



TESIS DE MAESTRÍA

**Uso de inteligencia artificial para detectar medicamentos en
muestras de agua.**

P R E S E N T A:

Lisbet Alvarez Morales

DIRECTOR DE TESIS:

Dr. J Ascención Guerrero Viramontes

CODIRECTOR DE TESIS:

Dr. Juan Reyes Luévano

ASESORA:

Dra. Ma. Rosario González Mota

Aguascalientes, Ags. 15 de enero de 2025



Instituto Tecnológico de Aguascalientes
División de Estudios de Posgrado e Investigación

Aguascalientes, Ags., **14/enero/2025**
Oficio No. DEPI 011/2025
Asunto: Autorización impresión tesis

C. LISBET ÁLVAREZ MORALES
PRESENTE

Los abajo firmantes, Miembros del Jurado para Examen de Grado de Maestría, hacemos **constar** que, habiendo revisado el Trabajo de Tesis desarrollado por Usted, bajo el título: **"Uso de inteligencia artificial para detectar medicamentos en muestras de agua"**, hemos dictaminado que éste es de aceptarse, por lo que se autoriza su impresión.

Excelencia en Educación Tecnológica®
Ingenio, Cultura y Saber, que conducen a la Excelencia®

PRESIDENTE

DR. J. ASCENCIÓN GUERRERO VIRAMONTES

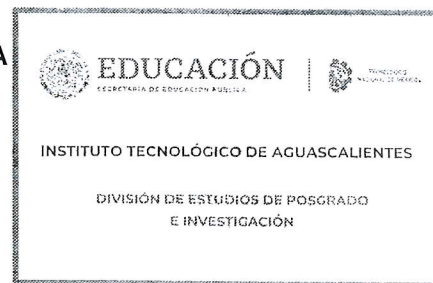
SECRETARIO

Juan Reyes L.
DR. JUAN REYES LUÉVANO

VOCAL

Rosario González Mota
DRA. MA. ROSARIO GONZÁLEZ MOTA

ccp. Archivo
JFLH/yevo



2025
Año de
La Mujer
Indígena

Av. Adolfo López Mateos #1801. Fracc. Bona Gens
C.P. 20256 Aguascalientes, Ags. Tel. 449 910 5002 ext. 127
e-mail: jefatura.depi@aguascalientes.tecnm.mx
tecnm.mx | www.aguascalientes.tecnm.mx



Instituto Tecnológico
de Aguascalientes





Instituto Tecnológico de Aguascalientes
División de Estudios de Posgrado e Investigación

Aguascalientes, Ags., 14/enero/2025
Asunto: Autorización de uso de derechos

LISBET ALVAREZ MORALES, mayor de edad, con domicilio ubicado en **Adolfo Ruiz Cortines 209, Edificio 6, número 302, Primo Verdad INEGI, 20265, Aguascalientes, Aguascalientes** en mi calidad de titular y autor de la tesis denominada **"USO DE LA INTELIGENCIA ARTIFICIAL PARA DETECTAR MEDICAMENTOS EN MUESTRAS DE AGUA"** quien para todos los fines del presente documento se denominará **EL AUTOR Y/O TITULAR**, suscribo el presente documento de autorización de uso de derechos patrimoniales de autor a favor del Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Aguascalientes el cual se registrá por las cláusulas siguientes:

PRIMERA – AUTORIZACIÓN: **EL AUTOR Y/O TITULAR**, mediante el presente documento autoriza la utilización de los derechos patrimoniales de autor al Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Aguascalientes, de la tesis denominada **"USO DE LA INTELIGENCIA ARTIFICIAL PARA DETECTAR MEDICAMENTOS EN MUESTRAS DE AGUA"**, a través del Repositorio Institucional del Tecnológico Nacional de México (en lo sucesivo TecNM) y en el Repositorio Nacional, que puede ser consultado en la liga electrónica: (www.repositorionacionalcti.mx/).

SEGUNDA – OBJETO: Por medio del presente escrito, **EL AUTOR Y/O TITULAR** autoriza al Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Aguascalientes, a través del Repositorio Institucional del TecNM y en el Repositorio Nacional para que de conformidad con la Ley Federal del Derecho de Autor y la Ley de la Propiedad Industrial, use los derechos del documento antes referido, con fines exclusivamente académicos.

TERCERA – TERRITORIO: Los derechos aquí autorizados se dan sin limitación geográfica o territorial alguna.

CUARTA – ALCANCE: La presente autorización se da tanto para formato o soporte material, y se extiende a la utilización en medio óptico, magnético, electrónico, en red, mensajes de datos o similar conocido o por conocer, del ejemplar o número respectivo de la publicación.

QUINTA – EXCLUSIVIDAD: La autorización de uso aquí establecida no implica exclusividad en favor del Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Aguascalientes. Por lo tanto, **EL AUTOR Y/O TITULAR** en su carácter de autor de la obra objeto del presente documento se reserva el derecho de publicar directamente, u otorgar a cualquier tercero, autorizaciones de uso similares o en los mismos términos aquí acordados.



2025
Año de
La Mujer
Indígena

Av. Adolfo López Mateos #1801. Fracc. Bona Gens
C.P. 20256 Aguascalientes, Ags. Tel. 449 910 5002 ext. 127
e-mail: jefatura.depi@aguascalientes.tecnm.mx
tecnm.mx | www.aguascalientes.tecnm.mx





Instituto Tecnológico de Aguascalientes
División de Estudios de Posgrado e Investigación

SEXTA – DERECHOS MORALES (Créditos y mención): La Autorización de los derechos antes mencionados no implica la cesión de los derechos morales sobre los mismos por cuanto en conformidad con lo establecido en los artículos 18, 19, 20, 21, 22 y 23 de la Ley Federal de Derechos de Autor, dada la cuenta que estos derechos son inalienables, imprescriptibles, irrenunciables e inembargables. Por lo tanto, los mencionados derechos seguirán radicados en cabeza de EL AUTOR Y/O TITULAR, y siempre deberá mencionarse su nombre cuando se utilice la obra.

SÉPTIMA – AUTORÍA: EL AUTOR Y/O TITULAR, declara y ratifica que el material objeto de la presente fue realizada por él o por ella sin violar o usurpar derechos de Propiedad Intelectual de terceros.

ATENTAMENTE

Excelencia en Educación Tecnológica®

Ingenio, Cultura y Saber, que conducen a la Excelencia

LISBET ALVAREZ MORALES
AUTOR DE LA TESIS

Vo.Bo.

DR. J. ASCENSIÓN GUERRERO VIRAMONTES
DIRECTOR DE LA TESIS

ccp. Archivo



2025
Año de
La Mujer
Indígena

Av. Adolfo López Mateos #1801. Fracc. Bona Gens
C.P. 20256 Aguascalientes, Ags. Tel. 449 910 5002 ext. 127
e-mail: jefatura.depi@aguascalientes.tecnm.mx
tecnm.mx | www.aguascalientes.tecnm.mx





A mis padres y a mi abuelo.

Agradecimientos

Quiero expresar mi más profundo agradecimiento a mis padres y a mi abuelo. Ellos han sido mi fortaleza, inspiración y apoyo incondicional. Su amor, dedicación y sacrificios me han impulsado en cada paso de mi vida y han hecho posible que alcance esta meta. Sin su guía y confianza, este logro no habría sido posible.

Agradezco de manera especial al Dr. J. Ascensión Guerrero Viramontes, al Dr. Juan Reyes Luévano y a la Dra. Ma. Rosario González Mota, quienes han sido pilares fundamentales en la realización de este proyecto. Sus valiosos conocimientos, su disposición para compartirlos y su confianza en mi trabajo fueron determinantes para el desarrollo exitoso de esta investigación. Su paciencia y orientación en momentos de incertidumbre me enseñaron no solo a enfrentar los retos académicos, sino también a crecer como profesional.

No puedo dejar de mencionar a mis compañeros de maestría, quienes, me acompañaron en este viaje. Su apoyo, tanto en los momentos más difíciles como en los más felices, fue una fuente de motivación constante. A través de su ayuda, amistad y colaboración, hicieron que esta experiencia en un país extranjero fuera mucho más llevadera. Cada uno de ellos, de alguna manera, contribuyó a que este sueño se convirtiera en realidad.

Finalmente, quiero expresar mi agradecimiento a mi pareja, Andy Alejandro García, por acompañarme incondicionalmente, brindarme su apoyo y paciencia a lo largo de cada paso que he dado. Este logro no es únicamente fruto de mi esfuerzo, sino también de todas las personas que caminaron a mi lado y dejaron una huella imborrable en mi camino. A cada uno de ustedes, gracias por estar presentes.



RESUMEN

La contaminación del agua constituye un desafío vigente que requiere atención, dado la presencia de diversos tipos de contaminantes. Este proyecto se enfoca en el estudio de los fármacos, un contaminante muy frecuente, el cual puede producir efectos adversos en los ecosistemas acuáticos y en la salud humana. Una forma de aportar soluciones ante esta problemática es mediante el empleo de inteligencia artificial, específicamente las redes neuronales convolucionales, las cuales consisten en un tipo de algoritmo que emula el funcionamiento del sistema visual humano y se utiliza ampliamente en procesamiento de imágenes. Convirtiéndose en una herramienta prometedora para la detección de estos contaminantes, ya que brinda la posibilidad de mejorar la eficiencia y precisión en el monitoreo de la calidad del agua, contribuyendo así a la protección de la salud humana y de los ecosistemas acuáticos.

Este proyecto plantea la cuantificación y detección de diferentes fármacos en el agua mediante el uso de inteligencia artificial, la cual efectúa la detección analizando imágenes previamente capturadas por un sistema óptico.



ABSTRACT

Water pollution is a current challenge that requires attention, given the presence of various types of contaminants. This project focuses on the study of drugs, a very common contaminant, which can produce adverse effects on aquatic ecosystems and human health. One way to provide solutions to this problem is using artificial intelligence, specifically convolutional neural networks, which consist of a type of algorithm that emulates the functioning of the human visual system and is widely used in image processing. Becoming a promising tool for the detection of these contaminants, since it offers the possibility of improving efficiency and precision in monitoring water quality, thus contributing to the protection of human health and aquatic ecosystems.

This project proposes the identification of different drugs in water using artificial intelligence, which carries out detection by analyzing images previously captured by an optical system.



Índice:

CAPÍTULO 1: Introducción.	1
1.1. Planteamiento del problema	5
1.2. Justificación.....	5
1.3. Objetivos.....	6
Objetivo general	6
Objetivos específicos	6
CAPÍTULO 2: Marco teórico	7
2.1. Medicamentos.....	7
2.1.1. Excipientes farmacéuticos	8
2.1.2. Contaminación derivada de los medicamentos.	10
2.2. Elementos ópticos.	13
2.2.1. Cámaras fotográficas.	13
2.2.2. Fuentes de iluminación.....	14
2.2.3. Sistema de procesamiento de imágenes.....	16
2.3.1. Las redes neuronales artificiales (RNA)	17
2.3.2. Red Neuronal Convolucional (CNN).....	19
CAPÍTULO 3: Metodología	22
3.1. Fármacos.....	22
3.3. Preparación de la mezcla.....	23
3.4. Toma de imágenes.....	27
3.5. Procesamiento de las imágenes.	28



CAPÍTULO 4: Resultados y discusión.....	30
4.1 Imágenes de las muestras de medicamentos.....	30
4.2. Entrenamiento y validación de la CNN.	31
4.3. Confiabilidad de estimación de la CNN	34
4.4. Error promedio.	36
CONCLUSIONES.....	39
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	41
ANEXOS	46



CAPÍTULO 1: Introducción.

La contaminación del agua se ha convertido en uno de los desafíos ambientales más urgentes y complejos de nuestro tiempo. Esta problemática es en gran medida causada por la actividad humana, ocasionando efectos devastadores en los ecosistemas acuáticos y la biodiversidad. Una gran variedad de contaminantes llega a nuestros ríos, lagos, arroyos y acuíferos, extendiéndose hasta los océanos, desde grandes pedazos de basura hasta sustancias químicas invisibles. Estos contaminantes no solo deterioran las reservas de agua, sino que también ponen en riesgo el suministro de agua potable y de otros recursos esenciales, alimentando una crisis global de agua dulce que se ve agravada por la sequía, el crecimiento poblacional y la mala gestión de los recursos hídricos [1, 2].

Aunque aproximadamente el 70% de la superficie terrestre está cubierta por agua, solo un 2,5% de ella es agua dulce, y de ese pequeño porcentaje, apenas un 1% es accesible para el consumo humano. La mayor parte del agua dulce se encuentra atrapada en glaciares y campos de nieve alejados de nuestros alcances cotidianos. Pero incluso estas vastas reservas no están a salvo. El calentamiento global, la contaminación y otras actividades humanas han alterado profundamente el equilibrio natural del planeta, incluido el ciclo del agua. Esto deja a millones de personas en situaciones vulnerables y resalta la necesidad urgente de proteger y gestionar este recurso vital [2, 3].

La magnitud del problema de la contaminación del agua se refleja en numerosos estudios a lo largo y ancho del mundo. Por ejemplo, se han detectado microcontaminantes orgánicos, fragmentos plásticos y sustancias como la nicotina o incluso antidepresivos en lugares tan remotos como la Antártida. Un estudio realizado por el Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) en 2023 reveló algo sorprendente: encontraron 59 tipos diferentes de microcontaminantes orgánicos en el agua de 140 áreas consideradas vitales para la conservación de aves y la biodiversidad en España.



Estas zonas, que deberían estar protegidas debido a su importancia ecológica, están siendo amenazadas por la agricultura intensiva y la expansión urbana, fuentes principales de estos contaminantes [2, 4, 5].

Dentro de todos estos contaminantes, las sustancias perfluoroalquiladas (PFAS) presentan una alta resistencia a la degradación y a menudo se les llama "sustancias químicas eternas". Los PFAS se añaden a muchos productos cotidianos para hacerlos resistentes al agua, al calor y a las manchas. Sin embargo, esta misma característica hace que se acumulen en el medio ambiente y se detecten frecuentemente en el agua potable. La presencia de PFAS evidencia la falta de regulaciones adecuadas y la gran dependencia que tenemos de químicos que, aunque son útiles para la industria, pueden causar daños a largo plazo en los ecosistemas y en nuestra salud [2, 6].

Por otro lado, el cambio climático está empeorando la situación, especialmente en las regiones montañosas. En estas áreas, las temperaturas están subiendo mucho más rápido que la media global —algunas zonas hasta un 50% más rápido— lo que está transformando radicalmente sus ecosistemas. Los glaciares y fuentes de agua dulce en las montañas, que son esenciales para millones de personas, se están viendo comprometidos. Las cadenas montañosas, que cubren cerca de una cuarta parte del planeta, están enfrentando riesgos cada vez mayores debido a fenómenos naturales más intensos y a cambios significativos en el ciclo del agua, creando un panorama sin precedentes en la historia reciente [2, 7].

El agua contaminada puede manifestar cambios físicos evidentes, como alteraciones en el color, la temperatura y la transparencia, pero también puede contener contaminantes químicos, biológicos y radiológicos que son menos perceptibles, pero igualmente peligrosos. Estos contaminantes abarcan una amplia gama de sustancias, desde agentes patógenos como bacterias y virus, hasta productos químicos industriales, fertilizantes agrícolas, metales pesados y microplásticos [8, 9].



Entre los contaminantes más comunes se encuentran las sustancias químicas inorgánicas, como los ácidos y metales tóxicos, que suelen liberarse en el agua debido a actividades industriales y agrícolas. Estos compuestos representan una amenaza significativa para la fauna y flora acuática, además de ser peligrosos para la salud humana. Asimismo, los nutrientes vegetales, como el nitrógeno y el fósforo, derivados del uso excesivo de fertilizantes, pueden desencadenar fenómenos como la eutrofización, agotando el oxígeno en los cuerpos de agua y provocando la muerte masiva de peces y otros organismos [10, 11].

Otro grupo importante de contaminantes son los microplásticos, que se han convertido en un tema de preocupación global debido a su persistencia en el medio ambiente y su capacidad para bioacumularse en la cadena alimentaria. Estas pequeñas partículas de plástico, provenientes de productos de consumo diario y del deterioro de materiales plásticos más grandes, han sido detectadas en ríos, lagos y océanos de todo el mundo, afectando a una amplia variedad de organismos acuáticos. Los sedimentos, por su parte, representan otro tipo de contaminante físico que, al acumularse en los cuerpos de agua, pueden reducir la transparencia del agua y transportar contaminantes químicos a largas distancias, amplificando su impacto ambiental [12].

En este contexto, la contaminación farmacéutica ha surgido como un tema de gran relevancia y preocupación. Los residuos de productos farmacéuticos en el agua representan una amenaza tanto para los ecosistemas acuáticos como para la salud humana. Los medicamentos pueden ejercer efectos adversos incluso a bajas concentraciones. Su presencia en el agua se debe principalmente a las descargas de aguas residuales urbanas, vertidos industriales y actividades ganaderas, así como a la eliminación inadecuada de medicamentos caducados o no utilizados. Según diversos estudios, los analgésicos, antibióticos y antiinflamatorios son los fármacos más comúnmente detectados en cuerpos de agua, lo que refleja su amplio uso y la falta de estrategias efectivas para su eliminación [13].



Por un lado, los fármacos antiinflamatorios han demostrado ser tóxicos para especies como peces y anfibios, afectando su desarrollo, reproducción y comportamiento. Por otro lado, los antibióticos presentes en el agua pueden alterar las comunidades microbianas naturales, reduciendo la biodiversidad y comprometiendo procesos ecológicos esenciales, como la descomposición de materia orgánica y el ciclo de nutrientes. Además, la exposición constante a concentraciones subletales de antibióticos está impulsando la resistencia antimicrobiana, un fenómeno que representa una amenaza global para la salud pública y que dificulta el tratamiento de infecciones bacterianas en humanos y animales [13, 14].

El impacto de esta contaminación no se limita al ambiente acuático. A través de la cadena alimentaria, los residuos farmacéuticos pueden acumularse en organismos de mayor tamaño, incluidos los seres humanos. Este problema subraya la necesidad de desarrollar herramientas y estrategias efectivas para detectar y monitorear la presencia de medicamentos en el agua [14].

Este proyecto se presenta como una solución innovadora para abordar la contaminación farmacéutica en el agua. El objetivo principal es implementar redes neuronales convolucionales (CNN) para analizar imágenes de agua contaminada y detectar la presencia de residuos farmacéuticos. Las CNN son algoritmos de aprendizaje profundo ampliamente utilizados en el procesamiento de imágenes debido a su capacidad para identificar patrones complejos y clasificar imágenes con alta precisión y velocidad. Su aplicación en este campo promete revolucionar la forma en que se monitorea la calidad del agua, ofreciendo una alternativa más rápida, económica y eficiente en comparación con los métodos analíticos convencionales [15].

El uso de redes neuronales convolucionales en este proyecto ofrece una alternativa para eliminar la necesidad de equipos costosos y análisis complejos para la detección de estos contaminantes en agua. Además, al utilizar redes neuronales convolucionales para el análisis de imágenes, no solo ofrece una solución para la detección de medicamentos en el agua, sino que también abre nuevas



posibilidades para el monitoreo y la gestión de la calidad del agua en un contexto global. Su implementación podría marcar un antes y un después en la lucha contra la contaminación farmacéutica y en la preservación de los recursos hídricos para las generaciones futuras.

1.1. Planteamiento del problema

En los últimos años, se ha realizado una gran cantidad de investigaciones para analizar la distribución y la presencia de los medicamentos en agua, y se han desarrollado varias técnicas y metodologías para detectarlos. Sin embargo, en la actualidad no existe una metodología estandarizada para su detección.

Aunque inicialmente se subestimó el impacto de estos contaminantes en el agua debido a sus concentraciones mínimas, investigaciones recientes han revelado su potencial nocivo incluso en niveles muy bajos. Por lo tanto, es fundamental contar con metodologías analíticas que permitan detectar, diferenciar y cuantificar la presencia de estos contaminantes [16].

Con el objetivo de aportar en el desarrollo de técnicas para detectar los medicamentos en el agua, se plantea el uso de un sistema óptico para la captura de imágenes de las muestras acuosas con concentraciones conocidas de estos contaminantes, que serán utilizadas para entrenar un algoritmo de inteligencia artificial que permita detectarlos y clasificarlos cuando estén presentes en muestras de agua.

1.2. Justificación

Una de las impurezas más comunes y preocupantes en el agua es la materia orgánica, particularmente los productos farmacéuticos. La presencia de estos compuestos en el agua tiene impactos nocivos significativos en el medio ambiente acuático y la salud humana. Entre los efectos adversos más notables se encuentran las alteraciones en el equilibrio hormonal de la fauna acuática,



la promoción de resistencia a los antibióticos y la creación de riesgos potenciales para la salud de las personas que consumen esta agua contaminada. Por ello, es de suma importancia implementar métodos efectivos para la detección y cuantificación de medicamentos en el agua [16, 17].

Debido a la importancia de consumir agua libre de contaminantes nocivos para la salud, este proyecto consiste en el uso de una inteligencia artificial para la detección de medicamentos en agua. Esta resulta una técnica prometedora ya que se identificarán patrones en grandes conjuntos de datos que los humanos podrían no detectar permitiendo detectar cantidades de medicamentos en el agua difíciles de identificar. Además, la automatización del proceso de detección mediante la inteligencia artificial es una opción que permitirá disminuir el costo y tiempo de análisis, al reducir la necesidad de pruebas de laboratorio y personal especializado.

1.3. Objetivos

Objetivo general

Detectar medicamentos en muestras de agua usando un algoritmo de inteligencia artificial.

Objetivos específicos

- Analizar muestras de agua con presencia de medicamentos mediante el uso de la inteligencia artificial.
- Entrenar el sistema de inteligencia artificial con las muestras controladas de los medicamentos.
- Evaluar la capacidad del sistema de inteligencia artificial para reconocer los medicamentos.
- Determinar la confiabilidad del sistema de inteligencia artificial para detectar medicamentos en muestras de agua.



CAPÍTULO 2: Marco teórico

2.1. Medicamentos.

Los medicamentos son sustancias o combinaciones de estas, las cuales tienen propiedades terapéuticas destinadas a tratar, prevenir, o aliviar enfermedades en seres humanos y animales. Su composición está dada por principios activos y excipientes, estos últimos, aunque no poseen actividad terapéutica, proporcionan estabilidad, conservación y eficacia al medicamento. Estos se pueden encontrar en diversas formas como comprimidos, cápsulas, jarabes, inyectables y supositorios, lo que permite adaptar el tratamiento a las necesidades específicas del paciente y asegurar una administración adecuada y efectiva [18, 19].

Entre los medicamentos de mayor consumo por el ser humano se encuentran los, analgésicos, antihipertensivos y antimicrobianos (figura 1). Estas categorías abordan el alivio del dolor, el control de la presión arterial y la lucha contra las infecciones, respectivamente, reflejando las necesidades médicas comunes de la población mundial [20].

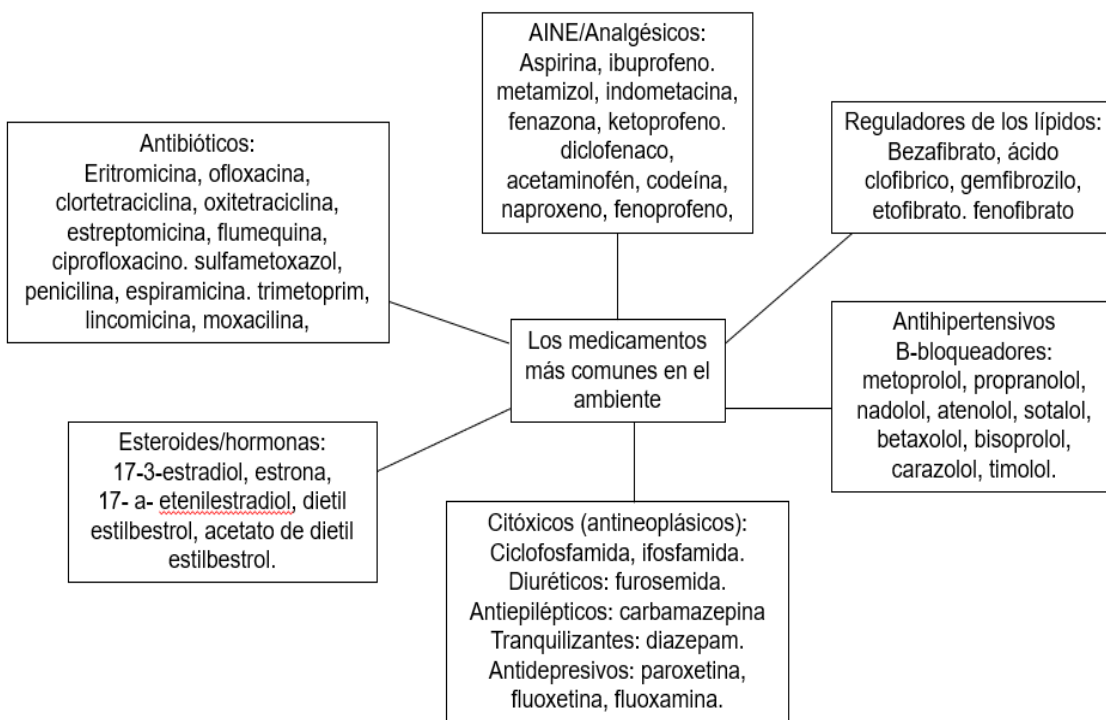


Figura 1: Medicamentos más comunes encontrados en el medio ambiente clasificados por grupos terapéuticos [21].

2.1.1. Excipientes farmacéuticos

Los productos farmacéuticos no solo están compuestos por la sustancia activo, sino que también se encuentran compuestos por diferentes excipientes que se utilizan para facilitar la formación del comprimido, para darle estabilidad al compuesto, para el control de la absorción de los fármacos, para la mejora de la seguridad y de la estabilidad de estos, entre otras propiedades. Entre los excipientes más utilizados en los diferentes grupos de medicamentos se mencionan en la Tabla 1 [22, 23].

Tabla 1. Excipientes multifuncionales presentes en fármacos comerciales [24, 25, 26, 27, 28, 29].

Nombre comercial	Composición	Ventajas/Función
Advantose FS 95	Fructuosa, almidón	Buen flujo, elevada compresibilidad, edulcorante.
Cellactose	Celulosa, lactosa	Elevada compresibilidad y sabor agradable.
F-Melt	-----	Elevada compresibilidad, buen flujo.
Ludiflash	Manitol, KollidonCLS, Kollicoat SR 30D	Buen flujo, sabor cremoso, dureza con poca friabilidad.
Star Cap 1500	Almidón de maíz, almidón pregelatinizado	Desintegrante con poco polvo, disolución independiente del pH.
Star Lac	Almidón de maíz, lactosa	Desintegrante, buen flujo.
Xylitab 100	Xylitol, polidextrosa	Compresión directa, mejor sabor

En las formulaciones farmacéuticas, los excipientes representan una proporción significativa en peso y variedad, desempeñando un papel fundamental en la estabilidad, eficacia y funcionalidad de los medicamentos. Sin embargo, una vez que estos medicamentos son utilizados y eventualmente desechados, muchos de sus componentes, incluidos los excipientes, terminan en cuerpos de agua, planteando un desafío creciente en términos de contaminación ambiental [23].

Algunos excipientes presentan características físicas y químicas que dificultan su degradación en el agua. Por ejemplo, compuestos con baja solubilidad en agua pueden persistir en estos ecosistemas, acumulándose y afectando negativamente a los organismos vivos.

2.1.2. Contaminación derivada de los medicamentos.

La contaminación del agua por la industria farmacéutica se ha convertido en una preocupación urgente a nivel internacional. Los residuos de medicamentos están contaminando cuerpos de agua, afectando negativamente al medio ambiente lo cual puede producir efectos directos en la salud humana. Esta contaminación no solo se limita al agua, sino que también afecta al suelo y al aire. Los ríos, lagos, mares, suelos, aguas subterráneas e incluso el agua potable están viéndose afectados. A nivel global, numerosos estudios han evidenciado la presencia de contaminación farmacéutica en las aguas (Tabla 2). En particular, se ha identificado que las aguas residuales urbanas son fuente de esta contaminación, llevando medicamentos que se desechan o que se excretan en la orina. Por otro lado, los vertidos procedentes de la industria farmacéutica, los hospitales y la ganadería también contribuyen a este grave problema. La presencia de estas sustancias farmacéuticas en el medio ambiente ha generado una alarma global [30, 31].

Tabla 2. Contaminación del medio ambiente por medicamentos [13].

Medicamento	Presencia ambiental/ Nombre comercial
Sulfonamidas	Sulfonamidas Concentraciones encontradas en percolados en Dinamarca: 0,04-6,47 mg/L directamente abajo del relleno y disminuyendo, dependiendo de la profundidad y el largo de la pluma. ECTAPRIM
Acetaminofeno Paracetamol	Es encontrado en las plantas de tratamiento de aguas. Paracetamol
Ácido acetil-salicílico	Uno de los primeros fármacos identificados en los afluentes/efluentes de sistemas de tratamiento de aguas servidas. Es eficientemente removido por las plantas de tratamiento de aguas servidas. Aspirina.



Diclofenaco de sodio	Se han encontrado cargas de aproximadamente 100 g/día en Alemania. Datos de laboratorio muestran una rápida y extensa fotodegradación a múltiples productos (Buser et al., 1999) Voltaren.
Ibuprofeno	Ibuprofeno Cargas sobre 200g/día en Alemania (Ternes, 1998) Excretado principalmente por los humanos en forma libre o conjugada (Buser et al., 1999). Advil.
Diazepam	En España se han detectado, en el efluente de plantas de tratamiento de aguas servidas; concentraciones medias de 16 ng L-1, con un máximo de 87 ng L-1, siendo el porcentaje de eliminación informado de un 4%. En Alemania las concentraciones detectadas, en el efluente de las plantas de tratamiento de aguas servidas, alcanza valores medio de 30 ng L-1, con una concentración máxima de 40 ng L-1. Valium.
Bezafibrato	Se han encontrado cargas de aproximadamente 300 g/día, en plantas de tratamiento de aguas servidas particulares de Alemania (Ternes, 1998) Befizal.
Carbamazepina	En Alemania se han detectado concentraciones de carbamazepina en aguas superficiales de hasta 1075 ng L-1, particularmente en el río Ebro el valor medido corresponde a 30 ng L-1. Diversos investigadores han determinado que, a su paso por sistemas de tratamiento de aguas servidas, no es eliminado en forma significativa. Tegretol
Fluoxetina	En España se han detectado, en el efluente de plantas de tratamiento de aguas servidas; concentraciones medias de 398 ng L-1, con un máximo de 929 ng L-1, siendo el porcentaje de eliminación informado de un 90%. En Canadá las concentraciones detectadas, en el efluente de las plantas de tratamiento de aguas servidas, alcanzan valores medios de 50 ng L-1, con una concentración máxima de 140 ng L-1. Prozac.

Por otro lado, los residuos de medicamentos como el diclofenaco están teniendo efectos perjudiciales en la fauna acuática y terrestre. Este antiinflamatorio, ha sido la causa del envenenamiento de buitres que consumen animales tratados con este medicamento.



Investigaciones han confirmado que el diclofenaco es dañino para las aves y ha sido detectado en volúmenes significativos en los restos de ganado en la India. Además del diclofenaco, se han encontrado rastros de otros analgésicos, como el naproxeno, el paracetamol y el ibuprofeno, en la bilis de ciertas especies de peces hallados en la naturaleza, específicamente aguas cercanas a una estación de tratamiento de aguas residuales [21, 32].

La contaminación farmacológica ha llegado a Áreas Importantes para la Conservación de las Aves (IBA), donde se detectó en el 98 % de las muestras analizadas, lo que representa una preocupación ecológica significativa. Al ser biológicamente activos, estos compuestos pueden afectar la regulación y expresión de genes, el funcionamiento del sistema inmunológico y el desarrollo de la vida silvestre en dichos entornos [5].

Además, existen antibióticos que son excretados sin sufrir modificaciones como es Amoxicilina provocando que sean muy reactivos incluso después de ser eliminados del organismo [21].

Los antibióticos además de afectar a la flora y fauna contaminan vegetales destinados al consumo humano. Estos medicamentos, presentes en lagos y riachuelos, llegan a los cultivos a través del agua de riego, que suele ser tratado, pero no siempre eficaz para eliminar los antibióticos. Una vez en los campos, los antibióticos son absorbidos por las raíces y quedan en los vegetales hasta su consumo, reintroduciendo el problema y generando efectos adversos en las personas [21].

La variedad y complejidad de los antibióticos con distintos mecanismos de acción complican su identificación en el ambiente. Aunque se pueden clasificar según su grupo para facilitar su manejo, esta clasificación presenta desafíos. Si se utiliza un método de detección basado en una parte específica de la molécula, y esto se altera durante los procesos de purificación del agua, el antibiótico podría no ser detectado. Esto hace que la detección de antibióticos en el ambiente sea una tarea compleja [21, 33].

2.2. Elementos ópticos.

Un sistema óptico es un conjunto de elementos diseñados para controlar y manipular la luz, con el fin de obtener imágenes, concentrar la luz o alterar sus propiedades. Estos sistemas pueden incluir componentes como lentes, espejos, prismas y filtros, cada uno con una función. Los sistemas ópticos son fundamentales en una amplia variedad de aplicaciones, desde cámaras fotográficas y telescopios hasta instrumentos científicos y dispositivos de iluminación. Estos sistemas utilizan las propiedades de la física óptica para lograr el efecto deseado, ya sea en la formación de imágenes nítidas, la concentración de luz para propósitos industriales o científicos.

2.2.1. Cámaras fotográficas.

- **Cámaras para uso industrial:** Las cámaras industriales están diseñadas especialmente para su implementación en entornos de producción y aplicaciones especializadas. Estos dispositivos suelen ser robustos, duraderos y capaces de resistir condiciones adversas, como altas temperaturas, vibraciones y ambientes con polvo o humedad [34].
- **Cámaras de nivel profesional:** Las cámaras profesionales, también conocidas como cámaras réflex digitales, son mayormente utilizadas por fotógrafos expertos. Estas cámaras ofrecen una amplia variedad de características y configuraciones avanzadas para permitir un control completo sobre la captura de imágenes y videos [34].
- **Cámaras para la web:** Las cámaras para la web son dispositivos compactos y pequeños que se emplean principalmente para realizar videoconferencias, transmisiones en tiempo real y videollamadas. Estas cámaras están especialmente diseñadas para conectarse a una computadora o dispositivos móviles y por lo general cuentan con una lente de gran angular que permite abarcar un amplio campo de visión. Su objetivo es ser de uso sencillo y

proporcionar una calidad de imagen adecuada para su aplicación en la comunicación en línea [35].

2.2.2. Fuentes de iluminación.

- **LED (Light Emitting Diode):** en español "Diodo Emisor de Luz", es un dispositivo semiconductor que emite luz cuando pasa corriente eléctrica a través de él. A diferencia de una bombilla incandescente tradicional que genera luz mediante calentamiento de un filamento, los LED generan luz directamente a partir de la excitación de electrones en el material semiconductor. Los LED se componen de varias capas de materiales semiconductores, generalmente de tipos como el silicio y el arseniuro de galio. Cuando una corriente eléctrica fluye a través del LED, los electrones se mueven desde una capa con carga negativa (ánodo) a una capa con carga positiva (cátodo). Durante este proceso, los electrones liberan energía en forma de fotones, que son partículas de luz. La frecuencia de la luz emitida depende del material semiconductor y de la brecha de energía entre sus capas [36].

A) Ventajas de la luz LED sobre las fuentes de luz tradicionales [37]:

- **Eficiencia Energética:** Los LED consumen mucha menos energía para producir la misma cantidad de luz que las bombillas tradicionales, lo que los hace mucho más eficientes en términos de consumo eléctrico.
- **Durabilidad:** Los LED son muy resistentes a golpes y vibraciones debido a su diseño sólido ya la falta de elementos frágiles, como los filamentos en las bombillas incandescentes.
- **Larga Vida Útil:** Los LED tienen una vida útil mucho más larga en comparación con las bombillas incandescentes y fluorescentes, lo que reduce la necesidad de reemplazos frecuentes.

- Variedad de colores: Los LED pueden emitir una amplia gama de colores directamente, lo que permite una mayor flexibilidad en la creación de iluminación con diferentes tonalidades.
- Encendido Instantáneo: Los LED se encienden al instante sin tiempo de calentamiento, a diferencia de algunas tecnologías tradicionales.

Debido a estas ventajas, los LED se utilizan en una variedad de aplicaciones, desde iluminación doméstica y comercial hasta pantallas electrónicas, luces de automóviles, dispositivos electrónicos y más. Su versatilidad y eficiencia los han convertido en una opción popular para la iluminación y otras aplicaciones en la actualidad.

- **Láser (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation):** en español "Amplificación de Luz por Emisión Estimulada de Radiación", es una fuente de luz coherente y altamente concentrada que se genera mediante un proceso de emisión estimulada en un medio activo, como un cristal o un gas. A diferencia de otras fuentes de luz, como las bombillas incandescentes o los LED, un láser emite luz en forma de un haz de fotones con una única longitud de onda y fase, lo que significa que las ondas de luz están sincronizadas en fase [38].

A) Ventajas de los láseres [38]:

- Coherencia: La luz láser tiene una fase y una dirección uniformes, lo que permite que se enfoque en un punto pequeño y se mantenga coherente en distancias relativamente largas.
- Monocromatismo: Los láseres emiten luz en una única longitud de onda o color, lo que es útil en aplicaciones como la espectroscopía y la comunicación óptica.
- Direccionalidad: El haz láser tiende a ser muy direccional y se puede enfocar en áreas muy pequeñas, lo que es útil en la cirugía láser y en aplicaciones de grabado.

- **Intensidad Elevada:** Debido a su concentración de energía, los láseres pueden generar intensidades luminosas extremadamente altas, lo que es mejor en aplicaciones de corte y soldadura.

Los láseres se utilizan en diversas áreas, como la medicina (cirugía láser, tratamientos oftalmológicos), la investigación científica (espectroscopía, estudios de materiales), la industria (corte, soldadura, marcado láser) y las comunicaciones ópticas, entre otras. Sin embargo, debido a su alta consistencia y concentración de energía, también es crucial seguir pautas de seguridad estrictas al trabajar con láseres para evitar daños oculares y otros riesgos.

2.2.3. Sistema de procesamiento de imágenes

El sistema electrónico para el procesamiento de imágenes utilizando una Raspberry Pi es una solución eficiente y versátil para diversos proyectos que requieren manejo y análisis de imágenes. La Raspberry Pi, una pequeña pero potente computadora de placa única. Su capacidad para ejecutar software de procesamiento de imágenes y su compatibilidad con diversos módulos y sensores la hacen ideal para una amplia gama de aplicaciones, desde prototipos sencillos hasta sistemas más complejos integrados [39].

2.3. Inteligencia Artificial.

La inteligencia artificial es una disciplina de la informática que se centra en el desarrollo de sistemas y programas capaces de realizar tareas que normalmente requerirían de la inteligencia humana, basándose en la creación de algoritmos y modelos computacionales que permiten a las máquinas procesar información, aprender, tomar decisiones y resolver problemas de manera autónoma [40].



La inteligencia artificial abarca una amplia gama de técnicas y enfoques, incluyendo el aprendizaje automático (machine learning), el procesamiento del lenguaje natural (NLP), visión artificial, la planificación, la robótica y más. Además, pueden analizar grandes cantidades de datos, reconocer patrones, adaptarse a nuevas situaciones y mejorar su desempeño a lo largo del tiempo [40].

El objetivo principal de la inteligencia artificial es emular y ampliar las capacidades humanas en términos de percepción, razonamiento, toma de decisiones y resolución de problemas. A medida que avanza la tecnología, la inteligencia artificial se aplica en una amplia gama de campos, incluyendo medicina, automoción, finanzas, asistentes virtuales, juegos, recomendaciones personalizadas, entre otros [40, 41].

2.3.1. Las redes neuronales artificiales (RNA)

Las redes neuronales artificiales (RNA) tienen como objetivo imitar el funcionamiento del cerebro humano, el cual se caracteriza por su capacidad de aprender a partir de la experiencia y extraer conocimiento general a partir de datos. Estos sistemas buscan replicar de manera esquemática la estructura neuronal del cerebro, ya sea a través de programas de computadora modelos, simulación, de procesamiento con capacidad de cálculo paralelo, emulación, o incluso construyendo sistemas físicos que se asemejen a la arquitectura de la red neuronal biológica, implementación de RNA en hardware [42].

Sin embargo, existen diferencias biológicas significativas entre el cerebro y las computadoras convencionales en las que se suelen implementar las redes neuronales artificiales como las que se muestran en la Tabla 3 [42].

Tabla 3. Diferencias entre el cerebro humano y las computadoras [24].

Características	Cerebro humano	Computador
Velocidad del proceso	Entre 10^{-3} y 10^{-2} seg.	Entre 10^{-8} y 10^{-9} seg.
Estilo de procesamiento	Paralelo	Secuencial (en serie)
Número de procesadores	Entre 10^{11} y 10^{14} seg.	Pocos
Almacenamiento del conocimiento	Distribuido	En direcciones fijas (posiciones precisas)
Tolerancia a fallos	Amplia	Poca o nula
Tipo de control del proceso	Autoorganizado (democrático)	Centralizado (dictatorial)
Consumo de energía para ejecutar una operación	10^{-14} Julios	10^{-6} Julios

Formalmente, un RNA puede ser definido utilizando el concepto de grafo, que consiste en un conjunto de nodos, vértices y conexiones, entre ellos. El grafo puede ser dirigido, es decir, con conexiones unidireccionales, o no dirigido, con conexiones bidireccionales. También puede haber grafos densos, donde la mayoría de los nodos están interconectados, o grafos dispersos, con conexiones limitadas entre los nodos. Un grafo puede estar compuesto por diferentes tipos de nudos y conexiones [42].

La forma más común de representar un grafo es a través de círculos para representar los nodos y líneas o flechas para representar las conexiones, como se muestra en la Figura 2. También es común utilizar una matriz de conexiones para representarlo, que será simétrica si el grafo no es dirigido. Otra forma de representación alternativa es utilizar una lista de conexiones, que indica cómo se conectan los nodos [42].

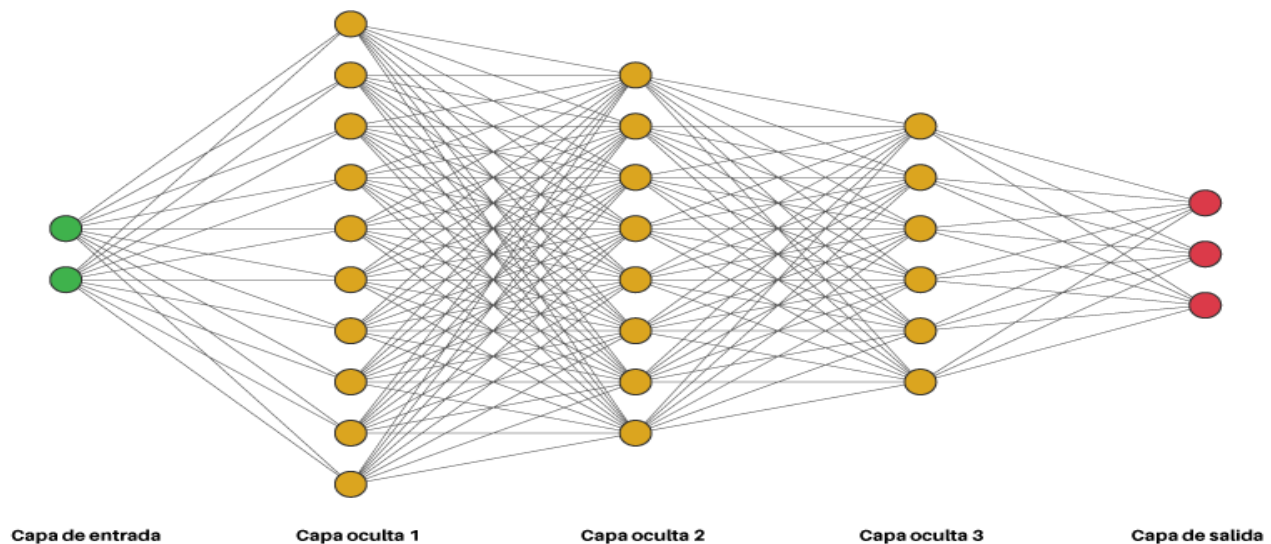


Figura 2: Diseño de red neuronal [43]

2.3.2. Red Neuronal Convolutiva (CNN).

El Deep Learning, también conocido como aprendizaje profundo, posibilita que los modelos computacionales con múltiples capas de procesamiento aprendan representaciones en distintos niveles de abstracción a partir de grandes conjuntos de datos. En el ámbito del reconocimiento de imágenes y video, el aprendizaje profundo ha logrado notables avances, y las CNN son un ejemplo destacado de esta técnica [44, 45].

Las redes CNN son ampliamente empleadas en problemas de visión computacional debido a su destacado rendimiento, cuyo objetivo principal es extraer características relevantes de una imagen y emplear dichas características para detectar o clasificar objetos en la imagen. Los filtros empleados en las capas de una CNN pueden ser aprendidos y optimizados en conjunto con los componentes de clasificación para minimizar el error de clasificación total, permitiendo que la red se adapte y mejore



en la tarea específica para la cual ha sido entrenada. Las redes neuronales convolucionales son herramientas potentes del aprendizaje profundo que han demostrado excelentes resultados en problemas de reconocimiento e interpretación de imágenes y video [44, 46].

Las redes neuronales convolucionales son empleadas en el análisis de imágenes, estas están diseñadas para comportarse de un modo similar a la corteza visual primaria del cerebro humano (Figura 3). Las personas pueden diferenciar gran cantidad de objetos gracias a la detección de características como colores, bordes, formas y sombras, lo que hace posible que cada objeto sea identificado de forma independiente [47].

Las CNN constan de tres capas fundamentales: la capa de convolución, la capa de reducción (max pooling) y las capas densas (totalmente conectadas) (Figura 3). Mientras las dos primeras se encargan de extraer características, las últimas actúan en la fase de clasificación. Durante la fase de extracción de características, la se enfoca en rasgos distintivos para reconocer un objeto. Una vez finalizada esta etapa, las capas densas llevan a cabo la fase de clasificación o de regresión, combinando toda la información previamente obtenida para generar el resultado [47].

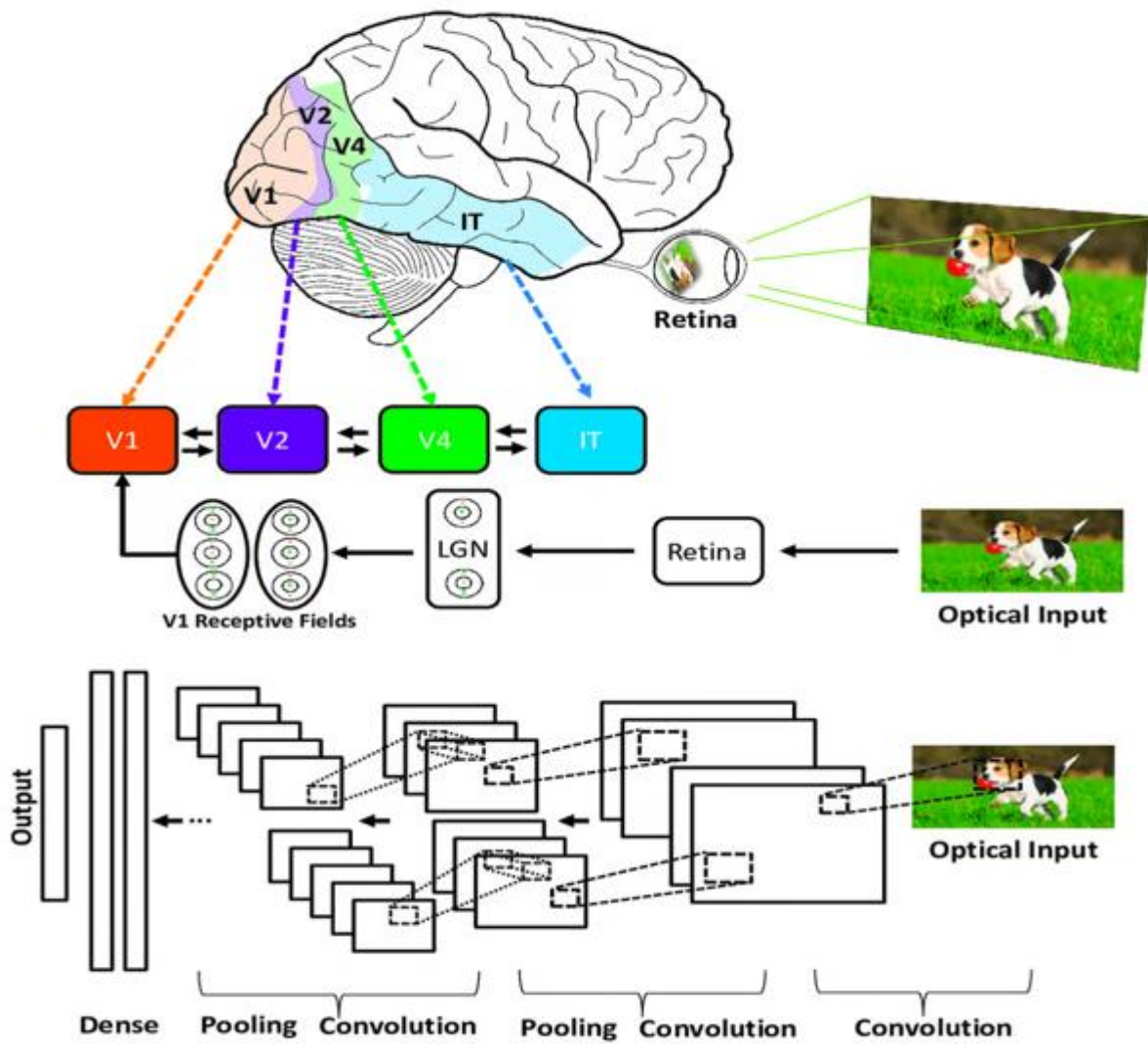


Figura 3: Ilustración de la correspondencia entre las áreas asociadas a la corteza visual primaria y las capas de una red neuronal convolucional [48].

CAPÍTULO 3: Metodología

3.1. Fármacos.

Los productos farmacéuticos analizados fueron seleccionados con base en la revisión bibliográfica previamente realizada, ya que fueron los más frecuentes en los estudios realizados sobre la contaminación por medicamentos en medio ambiente (Tabla 1). Además, estos medicamentos se encuentran entre los más consumidos.

Los medicamentos seleccionados incluyen un grupo de analgésicos: paracetamol, diclofenaco, naproxeno e ibuprofeno; así como dos antibióticos: clindamicina y amoxicilina.

3.2. Preparación de los medicamentos.

A) Reducción de tamaño de los medicamentos.

Los medicamentos fueron molidos individualmente en un mortero (ver Figura 4) con el objetivo de facilitar su incorporación en la solución.



Figura 4. Mortero

B) Tamizado de los medicamentos

Posterior a la trituración de los medicamentos se procede al tamizado de este con el fin de obtener un diámetro de partículas lo más pequeñas posible y de esta forma lograr una mejor homogenización de las soluciones preparadas, consiguiendo una mayor similitud a como encontramos estos productos en diluciones acuosas en el medio ambiente. En este caso para llevar a cabo el tamizado se utilizó un tamiz de 75 micras (Véase Figura 5).



Figura 5: Ejemplo de tamiz utilizado

3.3. Preparación de la mezcla.

A) Pesaje.

Una vez triturado y tamizado el medicamento se procede al pesaje con una balanza analítica (ver Figura 6), en la cual se pesó la cantidad del medicamento necesario para preparar la solución madre de cada medicamento. Para ello se determinó pesar 1.1mg para los 6 medicamentos, el cual permitió alcanzar concentraciones cercanas a las encontradas en el medio ambiente de estos medicamentos.



Figura 6. Balanza analítica.

B) Preparación de la solución.

Para la preparación de la solución se empleó agua HPLC para disolver cada fármaco, asegurando la ausencia de otras sustancias que pudieran interferir con la integridad de la muestra. Una vez incorporado el medicamento al agua, se agitó la solución hasta alcanzar su completa disolución.

La solución madre se preparó con una concentración de 0.011 g/L y, a partir de esta, se elaboraron 5 diluciones (Tabla 4) que permitieron un que el modelo de CNN tuviera un rango de aprendizaje cercano al que se reporta en condiciones reales. La metodología para preparar estas diluciones fue mediante una proporción de 1/100, consistiendo en diluir 1 mL de la solución más concentrada en 100 mL de agua HPLC para obtener diluciones de 100 mL.

Tabla 4. Concentraciones preparadas de los medicamentos analizados.

Diluciones	Concentraciones
Solución madre	0.011 g/L
Primera dilución	0.00011 g/L
Segunda dilución	0.0000011 g/L



Tercera dilución	0.000000011 g/L
Cuarta dilución	0.00000000011 g/L
Quinta dilución	0.0000000000011 g/L

Para calcular la concentración de la solución madre se utilizó Ecuación 1 :

$$C = \frac{m}{V} \quad \text{Ecuación 1}$$

Donde:

C es la concentración (en g/mL o g/L).

m es la masa del soluto (en este caso, 0.0011 g).

V es el volumen de la solución (en este caso, 100 mL).

Sustituyendo en la ecuación 1:

$$C = \frac{0.0011 \text{ g}}{100 \text{ mL}} = 0.000011 \frac{\text{g}}{\text{mL}} \text{ o } 0.011 \frac{\text{g}}{\text{L}}$$

Para llevar a cabo el cálculo de las 5 diluciones estudiadas, se utilizó la formula de dilución (Ecuación 2) :

$$C_1 * V_1 = C_2 * V_2 \quad \text{Ecuación 2}$$

Despejando la ecuación 2 para calcular C₂:

$$C_2 = \frac{C_1 * V_1}{V_2}$$

Solución madre:



Concentración inicial (C1): 0,011 g/L

Volumen tomado (V1): 1 mL (0,001 L)

Volumen total (V2): 100 ml (0,1 L)

Primera dilución:

Concentración inicial (C1): 0,011 g/L

$$C_2 = \frac{C_1 + V_1}{V_2} = \frac{0.011 \frac{g}{L} + 0.001L}{0.1L} = 0.00011 \frac{g}{L}$$

Segunda dilución:

Concentración inicial (C1): 0,00011 g/L

$$C_2 = \frac{C_1 + V_1}{V_2} = \frac{0.00011 \frac{g}{L} + 0.001L}{0.1L} = 0.0000011 \frac{g}{L}$$

Tercera dilución:

Concentración inicial (C1): 0,0000011 g/L

$$C_2 = \frac{C_1 + V_1}{V_2} = \frac{0.0000011 \frac{g}{L} + 0.001L}{0.1L} = 0.000000011 \frac{g}{L}$$

Cuarta dilución:

Concentración inicial (C1): 0,000000011 g/L

$$C_2 = \frac{C_1 + V_1}{V_2} = \frac{0.000000011 \frac{g}{L} + 0.001L}{0.1L} = 0.00000000011 \frac{g}{L}$$

Quinta dilución:

Concentración inicial (C1): 0,00000000011 g/L

$$C_2 = \frac{C_1 + V_1}{V_2} = \frac{0.00000000011 \frac{g}{L} + 0.001L}{0.1L} = 0.0000000000011 \frac{g}{L}$$

C) Almacenamiento de la muestra.

Una vez preparadas las soluciones, se procedió a rotularlas de manera clara y legible, indicando la fecha, el tipo de fármaco y su concentración. Las mezclas preparadas se almacenaron en refrigeración y en ausencia de luz, para evitar la degradación de los compuestos farmacéuticos en disolución. Las diluciones de cada medicamento se preparan justo antes de capturar las imágenes correspondientes.

3.4. Toma de imágenes.

A través del sistema óptico que se muestra en la Figura 7, que incluye la fuente de iluminación, la cámara y el tipo particular de lente, se capturaron imágenes de las muestras previamente preparadas. La nitidez y calidad de dichas imágenes resultan fundamentales para conseguir resultados satisfactorios en el posterior análisis.

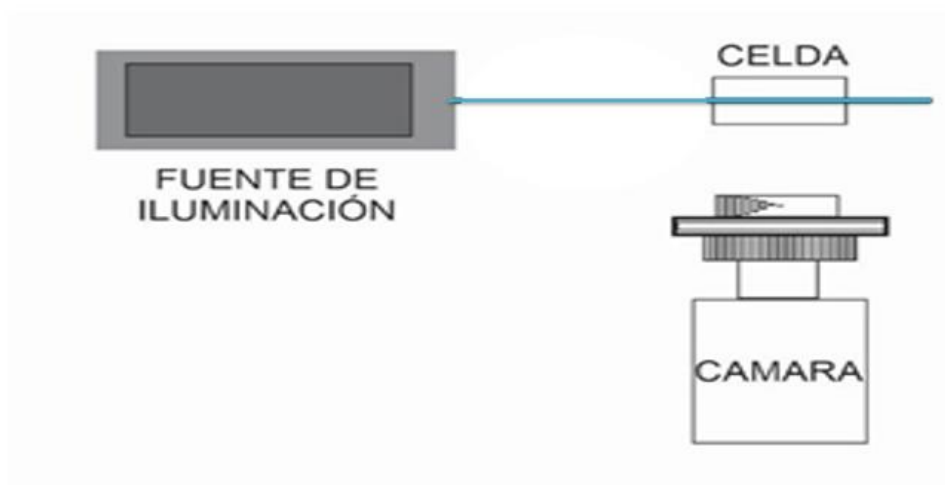


Figura 7. Sistema óptico.



A través del sistema óptico se capturaron imágenes siguiendo el protocolo siguiente:

Inicialmente, se tomaron 3000 imágenes por cada concentración de los medicamentos y 3000 imágenes de agua HPLC (concentración cero). Las imágenes de cada medicamento se obtuvieron el mismo día, variando únicamente la concentración. Dado que se evaluaron cinco concentraciones por medicamento, y de cada concentración se obtuvieron 3,000 imágenes, esto resultó en un total de 15,000 imágenes por medicamento. Por otro lado, al analizarse seis medicamentos, se generaron 18,000 imágenes por cada concentración evaluada.

Estas variaciones en las capturas permitieron obtener un amplio rango de datos, lo cual permitió un mejor entrenamiento y desempeño de la red neuronal utilizada en el análisis.

3.5. Procesamiento de las imágenes.

El procesamiento de las imágenes se realizó de la siguiente manera:

Primero, cada imagen fue recortada en la región de interés, asegurando que la información relevante para el estudio esté bien destacada. A continuación, los archivos fueron renombrados de manera sistemática para facilitar su organización y una identificación más eficiente.

Luego, las imágenes se redimensionaron a una resolución estándar de 150x150 píxeles, lo que permitió mantener la uniformidad necesaria para el análisis y el entrenamiento de los modelos. Posteriormente, se aplicó un proceso de aleatorización, para garantizar una distribución aleatoria de las imágenes dentro de sus respectivas categorías, minimizando cualquier sesgo que pudiera influir en los resultados.

Finalmente, las imágenes se dividieron en tres conjuntos: entrenamiento, validación y prueba. Para llevar a cabo el procesamiento de las imágenes se tomó una muestra representativa de 4000



imágenes por conjunto de imágenes que se quisieran estudiar, dentro de las cuales, 2000 fueron para entrenamiento, 1000 para validación y 1000 para prueba (estimación). Estas imágenes se distribuyeron en 4 modelos de entrenamiento diferentes como se muestran en la Tabla 5 para finalmente utilizar en que mejores resultados arrojará.

Tabla 5. Orden para selección de imágenes de entrenamiento, validación y prueba.

Modelo de entrenamiento	50%		50%	
1	Entrenamiento 2000 imágenes		Prueba 1000 imágenes	Validación 1000 imágenes
2	Entrenamiento 2000 imágenes		Validación 1000 imágenes	Prueba 1000 imágenes
3	Prueba 1000 imágenes	Validación 1000 imágenes	Entrenamiento 2000 imágenes	
4	Validación 1000 imágenes	Prueba 1000 imágenes	Entrenamiento 2000 imágenes	

CAPÍTULO 4: Resultados y discusión.

4.1 Imágenes de las muestras de medicamentos.

El sistema óptico utilizado nos permitió visualizar las micropartículas en agua de las diferentes diluciones de medicamentos como se puede observar en la muestra de imágenes de la Figura 8, lo cual contribuye al procesamiento de las imágenes con la red neuronal y de esta forma ser más eficiente en las tareas asignadas.

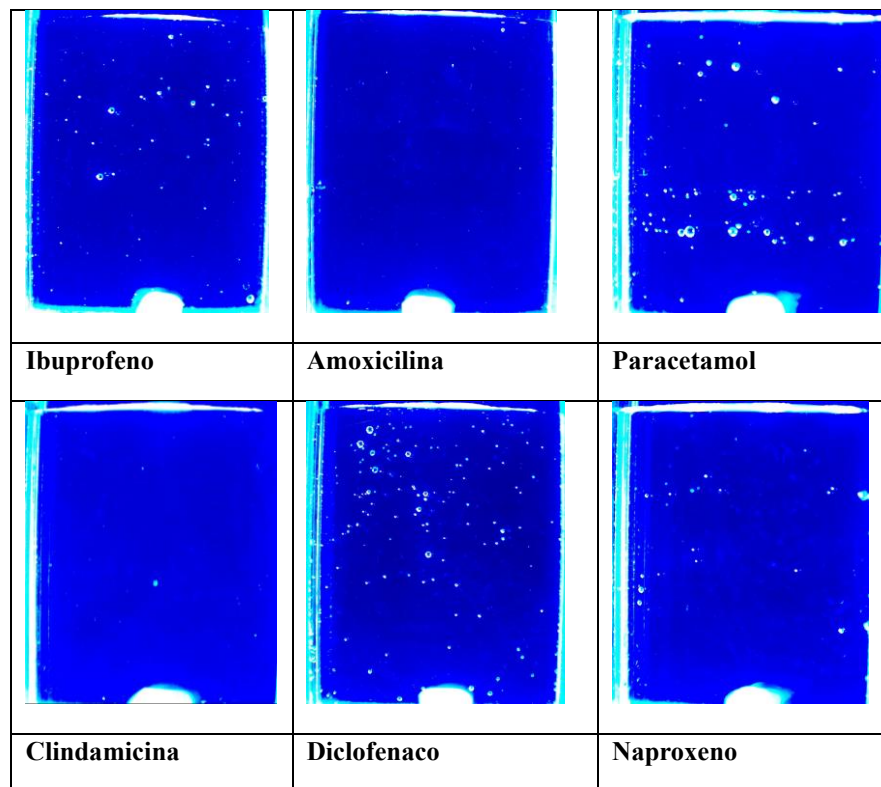


Figura 8: Muestra de imágenes de los diferentes medicamentos en dilución.

4.2. Entrenamiento y validación de la CNN.

Para la cuantificación global de medicamentos en muestras de agua se llevaron a cabo cuatro experimentos de entrenamiento variando la distribución de los datos. Inicialmente se analizaron los datos para la cuantificación de medicamentos en muestras de agua (Figura 9), obteniendo un accuracy promedio de 0.986729 con una desviación estándar de ± 0.10323 y el segundo que se realizó fue para la detección y diferenciación de medicamentos en muestras de agua (Figura 10), donde se obtuvo una accuracy promedio de 0.983625 y una desviación estándar: ± 0.07284

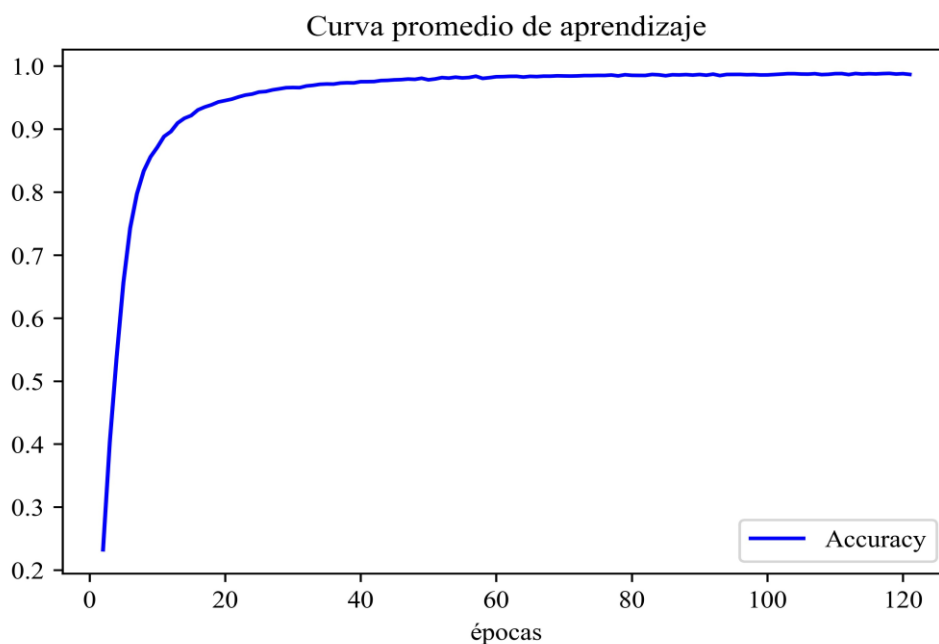


Figura 9: Curva de Accuracy promedio de los 4 modelos de entrenamiento de la CNN para la cuantificación de medicamentos en muestras de agua.

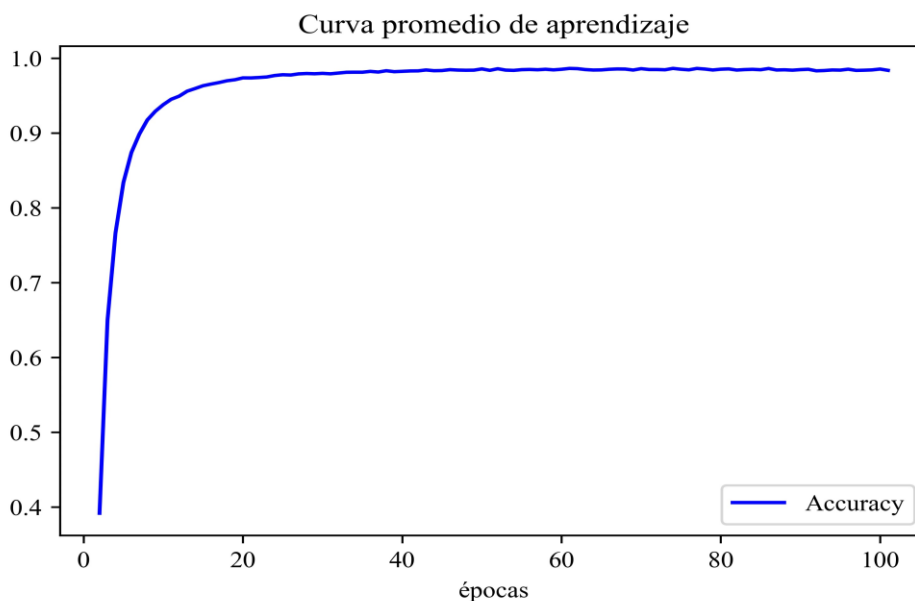


Figura 10: Curva de Accuracy promedio de los 4 modelos de entrenamiento de la CNN para la detección y diferenciación de medicamentos en muestras de agua.

El modelo que resultó el más eficiente y confiable en ambos casos fue el modelo 4 de la Tabla 5, logrando un equilibrio óptimo entre las fases de entrenamiento, validación y prueba (50%, 25% y 25%, respectivamente).

Luego de ser determinado el modelo de mayor accuracy se procede a la validación del sistema. Primero, se validó el sistema para la cuantificación de los diferentes medicamentos como se muestra en la Figura 11. En esta se puede observar el crecimiento progresivo de la curva de accuracy del entrenamiento y validación con tendencia a 1 incrementando estabilidad a medida que aumentan las iteraciones (epochs), obteniéndose una accuracy del modelo de 0.98971426.

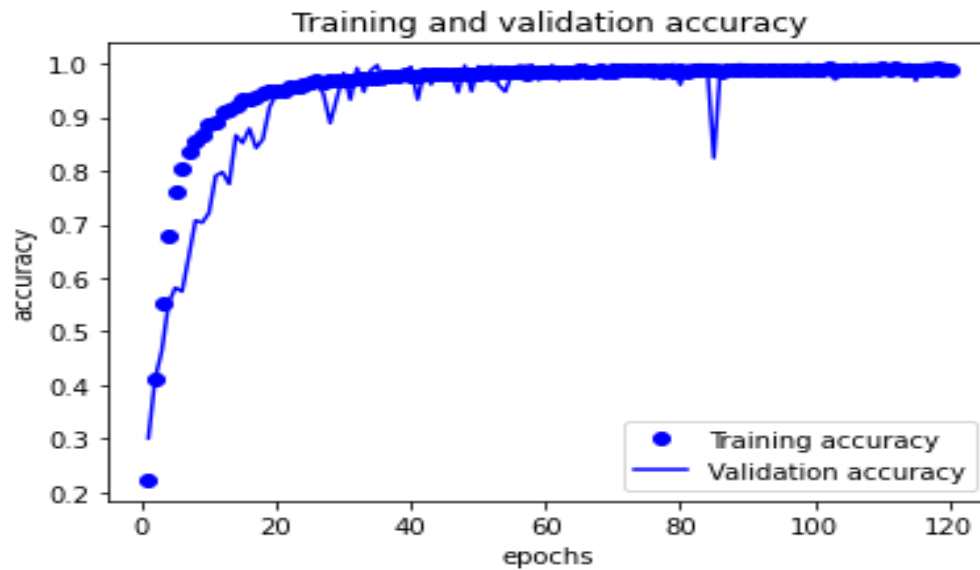


Figura 11: Curva de Accuracy del entrenamiento y validación de la CNN para la cuantificación de medicamentos en muestras de agua.

Posterior al procesamiento de las imágenes para la cuantificación, se realizó la validación de la CNN para la diferenciación de los medicamentos en muestras de agua, Figura 12. En esta se puede observar un crecimiento exponencial con tendencia a 1, donde pese a las fluctuaciones se mantiene la tendencia, estas de igual forma van disminuyendo a medida que aumenta el número de iteraciones (epochs) para finalmente obtener un accuracy de 0.98971426.

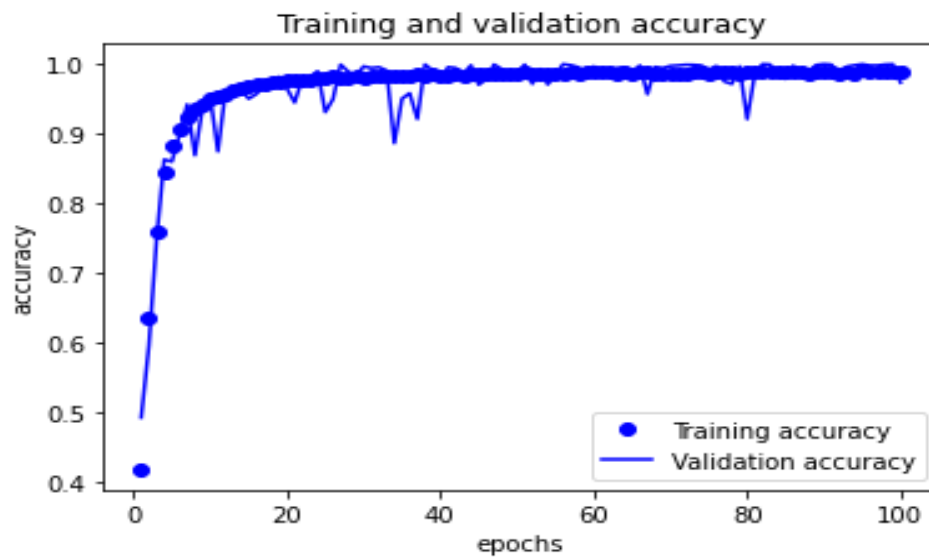


Figura 12: Curva de Accuracy del entrenamiento y validación de la CNN para la diferenciación de medicamentos en muestras de agua.

4.3. Confiabilidad de estimación de la CNN

El modelo de CNN tuvo una capacidad de estimación promedio de 99.61% para la cuantificación de medicamentos en muestras de agua. Esta evaluación se llevó a cabo a partir de imágenes no vistas previamente por el sistema, donde los resultados varían entre 98.9% y 100% dependiendo de la concentración como se puede observar en la Tabla 6.

Tabla 6. Nivel de confianza de estimación promedio para cuantificación de medicamento en agua.

Concentración real	Concentración promedio estimada	Nivel de confianza promedio
0.0011 g/L	0.00109g/L	99.09%
0.000011 g/L	0.0000111 g/L	100%
0.00000011 g/L	0.000000108 g/L	98.9%
0.0000000011 g/L	0.00000000109 g/L	99.8%
0.000000000011 g/L	0.0000000000109 g/L	99.9%
0.00 g/L	0.00 g/L	100%
Promedio de nivel de confianza		99.61%

En el anexo 1 se muestra las gráficas de estimación que ilustran los resultados obtenidos en la cuantificación de medicamentos en agua, donde se puede observar en detalle las fluctuaciones y variaciones específicas asociadas a cada concentración analizada.

Por otro lado, el modelo de redes neuronales convolucionales (CNN) demostró una capacidad promedio de 96.85% para la diferenciación y detección de medicamentos en muestras de agua. Esta evaluación se llevó a cabo a partir de imágenes no vistas previamente por la CNN, donde los resultados varían entre el 82% y el 100% dependiendo del compuesto evaluado como se puede observar en la Tabla 7.

Tabla 7. Nivel de confianza de estimación promedio para la diferenciación y detección de medicamentos en agua.

Medicamentos	Nivel de confianza promedio
Agua HPLC	100.0%
Amoxicilina	82.4265%
Clindamicina	99.3456%
Diclofenaco	99.345003%
Naproxeno	99.9978%
Paracetamol	100.0%
Promedio de nivel de confianza:	96.85%

El anexo 2 presenta las gráficas de estimación que ilustran los resultados obtenidos en la diferenciación y detección de medicamentos en agua. Estas gráficas permiten observar en detalle las fluctuaciones y variaciones específicas asociadas a cada compuesto analizado.

4.4. Error promedio.

De los resultados obtenidos previamente, se determinó el error de estimación promedio del sistema CNN para la cuantificación de medicamentos, tal como se detalla en la Tabla 8. Asimismo, en la Tabla 9 se presenta el error promedio en la diferenciación y detección de medicamentos en muestras de agua.

Tabla 8. Error de estimación promedio para cuantificación de medicamento en agua.

Concentración real	Concentración promedio estimada	Error de estimación	Porcentaje de error
0.0011 g/L	0.00109 g/L	0.00001 g/L	0.2 %
0.000011 g/L	0.0000111 g/L	0 g/L	0 %
0.00000011 g/L	0.000000108 g/L	1.2E-09 g/L	1.1 %
0.0000000011 g/L	0.00000000109 g/L	2E-12 g/L	0.2 %
0.000000000011 g/L	0.0000000000109 g/L	1E-14 g/L	0.1%
0.00 g/L	0.00 g/L	0 g/L	0 %
	Promedio	2.00024E-06 g/L	0.26 %

Tabla 9. Error de estimación promedio para para la diferenciación y detección de medicamentos en agua.

Compuesto bajo prueba	Nivel de confianza promedio	Error de estimación
Agua HPLC	100.0%	0 %
Amoxicilina	82.42%	17.58 %
Clindamicina	99.34%	0.66 %
Diclofenaco	99.34%	0.66 %
Naproxeno	99.99%	0.01 %
Paracetamol	100.0%	0 %
Promedio	96.85%	3.15 %



Con base en los resultados anteriores, se puede constatar que el sistema presentó un menor error en la cuantificación de medicamentos. Si bien la red CNN obtuvo buenos resultados en la detección y diferenciación de los fármacos, en el caso de la amoxicilina se observó un mayor margen de error, lo que incrementó el error promedio en las tareas de detección y diferenciación.



CONCLUSIONES

El sistema óptico empleado es eficaz para la visualización de las partículas de fármacos disueltas en agua, lo cual es fundamental, ya que demuestra que las técnicas ópticas pueden ser una herramienta valiosa para el análisis de farmacéuticos en medios acuosos, proporcionando una manera precisa y no invasiva de observar la distribución de las partículas de los medicamentos en las soluciones.

Los resultados obtenidos durante el entrenamiento reflejan un buen desempeño del modelo, evidenciado por las altas métricas de desempeño alcanzadas. Esto sugiere que el proceso de entrenamiento fue efectivo, logrando que el modelo identifique patrones relevantes en los datos.

Por otro lado, los resultados demuestran la capacidad y eficacia del modelo de redes CNN para la cuantificación de medicamentos en muestras de agua no vistas previamente donde el modelo alcanzó una accuracy promedio del 99.61%, con niveles de confianza que variaron entre 98,9% y 100%, dependiendo de la concentración del compuesto. El modelo logró mantener un alto nivel de exactitud muy cercano al 100%, obteniéndose un error promedio de estimación de 0.26%.

En cuanto a la capacidad de detectar y diferenciar medicamentos en muestras de agua el modelo de CNN demostró que es capaz de desarrollar esta tarea ya que se obtuvo un nivel de estimación promedio global del 96,85% y un error de estimación de 3.15% en la etapa de prueba. Sin embargo, el desempeño del modelo en esta etapa resalta que la Amoxicilina es el compuesto con mayor dificultad para ser detectado y diferenciado. Esto podría deberse a la menor presencia de aditivos, residuos o características distintivas en su composición cuando se encuentra en solución acuosa, lo que limita la cantidad de información disponible para su identificación.

El modelo de CNN resultó más eficiente para cuantificar medicamentos en muestras de agua ya que fue un 2.76% más eficiente para esta tarea que para detectar y diferenciar medicamentos en muestras de agua.



Los resultados obtenidos en este proyecto evidencian la efectividad de la herramienta basada en CNN para el monitoreo de fármacos en el agua. Si bien cada medicamento presenta características únicas, lo que implica la necesidad de ampliar la base de datos y entrenar el modelo con una mayor diversidad de compuestos para cubrir un espectro más amplio de posibles contaminantes, la experiencia adquirida demuestra claramente el potencial de esta tecnología.

La CNN desarrollada no solo ha demostrado capacidad para detectar la presencia de determinados fármacos con alta precisión, sino que también establece un punto de partida sólido para futuras mejoras y adaptaciones. Con una estrategia de entrenamiento continuo y la inclusión de nuevos fármacos, el sistema podría evolucionar hasta convertirse en una herramienta de vigilancia ambiental más completa y robusta, capaz de cuantificar y clasificar una gran variedad de sustancias.

La implementación de este modelo de CNN facilitaría el trabajo de monitoreo y control de la contaminación farmacéutica, contribuyendo de manera significativa a la protección de la salud pública y la conservación de los ecosistemas acuáticos. A largo plazo, este enfoque innovador podría complementar e incluso optimizar los métodos tradicionales de análisis, haciendo más eficiente la gestión de recursos hídricos y la respuesta ante riesgos ambientales. Este proyecto demostró la importancia de utilizar herramientas tecnológicas avanzadas para enfrentar problemas ambientales, mostrando que la inteligencia artificial puede ser una solución eficaz para detectar medicamentos en diluciones acuosa con precisión y rapidez.



REFERENCIAS

- [1] F. p. l. c. y. e. ambiental, «Contaminación del agua,» [En línea]. Available: <https://agua.org.mx/contaminacion-del-agua/>. [Último acceso: 2025 1 10].
- [2] C. Nunez, «National Geographics,» 25 de abril de 2024.. [En línea]. Available: <https://www.nationalgeographic.es/medio-ambiente/contaminacion-del-agua>. [Último acceso: 10 enero 2025].
- [3] S. Rhoton, «Contaminación del agua,» Significados.com, [En línea]. Available: <https://www.significados.com/contaminacion-del-agua/> . [Último acceso: 10 de enero de 2025].
- [4] «Postigo, C., Moreno-Merino, L., López-García, E., López-Martínez, J., López de Alda, M. 2023. Human footprint on the water quality from the northern Antarctic Peninsula region. Journal of Hazardous Materials 453, 131394. doi: 10.1016/j.jhazmat.2023.131394,» [En línea].
- [5] «Redacción EFEverde,» Contaminación química: Detectan 59 sustancias químicas en zonas de alto valor ecológico, 6 de mayo, 2022. [En línea]. Available: <https://efeverde.com/sustancias-quimicas-zonas-alto-valor-ecologico/>. [Último acceso: 10 de enero 2025].
- [6] «Reacciones: Un estudio advierte sobre la contaminación por PFAS en los sistemas hídricos mundiales,» SMC España, 08 de abril de 2024. [En línea]. Available: <https://sciencemediacentre.es/en/reactions-study-warns-pfas-contamination-global-water-systems>. [Último acceso: 10 de enero de 2025].
- [7] B. N. Mundo, «"Las consecuencias del cambio climático son irreversibles", alerta la ONU en el informe más completo hasta la fecha,» 9 agosto 2021. [En línea]. Available: <https://www.bbc.com/mundo/noticias-58143985>. [Último acceso: 10 enero 2024].
- [8] Pire, «La contaminación del agua,» *La contaminación*, 3 diciembre 2019.
- [9] H. Wiere, «Contaminantes que Alteran la Calidad del Agua: Un Análisis Detallado de Su Impacto y Soluciones,» Instituto del agua, [En línea]. Available:



<https://institutodelagua.es/calidad-del-agua/contaminantes-que-alteran-o-modifican-la-calidad-del-aguacalidad-del-agua/>.

- [10] F. Aquae, «Los 8 principales contaminantes del agua,» 16/11/2021. [En línea]. Available: <https://www.fundacionaquae.org/wiki/los-residuos-que-mas-contaminan-el-agua/>.
- [11] R. B. R. A. S.-V. y J. A. G. S. E. Pabón, «Contaminación del agua por metales pesados, métodos de análisis y tecnologías de remoción. Una revisión,» *Entre Ciencia e Ingeniería*, vol. 14, nº 27, 2020.».
- [12] A. F. G. F. N. C. A. M. Grover Castañeta, «Microplastics: a contaminant that grows in all environmental areas, its characteristics and possible risks to public health from exposure,» *Revista Boliviana de Química*, vol. 37, nº 3, 2020.».
- [13] E. Q. Candelaria Tejada, «Emerging contaminants in water: pharmaceutical residues. a review.,» *Facultad de ciencias básicas*, ISSN 1900-4699, Volumen 10, Número 1, Páginas 80-101, 2014.
- [14] C. J. Cartagena, «Contaminantes orgánicos emergentes en el ambiente: productos farmaceuticos,» *Revista Lasallista de Investigación*, p. vol.8 no.2 , 2011.
- [15] Z. Keita, «Introducción a las redes neuronales convolucionales (CNN),» *Datacamp*, 15 abr 2024.
- [16] T. a. d. B. A. B. Frank-Andreas Weber, «Fármacos en el medio ambiente - la perspectiva global,» *German Environment Agency*, 2014.
- [17] «Medición y monitorización de materia orgánica en agua potable,» 12 09 2016. [En línea]. Available: <https://www.interempresas.net/Quimica/Articulos/160098-Medicion-y-monitorizacion-de-materia-organica-en-agua-potable.html>.
- [18] E. Hilmas, «Medicamentos: qué son y para qué sirven,» Nemours KidsHealth, 2018.



- [19] <https://www.farmaceuticonline.com/es/medicamento-que-es/>, «Qué es un medicamento,» Centre Informació del Medicament.
- [20] A. M. S. M. J. Gil, «Contaminantes emergentes en aguas, efectos y posibles tratamientos,» *Produccion + Limpia*, vol. 17, nº 2, 2012.
- [21] J. M. M.-N. J. K.-J. L. A. V. C. Moreno-Ortiz, «Los medicamentos de receta de origen sintético y su impacto en el medio ambiente,» *Rx synthetic medicines and their environmental impact*, vol. 44, nº 4, 2013.
- [22] «¿Qué es un excipiente?,» engenerico, <https://www.engenerico.com/que-es-un-excipiente/>, 2013.
- [23] I. A. M. A. I. A. José Ramón Agirrezabala, «Excipientes:¿sustancias inertes?,» *farmakoterapia informazioa información farmacoterapéutica*, vol. 27, nº 3, 2019.
- [24] «Ficha tecnica paracetamol normon 500 mg comprimidos EFG,» Agencia española de medicamentos y productos sanitarios CIMA, https://cima.aemps.es/cima/dochtml/ft/68330/FichaTecnica_68330.html, 2022.
- [25] «Ficha tecnica Naproxeno sodico tad 550 mg comprimidos,» Agencia española de medicametos y productos sanitarios CIMA, https://cima.aemps.es/cima/dochtml/ft/82949/FT_82949.ht, 2024.
- [26] «Ficha tecnica Ibuprofeno,» Agencia española de medicamentos y productos sanitarios CIMA, 2024.
- [27] «Ficha tecnica Diclofenaco,» Agencia española de medicamentos y productos sanitarios CIMA, https://cima.aemps.es/cima/dochtml/ft/62439/FichaTecnica_62439.html, 2023.
- [28] «Ficha tecnica Clindamicina,» Agencia española de medicamentos y productos sanitarios, https://cima.aemps.es/cima/dochtml/ft/63667/FT_63667.html, 2021.



- [29] «Ficha tecnica Amoxicilina,» Agencia española de medicamentos y productos sanitarios CIMA, https://cima.aemps.es/cima/dochtml/ft/64388/FichaTecnica_64388.htm, 2023.
- [30] E. M. Bernhardt:, «Agua medicada: el consumo moderno de fármacos se convierte en un desafío ambiental,» nº <https://www.unep.org/es/noticias-y-reportajes/reportajes/agua-medicada-el-consumo-moderno-de-farmacos-se-convierte-en-un>, 06 AUG 2018.
- [31] C. R. Alvariño, «Los residuos en la industria farmacéutica,» *Revista CENIC Ciencias Biológicas*, vol. 37, nº 1, 2006.
- [32] A. C. & L. Marcano, «Presencia y eliminación de compuestos farmacéuticos en plantas de tratamientos de aguas residuales. Revisión a nivel mundial y perspectiva nacional,» *Boletín de Malariología y Salud Ambiental*, vol. 55, nº 1, 2015.
- [33] M. I. B.-M. M. A. L.-L. Lucila I. Castro-Pastrana, «Ecopharmacovigilance in Mexico: prospects of its implementation,» *Revista Mexicana de Ciencias Farmacéuticas*, vol. 46, nº 3, pp. 16-40, 2015.
- [34] M. Langford, «The guide for aspiring photographers,» *Langford's Advanced Photography*, vol. 9th ed. , 2019..
- [35] H. K. J. K. a. S. L. S. H. Song, « Design and implementation of a high-performance network camera for web-based services,» *Multimedia Tools and Applications*., 2018.
- [36] C. Neumann, «Development in illumination optics,» *Advanced Optical Technologies*, 2016.
- [37] V. H. F. RUGELES, «LED lighting Applications,» *Scientia et Technica Año XVI. Universidad Tecnológica de Pereira.*, Vols. %1 de %2 ISSN 0122-1701, nº 45, pp. 13-18, Agosto de 2010.
- [38] O. P. A. G. V. H.E. Ibarra Villalóna, «El camino hacia la luz láser,» *Revista mexicana de física E*, vol. vol.64 , nº no.2, jul./dic. 2018.
- [39] M. C. B. J. I. M. Mateo Wilkinson, «Un sistema de cámara basado en Raspberry Pi y un procedimiento de procesamiento de imágenes para un monitoreo de bajo costo y a largo



plazo de la dinámica del dosel forestal,» *Methods in Ecology and Evolu*, vol. 12, p. 1316–1322, 2021.

[40] A. Sanchez-Riofrio, «La inteligencia artificial,» *Universidad de Especialidades Espiritu Santo*, 2021.

[41] L. Rouhiainen, *La inteligencia artificial: 101 cosas que debes saber hoy sobre nuestro futuro*, España: Editorial Planeta, S.A., 2018, 2018.

[42] J. M. F. F. Raquel Flórez López, *Las Redes Neuronales Artificiales*, Netbiblo, 2008.

[43] M. Sotaquirá, «¿Que es una red neuronal?,» Septiembre 3, 2018.

[44] C. D. J. Á. F. Manlio Massiris, «Detección de equipos de protección personal mediante red neuronal convolucional YOLO,» *Actas de las XXXIX Jornadas de Automática*, 2018.

[45] Y. B. G. H. Yann Lecun, «Deep learning,» *Nature*, vol. 521, nº 7553, pp. 436-444., 2015.

[46] E. M. M. L. A. S. S. Adriana Cifuentes, «Desarrollo de una red neuronal convolucional para reconocer patrones en imágenes,» *Universidad Simón Bolívar, Barranquilla-Colombia*, 19 julio 2019.

[47] C. A. R. H. Federico Lubinus Badillo, «Convolutional neural networks, a model for deep learning in diagnostic imaging. A topic review,» pp. Colomb. Radiol. 2021; 32(3): 5591-9.

[48] G. Roffo, «Ranking to Learn and Learning to Rank: On the Role of Ranking in Pattern Recognition.Applications,» *Thesis, Verona, May 25, 2017*.

[49] «Contaminación del agua por materia orgánica y microorganismos,» 2007. [En línea]. Available: <https://agua.org.mx>.

ANEXOS

Anexo 1: Gráficas de estimación para la cuantificación de medicamentos en agua.

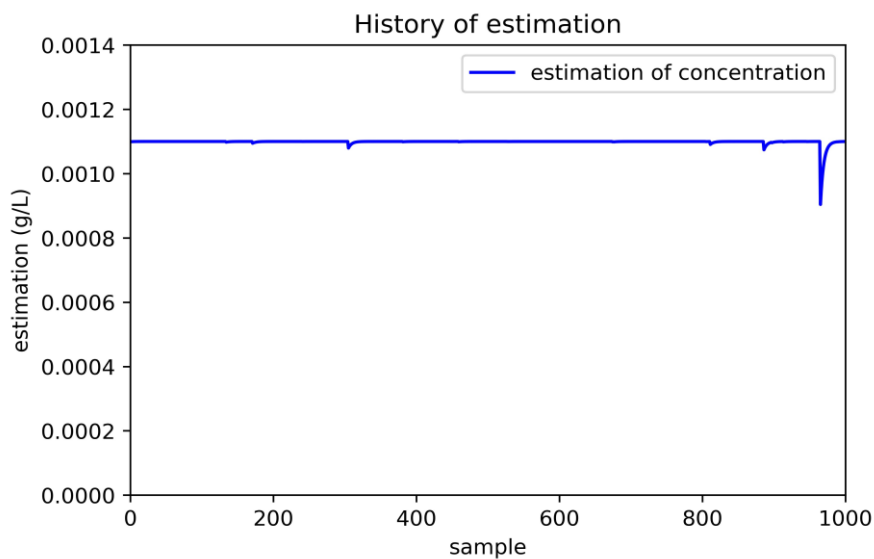


Figura 13: Gráfica de estimación para la concentración de 0.0011 g/L.

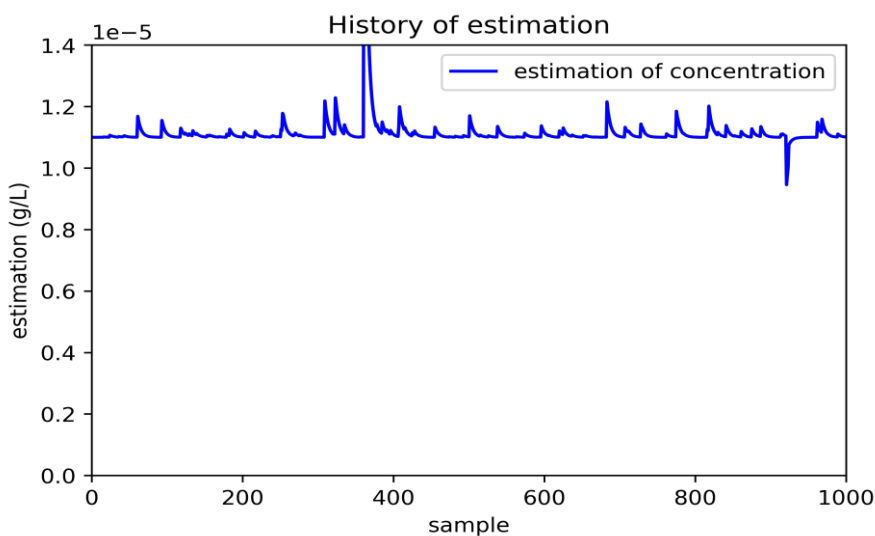


Figura 14: Gráfica de estimación para la concentración de 0.000011 g/L.

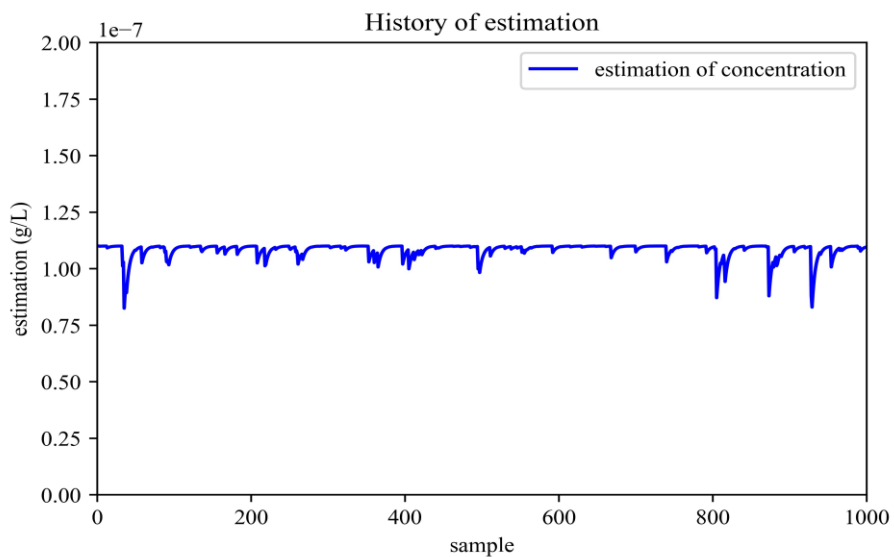


Figura 15: Gráfica de estimación para la concentración de 0.00000011 g/L .

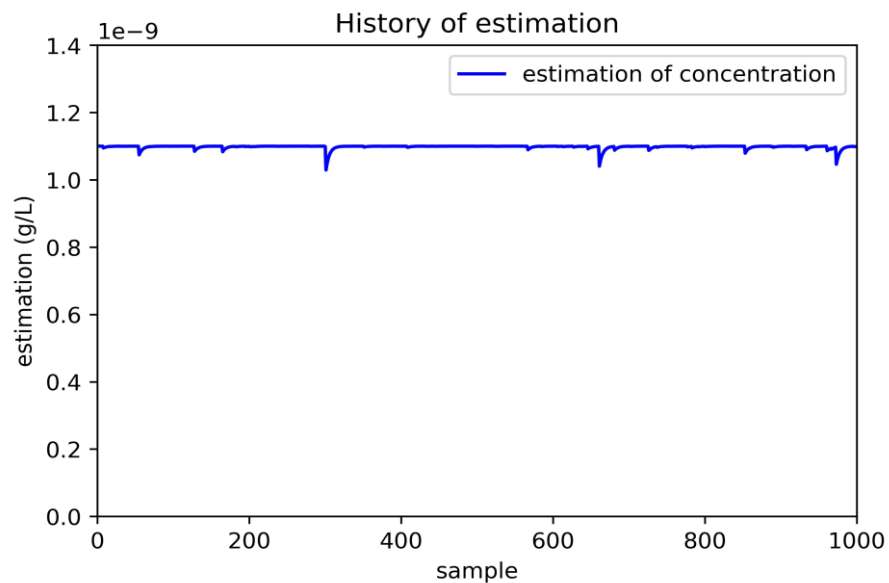


Figura 16: Gráfica de estimación para la concentración de 0.0000000011 g/L .

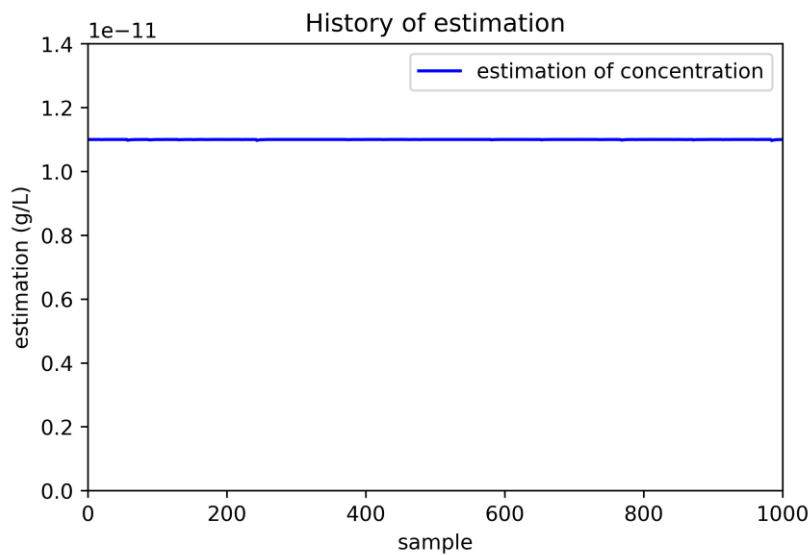


Figura 17: Gráfica de estimación para la concentración de 0.000000000011 g/L.

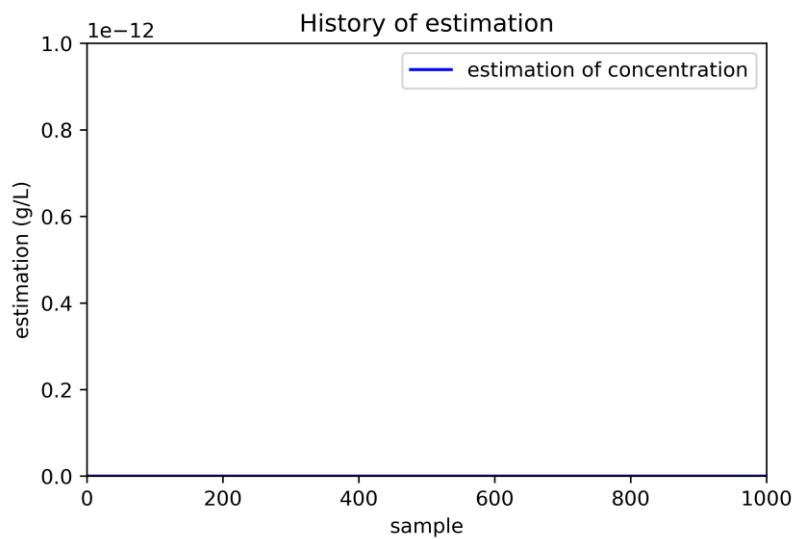


Figura 18: Gráfica de estimación para la concentración de 0.0 g/L.

Anexo 2: Gráficas de estimación de la diferenciación y detección de medicamentos en agua.

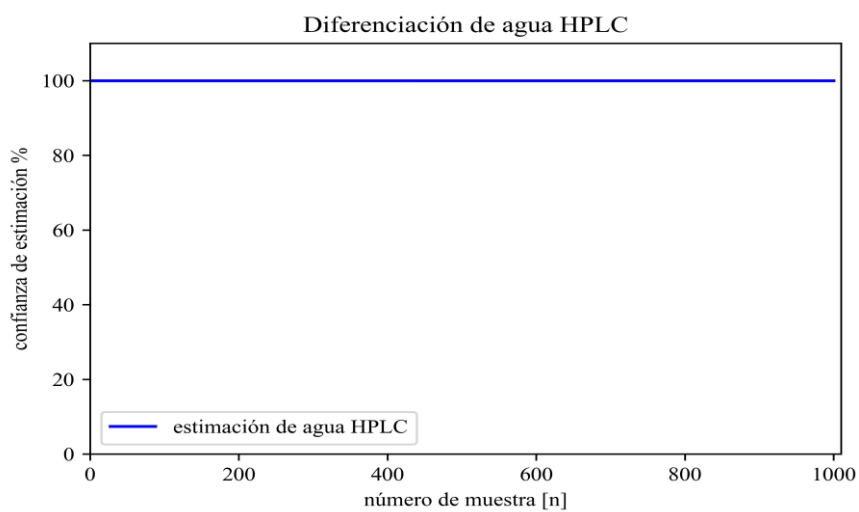


Figura 19: Gráfica de estimación para diferenciación de agua HPLC.

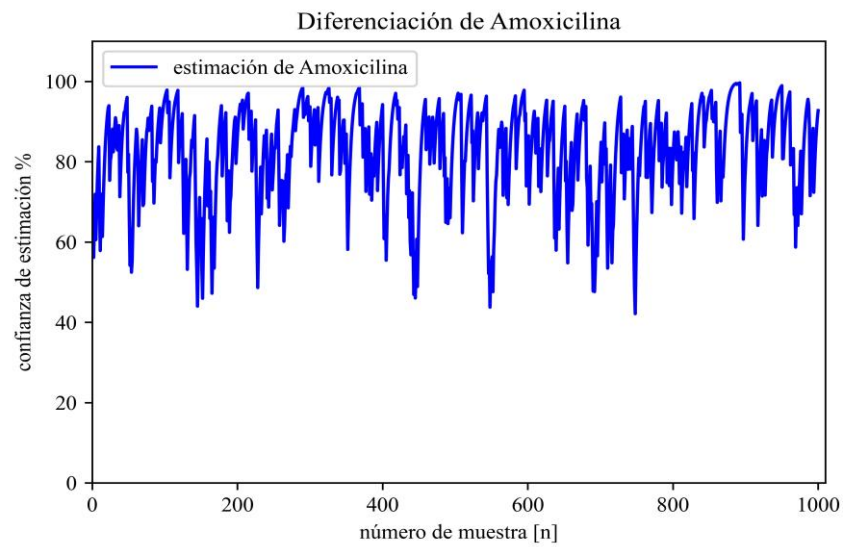


Figura 20: Gráfica de estimación para diferenciación de Amoxicilina

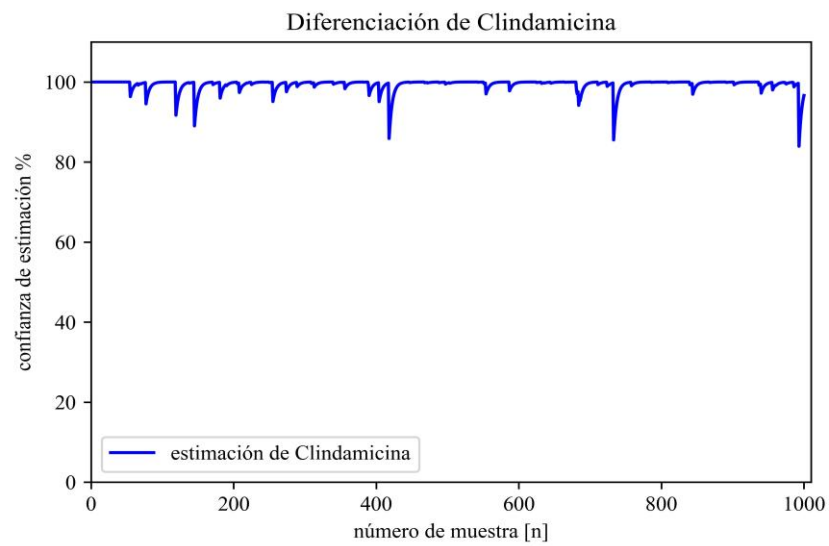


Figura 21: Gráfica de estimación para diferenciación de Clindamicina

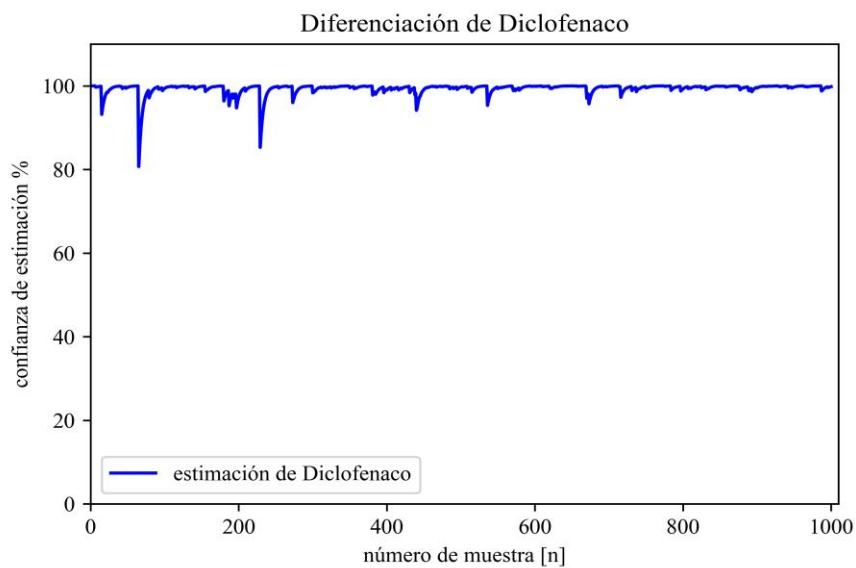


Figura 22: Gráfica de estimación para diferenciación de Diclofenaco

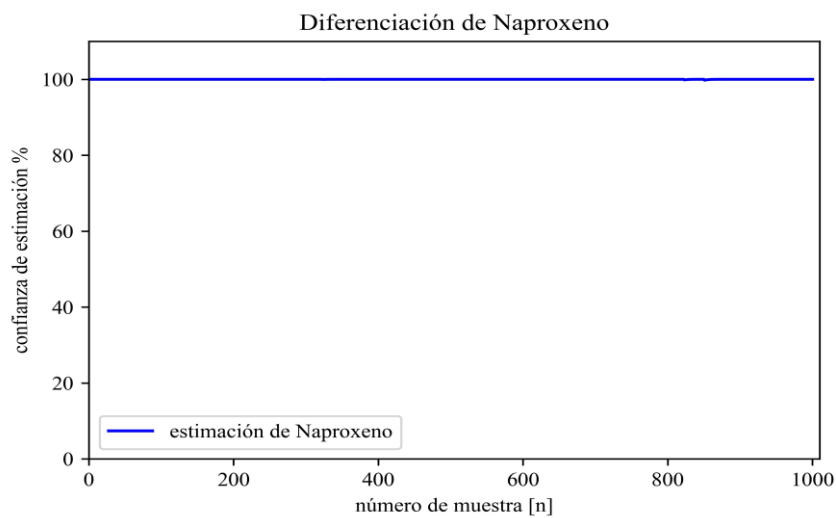


Figura 23: Gráfica de estimación para diferenciación de Naproxeno

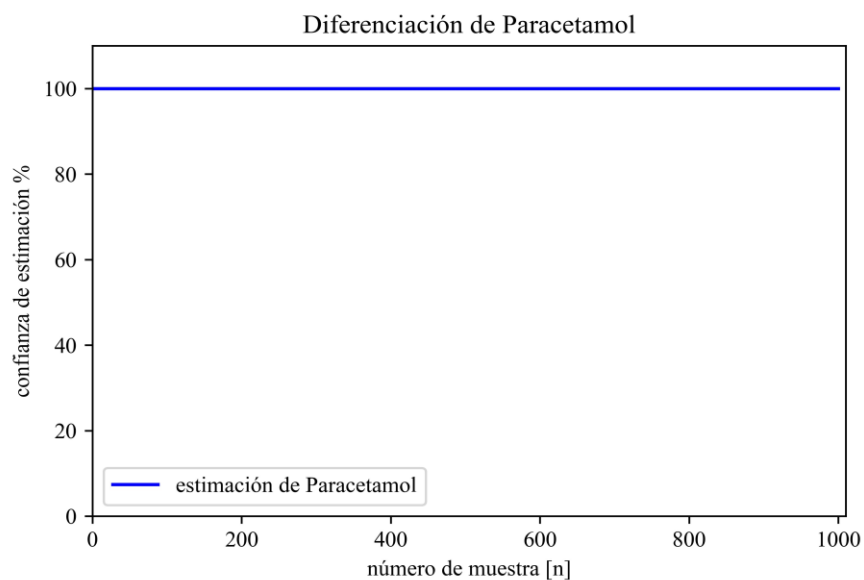


Figura 24: Gráfica de estimación para diferenciación de Paracetamol