



APLICACIÓN DEL ANÁLISIS FORMAL DE CONCEPTOS AL ESTUDIO DE RELACIONES ENTRE LAS CAPACIDADES BACTERIANAS DE BIOADSORCIÓN DE URANIO Y TORIO EN LA BIORREMEDIACIÓN DE DESECHOS RADIACTIVOS

NANCY Y. QUINTERO¹
GUILLERMO RESTREPO²

¹Estudiante del Programa de Doctorado en Biotecnología de la Universidad de Antioquia en convenio con la Universidad de Pamplona, Universidad Católica de Oriente y Universidad Pontificia Bolivariana; becaria de COLCIENCIAS, investigadora adscrita al Laboratorio de Química Teórica, Grupo CHIMA, Universidad de Pamplona. E-mail: ytrioradiac@gmail.com

²Dr. rerum natura, Docente líder del grupo CHIMA; investigador adscrito al Bioinformatics Group, Department of Computer Science Universität Leipzig, Germany y al Laboratorio de Química Teórica, Universidad de Pamplona, Facultad de Ciencias básicas. E-mail: guillermorestrepo@gmail.com

RESUMEN

El uranio (U) y el torio (Th) son radionucleídos presentes en ecosistemas contaminados por diversas actividades antropogénicas; para disminuir su impacto ambiental, se han empleado metodologías, entre las que se puede mencionar la biorremediación. Esta alternativa biotecnológica utiliza organismos (bacterias, hongos o algas) para atrapar e inmovilizar los metales y de esta manera, recuperar los ecosistemas; una propiedad importante que mide la eficiencia de este proceso, es la capacidad de bioadsorción del metal, Q_i , por parte del organismo. Teniendo en cuenta que el Análisis Formal de Conceptos (*Formal Concept Analysis, FCA*) es una técnica matemática usada para obtener relaciones significativas entre propiedades que caracterizan un conjunto de objetos, en esta investigación dichos objetos serán 28 bacterias utilizadas en biorremediación de U y Th en solución acuosa. El objetivo es establecer reglas de asociación (implicaciones y asociaciones) entre las capacidades de bioadsorción de U y Th que caracterizan a estas bacterias, clasificadas según la tinción de Gram; del análisis de estas reglas, se concluye que las bacterias Gram (+) son más efectivas que las Gram (-) en la biorremediación de desechos conteniendo uranio y torio juntos, bajo las condiciones de pH, concentración de metales y de biomasa establecidas.

Palabras claves: Análisis Formal de Conceptos, biorremediación, desechos radiactivos, reglas de asociación.

1. INTRODUCCIÓN

La contaminación de suelos y agua con desechos radiactivos ha sido un problema ampliamente estudiado usando métodos convencionales como la tecnología de membranas, la electrólisis, el intercambio

iónico, la extracción con solventes orgánicos, la precipitación química y la adsorción [1]. En general, las desventajas de estos métodos son su alto costo y los problemas secundarios como la falta de resistencia a ciertos valores de pH (tecnología de membranas [2] y resinas de



intercambio [3]); la interferencia de metales contaminantes en la electrólisis [4]; el empleo de grandes cantidades de agentes orgánicos (extracción con solventes orgánicos) [5]; el aumento considerable en la cantidad de aguas de desecho, los tiempos de espera (precipitación química) y el alto costo en la regeneración de adsorbentes (adsorción) [4].

Desde hace varios años y debido al alto costo de estos métodos, se ha propuesto la alternativa biotecnológica de la biorremediación usando bacterias, algas y hongos [6]. Dada su composición celular, estos organismos son capaces de acumular, inmovilizar y biotransformar radionucleídos, por procesos enzimáticos o de captación celulares [7], lo que representa rapidez y bajos costos derivados de la utilización de su biomasa.

La presente investigación se basa en la aplicación del Análisis Formal de Conceptos (*Formal Concept Analysis, FCA*) y su objetivo es establecer reglas de asociación (implicaciones y asociaciones) entre las capacidades de adsorción de uranio (U) y torio (Th) que caracterizan a las bacterias clasificadas según la tinción de Gram. Este estudio, se enmarca en la línea de la química teórica, campo de trabajo del grupo CHIMA, al que pertenecen los autores de este artículo. A continuación, se procede a explicar la técnica del FCA y su aplicación en la matriz de 28 bacterias caracterizadas por las propiedades seleccionadas, para la obtención de las reglas de asociación (implicaciones y asociaciones) [8]. Finalmente se dan algunas conclusiones basadas en la interpretación de dichas reglas.

2. MATERIALES Y MÉTODOS

El FCA, es una técnica matemática de análisis de datos formulada por Wille [9] basada en la idea filosófica de concepto.

Un concepto es una unidad de pensamiento [10], compuesta de dos partes, la extensión o conjunto de objetos y la intensión o conjunto de atributos [9] o propiedades.

En un concepto formal los objetos deben tener sólo las propiedades que los caracterizan y esas propiedades sólo pueden caracterizar a esos objetos; en este estudio, los objetos serán las bacterias empleadas en biorremediación de U+Th en solución acuosa, representadas por B y los atributos serán las propiedades que las caracterizan, representadas por P .

Si se tiene que $b \in B$ es una bacteria y $p \in P$ una propiedad, el hecho de que m tenga la propiedad p se representa por mRp . Con el conjunto B y el conjunto P , se construye una matriz de relaciones entre B y P , denominada contexto formal $\mathbb{K} := (B, P, R)$, donde cada celda de esta matriz evalúa la relación bRp , tomando el valor de 1 si la relación existe y 0, si no; en términos matemáticos esto puede escribirse como:

Definición 1: El contexto formal $\mathbb{K} := (B, P, R)$, de este estudio, se define como la terna de bacterias (m), las propiedades (p) que las caracterizan y una relación binaria entre dichas bacterias y sus propiedades que se expresa como $R \subseteq B \times P$ [9], lo que significa que cada bacteria m posee la propiedad p , donde $b \in B$ y $p \in P$.

En el FCA, el contexto formal \mathbb{K} se visualiza como una tabla, donde en las filas se ubican los objetos de B , en las columnas se representan las propiedades de P y la relación de incidencia R está simbolizada por una "x" cada vez que ocurra bRp ; para construir este contexto se utilizó el software libre Concept Explorer [11], que implementa las funcionalidades del FCA.



2.1 Bacterias seleccionadas:

Las especies de bacterias para este estudio fueron tomadas de [12, 13 y 14] y se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1. Bacterias usadas en biorremediación de uranio y torio

Nº	Bacterias
1	<i>Arthrobacter cireus</i> IAM 1660 [12]
2	<i>Arthrobacter cireus</i> IAM 12341 [12]
3	<i>Arthrobacter nicotianae</i> IAM 12342 [12]
4	<i>Bacillus licheniformis</i> IAM 111054 [12]
5	<i>Bacillus megaterium</i> IAM 1166 [12]
6	<i>Bacillus subtilis</i> IAM 1026 [12]
7	<i>Citrobacter freudii</i> IAM 12471 [12]
8	<i>Corynebacterium equi</i> IAM 1038 [12]
9	<i>Corynebacterium glutamicum</i> IAM 12435 [12]
10	<i>Escherichia coli</i> IAM 1268 [12]
11	<i>Micrococcus luteus</i> IAM 1056 [12]
12	<i>Micrococcus varians</i> IAM 13594 [12]
13	<i>Nocardia erythropolis</i> IAM 1399 [12]
14	<i>Pseudomonas aeruginosa</i> IAM 1054 [12]
15	<i>Pseudomonas fluorescens</i> IAM 12022 [12]
16	<i>Pseudomonas stutzeri</i> IAM 12097 [12]
17	<i>Starkeya novela</i> IAM 12100 [12]
18	<i>Streptomyces albogriseolus</i> HUT6045 [13]
19	<i>Streptomyces albus</i> HUT 6047 [13]
20	<i>Streptomyces flavoviridis</i> HUT 6147 [13]
21	<i>Streptomyces griseoflavus</i> HUT 6153 [13]
22	<i>Streptomyces hiroshimensis</i> HUT 6033 [13]
23	<i>Streptomyces fradie</i> HUT 6054 [14]
24	<i>Streptomyces levoris</i> HUT 6156 [13]
25	<i>Streptomyces olivaceus</i> HUT 6061 [13]
26	<i>Streptomyces scabies</i> HUT 6027 [13]
27	<i>Streptomyces viridochromogenes</i> HUT 6030 [13]

28 *Thiobacillus novellus* IAM 12110 [12]

Fuente: Datos tomados de [12], [13] y [14].

2.2 Propiedades seleccionadas:

En los estudios de biorremediación de U+Th, la cantidad de biomasa bacteriana fue de 15 mg en peso seco [12, 13, 14]; la biomasa fue suspendida en solución acuosa conteniendo U+Th en concentración de 50 μ M, para cada elemento [12, 13, 14]; asimismo el pH se ajustó a 3,5 y el tiempo de contacto entre las bacterias y dicha solución acuosa fue de 1 h [12, 13, 14]. Como las propiedades mencionadas fueron iguales para las 28 bacterias, se seleccionaron las siguientes propiedades para la construcción del contexto:

2.2.1 Capacidad de bioadsorción, Q :

Esta propiedad cuantifica la habilidad de la biomasa bacteriana para acumular metales desde una solución acuosa; se expresa en mg de metal/g biomasa seca [15]. En este estudio se analizará la capacidad de bioadsorción para uranio, Q_U y para torio, Q_{Th} , referenciados en [12,13, 14].

2.2.2. Clasificación de las bacterias según la tinción de Gram:

Esta tinción corresponde a la habilidad que tienen las bacterias para teñir sus paredes celulares y fue considerada en este estudio por su posible relación con la capacidad de las bacterias para atrapar metales como el uranio [16]. Las bacterias Gram (+) y Gram (-) difieren en la cantidad de peptidoglicano presente en sus paredes celulares donde se localizan grupos funcionales que por atracción se unen a los cationes de U [16] y Th.

2.3 Escalamiento conceptual de las propiedades para aplicación del FCA:

Para construir el contexto formal se hacen escalas de intervalos y se tiene en cuenta la naturaleza discreta o continua de cada propiedad. De esta forma, la propiedad de una bacteria de ser clasificada como Gram



(+) o Gram (-) se considera discreta y corresponde a una propiedad binaria o de presencia/ausencia; en tanto que la propiedad Q_i para U y Th es de naturaleza continua y por consiguiente, requiere de evaluación estadística mediante pruebas no paramétricas para analizar si sus valores se ajustan o no a una distribución normal [17]. Como los valores de las propiedades Q_U y Q_{Th} , tienen comportamiento normal, se dividieron en tres intervalos etiquetados como: bajo (B), medio (M) y alto (A) [17], cuyos intervalos B, M y A están comprendidos entre $[-3\sigma, -1\sigma]$, $(-1\sigma, 1\sigma]$ y $(1\sigma, 3\sigma]$, respectivamente (Tabla 2).

Tabla 2. Intervalos para las propiedades Q_U y Q_{Th} de bacterias usadas en biorremediación de U+Th.

P	Bajo	Medio	Alto
Q_U	0,710- 2,24 (3)*	2,25-21,6 (22)	21,7-33,8 (3)
Q_{Th}	19,0- 28,0(4)	28,01- 66,0 (17)	66,01- 76,8 (7)

*Los números escritos en paréntesis, corresponden al número de bacterias clasificadas en cada intervalo

2.4 Reglas de Asociación:

Una regla de asociación es una afirmación lógica con dos partes relacionadas entre sí, llamadas antecedente (A) y consecuente (B), formados por una o más propiedades de los objetos estudiados, en este caso, bacterias:

$$A \Rightarrow B$$

Antecedente \Rightarrow Consecuente

Cuando la regla tiene un 100% de confianza (ver explicación en el siguiente párrafo), se llama implicación o regla de asociación exacta; en caso contrario, la regla es una asociación o regla aproximada [8]. Normalmente al aplicar FCA, se obtienen muchas reglas y el investigador necesita tener un criterio para seleccionarlas; este criterio lo constituyen

las medidas estadísticas, que pueden entenderse como probabilidades [8]. Para este estudio se tendrán en cuenta dos de estas medidas, conocidas como soporte y confianza.

En términos generales, el soporte es el número de objetos que cumplen lo establecido en los antecedentes y la confianza es el porcentaje de esos objetos que cumplen los antecedentes que también cumplen los consecuentes [8]. De modo que si una regla de asociación posee un soporte del 3% y una confianza del 60%, significa que cuando A aparece, el 60% de las veces B también aparece, y que A y B están apareciendo juntos en el 3% de los casos.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Atendiendo a la información de las reglas de asociación para el contexto de las bacterias y sus propiedades, se ensayaron diferentes valores de soporte y confianza. Finalmente en el programa Concept Explorer [11] se establecieron los valores umbrales, es decir valores mínimos para seleccionar las reglas; dichos valores fueron un mínimo soporte, mín_{sop} , del 1% y una mínima confianza, mín_{conf} , del 30%; con estos valores se obtuvieron cuatro implicaciones y 20 asociaciones, algunas de las cuales se muestran y se analizan en la Tabla 3.

Tabla 3. Interpretación de las implicaciones (I) y asociaciones (A) obtenidas para el contexto de 28 bacterias usadas para biorremediación de U+Th en soluciones acuosas.

Nº	Reglas de asociación y su interpretación
I_1	(3) Q_U Alto \Rightarrow (3) Gram (+)
	Toda bacteria que tenga una alta capacidad de bioadsorción de uranio, es Gram (+)
	(7) Q_{Th} Alto \Rightarrow (7) Gram (+)



I_2	Toda bacteria que tenga una alta capacidad de bioadsorción de torio, es Gram (+)
A_1	(7) Gram (+) Q_{Th} Alto =[86%] \Rightarrow (6) Q_U Medio Hay seis bacterias con capacidad media de bioadsorción, de cada siete que son Gram (+) y que tienen una alta capacidad de bioadsorción de torio
	(3) Gram (+) Q_U Alto =[67%] \Rightarrow (2) Q_{Th} Medio Hay dos bacterias con capacidad media de bioadsorción de torio, de cada tres que son Gram (+) con alta capacidad de bioadsorción de uranio
A_3	(3) Gram (+) Q_U Alto =[33%] \Rightarrow (1) Q_{Th} Alto Hay una bacteria con alta capacidad de adsorción de torio, de cada tres que son Gram (+) y que poseen alta capacidad de bioadsorción de uranio

4. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Se puede inferir que bajo las mismas condiciones de pH, concentraciones de metales y de biomasa y tiempo de contacto, las bacterias Gram (+) son más efectivas que las Gram (-) en la biorremediación de uranio y torio; esa efectividad se ve reflejada en las capacidades más altas de bioadsorción para estos radionucleídos encontradas en bacterias de esta clase (I_1 , I_2).

Asimismo, el 86% de las bacterias Gram (+) consideradas poseen una alta capacidad de bioadsorción para Th (más de 66,01 mg Th/g biomasa seca) y al mismo tiempo tienen una capacidad media para bioadsorción de uranio (entre 2,25 y 21,6 mg U/g biomasa seca) (A_1). Se concluye también que el 67% de las bacterias Gram (+) estudiadas poseen una alta capacidad de bioadsorción de uranio

(mayor a 21,7 mg U/g biomasa seca) y tienen una capacidad media de bioadsorción de Th (entre 28,01 y 66,0 mg Th/g biomasa seca) (A_2). De la asociación A_3 se establece que toda bacteria Gram (+) tiene alta capacidad de bioadsorción para U y Th con una probabilidad del 33%. Se espera en un próximo trabajo, aplicar FCA a una matriz de hongos usados en biorremediación de U+Th, con el fin de hacer la comparación de los resultados con los ya obtenidos en este estudio.

REFERENCIAS

- [1] Domingo A. CAMPO R. Estudio de la capacidad de remoción de plomo, cadmio y níquel de soluciones acuosas sintéticas, por biomasa seca del alga *Chlorella* sp. Tesis de Maestría en Química. Pamplona: Universidad de Pamplona, Facultad de Ciencias Básicas, 2014. 88 p.
- [2] B. W. ATKINSON; F. BUX y H. C. KASAN. Considerations for application of biosorption technology to remediate metal-contaminated industrial effluents. *Water SA*, vol. 24, No. 2, 1998, p. 129-136.
- [3] O. ABDI y M. A. KAZEMI. Review study of biosorption of heavy metals and comparison between different biosorbents. *J. Mater. Environ. Sci.*, vol. 6, No. 5, 2015, p. 1386-1399.
- [4] S. AL-ASHEN. Sorption of heavy metals by biological materials. Tesis Doctoral. Ottawa: University of Ottawa, 1997, 271 p.
- [5] F. XIE; T. A. ZHANG; D. DREISINGER y F. DOYLE. A critical review on solvent extraction of rare earths from aqueous solutions. *Minerals Engineering*, vol. 56, 2014, p. 10-28.



- [6] REENA; M. CH. MAGHI; A. K. ARYA; R. KUMAR y A. KUMAR. BioRadBase: A database for bioremediation of radioactive waste. *African Journal of Biotechnology*, vol. 11, no.35, 2012, p. 8718-8721.
- [7] E. van HULLEBUSCH; P. N. L. LENS y H. H. TABAK. Developments in bioremediation of soils and sediments polluted with metals and radionuclides. 3. Influence of chemical speciation and bioavailability on contaminants immobilization/mobilization bioprocesses. *Rev. Environ. Sci. Biotechnol.*, vol. 4, 2005, p. 185-212.
- [8] P. LENCA; P. MEYER; B. VAILLANT y S. LALLICH. On selecting interestingness measures for association rules: user oriented description and multiple criteria decision aid. *European Journal of operational research*, vol. 184, No. 2, January 2008, p. 610-628.
- [9] R. WILLE. Restructuring Lattice theory: an approach based on hierarchies of concepts. *Formal Concept Analysis, 7th International Conference, IFCA*. Darmstadt, Germany, May 2009. Springer-Verlag. p. 316.
- [10]. M. Ch. PÉREZ H. Estudios de Lingüística del español. Explotación de los corpóra textuales informatizados para la creación de bases de datos terminológicas basadas en el conocimiento: Resituando el concepto de concepto. Universidad Autónoma de Barcelona. [online], 2002 [cited 11 August 2015]. Available from Internet: < <http://elies.rediris.es/elies18/521.html> >. ISSN: 1139-8736.
- [11] S. A. YEVTUSHENKO. System of data analysis "Concept Explorer".
- Proceedings of the 7th National conference on Artificial Intelligence KII, Russia, p. 127-134
- [12] A. NAKAJIMA y T. TSURUTA. Competitive Biosorption of thorium and uranium by *Micrococcus luteus*. *J. Radioanal. Nucl. Chem.*, vol. 260, No.1, 2004, p. 13-18
- [13] T. TSURUTA. Accumulation of Thorium and Uranium by Microbes - the Effect of pH, concentration of metals, and time Course on the accumulation of both elements using *Streptomyces levoris*. *J. Nucl. Radiochem. Sci.*, vol. 7, 2006, No. 1, p. 1-6.
- [14] A. NAKAJIMA y T. TSURUTA. Competitive biosorption of thorium and uranium by actinomycetes. *Journal of Nuclear Science and Technology*, Supplement 3, 2002, p. 528-531.
- [15] Z. YI, B. LIAN. Adsorption of U (VI) by *Bacillus mucilaginosus*. *J. Radioanal. Nucl. Chem.*, 2012, vol.293, No.1, p. 321-329.
- [16] T. REITZ, A. ROSSBERG; A. BARKLEIT; S. SELENSKA-POBELL y M.L. MERROUN. Decrease of U (VI) immobilization capability of the facultative anaerobic strain *Paenibacillus* sp. JG-TB8 under anoxic conditions due to strongly reduced phosphatase activity. *PLOS One*, 2014, vol. 9, No.8, p.1-13.
- [17] N. Y. QUINTERO; G. RESTREPO y M. COHEN. Relating β^+ radionuclides' properties by order theory. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*, 2013, vol. 298, p.1937-1946.