*Ciencia Nicolaita* 91: 10-21; Agosto de 2024 doi:10.35830/cn.vi91.759

# Confiabilidad en las técnicas colorimétricas para la determinación de sólidos suspendidos como parámetros de calidad del agua

## Reliability in the colorimetric techniques for determination of suspended solids as water quality parameters

Itzel Luviano Soto[1]*, Yajaira Concha Sánchez[1], Bertha Alejandra Olmos Navarrete[1], Gabriel Arroyo Correa[2], José Vega Cabrera[2]

[1] Facultad de Ingeniería Civil, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Gral. Francisco J. Mújica, Col. Felícitas del Río C.P. 58040, Morelia, Michoacán.
[2] Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Gral. Francisco J. Mújica, Col. Felícitas del Río C.P. 58040, Morelia, Michoacán.

**Historial**
Manuscrito recibido: 1 de diciembre de 2023
Manuscrito aceptado: 22 de mayo de 2024
Manuscrito publicado: agosto 2024

***Autor para correspondencia**
Itzel Luviano Soto
e-mail: itzel.luviano@umich.mx

## Resumen

Los sólidos suspendidos son un parámetro de calidad del agua que se obtiene por pruebas de laboratorio, las cuales suelen ser costosas, sin embargo, existen métodos alternativos como las pruebas colorimétricas. El presente trabajo tiene como objetivo la determinación de la confiabilidad de estas técnicas, para esto se realizó un estudio colorimétrico de 20 muestras a cuatro longitudes de onda. Posteriormente, se realizó una simulación de Monte Carlo para determinar la confiabilidad de este método a partir de medidas de sensibilidad. Las técnicas colorimétricas permitieron una adecuada predicción de la concentración de sólidos suspendidos mediante el análisis de la absorbancia, esto se refleja a partir de los valores de regresión obtenidos. El modelo se puede mejorar con más datos generados de forma experimental, así como la simulación de Monte Carlo.

***Palabras clave:*** calidad del agua, sensibilidad e incertidumbre, simulación de Monte Carlo, colorimetría, sólidos suspendidos.

## Abstract

The analysis of suspended solids is a water quality parameter obtained through laboratory tests, which usually is expensive. However, there are alternative methods such as colorimetric tests. The goal of this work was to determine the reliability of this alternative technique, for this, a colorimetric study was conducted through testing 20 samples at four wavelengths. Subsequently, a Monte Carlo simulation was performed to determine the reliability of this method based on sensitivity measurements. The colorimetric techniques allowed an adequate prediction of the concentration of suspended solids through the analysis of the absorbance reflected from the regression values obtained. The model can be further improved with more data generated experimentally, as well as the Monte Carlo simulation.

***Keywords:*** water quality, sensitivity and uncertainty, Monte Carlo simulation, colorimetry, suspended solids.

## Introducción

Para la correcta evaluación de la calidad del agua es necesario determinar las concentraciones de diferentes agentes contaminantes que están en ella, denominados parámetros de contaminación, y que se utilizan como referencia para determinar propiedades físicas, químicas y/o biológicas (Secretaria del Medio Ambiente y Recursos Naturales, 2022). Dentro de los parámetros más comunes evaluados se encuentran los sólidos inmersos, en donde la cantidad de sólidos suspendidos totales disminuye la calidad de los cuerpos de agua. Altas concentraciones de sólidos suspendidos totales hacen que aumente la turbidez y la temperatura, disminuyen

Copyright © Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo • ISSN 2007-7068

los niveles de oxígeno disuelto, así como la luz inmersa, dificultando el proceso de fotosíntesis. Todo lo anterior puede provocar la muerte de organismos marinos, así como generar mal sabor, olor y color (Tchobanoglous *et al.,* 2002).

Por lo anterior, la determinación de los sólidos suspendidos totales como parámetro de la calidad del agua es de gran importancia, no obstante, el análisis de dichos parámetros implica costosas y tardadas pruebas de laboratorios. Con esta base, nuestro trabajo tiene como objetivo la determinación indirecta de los Sólidos Suspendidos Totales (SST), principalmente aquellos de origen inorgánico, a partir de pruebas colorimétricas basadas en la capacidad que tienen las moléculas para absorber las radiaciones electromagnéticas, incluyendo el espectro en la región UV-Visible-IR, por lo que dicha técnica constituye un valioso instrumento para la determinación y caracterización de sustancias a partir de la ley de Lambert-Beer.

La colorimetría es una técnica de detección de color que se fundamenta en el hecho de que toda materia responde al estimulo ocasionado por ondas electromagnéticas (luz), como se muestra en la **Fig. 1** (Herrera, 2017). Esta técnica consiste en irradiar la muestra con luz monocromática de intensidad inicial ($I_0$), la cual, absorbe cierta cantidad de luz, y la luz transmitida $I$ se mide a la salida mediante un detector.

Dado que la absorbancia se utiliza comúnmente como una herramienta experimental para la caracterización de sustancias en estudios de concentración, esta puede ser una técnica con fuentes de incertidumbre, por lo que la aplicación de un análisis de confiabilidad es esencial para identificar los aspectos críticos del modelo que afectan la incertidumbre de este.

Las técnicas de sensibilidad utilizadas para determinar la confiabilidad de un modelo, se pueden clasificar como técnicas de análisis diferencial (sensibilidad local), análisis de Monte Carlo (sensibilidad global), Test de Amplitud de Sensibilidad de Fourier FAST (sensibilidad global) y una metodología de superficie de respuesta (sensibilidad global) (Saltelli y Ratto, 2008). Actualmente, existen diferentes estrategias para realizar un análisis de confiabilidad. En este trabajo se optó por la utilización de regresión y correlación como medidas de sensibilidad e incertidumbre para determinar la confiabilidad a partir de la ley de Lambert Beer como modelo de determinación de concentración de SST aplicando las Simulaciones de Monte Carlo, ya que

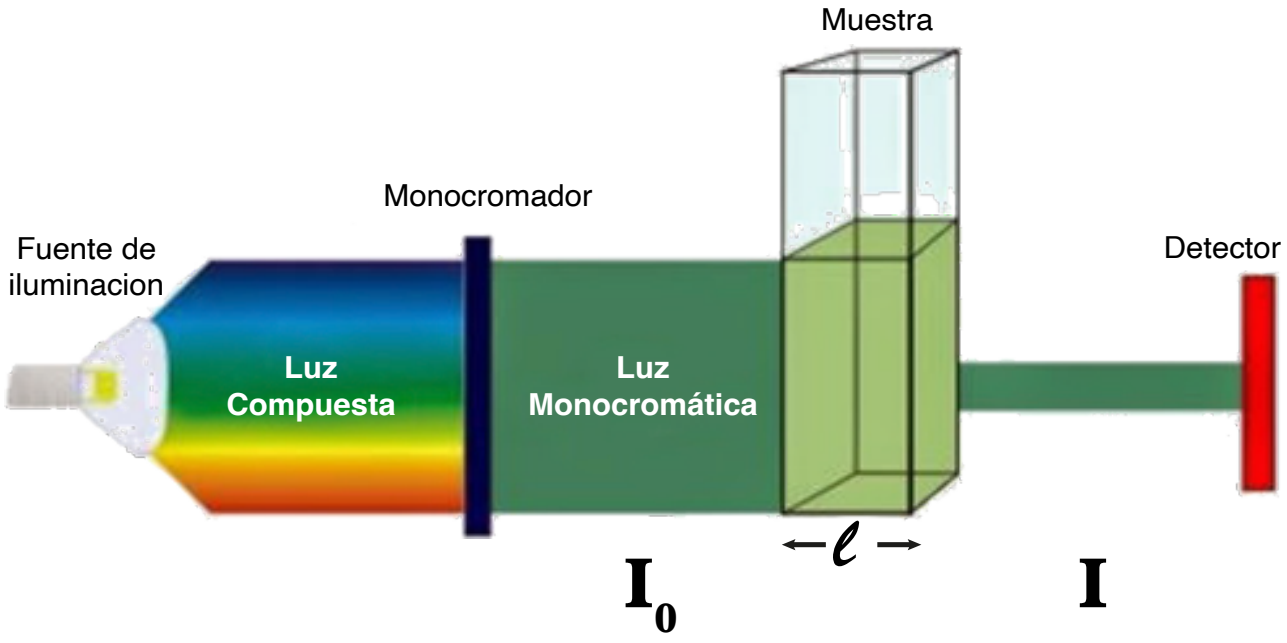


**Figura 1.** Esquema básico para medidas colorimétricas.

a lo largo del tiempo, se han desarrollado estudios de varios métodos de sensibilidad e incertidumbre (e.g. Iman y Helton, 1985, 1988; Saltelli y Marivoet, 1990; Saltelli y Homma, 1992; Saltelli *et al.,* 1993 y Pappenberger *et al.,* 2006), en los cuales se demuestra que con pruebas de sensibilidad basadas en múltiples simulaciones, tales como la Simulación de Monte Carlo (MCS) conlleva a análisis más robustos, efectivos y flexibles. El método de análisis MCS implica un muestreo de un rango de las variables de entrada seguidas por el modelo de evaluaciones para los valores muestreados, después de lo cual se utiliza la regresión y las medidas de sensibilidad basadas en la correlación que se pueden calcular.

El análisis de confiabilidad de este trabajo se basa en el análisis de sensibilidad basado en la MSC. Este análisis está limitado a la influencia de la incertidumbre del resultado del modelo propuesto, sin embargo, esta incertidumbre y sensibilidad se pueden determinar mediante varias medidas de correlación y regresión en la determinación de SST como parámetros de calidad del agua.

## Materiales y métodos

En este trabajo se analizaron veinte muestras de agua, formuladas a partir de agua destilada, considerada como agua completamente pura, mezclada con sólidos suspendidos. Para los sólidos se trabajó con muestras de arcillas, constituidas principalmente de silicato hidratado de alúmina, este material fue granulométricamente seleccionado y tamizado por la malla granulométrica #200, obteniendo así material de 74 micrómetros aproximadamente (**Fig. 2a**). Este material se pesó en una báscula analítica con precisión de 0.1 mg, de ésta se obtuvieron 20 medidas del material (**Fig. 2b**). Posteriormente, se mezclaron con 200 mL de agua destilada para obtener muestras puras de agua con SST (**Fig. 2c**) y las arcillas se analizaron mediante pruebas colorimétricas usando la instrumentación PASCO mostrada en la **Fig. 3**. Se utilizó un colorímetro portátil marca PASCO CI-6747 que opera a cuatro longitudes de onda: rojo (λ=697 nm), naranja (λ=630 nm), verde (λ=565 nm) y azul (λ=460 nm) y se calibra para cada longitud de onda con una celda de polipropileno con agua destilada. Los resultados se capturaron con el software CAPSTONE® de PASCO y las mediciones se llevaron a cabo en 4 sesiones para disminuir la propagación de errores. Las muestras se refrigeraron a 4 °C para su manejo y conservación por el periodo en que se llevó a cabo el estudio.

Una vez capturadas las muestras de las cuatro

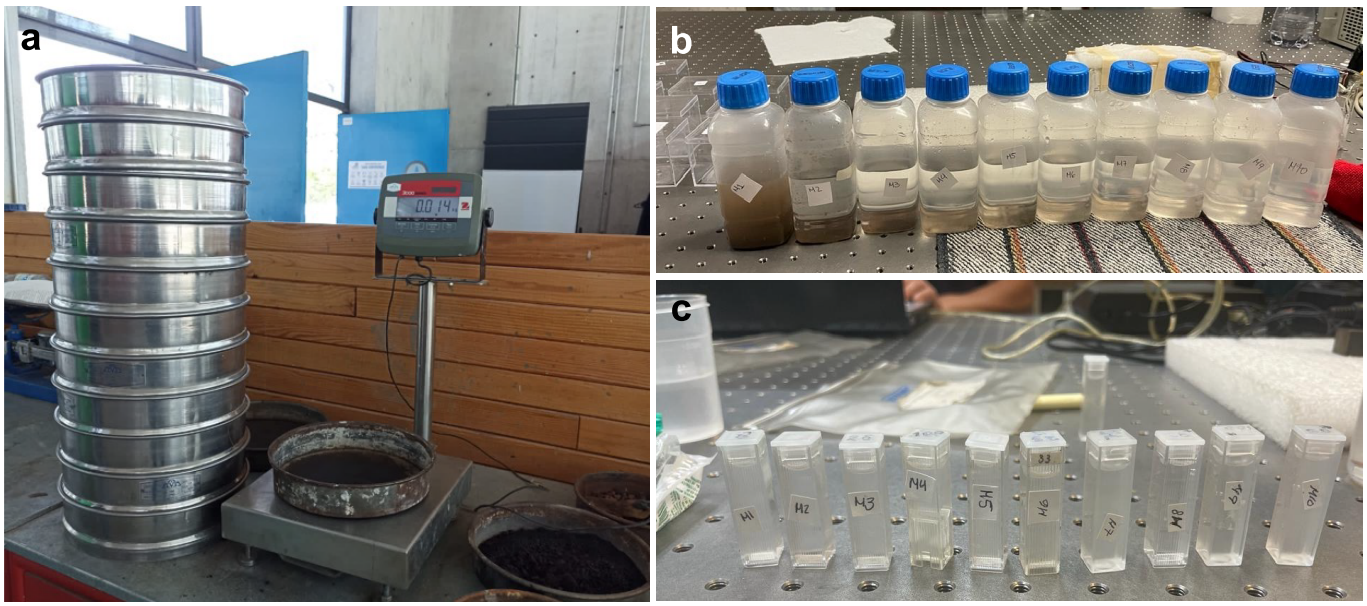


**Figura 2. a)** Prueba granulométrica para obtención de sólidos, **b)** Preparación de muestras, **c)** Celdas utilizadas para las muestras colorimétricas.

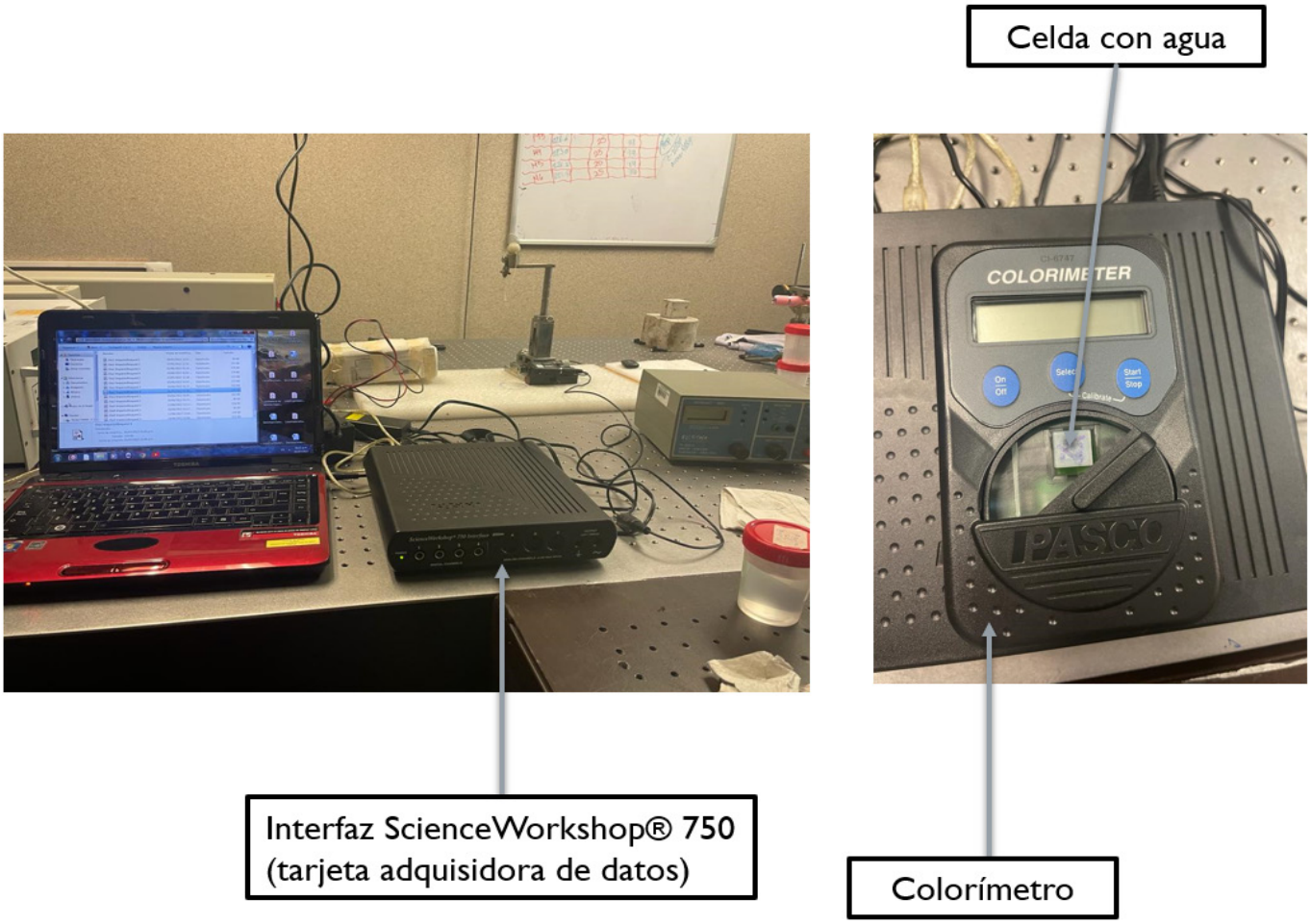


**Figura 3.** Instrumentación para las pruebas colorimétricas.

sesiones de prueba, se obtuvieron las absorbancias. Los resultados de cada onda se promediaron, estas absorbancias se vincularon con cada concentración de SST, dado que dependen de la longitud de onda del coeficiente de extinción , los resultados de cada onda se promediaron, esto en base a la ley empírica de Lambert-Beer que establece la relación entre estas intensidades, a partir de la cual se puede definir la transmitancia $T$ dada en la Eq. (1) y la absorbancia Eq. (2).

$$T = \frac{I}{I_0} = 10^{-\varepsilon c l} \qquad (1)$$

donde $\boldsymbol{\varepsilon}$ es el coeficiente de extinción, $\boldsymbol{c}$ es la concentración de la sustancia y $\boldsymbol{l}$ es el ancho del medio, conocido como camino óptico. Además, de la fórmula de la ley de Lambert-Beer se puede deducir la siguiente ecuación que permite calcular la absorbancia (Herrera, 2017) a partir del análisis de la intensidad de luz transmitida y esparcida que se originan al incidir un haz de luz. El fundamento con el cual se basa el cálculo de la concentración de partículas se halla en el uso de la ley de Bouguer–Lambert–Beer y la teoría de esparcimiento de Mie. La propuesta del equipo lleva por nombre EMETEL (Equipo de Medición para el Estudio de la Transmitancia y el Esparcimiento de Luz):

$$A = \varepsilon_\lambda c l \qquad (2)$$

en donde $\boldsymbol{\varepsilon_\lambda}$ es un parámetro que depende de las propiedades de la sustancia diluida y de la longitud de onda de la luz incidente. La medición de la absorbancia $\boldsymbol{A}$, Ec. (2), es comúnmente utilizada como una herramienta para la caracterización de sustan-

cias en estudios de colorimetría o de espectrofotometría (van Loosdrecht *et al.*, 2019).

Para realizar la MCS las absorbancias resultantes se ajustaron a una función de distribución. Para ello se realizaron varias pruebas estadísticas para determinar el modelo probabilístico de mejor ajuste, este proceso se realizó mediante el método de máxima verosimilitud. Este método consiste en que dada $f_x(X,\theta)$ que denote la función de densidad de probabilidad conjunta de un vector de variables aleatorias, $X$ y $\theta$, el conjunto de los parámetros de la distribución, en este método se intenta estimar $\theta$, maximizando la probabilidad de ocurrencia de los eventos $E_1$, $E_2$,..., $E_n$, cuando esta probabilidad está escrita como función de $\theta$. Para este propósito se define $L(\theta)$ como una función que es proporcional a la probabilidad $P(E_1 \cap E_2 \cap \cdots \cap E_n)$. En el caso especial en que los eventos $E_1$, $E_2$,..., $E_n$ sean un conjunto de observaciones estadísticamente independientes $x_1$, $x_2$,... $x_n$ de una variable continua $X$, la función de verosimilitud se describe con la Eq. 3 (Montgomery y Runger, 2018):

$$L(\theta) \approx \prod_{i=1}^{n} f_X(x_i,\theta) \qquad (3)$$

Posteriormente, se obtiene $\theta$ como el valor que maximiza la función de verosimilitud, este proceso se llevó a cabo por métodos de optimización, en este trabajo se utilizó el método quasi-Newton "BFGS" en la obtención de parámetros de la distribución de ajuste.

El método BFGS, algoritmo de Broyden-Fletcher-Golfarb-Shannon, es uno de los métodos más efectivos en optimización, Eq. (4), ya que toma la forma general del método de Newton (Senocak, 2021):

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k B_k^{-1} \nabla f(x_k) \qquad (4)$$

donde $\alpha_k$ es un parámetro de búsqueda en línea, $\nabla f(x_k)$ es el gradiente de la función $f(x_k)$, $B_k$ es una aproximación de la matriz Hessiana (derivada parcial de la matriz gradiente de la función global), la aproximación de esta matriz parte de la matriz identidad y a partir de un valor inicial se actualiza mediante el paso de Newton como se muestra en el algoritmo de la **Tabla 1** (Senocak, 2021):

El proceso de función de mejor ajuste se llevó a cabo en el software RStudio, en donde se obtuvieron los gráficos de distribución de probabilidad, los gráficos Q-Q, P-P y distribuciones acumuladas asociadas a diferentes distribuciones, también se realizaron pruebas de bondad de ajuste estadístico como las pruebas de Kolgomorov-Smirnov, Cramér-von Mises y Anderson-Darling, y los Criterios de Información de Akaike (AIC) y Criterio de Información Bayesiano (BIC).

Una vez seleccionada la función de densidad de mejor ajuste, se realizó la MSC para 10,000 muestras aleatorias a partir de los parámetros de ajuste obtenidos, la simulación se generó con valores aleatorios truncados entre [0, 100], que son los valores que puede llegar a tener la absorbancia.

**Tabla 1.** Algoritmo BFGS para optimización.

| | |
|---|---|
| $x_0$ = *valor inicial* | |
| $B_0$ = *aproximación inicial del Hessiano* | |
| *for* $k$ = 0, 1, 2 ... | |
| Solve $B_k s_k = \nabla f(x_k)$ *for* $s_k$ | {Paso de quasi-Newton} |
| $x_{k+1} = x_k + s_k$ | {actualización de la solución} |
| $B_{k+1} = B_k + \frac{y_k y_k^T}{y_k^T s_k} - \frac{B_k s_k s_k^T B_k}{s_k^T B_k s_k}$ | {aproximación actualizada del Hessiano} |
| end | |

Posteriormente, se realizó un análisis de sensibilidad e incertidumbre a partir de medidas de correlación y regresión lineal.

Para determinar las variables de sensibilidad e incertidumbre fue necesario ajustar un modelo lineal de los valores de colorimetría donde $y = y_1$, $y_2$,..., $y_n$, corresponden a los valores de salida de MCS, y $X(N{\cdot}p)$ la matriz que contiene los valores de los parámetros de las variables de entrada del modelo para $N$ simulaciones. En este caso el único parámetro determinado fue la absorbancia por lo que la matriz se convirtió en un vector:

$$X = \begin{bmatrix} x_{11} \\ x_{21} \\ \cdots \\ x_{N1} \end{bmatrix} \tag{5}$$

Mediante la regresión por mínimos cuadrados del modelo de salida en la k-ésima simulación ($k = 1,\ldots,N$) y con la asociación de la muestra de parámetros, el modelo lineal puede ser descrito de la siguiente forma:

$$y(k) = b_0 + \sum_{i=1}^{p} b_i x_i(k) + e(k) = \hat{y}(k) + e(k) \tag{6}$$

donde $y(k)$ y $x_i$ son los valores de salida del modelo y los parámetros de entrada en la k-ésima simulación respectivamente, $e(k)$ es la regresión residual, $\hat{y}(k)$ es la regresión estimada en el modelo de salida y $b_0$, $b_1$,...$b_p$ son los Coeficientes de Regresión Lineal (ORC) obtenidos a partir de la minimización de la función de mínimos cuadrados $F(b)$.

$$F(b) = \sum_{k=1}^{N} \left[ y(k) - b_0 - \sum_{i=1}^{p} b_i x_i(k) \right]^2 \tag{7}$$

Esta minimización de la función se realizó mediante el algoritmo de optimización de Levenberg-Marquart, que es una combinación del método de Región de Confianza (TR) y el método de Gauss Newton, ya que este método permite minimizar la función considerando restricciones en forma de caja. En este método cada iteración tiene la forma (Senocak, 2021):

$$(J^T(x_k)J(x_k) + \mu_k I)s_k = -J^T(x_k)r(x_k) \tag{8}$$

Donde $\mu_k$ es un escalar escogido mediante alguna estrategia, típicamente se escoge a partir del método de región de confianza, $\boldsymbol{J(x_k)}$ es la matriz jacobiana de la función a minimizar, $\boldsymbol{s_k}$ corresponde al paso de Newton y $\boldsymbol{r(x_k)}$ es el residual de la función. La solución del problema por mínimos cuadrados lineales esta dado por:

$$\begin{bmatrix} J(x_k) \\ \sqrt{\mu_k I} \end{bmatrix} s_k \cong \begin{bmatrix} -r(x_k) \\ 0 \end{bmatrix} \tag{9}$$

Las restricciones utilizadas en la solución del sistema por este método fueron las restricciones para los Coeficientes de Regresión Lineal (OCR) dadas por $b_i \in [0,\infty]$.

Una vez obtenidos los OCR se determinaron las medidas de sensibilidad e incertidumbre dadas por:

Coeficiente de Determinación
$$R_y^2 = 1 - \frac{S_e^2}{S_y^2} \tag{10}$$

Coeficiente de Regresión Normalizado (NRC)
$$NRC(y, x_i) = b_i \frac{\overline{x_l}}{\overline{y}} \tag{11}$$

Coeficiente de Regresión Estandarizado (SRC)
$$SRC_i = NRC_i \frac{CV_i}{CV_y} \tag{12}$$

Coeficiente Lineal de Correlación (LCC)
$$r_{yx_i} = \frac{\mathrm{cov}(y, x_i)}{\mathrm{var}(y)\,\mathrm{var}(x_i)} \tag{13}$$

Coeficiente Parcial de Correlación (PCC)
$$PCC_i = \frac{-c_{iy}}{(c_{ii}c_{yy})^{1/2}} \tag{14}$$

Coeficiente Semi-parcial de correlación (SPC)
$$SPC_i = r_{y\tilde{x}_l} \tag{15}$$

Mínimos Cuadrados Parciales Relativos (RPSS)
$$RPSS_i = \frac{S^2_{\hat{y}} - S^2_{\hat{y}|i-}}{S^2_y} \quad (16)$$

$R^2$ ajustada
$$R^2_{adj} = 1 - [1 - R^2]\left[\frac{(N-1)}{N-(1+p)}\right] \quad (17)$$

Factor de Variación de Inflación (VIF)
$$VIF_i = [C_x]_{ii} = (1 - r_i^2)^{-1} \quad (18)$$

donde $S^2_e$ es la variancia del error residual, $S^2_y$ es la varianza de la simulación original del modelo y $S^2_{\hat{y}}$ es la varianza de los valores predichos $\hat{y}(k)$ de la regresión del modelo, $\bar{x}_l$ y $\bar{y}$ son la media de los valores, $CV_i$ y $CV_y$ son los coeficientes de variación para $x_i$ y $y$, respectivamente, $cov(y,x_i)$ es la covariancia de $y$ y $x_i$, $var(y)$ es la variancia de $y$ y $var(x_i)$ es la varianza de $x_i$, $c_{iy}$, $c_{ii}$, $c_{yy}$ son los elementos de la matriz inversa de correlación entre $x$ y $y$ basados en las $N$ simulaciones, $S^2_{\hat{y}|i-}$ es la varianza asociada al predictor linear $y$ en base a $x_1$,..., $x_{i-1}$, $x_{i+1}$,..., $x_p$, $r_{y\tilde{x}_l}$ denota el coeficiente de correlación semi-parcial entre $y$ y $\tilde{x}_l$, resultante de corregir $x_i$ por efectos de linealidad de las otras variables usando regresión simple, $R^2$ es el coeficiente de determinación, $N$ representa el número de simulaciones y p el número de parámetros, $[C_x]_{ii}$ corresponde al *i-ésimo* elemento de la diagonal de la matriz inversa de correlación de $x_i$, la cual también se puede determinar mediante $(1-r_i^2)^{-1}$, donde $r_i^2$ es el coeficiente de correlación entre $x_i$.

El algoritmo para el análisis de sensibilidad utilizado en este estudio se muestra en la **Fig. 4** propuesto por Manache y Melching (2008).

## Resultados

Los resultados de las pruebas colorimétricas promediadas de las cuatro sesiones se muestran en la **Tabla 2**, en donde se observa que, en general las pruebas son congruentes con los valores de los SST, ya que, a mayor concentración de SST de la muestra, mayor es la absorción por parte de ésta, sin embargo, las muestras M6, M8 y M17 se descartaron por no seguir este comportamiento.

Con las muestras descartadas, se realizó el análisis de función de mejor ajuste en donde se probaron 17 funciones de distribución continuas, entre ellas la distribución normal, log-normal, exponencial, gamma, beta, uniforme, nakagami, gumbell, Weibull, Pareto, Gauss inversa, logística, log-logística, Birman-Sanders, Rayleigh, Riciana, entre otras. Las distribuciones con mejores ajustes se muestran en la **Fig. 5**, donde se muestran que fueron de probabilidad Weibull, gamma, normal, log-normal y exponencial; también se muestran las gráficas de los cuartiles Q-Q, las gráficas P-P y la función acumulada de las mismas distribuciones.

Para la selección de la distribución de probabilidad de mejor ajuste se realizaron las pruebas de Smirnov-Kolgomorov, Cramer-von Mises y Anderson-Darling, sin embargo, estas pruebas no fueron conclusivas por lo que se utilizó la información de AIC y BIC, donde la función de mejor ajuste seleccionado por estos valores fue la distribución Weibull, como se muestra en la **Tabla 3**.

Los datos estadísticos de las muestras se presentan en la **Tabla 4** y se utilizó la distribución Weibull truncada de [0, 100], con 10,000 muestras aleatorias en ese intervalo para la realización de SMC.

Las muestras se ajustaron al modelo de absorción propuesto por una función polinomial de grado 2, ya que este modelo resultó tener el mejor ajuste estadístico a partir de la Ec. 2, en la **Figura 6** se muestran los modelos de ajuste para la absorbancia y la concentración de SST.

De los valores experimentales se obtuvieron las medidas de sensibilidad a partir del NRC, SRC, PCC, LCC, y RPSS del modelo lineal a partir del parámetro de entrada como se muestran en la **Tabla 5** y los datos de sensibilidad se muestran en la **Tabla 6**.

El resumen de la información del modelo de regresión lineal de salida se muestra en la **Tabla 7.**

## Discusión

Los modelos de correlación y regresión lineal se utilizaron como medidas de sensibilidad y confiabilidad para la determinación de pruebas experimentales colorimétricas y mediante la MCS. Los datos originales como los datos simulados se

**Tabla 2.** Concentrado de pruebas colorimétricas.

| Muestra | Azul | Naranja | Rojo | Verde | Promedio | SST (mg/L) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| M1 | 58.0045 | 59.8147 | 69.2013 | 63.6464 | 62.6667 | 5000.0000 |
| M2 | 78.5353 | 78.2906 | 80.5859 | 80.6613 | 79.5183 | 2511.5000 |
| M3 | 86.8576 | 89.7774 | 90.6198 | 90.1058 | 89.3402 | 1010.0000 |
| M4 | 86.7875 | 93.0794 | 92.9817 | 90.8975 | 90.9365 | 517.5000 |
| M5 | 81.9925 | 93.1416 | 94.0256 | 92.9551 | 90.5287 | 405.5500 |
| M6 | 81.9925 | 84.8575 | 90.4670 | 91.7754 | 87.2731 | 379.0000 |
| M7 | 90.2194 | 93.7085 | 94.1052 | 92.3496 | 92.5957 | 277.5000 |
| M8 | 96.4232 | 97.9669 | 98.5731 | 97.0019 | 97.4913 | 180.0000 |
| M9 | 95.7489 | 98.0626 | 98.0599 | 97.5539 | 97.3563 | 118.7500 |
| M10 | 96.4204 | 99.2006 | 98.4196 | 97.1390 | 97.7949 | 85.0000 |
| M11 | 99.9636 | 99.7434 | 97.5581 | 99.9986 | 99.3159 | 200.0000 |
| M12 | 99.9648 | 98.5323 | 96.0701 | 98.9342 | 98.3753 | 160.0000 |
| M13 | 99.9634 | 98.8903 | 99.9408 | 99.9979 | 99.6981 | 180.0000 |
| M14 | 99.9644 | 99.9841 | 98.8351 | 99.9998 | 99.6958 | 102.4000 |
| M15 | 99.9643 | 98.6134 | 97.8526 | 99.9992 | 99.1074 | 81.9200 |
| M16 | 99.9609 | 99.9399 | 99.6854 | 99.9999 | 99.8965 | 65.5360 |
| M17 | 92.7294 | 93.5444 | 91.6037 | 94.9325 | 93.2025 | 52.4300 |
| M18 | 99.9622 | 99.7298 | 99.9299 | 100.0000 | 99.9055 | 41.9200 |
| M19 | 99.9617 | 99.9833 | 99.9274 | 100.0008 | 99.9683 | 33.5500 |
| M20 | 99.9602 | 99.5758 | 99.9274 | 99.9999 | 99.8658 | 26.8400 |
| AG. DEST | 99.9810 | 100.0047 | 99.9633 | 100.0196 | 99.9921 | 0.0000 |

**Tabla 3.** Pruebas de bondad de ajuste.

| Test/Distribución | Normal | Log-Normal | Weibull | Exponencial | Gamma |
|---|---|---|---|---|---|
| Kolmogorov-Smirnov | 0.3025 | 0.1289 | 0.1135 | 0.3042 | 0.1302 |
| Cramer-von | 0.3998 | 0.0511 | 0.0354 | 0.5481 | 0.0451 |
| Anderson-Darling | 2.2426 | 0.3191 | 0.2304 | 4.8315 | 0.2793 |
| Criterio de Información Akaike›s | 135.3424 | 89.7196 | 88.8119 | 101.7278 | 89.2255 |
| Criterio de Información Bayesian | 137.1232 | 91.5004 | 90.5927 | 102.6182 | 91.0062 |

**Tabla 4.** Datos estadísticos de los valores experimentales.

| Parámetro | Máximo | Mínimo | Media | Desv. estándar | Distribución |
|---|---|---|---|---|---|
| Absorción | 0.00213 | 37.3332 | 5.7464 | 9.6258 | Weibull |

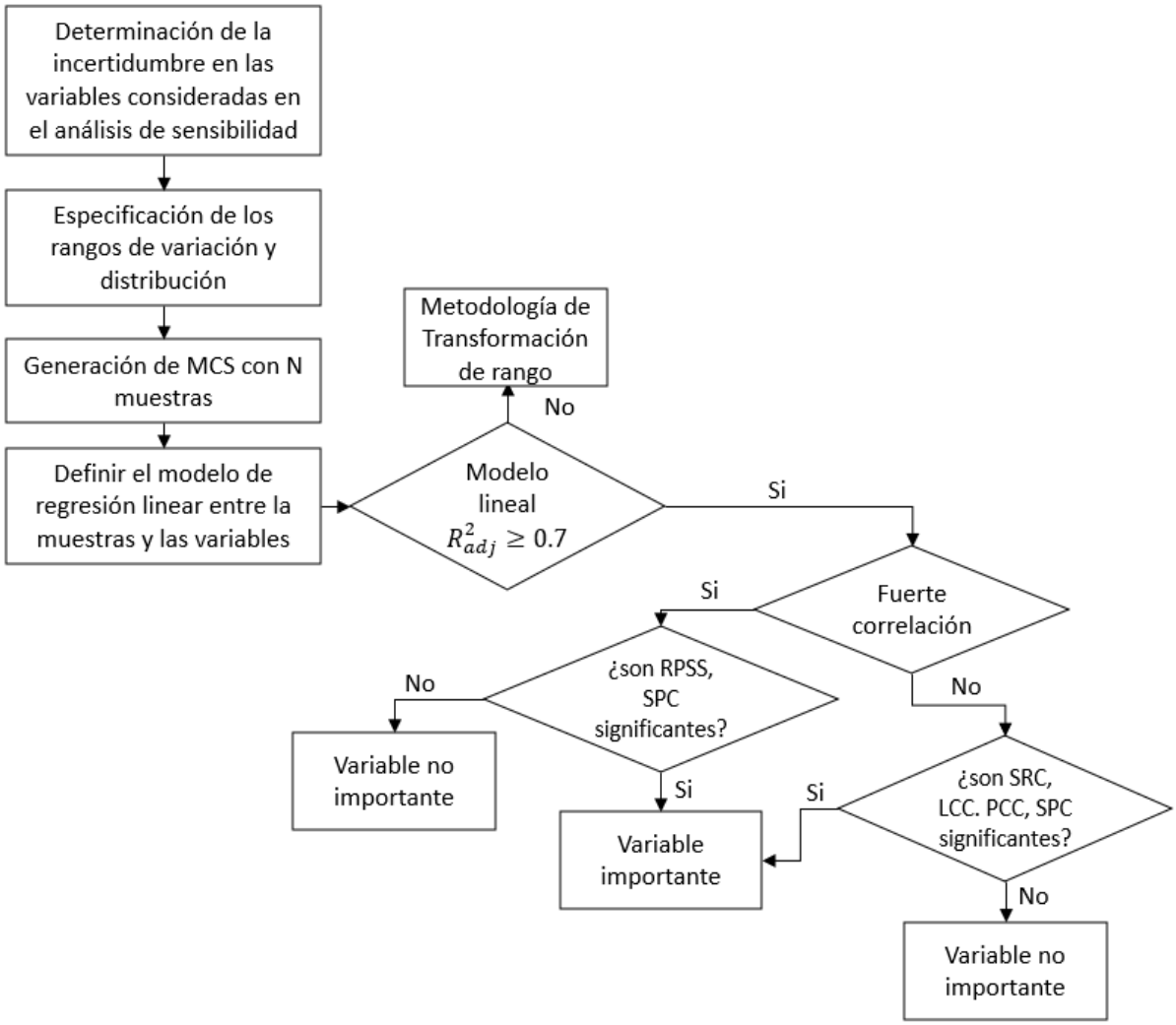


**Figura 4.** Esquema del análisis de sensibilidad aplicado a este trabajo.

**Tabla 5.** Valores de sensibilidad del modelo con valores experimentales.

| | NRC | SRC | PCC | SPC | LCC | RPSS |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Absorbancia | 1.2041 | 0.9712 | 1 | 1 | 0.9712 | 0.999 |

**Tabla 6.** Valores de sensibilidad para N simulaciones con MCS.

| | NRC | SRC | PCC | SPC | LCC | RPSS |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Absorbancia | 1.4609 | 0.9450 | 1 | 1 | 0.9450 | 1 |

**Tabla 7.** Valores de regresión lineal a partir de los datos originales y simulados.

| Estadístico de regresión | Datos originales | Datos simulados |
|---|---|---|
| VIF | 34.7222 | 18.1818 |
| $R^2$ | 0.943 | 0.893 |
| $R^2$ ajustada | 0.94 | 0.893 |
| F regresión | 267 | 83416 |
| Error Estándar de regresión-estimado | 7.7122 | 0.60172 |

calcularon a partir del cumplimiento del algoritmo mostrado en la **Fig. 4**, ya que para poder utilizar un modelo de regresión y correlación lineal se debería cumplir un ajuste de regresión lineal con un coeficiente de determinación $R^2$ ajustada de al menos 0.7. En los dos casos, los datos originales y MCS, se cumplió el supuesto, ya que los $R^2$ ajustados fueron de 0.94 y 0.89, respectivamente, por lo que el algoritmo se pudo llevar a cabo. De

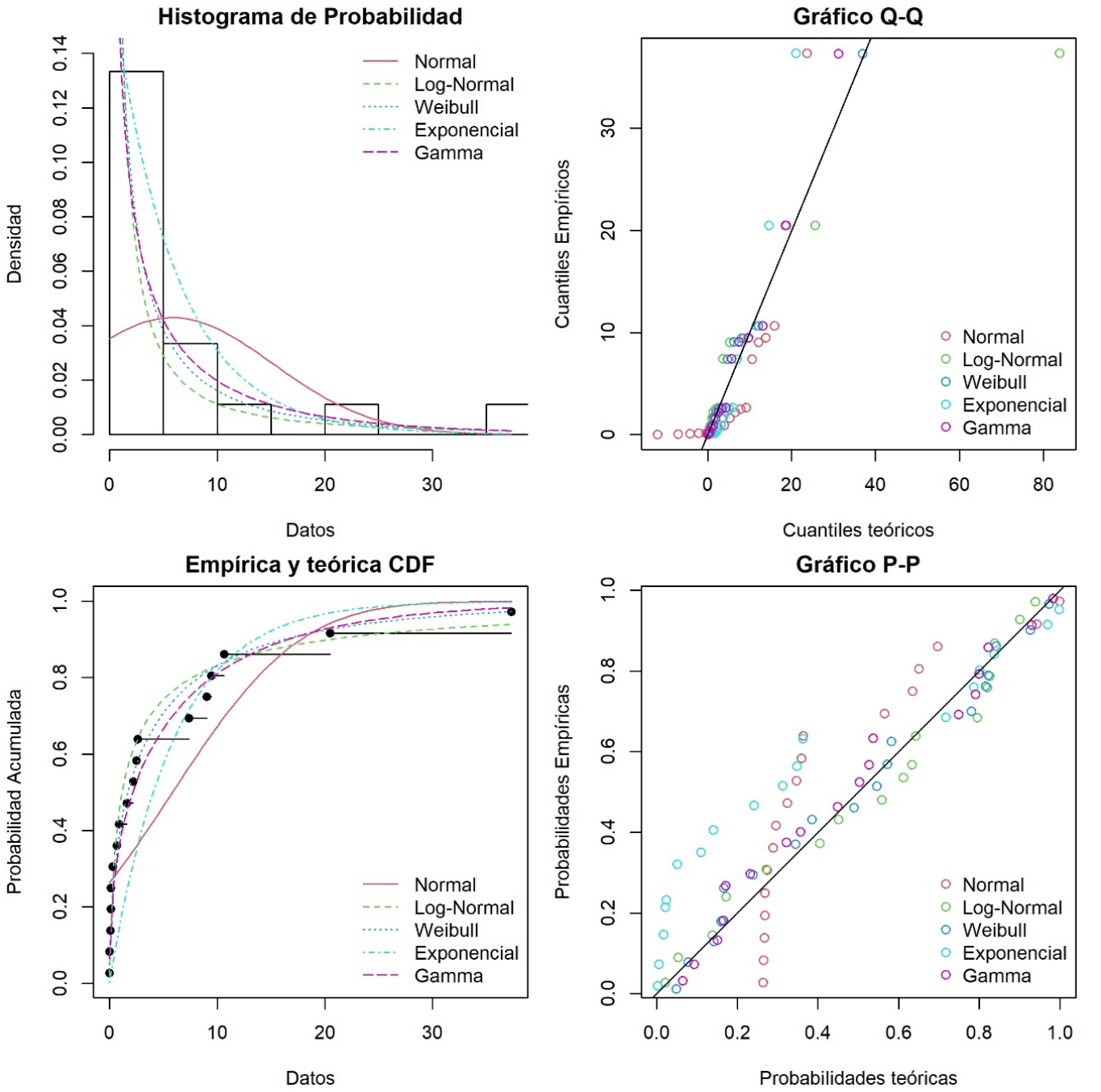


**Figura 5.** Función de probabilidad de mejor ajuste para pruebas colorimétricas.

acuerdo a estudios previos, en caso de no lograr el ajuste mínimo requerido en la regresión lineal, aún es posible utilizar el algoritmo propuesto, siempre y cuando el modelo a probar corresponda a una función monolítica y mediante el método de transformación de rango (Iman y Conover, 1979). Para el caso de funciones no lineales o no monolíticas es necesario el uso de otro algoritmo diferente como puede ser el caso de metodologías basadas en rejillas y entropía (Iman y Helton, 1988).

En este trabajo las medidas más relevantes para la determinación de la sensibilidad del modelo se describen por medio del método de los Mínimos Cuadrados Parciales Relativos (RPSS) que para la simulación de Monte Carlo resultó de 1.0 y para los datos originales de 0.999; éste valor resultó

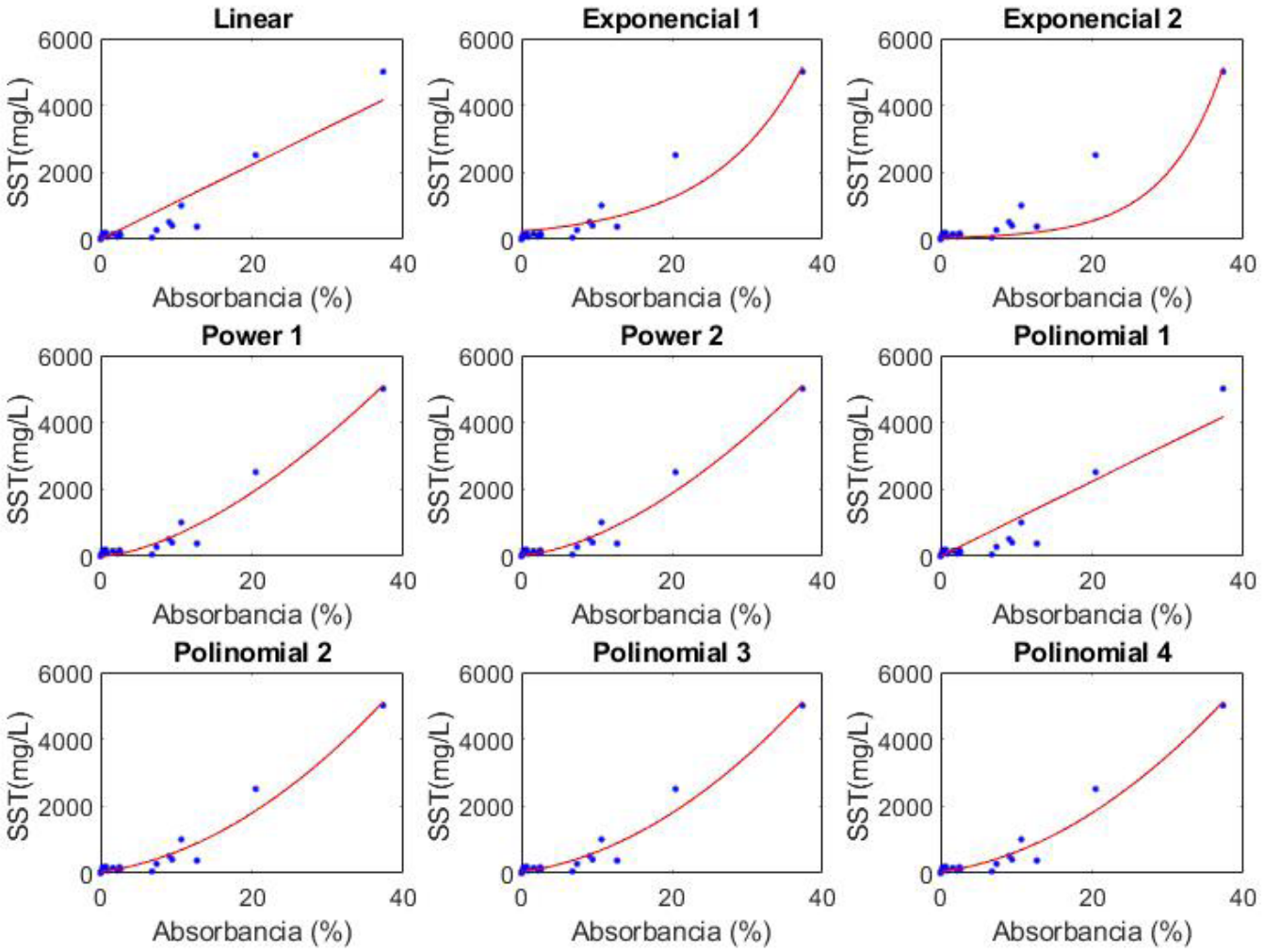


**Figura 6.** Modelos de mejor ajuste para las muestras colorimétricas

muy significativo, al igual que el Coeficiente Semiparcial de Correlación (SPC) siendo éste de 1.0 en los dos casos, por lo que la variable de absorción para la determinación de SST se convierte en una variable de suma importancia para la determinación de este parámetro. Cabe mencionar que este estudio se puede extrapolar a modelos que contengan más de un parámetro e incluso puede adoptarse a modelos dinámicos o softwares computacionales de calidad del agua, destacándose que para poder considerar la absorción como una variable con una fuerte correlación se consideró el valor de 0.8 en el algoritmo, mismo que se programó en el software Matlab, así como la simulación de Monte Carlo y la determinación de los valores de correlación y regresión.

## Conclusiones

En este trabajo se determinó la variable de absorbancia como importante dado los resultados obtenidos del RPSS y SPC. La determinación de la importancia de la variable se realizó de acuerdo al algoritmo propuesto en el trabajo "Identification of reliable regression- and correlation-based sensitivity measures for importance ranking of water-quality model parameters", mismo que emplea los coeficientes de correlación y regresión como medidas de sensibilidad e incertidumbre.

Aunque este estudio se centró en el efecto de la absorbancia como parámetro de incertidumbre en la predicción del modelo, el enfoque desarrollado puede aplicarse a cualquier otro factor incierto utilizado en las simulaciones del modelo, por ejemplo, datos de entrada, condiciones de contorno,

entre otras y puede aplicarse a una amplia variedad de problemas. Las medidas propuestas en este trabajo son apropiadas para modelos que son aproximadamente lineales o monótamente no lineales por medio del método de trasformación de rango.

Dado que en los resultados se obtuvieron buenos indicadores de sensibilidad del RPSS y SPC, se concluye que las técnicas colorimétricas permiten una adecuada predicción de la concentración de SS mediante el análisis de la absorbancia, esto se refleja a partir de los valores de regresión obtenidos, sin embargo, es importante mencionar que el modelo realizado se puede lograr calibrar con más datos generados de forma experimental para poder mejorar el modelo propuesto, así como la simulación de Monte Carlo.

## Referencias

Herrera JLN (2017). Diseño y construcción de un Equipo de Medición para el Estudio de la Transmitancia y el Esparcimiento de Luz (EMETEL) en una suspensión. MCs thesis Universidad Politécnica Nacional p 82.

Iman RL, Helton JC (1988). An investigation of uncertainty and sensitivity analysis techniques for computer models. *Risk Analysis* 8(1):71-90. doi:10.1111/j.1539-6924.1988.tb01155.

Iman RL, Helton JC (1985). A comparison of uncertainty and sensitivity analysis techniques for computer models. Report. NUREGICR-3904, SAND 84-1461. Sandia National Laboratories, Albuquerque, New Mexico.

Iman RL, Conover WJ (1979). The use of the rank transform in regression. *Technometrics* 21(4):499–509. doi:10.1080/00401706.1979.10489820.

Manache G, Melching CS (2008), Identification of reliable regression- and correlation-based sensitivity measures for importance ranking of water-quality model parameters. *Environmental Modelling and Software* 23(5):549–562. doi:10.1016/j.envsoft.2007.08.001.

van Loosdrecht MCM, Nielsen PH, López-Vázquez CM, Brdjanovic D, Gutiérrez CM, Fall C (2019). Métodos experimentales para el tratamiento de aguas residuales. IWA Publishing. doi:10.2166/9781780409252.

Montgomery DC, Runger GC (2018). Applied statistics and probability for engineers, Seventh Edition, Wiley Ed., p. 710.

Pappenberger F, Iorgulescu I, Beven KJ (2006). Sensitivity analysis based on regional splits and regression trees (SARS-RT). *Environmental Modelling & Software* 21(7):976-990. doi:10.1016/j.envsoft.2005.04.010.

Saltelli A, Ratto M (2008). Global sensitivity analysis. In John Wiley & Sons Ltd, (Vol. 1, Issue 5). doi:10.1002/9780470725184.

Saltelli A (2002). Sensitivity analysis for importance assessment. *Risk Analysis* 22(3):579-590. doi:10.1111/0272-4332.00040.

Saltelli A, Andres TH, Homma T (1993). Sensitivity analysis of model output: an investigation of new techniques. *Computational Statistics and Data Analysis* 15:211-238. doi:10.1016/0167-9473(93)90193-W.

Saltelli A, Homma T (1992). Sensitivity analysis for model output. Performance of black box techniques on three international benchmark exercises. *Computational Statistics and Data Analysis* 13(1):73-94. doi:10.1016/0167-9473(92)90155-9.

Saltelli A, Marivoet J (1990). Nonparametric statistics in sensitivity analysis for model output: a comparison of selected techniques. *Reliability Engineering and System Safety* 28:229-253. doi:10.1016/0951-8320(90)90065-U.

Secretaria del Medio Ambiente y Recursos Naturales (2022). NORMA Oficial Mexicana NOM-001-SEMARNAT-2021, Que establece los límites permisibles de contaminantes en las descargas de aguas residuales en cuerpos receptores propiedad de la nación. (Vol. 5, pp. 1–17).

Senocak I (2020). Scientific Computing. An Introductory Survey. Revised Second Edition. *AIAA Journal* 59(1):417-418. doi:10.2514/1.J060261.

Tchobanoglous G, Burton FL, Stensel HD (2002). Wastewater engineering_ treatment and reuse McGraw-Hill (p. 1846).