023). A Neural Network Approach to Reducing the Costs of Parameter-Setting in the Production of Polyethylene Oxide Nanofibers. *Micromachines*, 14(7), 1410.
184. Song, W., Zhang, C., & Wang, Z. (2021). Investigation of the microstructural characteristics and the tensile strength of silkworm cocoons using X-ray micro computed tomography. *Materials & Design*, 199, 109436.
185. Stepanyan, R., Subbotin, A., Cuperus, L., Boonen, P., Dorsch, M., Oosterlinck, F., & Bulters, M. (2014). Fiber diameter control in electrospinning. *Applied Physics Letters*, 105(17).
186. Stepanyan, R., Subbotin, A. V., Cuperus, L., Boonen, P., Dorsch, M., Oosterlinck, F., & Bulters, M. J. H. (2016). Nanofiber diameter in electrospinning of polymer solutions: Model and experiment. *Polymer*, 97, 428-439.
187. Sultana, S., Ali, M. E., & Ahamad, M. N. U. (2018). Gelatine, collagen, and single cell proteins as a natural and newly emerging food ingredients. In *Preparation and processing of religious and cultural foods*, 215-239. Woodhead Publishing.

188. Sun, W., Shahrajabian, M. H., & Cheng, Q. (2019). Anise (*Pimpinella anisum* L.), a dominant spice and traditional medicinal herb for both food and medicinal purposes. *Cogent Biology*, 5(1), 1673688.
189. Suryamathi, M., Ruba, C., Viswanathamurthi, P., Balasubramanian, V., & Perumal, P. (2019). Tridax procumbens extract loaded electrospun PCL nanofibers: a novel wound dressing material. *Macromolecular Research*, 27, 55-60.
190. Tampau, A., González -Martínez, C., & Chiralt, A. (2020) Polyvinyl alcohol-based materials encapsulating carvacrol obtained by solvent casting and electrospinning, *Reactive and Functional Polymers*, 153, 104603.
191. Tang, Y., Chen, L., Zhao, K., Wu, Z., Wang, Y., & Tan, Q. (2016). Fabrication of PLGA/HA (core)-collagen/amoxicillin (shell) nanofiber membranes through coaxial electrospinning for guided tissue regeneration. *Composites Science and Technology*, 125, 100-107.
192. Tavassoli-Kafrani, E., Goli, S. A. H., & Fathi, M. (2018). Encapsulation of orange essential oil using cross-linked electrospun gelatin nanofibers. *Food and bioprocess technology*, 11, 427-434.
193. Teixeira, M. A., Amorim, M. T. P., & Felgueiras, H. P. (2019). Poly (vinyl alcohol)-based nanofibrous electrospun scaffolds for tissue engineering applications. *Polymers*, 12(1), 7.
194. Tomić, N. Z., Milanović, P., Međo, B., Vuksanović, M. M., Veljović, Đ., Rakin, M., & Heinemann, R. J. (2019). Image analysis and the finite element method in the characterization of the influence of porosity parameters on the mechanical properties of porous EVA/PMMA polymer blends. *Mechanics of Materials*, 129, 1-14.
195. Triyada, K., Mu'min M.S., Faizah K., Yusuf, Y., Kusumaatmaja, A., Harsojo. (2015). Electrospun Nanofibers Based on Polyvinyl Alcohol/Chitosan and Its stability in KOH Solution, *Materials Science Form*, 827, 321-325.
196. Turk, N., Greig, M.J., Dearman, W.R., Amin, F.F. (1987). Characterization of rock joint surfaces by fractal dimension. Paper presented at 28th U.S. Symposium on Rock Mechanics (USRMS), Tucson, Arizona.
197. Uzair, M., & Jamil, N. (2020). Effects of hidden layers on the efficiency of neural networks. In *2020 IEEE 23rd international multitopic conference (INMIC)*, 1-6. IEEE.
198. Vass, P., Szabó, E., Domokos, A., Hirsch, E., Galata, D., Farkas, B., ... & Nagy, Z. K. (2020). Scale-up of electrospinning technology: Applications in the pharmaceutical industry. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Nanomedicine and Nanobiotechnology*, 12(4), e1611.
199. Vatankhah, E., Semnani, D., Prabhakaran, M. P., Tadayon, M., Razavi, S., & Ramakrishna, S. (2014). Artificial neural network for modeling the elastic modulus of electrospun polycaprolactone/gelatin scaffolds. *Acta biomaterialia*, 10(2), 709-721.
200. Vu, T. H. N., Morozkina, S. N., & Uspenskaya, M. V. (2022). Study of the Nanofibers Fabrication Conditions from the Mixture of Poly (vinyl alcohol) and Chitosan by Electrospinning Method. *Polymers*, 14(4), 811.
201. Vysloužilová, L., Buzgo, M., Pokorný, P., Chvojka, J., Míčková, A., Rampichová, M., ... & Amler, E. (2017). Needleless coaxial electrospinning: A novel approach to mass production of coaxial nanofibers. *International Journal of Pharmaceutics*, 516(1-2), 293-300.
202. Wan, X., Zhao, Y., Li, Z., & Li, L. (2022). Emerging polymeric electrospun fibers: From structural diversity to application in flexible bioelectronics and tissue engineering. In *Exploration*, 2 (1), 20210029.

203. Wang, T., Chen, Y., Dong, W., Liu, Y., Shi, L., Chen, R., & Pan, T. (2020). Fractal Characteristics of Porosity of Electrospun Nanofiber Membranes. *Mathematical Problems in Engineering*, 2020, 1-8.
204. Wang, L., Zeng, X., Yang, H., Lv, X., Guo, F., Shi, Y., & Hanif, A. (2021). Investigation and application of fractal theory in cement-based materials: A review. *Fractal and Fractional*, 5(4), 247.
205. Wang, Z., Crandall, C., Sahadevan, R., Menkhaus, T. J., & Fong, H. (2017). Microfiltration performance of electrospun nanofiber membranes with varied fiber diameters and different membrane porosities and thicknesses. *Polymer*, 114, 64-72.
206. Wang, C., Wang, J., Zeng, L., Qiao, Z., Liu, X., Liu, H., ... & Ding, J. (2019). Fabrication of electrospun polymer nanofibers with diverse morphologies. *Molecules*, 24(5), 834.
207. Wen, P., Zhu, D-H., Wu, H., Zong, M-H, Jing, Y-R., Han, S-Y. (2016). Encapsulation of cinnamon essential oil in electrospun nanofibrous film for active food packaging, *Food Control*, 59, 366-376.
208. Wu, J., Zhang, Z., Zhou, W., Liang, X., Zhou, G., Han, C. C., ... & Liu, Y. (2020). Mechanism of a long-term controlled drug release system based on simple blended electrospun fibers. *Journal of Controlled Release*, 320, 337-346.
209. Xia, Y., Cai, J., Perfect, E., Wei, W., Zhang, Q., & Meng, Q. (2019). Fractal dimension, lacunarity and succolarity analyses on CT images of reservoir rocks for permeability prediction. *Journal of Hydrology*, 579, 124198.
210. Xiao, J., Chen, S., Chen, Y., & Su, J. (2022). The potential health benefits of aloin from genus Aloe. *Phytotherapy Research*, 36(2), 873-890.
211. Xu, Y., Zou, L., Lu, H., & Kang, T. (2017). Effect of different solvent systems on PHBV/PEO electrospun fibers. *RSC advances*, 7(7), 4000-4010.
212. Yao, Z. C., Chang, M. W., Ahmad, Z., & Li, J. S. (2016). Encapsulation of rose hip seed oil into fibrous zein films for ambient and on demand food preservation via coaxial electrospinning. *Journal of food engineering*, 191, 115-123.
213. Yates, L. A., Aandahl, Z., Richards, S. A., & Brook, B. W. (2023). Cross validation for model selection: a review with examples from ecology. *Ecological Monographs*, 93(1), e1557.
214. You, K. W., & Arumugasamy, S. K. (2020). Deep learning techniques for polycaprolactone molecular weight prediction via enzymatic polymerization process. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 116, 238-255.
215. Yu, H., & Wilamowski, B. M. (2018). Levenberg–marquardt training. In *Intelligent systems*, 12-1. CRC Press.
216. Zaroual, H., Chénè, C., El Hadrami, E. M., & Karoui, R. (2022). Application of new emerging techniques in combination with classical methods for the determination of the quality and authenticity of olive oil: A review. *Critical Reviews in Food Science and Nutrition*, 62(16), 4526-4549.
217. Ziabari, M., Mottaghitalab, V., & Haghi, A. K. (2008). Evaluation of electrospun nanofiber pore structure parameters. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 25, 923-932.
218. Zhang, G., Hu, M. Y., Patuwo, B. E., & Indro, D. C. (1999). Artificial neural networks in bankruptcy prediction: General framework and cross-validation analysis. *European journal of operational research*, 116(1), 16-32.
219. Zhang, C., Wu, J., & Fu, D. (2014). Fractals in several electrode materials. *Applied surface science*, 313, 750-754.

220. Zhang, W., Li, J., Li, Z-B., & Li, Z. (2018). Predicting postoperative facial swelling following impacted mandibular third molars extraction by using artificial neural networks evaluation. *Scientific Reports*.
221. Zhang, D., Davoodi, P., Li, X., Liu, Y., Wang, W., & Huang, Y. Y. S. (2020). An empirical model to evaluate the effects of environmental humidity on the formation of wrinkled, creased and porous fibre morphology from electrospinning. *Scientific Reports*, *10*(1), 18783.
222. Zhang, H., Niu, F., Zhang, J., & Yu, X. (2022). Prediction of Three-Dimensional Fractal Dimension of Hematite Floccs Based on Particle Swarm Optimization Optimized Back Propagation Neural Network. *Mining, Metallurgy & Exploration*, *39*(6), 2503-2515.
223. Zhu, F., Zhou, Y., Feng, Q., & Xia, D. (2013). Moisture diffusivity in structure of random fractal fiber bed. *Physics Letters A*, *377*(37), 2324-2328.
224. Ziel, R., Haus, A., & Tulke, A. (2008). Quantification of the pore size distribution (porosity profiles) in microfiltration membranes by SEM, TEM and computer image analysis. *Journal of membrane science*, *323*(2), 241-246.