

Uso de redes neuronales artificiales para la predicción de las cinéticas de adsorción de toxinas urémicas sobre telas de carbón. La inteligencia artificial aplicada al diseño de membranas para hemodiálisis

M.A. Álvarez¹, A.F. Pérez-Cadenas², E. Bailón-García², F. Carrasco-Marín², W.M. Warren-Vega³, L.A. Romero-Cano³

¹Departamento de Química Inorgánica y Orgánica, Facultad de Ciencias Experimentales, Universidad de Jaén, 23071, Jaén, Spain.

²Materiales Polifuncionales Basados en Carbono (UGR-Carbon), Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias - Unidad de Excelencia Química Aplicada a Biomedicina y Medioambiente - Universidad de Granada (UEQ-UGR), 18071 Granada, Spain.

³Grupo de Investigación en Materiales y Fenómenos de Superficie. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Autónoma de Guadalajara. Av. Patria 1201, C.P. 45129. Zapopan, Jalisco. México.

malvarez@ujaen.es

Palabras clave: toxinas urémicas, mecanismo de adsorción, red neuronal artificial.

Introducción

El tratamiento de los pacientes con enfermedad renal crónica y terminal consiste en utilizar la hemodiálisis para eliminar las toxinas urémicas de la sangre. El sistema de hemodiálisis actual no elimina completamente las toxinas urémicas provocando la acumulación de desechos tóxicos en los cuerpos de los pacientes. En este sentido, una alternativa muy prometedora son las telas de carbón activado (MCCs) que destacan por su biocompatibilidad y alta capacidad de adsorción. El reto actual es diseñar estos materiales a la medida del adsorbato de interés. Por ello, el objetivo de este trabajo es la preparación de MCCs funcionalizadas para obtener información fundamental para entrenar una Red Neuronal Artificial con Regularización Bayesiana (BRANN) capaz de predecir la capacidad de adsorción de las toxinas urémicas, creatinina (CRT), ácido úrico (AU) y p-cresol (p-C), a partir de variables independientes inherentes al proceso.

Experimental

En este trabajo se ha usado una tela carbón activado de Kynol Europe que fue oxidada con $K_2S_2O_8$, H_2O_2 y ácido cítrico. Las muestras oxidadas serán citadas en el texto como S, H o C, respectivamente. Estos adsorbentes se caracterizaron por adsorción de N_2 a $-196\text{ }^\circ\text{C}$, análisis elemental, FTIR, valoración potenciométrica y XPS. Las concentraciones iniciales de CRT, AU y p-C fueron de 136 mg/L, 83.5 mg/L y 50 mg/L, respectivamente, que son los niveles medios de estas toxinas en el cuerpo de los pacientes con enfermedad renal crónica [1]. Las cinéticas de adsorción se obtuvieron usando una relación adsorbente/adsorbato de 25 mg/50 mL. Las suspensiones se agitaron mecánicamente (250 rpm) a $37\text{ }^\circ\text{C}$ durante 4 h, tiempo similar al tratamiento de diálisis [1]. La concentración de CRT, AU y p-C en la disolución se determinó mediante espectrofotometría UV a $\lambda = 234\text{ nm}$, 292 nm y 277 nm , respectivamente. El programa informático utilizado para entrenar y probar la BRANN fue el módulo de redes neuronales de MATLAB.

Resultados y discusión

Todos los adsorbentes empleados presentan una elevada área superficial y porosidad (Tabla 1). Las muestras oxidadas presentan una menor S_{BET} y porosidad que la muestra MCC, lo cual se atribuye a la destrucción de las paredes de parte de los microporos durante la oxidación. La oxidación de la MCC aumenta considerablemente el contenido en oxígeno por la fijación de complejos superficiales de oxígeno de carácter ácido, y disminuye el pH_{PZC} .

Tabla 1. Características texturales y químicas de las telas de carbón activado.

Carbón	S_{BET} $m^2\ g^{-1}$	W_0 cm^3/g	V_{meso} $cm^3\ g$	O %	pH_{PZC}
MCC	2073	0.693	0.172	6.9	7.8
MCC-S	1354	0.514	0.086	29.1	4.1
MCC-H	1959	0.680	0.168	9.4	5.8
MCC-C	1608	0.532	0.155	10.8	5.2

En la Figura 1 se compara los resultados entre los valores predichos por el BRANN y los obtenidos experimentalmente para los tres adsorbatos de interés en solución acuosa. En todos los casos, se observan altos coeficientes de regresión, evidenciando la capacidad de las BRANN's para predecir la cinética de adsorción de los tres adsorbatos de interés.

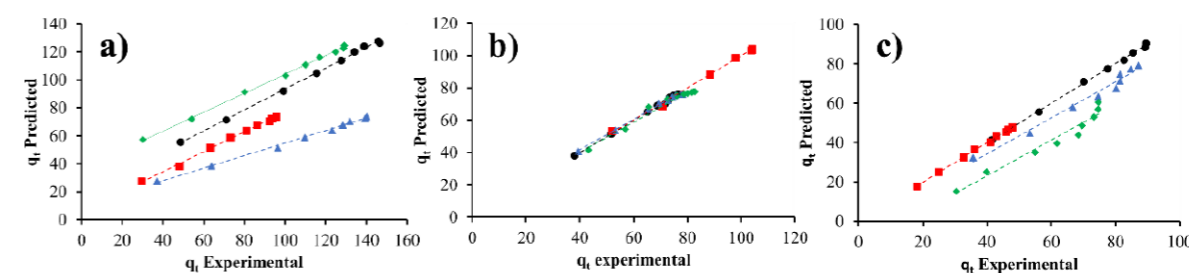


Figura 1. Comparación de los valores de q_t experimental frente al simulado (mg/g) de (a) ácido úrico, (b) creatinina y (c) p-cresol sobre las MCCs funcionalizadas en disolución acuosa: ● MCC, ■ MCC-S, ▲ MCC-H, and ◆ MCC-C.

La máxima capacidad de adsorción de CRT, AU y p-C en la muestra MCC fue de 73.2 mg/g, 142.7 mg/g y 86.5 mg/g respectivamente. Estos resultados son mejores que los obtenidos por los sistemas de diálisis convencionales [2]. Los estudios de adsorción, en combinación con la caracterización de los materiales, permitieron establecer el mecanismo de adsorción.

Conclusiones

Se concluye que la eficacia de las MCCs en la adsorción de toxinas urémicas se basa en un mecanismo de adsorción por enlaces π - π entre la toxina y la superficie del material de tal forma que los materiales con mayor área superficial BET presentan mayor tasa de eliminación. Los resultados muestran que las MCCs son materiales prometedores para las membranas de diálisis.

Agradecimientos

Junta de Andalucía (Proyecto FEDER-UJA-1380629 y Proyecto B-RNM-566-UGR20).

Referencias

- [1] Vanholder R., De Smet R., Glorieux G., Argilés A., Baurmeister U., Brunet P., Zidek W. Review on uremic toxins: classification, concentration, and interindividual variability. *Kidney Int.* 2003, 63, 1934-1943.
- [2] Fu C.C., Hsiao Y.S., Ke J.W., Syu W. L., Liu T.Y., Liu S. H., Juang, R.S. Adsorptive removal of p-cresol and creatinine from simulated serum using porous polyethersulfone mixed-matrix membranes. *Sep. Purif. Technol.* 2020, 245, 116884.