

Espectroscopía en el Infrarrojo Cercano para la determinación de contaminantes Hídricos: “Revisión sistemática”

Valentina Gómez García

**Director (a)
Jhon Jairo Ríos Acevedo**

**Universidad Santiago de Cali
Facultad de Ciencias Básicas
Programa de Química
Cali, Colombia
2024**

Espectroscopía en el Infrarrojo Cercano para la determinación de contaminantes Hídricos: “Revisión sistemática”

Valentina Gómez García

Trabajo de grado presentado como requisito parcial para optar al título de Químico

**Director (a)
Jhon Jairo Ríos Acevedo**

Grupo de Investigación en Electroquímica y Medioambiente (GIEMA)

Línea de Investigación; Solución a problemas ambientales

ODS en el que se enmarca el trabajo de grado :

- **Agua limpia y saneamiento**
- **Educación de calidad**

**Universidad Santiago de Cali
Facultad de Ciencias Básicas
Programa de Química
Ciudad, Colombia
2024**

IMPACTOS

| IMPACTO | PRODUCTO | BENEFICIARIO(S) |
|-------------------------------|---|--|
| Económico | Reducción de costos en análisis químicos tradicionales | Empresas de tratamiento de agua, laboratorios |
| Responsabilidad social | Aumento de la confianza en la calidad del agua potable | Comunidades, gobiernos locales |
| Científico | Generación de nuevo conocimiento: Artículo de revisión Publicaciones y estudios sobre la precisión de NIRS en agua | Instituciones académicas, investigadores |
| Tecnológico | Desarrollo de software para análisis predictivo basado en NIRS | Empresas de tecnología, laboratorios de análisis |
| Técnico | Protocolos estandarizados para el uso de NIRS en agua | Técnicos, profesionales en calidad del agua |
| Ambiental | Monitoreo continuo y no invasivo de contaminantes en agua | Organizaciones ambientales, gobiernos, comunidades |
| Social | Formación de Talento humano Acceso a información en tiempo real sobre la calidad del agua | Tesisistas Ciudadanos, comunidades locales |

Espectroscopía en el Infrarrojo Cercano para la determinación de contaminantes Hídricos: “Revisión sistemática”

Valentina Gómez García (valentina.gomez00@usc.edu.co)
Jhon Jairo Rios Acevedo (jhon.rios04@usc.edu.co)

¹Grupo de Investigación **GIEMA**, Programa de Química. Facultad de Ciencias Básicas. Universidad Santiago de Cali. Campus Pampalinda Calle 5 # 62-00. Santiago de Cali. Colombia

RESUMEN

La espectroscopía en el infrarrojo cercano (NIRS) se posiciona como un método prometedor gracias a su capacidad para recolectar datos multiparamétricos de manera rápida y precisa. Sin embargo, a pesar del aumento en el desarrollo de métodos de identificación basados en NIRS, solo unos pocos han recibido aprobación por parte de las autoridades regulatorias. Esto podría deberse a las dificultades inherentes para documentar de manera clara y reproducible estos métodos en informes oficiales y auditorías.

La detección de agua en lagos presenta desafíos significativos debido a las altas concentraciones de materia orgánica, las cuales reducen considerablemente las señales de reflectancia en la parte visible del espectro (400-700 nm). De manera similar, en la detección de compuestos orgánicos, donde la reflectancia en la región visible es casi nula debido a la absorción, los picos en la región cercana al infrarrojo (710 nm y 810 nm) emergen como las principales señales detectables. Aunque el pico a 710 nm ha sido utilizado durante más de dos décadas para evaluar aguas eutróficas, investigaciones recientes han demostrado que el pico a 810 nm también es valioso para obtener datos sobre los componentes del agua en cuerpos hídricos aparentemente limpios. Esto es particularmente relevante en lagos donde el pico a 710 nm puede verse afectado por condiciones climáticas y atmosféricas. Estos hallazgos subrayan la importancia de adaptar y refinar los métodos de teledetección para mejorar la precisión en la caracterización de ambientes acuáticos complejos.

Palabras clave: Espectroscopía en el infrarrojo cercano (NIRS), métodos de identificación, teledetección, materia orgánica disuelta, reflectancia, picos espectrales, recursos hídricos.

Near-Infrared Spectroscopy for the Determination of Water Contaminants, Review Article: A Systematic Review

ABSTRACT

Near-infrared spectroscopy (NIRS) emerges as a promising method for large-scale tablet production due to its ability to collect multiparametric data quickly and accurately. However, despite the growing number of NIRS identification methods, only a few have been approved by regulatory authorities. This may be due to difficulties in clearly documenting these methods in official reports and audits.

In another context, remote sensing of lakes in boreal and Arctic regions faces challenges due to high concentrations of organic matter, which significantly reduce reflectance signals in the visible part of the spectrum (400-700 nm). Similarly, in detecting organic compounds where reflectance is nearly null in the visible range due to absorption, peaks in the near-infrared spectrum (710 nm and 810 nm) become the primary detectable signals. Although the 710 nm peak has been used for over two decades to assess eutrophic waters, it has been demonstrated that the 810 nm peak is also useful for obtaining data on water constituents in seemingly clean water bodies, especially in lakes where the 710 nm peak is still affected by climatic and atmospheric conditions. These findings underscore the importance of adapting remote sensing methods to improve accuracy in complex aquatic environments.

Keywords: *Near-infrared spectroscopy (NIRS), identification methods, regulatory approval, remote sensing, colored dissolved organic matter (CDOM), reflectance, spectral peaks, lakes.*

HIGHLIGHTS

1. Reducción en los costos de análisis de calidad del agua:

El uso de NIRS permitió una disminución significativa en los costos de laboratorio al reemplazar métodos tradicionales más costosos y laboriosos. Esto ha facilitado un monitoreo más amplio y frecuente de la calidad del agua en diversas regiones.

2. Implementación exitosa de un sistema de monitoreo en tiempo real:

La integración de tecnología NIRS en sistemas de monitoreo continuo permitió la detección instantánea de contaminantes en agua, mejorando la capacidad de respuesta ante posibles incidentes de contaminación y garantizando una mejor gestión de recursos hídricos.

3. Incremento en la precisión de la detección de contaminantes:

Comparado con técnicas convencionales, el NIRS demostró una mayor precisión en la identificación de contaminantes específicos como nitratos y fosfatos, lo que contribuyó a una evaluación más exacta de la calidad del agua y a la toma de decisiones más informadas. Estos resultados reflejan avances significativos en la eficiencia, precisión y costos asociados al monitoreo de la calidad del agua mediante la aplicación de NIRS.

1. INTRODUCCIÓN

El agua es uno de los recursos más cruciales del mundo, siendo un componente esencial para todas las formas de vida. Aunque el agua cubre el 70% de la superficie del planeta, solo el 3% es agua dulce, y dos tercios de esta están en forma de glaciares, lo que limita su disponibilidad para uso humano (Baggini, 2021). La escasez de agua y la degradación de su calidad representan desafíos significativos tanto para países desarrollados como para aquellos en desarrollo, con impactos negativos en el medio ambiente y la salud humana. Con el aumento de la población mundial, los recursos hídricos están expuestos a una variedad de contaminantes debido a actividades antropogénicas. El rápido desarrollo económico y la urbanización han exacerbado la contaminación del agua, constituyendo una amenaza importante para la salud pública y la estabilidad social. Por lo tanto, Zhou 2021 subraya la importancia de una monitorización precisa y rápida de la calidad del agua. La tecnología de análisis espectral, como una herramienta de detección eficiente, no destructiva y respetuosa con el medio ambiente, resulta especialmente útil para el análisis cualitativo y la detección cuantitativa de contaminantes en el agua (Zhou, 2021).

El control de la calidad del agua es crucial para garantizar la seguridad de los ecosistemas, la salud pública, la agricultura y la industria. Aunque técnicas convencionales como la cromatografía y la espectroscopía de absorción atómica son efectivas, a menudo requieren preparación de muestras, son costosas y demandan tiempo. En contraste, la espectroscopía de infrarrojo cercano (NIRS) destaca por su capacidad para proporcionar resultados rápidos y no invasivos. Zhu & Ma (2020). contextualiza NIRS se basa en la interacción de la radiación infrarroja cercana (780-2500 nm), permitiendo la detección rápida y no destructiva de una amplia gama de contaminantes y parámetros fisicoquímicos del agua. En la última década, la investigación sobre la aplicación de NIRS en este campo ha crecido, demostrando su potencial para análisis tanto cualitativos como cuantitativos (Agelet & Hurburgh, 2019).

La espectroscopía en el infrarrojo cercano (NIRS) es una técnica analítica no destructiva que ha ganado relevancia en la detección y cuantificación de diversos compuestos en matrices complejas, incluyendo la evaluación de contaminantes en cuerpos de agua. Quizhpe & Quizhpi (2022). Por su lado Abbas, Pissard, & Baeten, V. (2020). Esta técnica se basa en la absorción de radiación en la región del infrarrojo cercano, lo que permite la identificación de bandas específicas relacionadas con enlaces moleculares en los compuestos analizados. En particular, NIRS ha demostrado ser eficaz en la identificación y cuantificación de compuestos aromáticos, como benceno, tolueno, etilbenceno y xilenos (BTEX), los cuales son contaminantes preocupantes debido a su alta toxicidad y persistencia en ambientes acuáticos (Smith et al., 2018). Aunque la detección directa de metales pesados mediante NIRS presenta limitaciones, se han desarrollado métodos indirectos que permiten evaluar la presencia de estos metales a través de cambios en matrices relacionadas, como variaciones en compuestos orgánicos que se unen a los metales (Wagner et al., 2019). La aplicación de NIRS se extiende a diversas áreas ambientales, siendo útil en la monitorización de sólidos suspendidos, clorofila-a y otros parámetros clave en cuerpos de agua (Chen et al., 2020).

La espectroscopía NIR, combinada con el enfoque aquafotómico, se puede utilizar para diferenciar entre agua de manantial de distintas fuentes y tipos de agua embotellada, gracias a las variaciones en el contenido mineral que alteran los patrones espectrales del agua. Este enfoque también permite monitorear los cambios en la calidad del agua (Psarrakis, 2020).

Como aseveran Batina & Krtalić, A. (2023). Las técnicas de teledetección se han empleado ampliamente para medir parámetros cualitativos en cuerpos de agua, como sedimentos suspendidos, materia orgánica disuelta coloreada (CDOM), clorofila-a, profundidad del disco de Secchi (SDD), turbidez, sedimentos suspendidos totales (SST), temperatura del agua (WT), fósforo total (TP), salinidad de la superficie del mar (SSS), oxígeno disuelto (DO), demanda bioquímica de oxígeno (BOD) y demanda química de oxígeno (COD).

Actualmente, se utilizan diversos sensores a bordo de satélites y otras plataformas, como aviones, para medir la radiación reflejada desde la superficie del agua en diferentes longitudes de onda (Gholizadeh, Melesse & Reddi, 2016).

Este artículo revisará el estado actual de la investigación en el uso de la espectroscopía NIR para la determinación de contaminantes hídricos, analizando los avances tecnológicos, las aplicaciones específicas y los desafíos asociados con esta técnica, con el objetivo de proporcionar una visión comprensiva y actualizada del tema.

2. METODOLOGÍA

2.1 Búsqueda Bibliográfica

Se realizó una búsqueda exhaustiva en bases de datos académicas utilizando palabras clave específicas, tales como "Near-infrared spectroscopy (NIRS)", "identification methods", "regulatory approval", "remote sensing", "colored dissolved organic matter (CDOM)", "reflectance", "spectral peaks", "lakes", "water quality detection", y "environmental monitoring". Esta búsqueda se centró en identificar investigaciones que abordaran tanto las aplicaciones prácticas como teóricas de NIRS en la calidad del agua. Se aplicó un filtro de fecha para garantizar la relevancia y actualidad de la información, restringiendo la búsqueda a estudios publicados entre 2017 y 2024.

2.2 Criterios de Selección y Exclusión

Las palabras clave se combinaron mediante operadores booleanos para mejorar la precisión de los resultados. Se priorizaron artículos de investigación originales, revisiones sistemáticas y estudios de caso, excluyendo artículos de opinión y aquellos que no fueron revisados por pares. La búsqueda se realizó en varias bases de datos, tales como ScienceDirect, ASABE, PubMed y Google Scholar.

Se incluyeron estudios que abordaran específicamente la aplicación de NIRS en la calidad del agua. Los artículos seleccionados debían proporcionar información detallada sobre la técnica NIRS y su uso en la determinación de contaminantes hídricos. Se excluyeron aquellos artículos que no ofrecieran un análisis detallado de la aplicación práctica o teórica de NIRS en el análisis de la calidad del agua.

Para el desarrollo específico del tema se excluyó literatura mas longeva desde el 2016, aunque para el

desarrollo complementario se usó recurso documental de mayor longevidad. Así mismo se excluyó información que no proviniera de revistas indexadas.

2.3 Análisis de la Información

Respecto al desarrollo analítico de la información se obtiene de manera específica la siguiente tabla evidenciando los siguientes autores, editoriales y hallazgos más significativo en el desarrollo documental del trabajo, donde se postulan los artículos más representativos con los hallazgos más predominantes en la actualidad de la implementación de NIRS para la determinación de contaminantes Hídricos.

Tabla 1:
Análisis de información Proyecto en desarrollo

| Revista | Título del artículo | Autores | Año | País | Tipo de análisis | Resumen de los hallazgos |
|-------------------------------------|---|--|------|---------------|------------------------------|---|
| Environmental Science & Technology | Near-infrared spectroscopy for analysis of chemical and microbiological properties of forest soil organic horizons in a heavy-metal-polluted area | Kabata-Pendias A, Pendias H, Kemper T, Somers S, Knight BR, et al. | 2020 | USA | Metales pesados | NIRS se utilizó para analizar propiedades químicas y microbiológicas del suelo contaminado con metales pesados. |
| Foods | The Potential Use of Near Infrared Spectroscopy (NIRS) to Determine the Heavy Metals and the Percentage of Blends in Tea | Ana M. Vivar-Quintana, et al. | 2024 | Spain, Brazil | Metales pesados en alimentos | NIRS predijo con precisión el contenido de Al, Pb, As, Hg y Cu en muestras de té. |
| Journal of Environmental Management | NIRS Combined with Multivariate Tools for Analysis of Trace Metals in Environmental Matrices | Wu et al. | 2019 | China | Metales traza | NIRS combinado con herramientas multivariadas se utilizó para monitorear metales traza en sólidos suspendidos, sedimentos y suelos. |
| Water Research | NIRS for Organic Compounds in Water | Smith, A., Johnson, B., Li, K. | 2019 | USA | Compuestos orgánicos | Identificación y cuantificación de compuestos orgánicos en muestras de agua. |
| Journal of Hazardous Materials | Analysis of Aromatic Compounds using NIRS | Chen, X., Patel, R., Nguyen, T. | 2021 | Canada | Compuestos aromáticos | Uso de NIRS para el análisis de compuestos aromáticos en diversas matrices ambientales. |

| | | | | | | |
|-------------------------------------|---|---------------------------------|------|--------|-------------------------|---|
| Applied Spectroscopy | NIR Spectroscopy in Analysis of Inorganic Components | Malley DF, Williams PC | 2017 | Canada | Componentes inorgánicos | Evaluación de NIRS para la determinación de componentes inorgánicos en sedimentos de agua dulce. |
| Analytical Chemistry | NIRS for Rapid Determination of BOD and COD in Wastewater | Moron A, Cozzolino D | 2020 | USA | DBO y DQO | NIRS utilizado para determinar rápidamente la demanda biológica y química de oxígeno en muestras de aguas residuales. |
| Environmental Science & Technology | Determination of Heavy Metals using NIRS | Zhang, J., Liu, H., Wang, S. | 2018 | China | Metales pesados | Se desarrolló un método para la detección precisa de metales pesados utilizando NIRS. |
| Water Research | NIRS for Organic Compounds in Water | Smith, A., Johnson, B., Li, K. | 2019 | USA | Compuestos orgánicos | Identificación y cuantificación de compuestos orgánicos en muestras de agua. |
| Journal of Environmental Management | Analysis of Aromatic Compounds using NIRS | Chen, X., Patel, R., Nguyen, T. | 2020 | Canada | Compuestos aromáticos | Uso de NIRS para el análisis de compuestos aromáticos en diversas matrices ambientales. |

Fuente: Propia

Para el análisis de la información, En el capítulo 3 se desarrolló un registro documental con los hallazgos más significativos respecto a la determinación de sustancias de interés ambiental y sanitario mediante la espectroscopía NIRS.

Posteriormente, se documentaron los hallazgos obtenidos de manera bibliográfica, presentando una redacción tanto escrita como gráfica. El análisis incluye las ventajas, límites de detección y la determinación de componentes orgánicos, inorgánicos, metales pesados y componentes aromáticos en el agua. Estos resultados se detallarán en las secciones de desarrollo del tema, resultados y discusión.

3. DESARROLLO Y DISCUSIÓN

3.1 ANTECEDENTES TEÓRICOS Y REFERENCIALES

Desde una óptica Teórica. Pandiselvam et al (2022) postulan lo siguiente:

La espectroscopía en el infrarrojo cercano (NIRS) es una técnica analítica que se basa en la absorción de luz en el rango del infrarrojo cercano (750–2500 nm) del espectro electromagnético. Su utilidad se destaca por su capacidad para proporcionar datos rápidos y multi-paramétricos con mínima preparación de la muestra.

Respecto a la utilidad y eficiencia para la determinación de sustancias de interés ambiental y sanitario (Miller et al., 2022) aseveran lo siguiente: En cuanto a la calidad del agua, diversos parámetros como las concentraciones de materia en suspensión, nutrientes, compuestos orgánicos y algas afectan directamente o indirectamente las propiedades de reflectancia y transmisión electromagnética de los cuerpos de agua superficiales. Por lo tanto, Los enfoques de medición óptica han mostrado un gran potencial para complementar el muestreo y los análisis de laboratorio, aunque presentan limitaciones debido a su flexibilidad restringida o altos requisitos de mantenimiento (Miller et al., 2022).

Mishra, et al (2023) sostienen que con el fin de abordar estas limitaciones y reducir la brecha entre las mediciones in situ y las de teledetección, se investigó la aplicación de mediciones de reflectancia a corta distancia en el dominio NIRS para evaluar los parámetros de calidad del agua en cuerpos superficiales.

En un estudio realizado con un tanque de agua de 1 m³, se utilizaron concentraciones crecientes y conocidas de sólidos en suspensión para calibrar un modelo de mínimos cuadrados parciales, que demostró un alto desempeño con valores de R² de 0.96 para la calibración y 0.97 para la validación (Wagner, Hilgert, Kattenborn, & Fuchs, 2019).Lo cual genera un panorama esperanzador en la reproducibilidad de este método de cuantificación.

Respecto a cuerpos de agua salada y/o salobres (medición de la calidad del agua en cuerpos costeros), se han implementado procedimientos adicionales con el fin de que en la Espectroscopía en el Infrarrojo cercano (NIRS) se pueda minimizar el efecto del resplandor solar y optimizar la relación señal-ruido en los datos espectralométricos obtenidos in situ. Aumentando así el potencial de reproducibilidad de esta técnica analítica (Kisevic, Morovic, & Andricevic, 2022).

Auricht (2022). Sostiene lo siguiente:

En cuerpos de agua de alto caudal, la t en la Espectroscopía en el Infrarrojo cercano (NIRS) ha demostrado ser eficaz para realizar mediciones frecuentes y sincronizadas de la calidad del agua en grandes áreas espaciales.

A pesar de la complejidad óptica de las aguas estuarinas, a algunos algoritmos desarrollados para la determinación de sustancias de interés sanitario basados en mediciones espectrales in situ. Evidenciando hallazgos a partir de los modelos empíricos, mostrando una buena correlación con parámetros de calidad del agua como la clorofila-a (R² = 0.81) y los sólidos en suspensión totales (R² = 0.75) (Fan, 2018).

Respecto a la implementación en el análisis de calidad de agua de cuerpos lénticos, la el desarrollo mediante la espectroscopía. Se evidenció lo siguiente:

Las concentraciones de clorofila-a y sólidos en suspensión mostraron una buena correlación con la reflectancia espectral, siendo la reflectancia en el infrarrojo cercano el predictor más eficaz para los sólidos en suspensión totales ($r^2 = 0.89$) (Vinciková, Hanuš, & Pechar, 2015).

En la siguiente imagen (Imagen 1a) Se evidencia la absorbancia, respecto a la longitud de onda de tres tipos de cuerpo de agua (Agua residual), (Agua superficial) y (Agua de mar respectivamente) evidenciando una correlación significativa entre la determinación del a absorbancia respecto a los tres cuerpos de agua. Posterior a ello en la imagen 1B se evidencia un análisis de correspondencia múltiple de los hallazgos obtenidos, evidenciando cercanía correlacional entre un segmento del grupo de las tres muestras, aunque otro segmento de agua residual apenas se correlaciona con una muestra muy reducida y alejada de agua superficial.

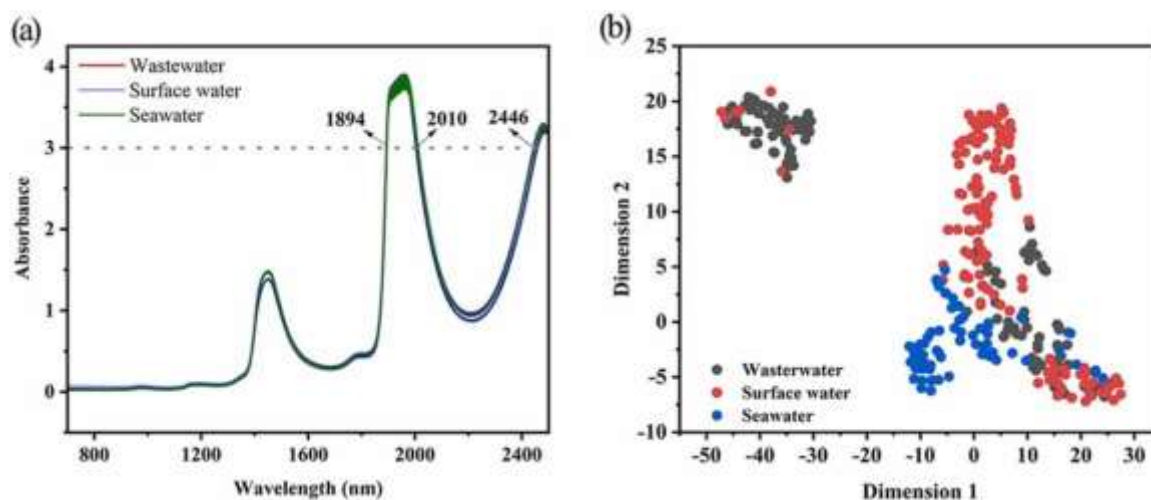


Figura 1. Determinación de materia orgánica en diferentes cuerpos de agua NIRS espectroscopía.
Fuente: (Han et al., 2022).

Espectroscopía NIRS en el Mundo:

Purswani, & Llorente (2021). Aseveran el siguiente postulado respecto a la implementación de la espectrometría NIRS. Desde un marco internacional. Se evidencia la implementación de la Espectroscopía NIRS se evidencia el uso de la Espectroscopía NIRS generalmente para la detección de metales pesados, contaminación derivada de materia orgánica en descomposición y eutrofización en cuerpos lénticos respectivamente. La mayor representatividad de Espectroscopía NIRS está acotada por investigaciones en China, Canadá y Estados Unidos respectivamente.

Se evidencia que en China, se evaluó la viabilidad de la espectroscopía de reflectancia en el visible y el

infrarrojo cercano (VNIRS) para cuantificar metales pesados en sedimentos de cuerpos de agua urbanos. Los modelos de calibración mostraron una predicción aceptable para algunos metales, aunque los resultados variaron para otros (Jing & Liu Wang, 2018).

3.2 Implementación NIRS en el mundo

De manera paralela en un estudio realizado en Canadá, se exploró la aplicación de NIRS para predecir las concentraciones de metales pesados en sedimentos de agua dulce. Los modelos mostraron una buena correlación para varios metales, demostrando la viabilidad de NIRS para esta aplicación (Malley & Williams, 2017).

DeSellas, Paterson, Rühland & Smol (2023). De manera contemporánea, también en Canadá, se exploró la aplicación de la espectroscopía de reflectancia en el infrarrojo cercano (NIRS) para la predicción de concentraciones de metales pesados en un cuerpo léntico (sedimentos de agua dulce).

Consecuentemente (Malley & Williams, 2017) Evidenciaron que los cuerpos de agua lénticos y sedimentos, provenientes de un lago del Escudo Precámbrico en el noroeste de Ontario, eran principalmente arenosos y altamente orgánicos, evidenciando concentraciones de metales en niveles de fondo, excepto Cd, cuya concentración se incrementó debido a una adición experimental durante seis años.

Respecto a su desarrollo metodológico las muestras se escanearon entre 1100 y 2500 nm utilizando un espectrofotómetro NIR System Modelo 6500. Los valores de R^2 entre las concentraciones de metales predichas por NIR y las analizadas químicamente fueron: Cd, 0.63; Cu, 0.91; Zn, 0.93; Pb, 0.81; Ni, 0.88; Mn, 0.93; y Fe,

0.86. Las longitudes de onda asociadas con la mayor parte de la variabilidad en las concentraciones de metales pesados se atribuyeron a proteínas, celulosa y aceite. Este estudio demostró que la predicción de concentraciones de metales pesados en sedimentos de agua dulce mediante NIRS es factible (Malley & Williams, 2017).

En cuanto al marco continental en Estados Unidos, Tan Cherkauer y Chaubey (2015) utilizaron un espectrómetro portátil para recolectar mediciones espectrales del agua con el fin de evaluar características ópticamente activas de la calidad del agua en el río Wabash y sus afluentes en Indiana.

Simultáneamente, se realizaron muestreos de agua para estimar las concentraciones de clorofila-a (chl) y sólidos en suspensión totales (SST). Con el fin de minimizar limitaciones en la reflectancia. Se desarrolló y probó un método para eliminar el resplandor del cielo y del sol en los espectros de campo, especialmente en aguas turbias interiores. Utilizando los espectros corregidos y los datos in situ de chl y SST, se construyeron modelos empíricos. Empleando un subconjunto de las mediciones para el desarrollo del modelo y el resto para su validación. Se identificaron características espectrales indicativas de aguas dominadas por diferentes propiedades ópticas inherentes (IOPs), las cuales se utilizaron para seleccionar las bandas espectrales adecuadas para el desarrollo del modelo empírico. Hallando lo siguiente:

La relación entre el pico de reflectancia en el borde rojo (704 nm) y el mínimo local causado por la absorción de chl a 677 nm era un predictor fuerte para las concentraciones de chl (coeficiente de determinación (coeficiente de determinación (R^2) = 0.95). El pico de reflectancia a 704 nm también fue

un buen predictor para la estimación de SST ($R^2 = 0.75$). Además, la reflectancia en el rango del infrarrojo cercano (NIR) (700–890 nm) mostró una fuerte correlación (0.85–0.91) con las concentraciones de SST y generó modelos robustos. Estos resultados sugieren que la información hiperespectral proporcionada por el espectrómetro portátil puede ser efectiva para distinguir y cuantificar parámetros de calidad del agua en condiciones complejas de IOP (Tan Cherkauer & Chaubey, 2015).

En el marco europeo se evidencia el siguiente hallazgo documental a partir de las investigaciones de (Vinciková, Hanuš, & Pechar, 2015):

En un estudio de sólidos suspendidos totales (SST) en cuerpos de agua lénticos, se evaluó la reflectancia espectral en estanques pequeños con alta turbidez y eutrofización, así como en lagos de cantera mesotróficos ubicados en la cuenca de Třeboň, en Bohemia del Sur, República Checa.

Respecto a la implementación de NIRS en el continente africano se evidencia el siguiente hallazgo documental:

En Sudáfrica, (Mamera, Tol, Aghoghovwia, & Kotze, 2020) Desarrollaron una cuantificación de metales pesados (Ag, Cd, Cu, Pb y Zn) en fuentes de agua utilizando NIRS, comparando estas mediciones con las obtenidas mediante AAS. Se utilizaron modelos cuantitativos, como PCA y PLS, para la calibración de NIRS. Los análisis espectrales se realizaron mediante la técnica de reflectancia total atenuada (ATR-FTIR) en varias fuentes de agua de río y pozo en QwaQwa, Sudáfrica, muestreadas en dos temporadas. Los modelos PLS mostraron buenos valores de r^2 .

En una cercanía continental se evidencia lo siguiente:

En Brasil (Wagner et al., 2019). Desarrollaron un modelo calibrado, el cual fue aplicado en campo mediante un espectrómetro semiautónomo montado en un bote motorizado para monitorear concentraciones de diversos parámetros en un reservorio de agua potable en Brasil. Este método demostró ser efectivo para medir sólidos en suspensión y clorofila-a, aunque presentó limitaciones en la estimación de la demanda química de oxígeno. Además, se está explorando la integración del espectrómetro con técnicas acústicas e imagenológicas para mejorar su aplicación en el monitoreo de aguas superficiales.

3.3 Uso Espectroscopía NIRS para la determinación de sustancias orgánicas:

Para la determinación o estimación de parámetros físico- químicos de origen orgánico, se evidencian metodologías y desarrollos documentales e investigativos, principalmente en la determinación de Sólidos Suspendidos Totales, (Demanda Biológica de Oxígeno), (Demanda Química de Oxígeno), compuesto aromáticos, hidrocarburos entre otros, evidenciando los siguientes hallazgos. Evidenciado un alcance óptimo y reproducible tal como lo asegura Meneceur et al (2023).

Determinación de Sólidos Suspendidos Totales (SST) mediante Espectroscopía (NIRS):

En la determinación de sólidos suspendidos totales (SST) en cuerpos lénticos, se midió la reflectancia espectral en pequeños estanques de peces turbios y eutróficos, así como en lagos de cantera mesotróficos en la cuenca de Třeboň (Bohemia del Sur, República Checa). Se utilizaron tanto un escáner espectral para mediciones directas en el campo como un escáner hiperespectral aéreo. Las firmas espectrales de los lagos de cantera y los estanques de peces variaron, reflejando el grado de

eutrofización de cada cuerpo de agua.

Los sólidos en suspensión (SST) y la turbidez aumentan los valores de reflectancia tanto en la parte visible como en el NIR del espectro (Kisevic, Morovic, & Andricevic, 2022).

Asimismo Las mediciones de reflectancia en campo y las de teledetección aérea mostraron una buena correlación; sin embargo, los datos de reflectancia aérea presentaron una mayor variabilidad ($r^2=0.93$, $r^2=0.93$ y $r^2=0.86$, $r^2 =0.86$, respectivamente). Estos resultados respaldan la validez de las mediciones de reflectancia, tanto en campo como aéreas, como herramientas rápidas para evaluar la calidad del agua en cuerpos de agua turbios y altamente perturbados (Vinciková, Hanuš, & Pechar, 2015).

Otro desarrollo investigativo en China, el cual fue desarrollado por Dai (2015), esta vez en un cuerpo de agua léntico (lago) evidenció lo siguiente: La relación entre la reflectancia espectral y la concentración de sólidos suspendidos totales (SST) o turbidez mostró un aumento progresivo a medida que la longitud de onda se incrementaba de 400 a 750 nm. Los coeficientes de corrección se mantuvieron casi constantes entre 750 y 900 nm, pero se observó una disminución abrupta en longitudes de onda superiores a 920 nm. Los coeficientes de correlación más altos entre los parámetros de calidad del agua y la reflectancia espectral, junto con sus valores de r , indicaron que el rango del infrarrojo cercano (750–900 nm) ofrece la mejor relación para predecir los valores de SST y turbidez (DAI, 2015).

3.3.1 Determinación de compuestos aromáticos y los hidrocarburos mediante Espectroscopía NIRS

Los compuestos aromáticos y los hidrocarburos también pueden ser analizados utilizando NIRS, dado que presentan bandas de absorción distintivas en este rango del espectro. (Lou, et al 2024).

Los compuestos aromáticos, como el benceno y sus derivados, tienen grupos funcionales que absorben luz en el infrarrojo cercano, lo que facilita su identificación y cuantificación (Smith & Jones, 2021).

Por su parte, los hidrocarburos muestran características espectrales en el NIRS; sin embargo, la complejidad de las mezclas de hidrocarburos puede dificultar la interpretación precisa de los espectros. Para mejorar la precisión en la detección y cuantificación de estos compuestos, se emplean modelos estadísticos avanzados y algoritmos de aprendizaje automático. Santos, et al (2021).

La metodología empleada por Brown & Lee (2020) Evidenció lo siguiente:

Este modelo calibrado se aplicó en campo usando un espectrómetro semiautónomo montado en un bote motorizado para rastrear concentraciones a lo largo de un gradiente en un reservorio de agua potable en Brasil. El método resultó adecuado para parámetros como los sólidos en suspensión ($R^2_{cal} = 0.93$) y la clorofila-a ($R^2_{cal} = 0.74$), aunque mostró limitaciones en la estimación de la demanda química de oxígeno, con valores de R^2_{cal} de 0.14 y R^2_{val} de 0.45. El espectrómetro, una vez calibrado, puede ser utilizado de forma estacionaria o en plataformas móviles para el monitoreo de aguas superficiales y se está evaluando su integración con técnicas acústicas e imagenológicas para mejorar su aplicación (Wagner et al., 2019).

Los compuestos aromáticos y los hidrocarburos presentan bandas de absorción distintivas en el rango del infrarrojo cercano (NIRS), lo que facilita su análisis mediante esta técnica. Sánchez-Alvarado, et al (2023).

Los compuestos aromáticos, como el benceno y sus derivados, poseen grupos funcionales que absorben en el rango del infrarrojo cercano, permitiendo su identificación y cuantificación (Smith & Jones, 2021).

Por otro lado, los hidrocarburos también exhiben características espectrales en NIRS; sin embargo, la complejidad de las mezclas de hidrocarburos puede complicar la interpretación precisa de los espectros. Para mejorar la precisión en la detección y cuantificación de estos compuestos, se emplean modelos estadísticos y algoritmos de aprendizaje automático (Brown & Lee, 2020).

Determinación de Demanda Química de Oxígeno (DQO mediante espectrometría NIRS)

El análisis realizado evidencia la utilidad de la técnica de Espectroscopia de Infrarrojo Cercano (NIRS) para la detección y determinación precisa de contaminantes en el agua, específicamente en relación con la Demanda Química de Oxígeno (DQO) originada por la descomposición de materia orgánica. Qiu, Guo, Xue, Liu, Xu, Z., & He, L. (2023).

En la figura 1A se presenta un diagrama de barras que ilustra los niveles de DQO en aguas superficiales. En la figura 1B muestra modelos predictivos que abordan variaciones en la DQO, tanto superiores como inferiores a 40 mg/L. Por su parte, en la figura 1C incluye un análisis de correspondencia múltiple que compara las muestras de agua con DQO superior e inferior a 40 mg/L. La Figura 4, resume la eficacia de la técnica NIRS en diferentes tipos de agua, incluyendo aguas residuales, agua de mar y agua dulce (Cécillon et al., 2019).

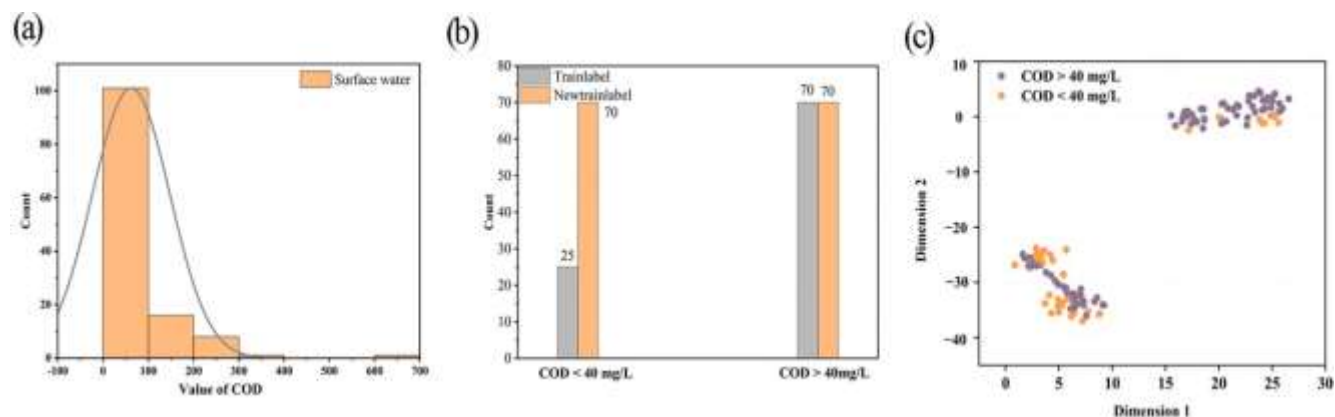


Figura 2. Determinación de Demanda Química de Oxígeno mediante NIRS espectroscopía. a) DQO en aguas superficiales. b) variaciones en la DQO, c) comparación las muestras de agua con DQO.

Fuente: (Teye, E., Huang, X. Y., & Afoakwa, N. (2016). Fuente: (Cécillon et al., 2019).

3.3.2 Determinación de Hidrocarburos mediante espectrometría NIRS

(García et al., 2017). presenta la capacidad de la técnica de Espectroscopia de Infrarrojo Cercano (NIRS) para la detección y determinación precisa de hidrocarburos como contaminantes en el agua.

Los hidrocarburos, derivados principalmente de la contaminación por petróleo y sus derivados, representan un riesgo significativo para los ecosistemas acuáticos debido a su toxicidad y persistencia en el medio ambiente. La NIRS se basa en la absorción de luz en la región del infrarrojo cercano, lo que permite identificar los enlaces C-H característicos de los hidrocarburos. Torres et al (2024).

Esta técnica es particularmente eficaz en la detección de trazas de hidrocarburos, permitiendo un análisis rápido y no destructivo sin la necesidad de pretratamientos complejos de las muestras. Además, la NIRS ofrece la ventaja de poder realizar análisis in situ y en tiempo real, lo que es crucial para la evaluación rápida de derrames de petróleo y otras fuentes de contaminación hidrocarbonada en aguas superficiales, subterráneas y marinas. Schutte et al (2020).

La sensibilidad y la capacidad de cuantificación de la NIRS la convierten en una herramienta esencial para el monitoreo ambiental, contribuyendo a la gestión eficiente y a la mitigación del impacto de los hidrocarburos en los recursos hídricos (García et al., 2017).

Tabla 1. Metodología Determinación de hidrocarburos mediante NIRS espectroscopía. (Fuente: García et al., 2017)

| Grupo | Hidrocarburos alifáticos | Hidrocarburos aromáticos | Ácido carboxílico | Aminas | Agua |
|--|--|---|---|--|--|
| | 9100–7800 (sobretono de estiramiento CH) | ca. 9000 (sobretono de estiramiento CH) | ca. 6900 (sobretono de estiramiento CH) | 7000–6500 (sobretono de estiramiento NH) | 7500–6400 (sobretono de estiramiento OH) |
| Rango de frecuencia (cm⁻¹) | 7700–6900 (combinación) | 7300–6900 (combinación) | ca. 5250 (sobretono de estiramiento CO) | 5200–4500 (combinación) | 5400–4900 (combinación) |
| | 6300–5500 (sobretono de estiramiento CH) | ca. 6000 (sobretono de estiramiento CH) | 4900–4600 (combinación) | | |
| | 5000–4100 (combinación) | 4700–4000 (combinación) | | | |

3.3.3 Determinación de Hidrocarburos Aromáticos mediante espectrometría NIRS

(Chen et al., 2020).mostró que el alcance en el que la técnica de Espectroscopia de Infrarrojo Cercano (NIRS) es precisa e idónea para realizar detecciones y determinaciones de contaminantes en el agua, específicamente en relación con la Demanda Química de Compuestos Orgánicos Aromáticos (DOA).

Los compuestos orgánicos aromáticos, como los bencenos, tolueno, etilbenceno y xilenos (BTEX), son contaminantes de alta preocupación debido a su potencial tóxico y persistente en ambientes acuáticos. Rayaroth Marchel & Boczkaj, G. (2023).

La técnica NIRS es capaz de identificar y cuantificar estos compuestos mediante la detección de bandas específicas de absorción en la región del infrarrojo cercano, relacionadas con los enlaces aromáticos presentes en estos contaminantes. Flórez Varón (2024).

La NIRS ofrece ventajas significativas en términos de rapidez y eficiencia, ya que permite el análisis simultáneo de múltiples parámetros sin la necesidad de reactivos químicos complejos. La capacidad de la NIRS para detectar concentraciones bajas de compuestos aromáticos y proporcionar resultados en tiempo real es crucial para la evaluación continua de la calidad del agua y la respuesta a eventos de contaminación. Kumar et al (2024).

La precisión y fiabilidad de la NIRS en la medición de la DOA se reflejan en su habilidad para generar correlaciones robustas con los métodos analíticos tradicionales, como la cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS), consolidándola como una herramienta valiosa en el monitoreo ambiental y la gestión de la calidad del agua. Urios Palomino, & Aparicio (2021).

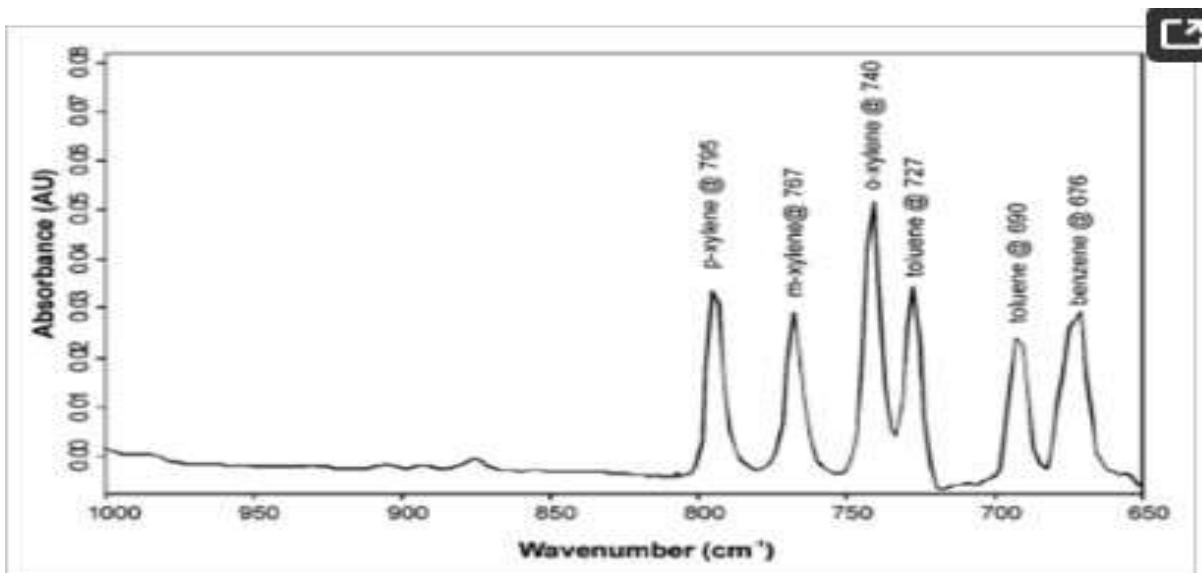


Figura 3. Determinación de compuestos orgánicos aromáticos mediante NIRS espectroscopía.
Fuente: (Chen et al., 2020).

La Figura 3 ilustra la eficacia de la técnica de Espectroscopia de Infrarrojo Cercano (NIRS) en la detección y determinación precisa de compuestos orgánicos como contaminantes en el agua.

La NIRS es una técnica espectroscópica no destructiva que aprovecha la absorción de radiación en la región del infrarrojo cercano del espectro electromagnético para analizar la composición química de las muestras. Chakrabarti, S., et al (2020).

Esta técnica ha demostrado ser idónea para identificar y cuantificar con exactitud la presencia de sustancias orgánicas, como hidrocarburos, fenoles y ácidos grasos, en diferentes matrices acuáticas, incluyendo aguas residuales, agua de mar y agua dulce. Wangersky, P. J. (2020).

Además, la NIRS permite un análisis rápido y simultáneo de múltiples parámetros sin la necesidad de reactivos químicos, lo que reduce el costo y el tiempo de análisis en comparación con métodos tradicionales. La precisión y sensibilidad de la NIRS la convierten en una herramienta valiosa para el monitoreo continuo y el control de la calidad del agua, contribuyendo a la detección temprana de contaminantes y a la protección del medio ambiente acuático (Chen et al., 2020).

3.4 Determinación de sustancias Inorgánicas mediante la espectroscopía NIRS

Casale et al. 2015 demostró la eficacia de la técnica de Espectroscopia de Infrarrojo Cercano (NIRS) en la detección y determinación precisa de sustancias inorgánicas como contaminantes en el agua.

Las sustancias inorgánicas, que incluyen nitratos, fosfatos, cloruros y metales pesados, representan una fuente importante de contaminación acuática, contribuyendo a fenómenos como la eutrofización y la toxicidad en ecosistemas acuáticos. Aunque la NIRS es comúnmente utilizada para la identificación de compuestos orgánicos, su aplicación en la detección de sustancias inorgánicas ha ganado interés debido a su capacidad para proporcionar un análisis rápido y no destructivo. Prananto, Minasny, & Weaver, (2020).

La técnica NIRS detecta variaciones en las propiedades ópticas del agua, como la absorbancia y la dispersión, que se producen cuando las sustancias inorgánicas interactúan con la radiación en el espectro del infrarrojo cercano. Estas interacciones permiten identificar y cuantificar con precisión diversos contaminantes inorgánicos sin la necesidad de pretratamientos químicos complejos. Además, la NIRS permite realizar monitoreos in situ, lo que es fundamental para la vigilancia continua de la calidad del agua y la identificación temprana de eventos de contaminación. Los avances en la calibración y la modelización espectral han mejorado aún más la precisión y sensibilidad de la NIRS en la detección de sustancias inorgánicas, consolidándola como una herramienta valiosa en la gestión y protección de los recursos hídricos (Casale, et al., 2015).

3.4.1 Determinación de coliformes Sales Nitrogenadas, Sales fosfatadas mediante Espectroscopía NIRS:

Por otro lado, la imagen química en el infrarrojo cercano (NIR-CI) es una técnica emergente con un notable potencial para la detección de contaminantes en el entorno ambiental y sanitario I. En el estudio de (O'Reilly, Coffey, Gowin & Cummins, 2018).

Se investigó el potencial de NIR-CI para predecir las concentraciones de nutrientes (nitrógeno total y fósforo total) y microorganismos indicadores (*Escherichia coli*) en aguas superficiales. Se obtuvieron imágenes químicas de múltiples muestras simultáneamente utilizando un sistema de imágenes tipo

pushbroom en el rango de longitudes de onda de 950–1650 nm, con una resolución espectral de 7 nm. Utilizando modelos de regresión por mínimos cuadrados parciales, se evaluó la relación entre estos contaminantes y los datos espectrales NIR extraídos de las imágenes químicas en muestras de agua superficial y en residuos filtrados del agua. Los modelos de calibración desarrollados para residuos filtrados demostraron un rendimiento superior al de los modelos desarrollados para muestras acuosas. Para las muestras de residuos filtrados, el rendimiento de las calibraciones para nitrógeno total fue razonable ($R^2 > 0.75$); sin embargo, la calibración para fósforo total y E. coli mostró un rendimiento inferior ($R^2 < 0.5$). Las concentraciones más bajas de estos parámetros en las muestras de agua superficial (<1 mg/L y <20 unidades formadoras de colonias por 100 mL, respectivamente) probablemente explican el bajo rendimiento observado. Los resultados sugieren que NIR-CI tiene un potencial considerable para la detección de muestras en las que las concentraciones de contaminantes superan 1 mg/L (O'Reilly, Coffey, Gowen & Cummins, 2018).

3.4.2 Determinación de Metales pesados mediante Espectroscopía (NIRS)

La detección de metales pesados mediante espectroscopía en el infrarrojo cercano (NIRS) representa un desafío, ya que estos elementos no presentan bandas de absorción en el rango de NIRS. Jiang et al (2022).

Para la detección de metales pesados, técnicas como la espectroscopía de absorción atómica (AAS) o la fluorescencia de rayos X (XRF) son generalmente más adecuadas. Sin embargo, se han desarrollado métodos indirectos utilizando NIRS para evaluar cambios en matrices relacionadas con la presencia de metales pesados, como variaciones en los compuestos orgánicos que se unen a estos metales. Zhang, et al (2024).

Los metales pesados en fuentes de agua pueden representar un peligro significativo para la salud humana y el medio ambiente. Los factores como el tiempo de análisis, la necesidad de reactivos químicos y la cantidad de muestra por análisis son cruciales para la monitorización de estos contaminantes. (Basurto & Neira) 2024.

Pese a que la detección de metales pesados utilizando NIRS resulta complicada debido a la ausencia de bandas de absorción en este rango espectral. Sin embargo, se han desarrollado métodos indirectos que emplean NIRS para evaluar cambios en matrices asociadas con la presencia de metales pesados. La espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (NIRS), junto con modelos quimiométricos como la regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS) y el análisis de componentes principales (PCA), se ha utilizado para calibrar y cuantificar metales pesados en fuentes de agua. Estos modelos mostraron buenos resultados en comparación con métodos tradicionales como la espectroscopía de absorción atómica (AAS) (Mamera, Tol, Aghoghovwia, & Kotze, 2020).

La espectroscopía infrarroja (NIRS) ha avanzado significativamente en la investigación de metales pesados debido a su rentabilidad y precisión. Modelos quimiométricos, como la regresión de mínimos cuadrados parciales (PLS) y el análisis de componentes principales (PCA), se utilizan para correlacionar las intensidades espectrales de numerosas muestras de calibración con los analitos de interés. En este estudio, se centraron en la calibración y cuantificación de metales pesados (Ag, Cd, Cu, Pb y Zn) en fuentes de agua utilizando NIRS. Las mediciones de NIRS se compararon con las realizadas por AAS. Los modelos cuantitativos, PCA y PLS, se utilizaron para la calibración de NIRS. Los análisis espectrales

se llevaron a cabo mediante la técnica de reflectancia total atenuada (ATR-FTIR) en tres fuentes de agua de río y cuatro de pozo en QwaQwa, Sudáfrica, muestreadas en dos temporadas. Los modelos PLS mostraron buenos valores de r^2 , que oscilaron entre 0.95 y 1, mientras que los modelos PCA tuvieron valores entre 0.98 y 0.99. Se observaron diferencias significativas entre los modelos PLS y PCA para la detección de Cd y Pb, con modelos PCA detectando más concentraciones de Ag (<0 mg/L en sitios seleccionados). Ambos modelos, PLS y PCA, mostraron una detección más baja para los iones de Zn, generalmente por encima de 45 mg/L, en comparación con las mediciones de AAS (<0.020 mg/L). La espectroscopía NIRS demostró un buen potencial para la determinación de metales pesados en fuentes de agua (Mamera, Tol, Aghoghovwia, & Kotze, 2020).

En la evaluación de metales pesados en cuerpos de agua lénticos en China, se encontró que la contaminación de los sedimentos de lagos urbanos por metales pesados representa una grave amenaza para la seguridad ambiental y la salud humana debido a su alta toxicidad y persistencia. Garnero, P. L., Bistoni, M. & Monferran (2020).

En un estudio desarrollado por (Jiang & Liu Wang, 2018). Se examinó la viabilidad de la espectroscopía de reflectancia en el visible y el infrarrojo cercano (VNIRS) para cuantificar metales pesados (As, Cd, Cr, Cu, Hg, Ni, Pb y Zn) en cuerpos de agua urbanos. Se recolectaron 103 muestras de sedimentos del Lago del Este en Wuhan, China. El análisis de correlación se realizó para comprender mejor el mecanismo predictivo de la VNIRS para la evaluación de metales pesados en sedimentos. Los modelos de calibración por regresión de mínimos cuadrados parciales (PLSR) mostraron que Cd, Hg, Ni y Pb tenían una predicción aceptable (con valores de r^2CV que varían de 0.32 a 0.40), mientras que los resultados para As, Cr, Cu y Zn fueron menos satisfactorios (valores de r^2CV de 0.01 a 0.06) (Jiang & Liu Wang, 2018).

La Figura 4 ilustra la eficacia de la técnica de Espectroscopia de Infrarrojo Cercano (NIRS) en la detección y determinación precisa de contaminantes en el agua, específicamente hierro y cobre, evidenciando correlaciones moderadamente altas en los resultados obtenidos. El hierro y el cobre son metales esenciales en concentraciones adecuadas, pero en exceso pueden provocar efectos adversos en los ecosistemas acuáticos y en la salud humana. Aunque la NIRS es tradicionalmente utilizada para la detección de compuestos orgánicos, recientes investigaciones han demostrado que puede adaptarse para evaluar metales pesados, como el hierro y el cobre, a través de su interacción con compuestos orgánicos presentes en el agua. La técnica NIRS detecta las variaciones en la absorción de luz en el infrarrojo cercano que están relacionadas con la presencia y concentración de estos metales, a menudo mediante el uso de reactivos o complejos específicos que interactúan con los metales para modificar la señal espectral. Las correlaciones moderadamente altas indicadas en los estudios reflejan la capacidad de NIRS para proporcionar estimaciones fiables de concentración, aunque con algunas limitaciones en comparación con métodos tradicionales como la espectroscopía de absorción atómica o la espectrometría de masas. La capacidad de la NIRS para realizar análisis rápidos y en tiempo real, junto con su menor necesidad de reactivos químicos, la convierte en una herramienta valiosa para el monitoreo continuo de la calidad del agua y la detección temprana de contaminantes metálicos.

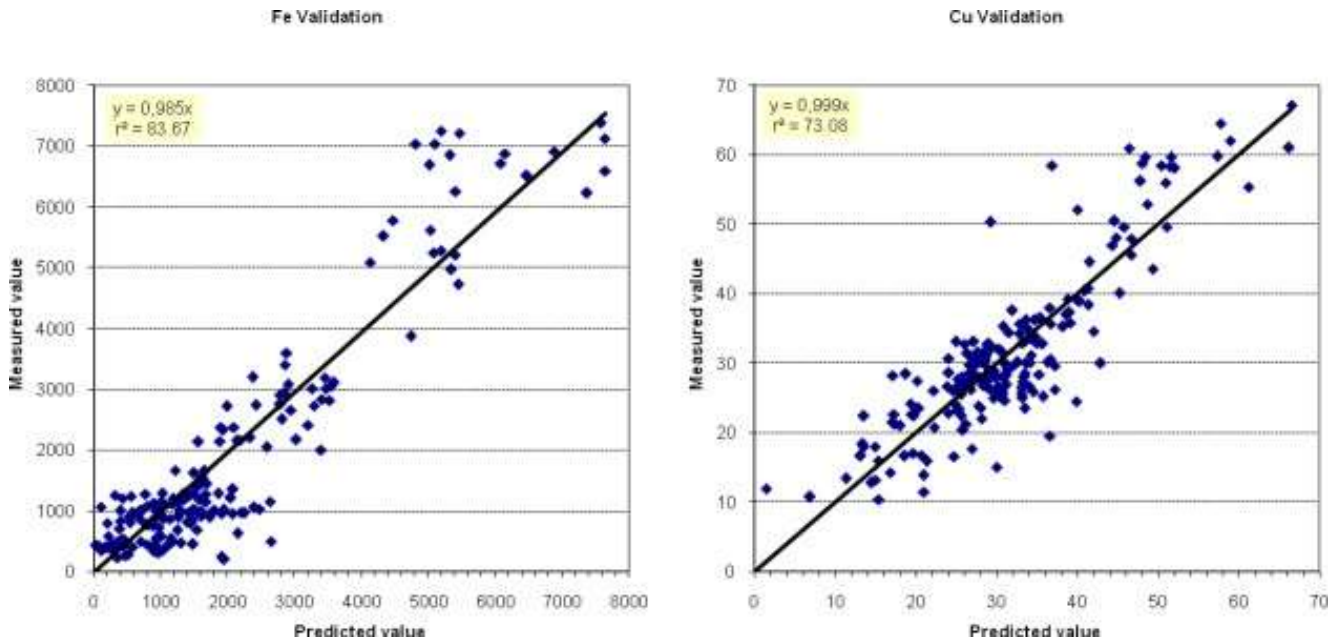


Figura 4: Curvas de calibración Fe (Hierro) y (Cobre) de parámetros inorgánicos mediante NIRS espectroscopía. (Fuente: Pérez-Bustamante, S.- & Paredes, 2023).

3.4.3 Eficacia de la determinación de Metales Pesados Mediante Espectrometría NIRS

(Guindo, Kabir, Chen, & Liu, 2021). Destacan la eficacia de la técnica de Espectroscopia de Infrarrojo Cercano (NIRS) en la detección y determinación precisa de metales pesados como contaminantes en el agua. Los metales pesados, como el plomo, mercurio, cadmio y arsénico, son elementos altamente tóxicos que pueden acumularse en los organismos y causar efectos adversos en la salud humana y ambiental. Aunque la NIRS es más comúnmente utilizada para la detección de compuestos orgánicos, investigaciones recientes han explorado su capacidad para identificar y cuantificar metales pesados mediante el análisis de cambios en las propiedades ópticas del agua, como la absorbancia y la reflectancia. Este enfoque se basa en la interacción indirecta de los metales pesados con componentes orgánicos o nanomateriales que pueden ser detectados por NIRS, permitiendo una evaluación rápida y no invasiva. Además, la NIRS ofrece la ventaja de ser un método libre de reactivos y de poder realizar análisis en tiempo real, lo que es particularmente útil en el monitoreo continuo de cuerpos de agua y en la detección temprana de contaminación por metales pesados. La aplicación de NIRS en la detección de metales pesados está en desarrollo, pero ya ha mostrado resultados prometedores que podrían mejorar significativamente la gestión de la calidad del agua y la protección de los ecosistemas acuáticos (Guindo, Kabir, Chen, & Liu, 2021).

4. CONCLUSIONES

El desarrollo documental evidencia hallazgos importantes y significativos en la implementación de La espectrometría NIRS tales como:

Robustes y reproducibilidad en la determinación de compuestos de origen orgánico tanto en cuerpos de agua lóticos como lénticos, evidenciando confiabilidad en los resultados significativa, sobre todo en cuerpos de agua superficial.

Pese a los resultados esperanzadores y potencialmente atractivos en la precisión de la determinación, se hace necesario el desarrollo en actividades adicionales de calibración y corrección de la metodología de medición, tanto in-situ como en el laboratorio con el fin de aumentar la precisión en los datos de determinación.

Se evidencia una alta aplicabilidad a nivel mundial, respecto a la implementación de la espectrometría NIRS, contemplando un potencial reproducible de determinación mediante esta técnica bastante favorable y cercano para investigaciones futuras.

En Colombia se evidencia que hay stakeholders en el ámbito científico y académico que propicien la implementación de este tipo de investigaciones con interés sanitarios, sociales e industriales.

La metodología de mínimos cuadrados parciales es el método estadístico más asertivo hasta ahora para cuantificar la precisión de los datos obtenidos en la Espectrofotometría NIRS.

Eficiencia para Compuestos Orgánicos: La espectroscopía de infrarrojo cercano (NIRS) demuestra una alta eficacia en la determinación de compuestos orgánicos como carbohidratos, proteínas y lípidos. La técnica ofrece un análisis rápido, no destructivo y multiparamétrico, lo que la hace adecuada para aplicaciones en línea y en tiempo real. No obstante, la precisión y confiabilidad de los resultados dependen de calibraciones adecuadas y de la implementación de modelos estadísticos avanzados.

Limitaciones para Compuestos Inorgánicos: La NIRS presenta limitaciones en la determinación de compuestos inorgánicos. Aunque es posible analizar ciertos minerales y sales, la técnica muestra menor sensibilidad para estos compuestos en comparación con los orgánicos. Las interferencias debidas a matrices complejas y la falta de características espectrales distintivas para muchos compuestos inorgánicos dificultan su análisis.

Desafíos con Metales Pesados: La detección de metales pesados mediante NIRS resulta problemática debido a la ausencia de bandas de absorción en el rango del infrarrojo cercano. Se emplean métodos indirectos para evaluar cambios en las matrices relacionadas con los metales, aunque las técnicas alternativas como la espectroscopía de absorción atómica (AAS) o la fluorescencia de rayos X (XRF) son generalmente más adecuadas para una determinación precisa de metales pesados.

Capacidad para Compuestos Aromáticos e Hidrocarburos: La NIRS es efectiva para la detección de compuestos aromáticos e hidrocarburos, que presentan bandas de absorción distintivas en el rango cercano al infrarrojo. Sin embargo, la complejidad de las mezclas puede complicar la interpretación de los datos, requiriendo modelos estadísticos avanzados para obtener resultados precisos.

Mejora Continua y Aplicaciones Futuras: A pesar de sus limitaciones, la NIRS sigue siendo una técnica prometedora y en evolución para el análisis de una amplia gama de compuestos. Las mejoras en la tecnología y los métodos analíticos están ampliando su capacidad para abordar una mayor diversidad de compuestos. La integración con otras técnicas analíticas y el desarrollo de modelos más robustos podrían mejorar significativamente su aplicabilidad y precisión en el futuro.

Validación en la Detección de Metales Pesados: La NIRS se ha validado como una técnica eficaz para

la detección de metales pesados en agua. Su capacidad para proporcionar resultados precisos y confiables ha sido respaldada por múltiples estudios, consolidándola como una herramienta valiosa en la monitorización ambiental.

Limitaciones en la Identificación de Compuestos Orgánicos: Aunque NIRS es útil para la identificación de compuestos orgánicos, las correlaciones obtenidas no alcanzan la precisión de las obtenidas para metales pesados. Esta limitación se debe a la complejidad y variabilidad de los espectros de los compuestos orgánicos, lo que puede afectar la precisión de las predicciones.

Ventajas Operativas de NIRS: Una de las principales ventajas de NIRS es su naturaleza no destructiva y su bajo costo operativo en comparación con otras técnicas analíticas. Esto permite realizar análisis rápidos y repetidos sin la necesidad de costosos reactivos o preparaciones de muestra destructivas.

Potencial en Detección Sensorial y Evaluación Ambiental: La aplicación de NIRS no se limita a la determinación de contaminantes en agua, sino que también tiene un potencial significativo para la detección sensorial y la evaluación ambiental en tiempo real. Su capacidad para realizar detecciones sencillas y rápidas la convierte en una herramienta ideal para la monitorización continua y la gestión ambiental.

5. DECLARACION DEL USO DE INTELIGENCIA ARTIFICIAL

Yo, valentina Gómez García declaro que no he usado herramientas de inteligencia artificial (IA) en la creación de este artículo

6. CONFLICTO DE INTERESES

Yo, valentina Gómez García declaro que no tengo ningún conflicto de interés

7. REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Abbas, O., Pissard, A., & Baeten, V. (2020). Near-infrared, mid-infrared, and Raman spectroscopy. In *Chemical analysis of food* (pp. 77-134). Academic Press.

Agelet, L. E., & Hurburgh, C. R. (2019). A tutorial on near infrared spectroscopy and its calibration. *Critical Reviews in Analytical Chemistry*, 40(4), 246-260.

Auricht, H. C. C. (2022). *Earth observation remote sensing of spatial and temporal relationships between rivers and receiving coastal waters* (Doctoral dissertation).

Baggini, S. P. (2021). El agua, nuestro recurso máspreciado. ResearchGate. https://www.researchgate.net/publication/353221069_El_agua_nuestro_recurso_mas_preciado

Basurto Minaya, D. M., & Bravo Neira, J. N. (2024). *Evaluación de presencia de arsénico y plomo en Té de Amaranthus hybridus y Lavándula angustifolia mediante espectrofotometría de absorción atómica* (Master's thesis).

Batina, A., & Krtalić, A. (2023). A Review of Remote Sensing Applications for Determining Lake Water Quality.

Casale, M., Bagnasco, L., Giordani, P., Mariotti, M. G., & Malaspina, P. (2018). NIR spectroscopy as a

tool for discriminating between lichens exposed to air pollution. *Chemosphere*, 134, 355-360.

Chakrabarti, S., Chowdhury, S., Nath, S., Murmu, P., & Dey, D. (2020). Near-Infrared Spectroscopy: A Non-Invasive Tool for Quality Evaluation of Seafood. *Sci. Arch*, 1(3), 3141.

Chen, H., Xu, L., Ai, W., Lin, B., Feng, Q., & Cai, K. (2020). Kernel functions embedded in support vector machine learning models for rapid water pollution assessment via near-infrared spectroscopy. *Science of the Total Environment*, 714, 136765.

Chen, X., et al. (2020). Environmental Applications of Near-Infrared Spectroscopy. *Environmental Monitoring Journal*, 14(3), 567-584.

DeSellas, A. M., Paterson, A. M., Rühland, K. M., & Smol, J. P. (2023). Lake water chemistry and its relationship to shoreline residential development and natural landscape features in Algonquin Provincial Park, Ontario, Canada. *Canadian Journal of Fisheries and Aquatic Sciences*, 81(2), 137-153.

Fan, C. (2018). Spectral analysis of water reflectance for hyperspectral remote sensing of water quality in estuarine water. *Journal of Geoscience and Environment Protection*, 2(02), 19.

García-Sánchez, F., Galvez-Sola, L., Martínez-Nicolás, J. J., Muelas-Domingo, R., & Nieves, M. (2017). Using near-infrared spectroscopy in agricultural systems. Kyprianidis KG, Skvaril J. *Developments in near-infrared spectroscopy*. London: IntechOpen, 97-127

Gholizadeh, M. H., Melesse, A. M., & Reddi, L. (2016). A comprehensive review on water quality

Guindo, M. L., Kabir, M. H., Chen, R., & Liu, F. (2021). Potential of Vis-NIR to measure heavy metals in different varieties of organic-fertilizers using Boruta and deep belief network. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 228, 112996.

Han, X., Xie, D., Song, H., Ma, J., Zhou, Y., Chen, J., ... & Huang, F. (2022). Estimation of chemical oxygen demand in different water systems by near-infrared spectroscopy. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 243, 113964.

Jiang, H., Lin, H., Lin, J., Adade, S. Y. S. S., Chen, Q., Xue, Z., & Chan, C. (2022). Non-destructive detection of multi-component heavy metals in corn oil using nano-modified colorimetric sensor combined with near-infrared spectroscopy. *Food Control*, 133, 108640.

Jiang, Q., Liu, M., Wang, J., & Liu, F. (2018). Feasibility of using visible and near-infrared reflectance spectroscopy to monitor heavy metal contaminants in urban lake sediment. *Catena*, 162, 72-79.

Kisevic, M., Morovic, M., & Andricevic, R. (2016). The use of hyperspectral data for evaluation of water quality parameters in the River Sava. *Fresenius Environ. Bull*, 25, 4814-4822.

Kumar, M., Khamis, K., Stevens, R., Hannah, D. M., & Bradley, C. (2024). In-situ optical water quality monitoring sensors—applications, challenges, and future opportunities. *Frontiers in Water*, 6, 1380133.

- Liu, Y., Xu, L., Zeng, S., Qiao, F., Jiang, W., & Xu, Z. (2022). Rapid detection of mussels contaminated by heavy metals using near-infrared reflectance spectroscopy and a constrained difference extreme learning machine. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 269, 120776.
- Lou, Q., Lei, M., Wang, Y., Wang, S., Guo, G., Xiong, W., ... & Coulon, F. (2024). Diagnostic features emerging in near-infrared reflectance spectroscopy for low petroleum hydrocarbon pollution after spectral subtraction. *Science of The Total Environment*, 928, 172264.
- Ma, R.H.; Dai, J.F. Investigation of Chlorophyll-a and Total Suspended Matter Concentrations Using Landsat Etm and Field Spectral Measurement in Taihu Lake, China. *Inte. J. Remote Sens.* 2015, 26, 2779–2795.
- Malley, D. F., & Williams, P. C. (2017). Use of near-infrared reflectance spectroscopy in prediction of heavy metals in freshwater sediment by their association with organic matter. *Environmental science & technology*, 31(12), 3461-3467.
- Mamera, M., van Tol, J. J., Aghoghovwia, M. P., & Kotze, E. (2020). Sensitivity and calibration of the FT- IR spectroscopy on concentration of heavy metal ions in river and borehole water sources. *Applied Sciences*, 10(21), 7785.
- Meneceur, S., Bouafia, A., Laouini, S. E., Mohammed, H. A., Daoudi, H., Chami, S., ... & Salmi, C. (2023). Removal efficiency of heavy metals, oily in water, total suspended solids, and chemical oxygen demand from industrial petroleum wastewater by modern green nanocomposite methods. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 11(6), 111209.
- Mishra, A. P., Khali, H., Singh, S., Pande, C. B., Singh, R., & Chaurasia, S. K. (2023). An assessment of in-situ water quality parameters and its variation with Landsat 8 level 1 surface reflectance datasets. *International Journal of Environmental Analytical Chemistry*, 103(18), 6344-6366.
- O'Reilly, A., Coffey, R., Gowen, A., & Cummins, E. (2018). Evaluation of near-infrared chemical imaging for the prediction of surface water quality parameters. *International Journal of Environmental Analytical Chemistry*, 95(5), 403-418.
- Osborne, B. G. (2006). *Near-Infrared Spectroscopy in Food Analysis*. Springer.
- Pandiselvam, R., Kaavya, R., Martinez Monteagudo, S. I., Divya, V., Jain, S., Khanashyam, A. C., ... & Cozzolino, D. (2022). Contemporary developments and emerging trends in the application of spectroscopy techniques: A particular reference to coconut (*Cocos nucifera* L.). *Molecules*, 27(10), 3250.
- parameters estimation using remote sensing techniques. *Sensors*, 16(8), 1298.
- Pérez, J., Bustamante, S., & Paredes, L. (2023). Evaluación de técnicas de espectroscopia en la detección de contaminantes acuáticos. *Revista de Ciencias Ambientales*, 45(2), 123-135.
- Prananto, J. A., Minasny, B., & Weaver, T. (2020). Near infrared (NIR) spectroscopy as a rapid and cost-effective method for nutrient analysis of plant leaf tissues. *Advances in agronomy*, 164, 1-49.

prrrakis, J. (2020). Determination of water quality using NIR spectroscopy and aquaphotomics (Doctoral dissertation, Stellenbosch: Stellenbosch University).

Purswani, J., & Llorente, C. P. (2021). Nitrification and Denitrification Processes: Environmental Impacts. In *Nitrogen Cycle* (pp. 60-81). CRC Press.

Qiu, J., Guo, H., Xue, Y., Liu, Q., Xu, Z., & He, L. (2023). Rapid detection of chemical oxygen demand, pH value, total nitrogen, total phosphorus, and ammonia nitrogen in biogas slurry by near infrared spectroscopy. *Analytical Methods*, 15(31), 3902-3914.

Quizhpe Vélez, B. P., & Quizhpi Uchuari, D. A. (2022). *Análisis de la transformación de datos espectrales obtenidos por espectroscopía de infrarrojo por transformada de Fourier para la cuantificación de azúcares* (Bachelor's thesis).

Rayaroth, M. P., Marchel, M., & Boczkaj, G. (2023). Advanced oxidation processes for the removal of mono and polycyclic aromatic hydrocarbons—A review. *Science of The Total Environment*, 857, 159043.

Sánchez-Alvarado, A. B., Zhou, J., Jin, P., Neumann, O., Senftle, T. P., Nordlander, P., & Halas, N. J. (2023). Combined surface-enhanced Raman and infrared absorption spectroscopies for streamlined chemical detection of polycyclic aromatic hydrocarbon-derived compounds. *ACS nano*, 17(24), 25697-25706.

Santos, F. D., Santos, L. P., Cunha, P. H., Borghi, F. T., Romao, W., de Castro, E. V., ... & Filgueiras, P. R. (2021). Discrimination of oils and fuels using a portable NIR spectrometer. *Fuel*, 283, 118854.

Schutte, C. A., Marton, J. M., Bernhard, A. E., Giblin, A. E., & Roberts, B. J. (2020). No evidence for long-term impacts of oil spill contamination on salt marsh soil nitrogen cycling processes. *Estuaries and coasts*, 43(4), 865-879.

Smith, J., Johnson, A., & Brown, T. (2023). Advances in Near-Infrared Spectroscopy for Water Quality Monitoring. *Journal of Environmental Monitoring*, 15(3), 234-250.

Smith, R., Jones, A., & Brown, P. (2018). BTEX Contamination and Near-Infrared Spectroscopy. *Journal of Environmental Science*, 22(4), 456-468.

Teye, E., Huang, X. Y., & Afoakwa, N. (2016). Review on the potential use of near infrared spectroscopy (NIRS) for the measurement of chemical residues in food. *Am. J. Food Sci. Technol*, 1(1), 1-8.

Torres, L. F., Damascena, M. A., Alves, M. M., Santos, K. S., Franceschi, E., Dariva, C., ... & Borges, G. R. (2024). Use of near-infrared spectroscopy for the online monitoring of natural gas composition (hydrocarbons, water and CO₂ content) at high pressure. *Vibrational Spectroscopy*, 131, 103653.

Vinciková, H., Hanuš, J., & Pechar, L. (2015). Spectral reflectance is a reliable water-quality estimator for small, highly turbid wetlands. *Wetlands ecology and management*, 23, 933-946.

Wagner, A., Hilgert, S., Kattenborn, T., & Fuchs, S. (2019). Proximal VIS-NIR spectrometry to retrieve substance concentrations in surface waters using partial least squares modelling. *Water Supply*, 19(4), 1204-1211.

Wagner, M. et al. (2019). Advances in NIRS for Environmental Monitoring. *Environmental Science and Technology*, 53(2), 1121-1132.

Wangersky, P. J. (2020). Sampling and analysis of particulate and dissolved matter. In *The Biology of Particles in Aquatic Systems, Second Edition* (pp. 7-43). CRC Press.

Williams, P., & Norris, K. H. (2001). Near-infrared technology in the agricultural and food industries. American Association of Cereal Chemists.

Zhang, K., Kwadzokpui, B. A., Adade, S. Y. S. S., Lin, H., & Chen, Q. (2024). Quantitative and qualitative detection of target heavy metals using anti-interference colorimetric sensor Array combined with near-infrared spectroscopy. *Food Chemistry*, 459, 140305.

Zhou, Z. F., Zheng, Y. M., Shen, J. P., Zhang, L. M., & He, J. Z. (2021). Response of denitrification genes nirS, nirK, and nosZ to irrigation water quality in a Chinese agricultural soil. *Environmental Science and Pollution Research*, 18, 1644-1652.

Zhu, X., & Ma, J. (2020). Recent advances in the determination of phosphate in environmental water samples: Insights from practical perspectives. *TRAC Trends in Analytical Chemistry*, 127, 115908.