

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE HIDALGO

Escuela Superior de Apan



TESIS DE LICENCIATURA

Sistema de visión artificial para el monitoreo de precipitados de cadmio en un proceso sulfato-reductor

Para obtener el título de

Licenciado en Ingeniería en Biociencias

P R E S E N T A

Luis Ángel Millán Téllez

Director de Tesis

Dr. Pablo Antonio López Pérez

Co-dirección

Dr. Fidel Meléndez Vázquez

Apan, Hidalgo., México, Junio 2026



Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo
Escuela Superior de Apan
Campus Apan

Oficio Núm. ESAP-B-28/2026

Asunto: Autorización de impresión de tesis

Luis Ángel Millán Téllez
P.D.L.B. C.
Presente

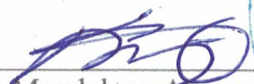
Por este medio le comunico que, el jurado asignado al pasante de la Licenciatura en Ingeniería en Biociencias **Luis Ángel Millán Téllez** (440042), a quienes les presentó el trabajo para su titulación en la modalidad de tesis con el título **"Sistema de visión artificial para el monitoreo de precipitados de cadmio en un proceso sulfato-reductor"**, después de la revisión han autorizado la impresión.

A continuación, se presentan las firmas de conformidad de los miembros de este jurado:

PRESIDENTE: Dr. Aldo Christiaan Jardínez Vera
SECRETARIO: Dra. Mónica Ivette Sánchez Contreras
PRIMER VOCAL: Dr. Pablo Antonio López Pérez
SEGUNDO VOCAL: Dr. Fidel Meléndez Vázquez
SUPLENTE: Ing. Ma. Rafaela Mohedano Juárez

Sin otro particular, agradezco de antemano su consideración al presente.

ATENTAMENTE
AMOR, ORDEN Y PROGRESO
Apan, Hidalgo; 25 de mayo del 2026


Dra. María Magdalena Armendariz Ontiveros
Coordinadora de Ingeniería en Biociencias



"Amor, Orden y Progreso"

Carretera Apan - Calpulapan Km. 8, Colonia Chimalpa
Tlalayote, Apan, Hidalgo, México C.P. 43900
Teléfono: 7717172000 Ext. 50901
esap@uaeh.edu.mx



2025



uaeh.edu.mx

DEDICATORIA

Detrás de cada meta alcanzada existen personas que sostienen, inspiran y acompañan el camino. Por ello, dedico este trabajo a quienes estuvieron presentes en mi etapa universitaria, brindándome fuerza cuando más lo necesitaba y recordándome siempre el valor de mi constancia, esfuerzo y dedicación.

A todos ustedes, mi más profunda gratitud por formar parte de esta etapa y del desarrollo de mi crecimiento personal y profesional.

AGRADECIMIENTOS

Al **Dr. Pablo Antonio López Pérez**, por aceptarme como su tesista y confiar en mí desde que cursé Biorreactores hasta la culminación de este proyecto. Agradezco su guía, disposición y acompañamiento a lo largo de este trabajo, quien fomentó la chispa de la investigación en mi formación profesional. Al **Dr. Fidel Meléndez Vázquez** por su apoyo y guía para comprender los temas abordados en esta investigación, así como a la **Dra. María Isabel Neria González** por proporcionar la muestra biológica indispensable para el desarrollo de este proyecto. Agradezco al grupo de sinodales que revisaron este trabajo, así como sus valiosas observaciones y recomendaciones, las cuales contribuyeron significativamente a mejorar este proyecto.

A mis padres, **Cecilia Téllez Fuentes** y **Ciro Millán Islas**, por ser los pilares fundamentales de mi vida y de mi formación como persona. Gracias por su amor y apoyo incondicional, por creer en mí incluso cuando yo no lo hacía e impulsarme siempre a seguir adelante. Gracias por darme las herramientas, la confianza y la libertad para crecer, por permitirme salir de casa en busca de mis sueños y lo que me apasiona, aun cuando ello implicara distancia, esfuerzos y sacrificios. Todo lo que soy y cada logro alcanzado tienen su origen en ustedes. A mis hermanos **Carlos Iván** y **Leonardo**, por ser una motivación permanente en mi camino. Como hermano mayor, cada paso que doy también está guiado por el deseo de ser un ejemplo para ustedes.

Durante mi etapa universitaria pude conocer a personas extraordinarias que dejaron de ser únicamente amigos para convertirse en parte de mi familia. Con especial cariño, me gustaría mencionar a **Urwik E. Paniagua**, por ser un amigo incondicional y un apoyo constante desde el momento que nos conocimos. Valoro profundamente tu amistad y confianza que me has brindado. A **Adriana Castillo**, por ser la persona que más me acompañó durante este proceso, gracias por explicarme cuando no entendía, por escucharme cuando dudaba de mí y por ser mi compañera de asiento a lo largo de la carrera. Me divertí y aprendí mucho a tu lado, compartiendo conocimiento, risas y tantas “millanécdotas”.

A **Scherezada Orgaz** por ser la primera persona que me habló al inicio de la carrera y actualmente ser una amiga con quien comparto gustos, ideas similares y que entiende la vibra. Deseo sinceramente que el futuro te deapre grandes cosas. A **Alberto Carrizo**, y

Gabriela A. Trejo, por ser mis compañeros, mis roomies y mi familia durante mi tiempo de foráneo. Gracias por no dejarme solo en los momentos más difíciles y por hacer de la distancia algo más llevadero. Mi gratitud completa hacia mi segunda familia, aunque la distancia nos separe, siempre tendrán en mí a alguien que los aprecia y los apoyará incondicionalmente.

Finalmente, agradezco profundamente a **William Romero Gutiérrez**. Entre tantas coincidencias, nos convertimos en destino. Gracias por acompañarme y apoyarme constantemente a lo largo de este proceso; por permitirme ser yo mismo, motivarme a seguir adelante cuando todo parecía difícil y por ayudarme a descubrir de lo que soy capaz. Este logro no habría sido el mismo sin ti. Aún quedan muchos sueños, metas y caminos por descubrir, y espero poder seguir compartiéndolos contigo.

RESUMEN

La biorremediación de metales pesados mediante bacterias sulfato-reductoras (BSR) permite la remoción de iones metálicos en sistemas acuosos a través de la reducción disimilatoria de sulfato y la formación de sulfuros metálicos insolubles bajo condiciones anaerobias. La precipitación de estos compuestos, como el sulfuro de cadmio (CdS), provoca cambios ópticos que pueden ser cuantificados mediante técnicas colorimétricas sin alterar el cultivo, lo que abre la posibilidad de desarrollar métodos de monitoreo no invasivos, de bajo costo y potencialmente aplicables en tiempo real.

En este estudio se utilizó visión artificial basada en redes neuronales convolucionales (CNN, por sus siglas en inglés) para estimar la concentración de Cd(II) residual a partir de cambios cromáticos asociados a la formación de CdS durante la cinética de remoción mediada por *Desulfovibrio alaskensis* 6SR. Se construyó un banco de 1900 imágenes obtenidas de cultivos en lote expuestos a distintas concentraciones de cadmio de 0, 25, 50, 75, 100, 125, 150, 175 y 200 ppm, que se emplearon para el entrenamiento, validación y prueba del modelo.

La CNN propuesta alcanzó una precisión global de 99.5%, una sensibilidad de 99.47% y un F1-score de 99.47% en el conjunto de prueba (n = 190 imágenes). Adicionalmente, el modelo fue evaluado bajo una condición no incluida en el entrenamiento (170 ppm), donde las estimaciones de concentración residual obtenidas a partir del análisis de imágenes mostraron concordancia a los valores determinados experimentalmente mediante espectroscopía de absorción atómica (AAS, por sus siglas en inglés), cumpliendo los límites permisibles de efluentes en base a norma de concentraciones menores a 0.003 mg/L

Finalmente, los resultados demuestran que la integración de herramientas de visión artificial a sistemas de remoción anaerobia permite inferir cuantitativamente la remoción de Cd(II) a partir de señales ópticas, destacando el potencial de esta estrategia como herramienta complementaria para el monitoreo y control de bioprocesos anaerobios.

ABSTRACT

Heavy metal bioremediation using sulfate-reducing bacteria (SRB) enables the immobilization of metal ions from aqueous systems through the dissimilatory sulfate reduction and the subsequent formation of insoluble metal sulfides under anaerobic conditions. The precipitation of these compounds, such as cadmium sulfide (CdS), induces optical changes in the system that can be quantified using colorimetric techniques without disturbing the biological culture, thereby enabling the development of non-invasive, low-cost monitoring methods with potential real-time applicability.

In this study, artificial vision based on convolutional neuronal networks (CNN) was used to estimate residual Cd(II) concentration from chromatic changes associated with CdS formation during the removal kinetics mediated by *Desulfovibrio alaskensis* 6SR. A dataset comprising 1900 images obtained from batch cultures exposed to initial cadmium concentrations of 0, 25, 50, 75, 100, 125, 150, 175, and 200 ppm, which were used for model training, validation, and testing.

The proposed CNN achieved an overall accuracy of 99.5%, a recall of 99.47%, and an F1-score of 99.47% on the test set (n = 190 images). Additionally, the model was evaluated under a condition not included during training data (170 ppm), where the residual concentration estimates obtained from image analysis showed agreement with values experimentally determined by atomic absorption spectroscopy (AAS), meeting permissible effluent limits according to regulatory standards requiring concentrations lower than 0.003 mg/L.

Finally, the results demonstrate that integrating artificial vision tools into anaerobic removal systems enables the quantitative inference of Cd(II) dynamics from optical signals, highlighting the potential of this approach as a complementary tool for monitoring and control of anaerobic bioprocesses.

ÍNDICE

RESUMEN.....	VI
ABSTRACT.....	VII
1 INTRODUCCIÓN.....	1
2 MARCO TEÓRICO	3
2.1 PRECIPITACIÓN DE CADMIO	3
2.1.1 Consideraciones generales del cadmio en el ambiente	3
2.1.2 Regulación de la concentración de cadmio en efluentes	3
2.1.3 Métodos para la remoción de cadmio.....	5
2.2 MECANISMO SULFATO-REDUCTOR DE <i>DESULFOVIBRIO ALASKENSIS</i>	5
2.2.1 Generalidades de las bacterias sulfato reductoras.....	5
2.2.2 Características de <i>Desulfovibrio alaskensis</i>	6
2.2.3 Mecanismo sulfato-reductor para la precipitación de metales pesados	7
2.3 MONITOREO DE CADMIO EN AGUAS RESIDUALES	8
2.3.1 Monitoreo y control en biorreactores.....	8
2.3.2 Sensores como método de monitoreo	9
2.3.3 Software sensor.....	11
2.4 SISTEMAS DE ADQUISICIÓN DE IMÁGENES MEDIANTE REDES NEURONALES	11
2.4.1 Inteligencia artificial y aprendizaje automático	11
2.4.2 Visión artificial y procesamiento de imágenes.....	14
2.4.3 Estructura de una neurona en las Redes neuronales.....	15
2.4.4 Arquitectura de las Redes Neuronales Convolucionales.....	16
2.5 MÉTRICAS IMPORTANTES PARA EVALUAR UNA CNN	18
2.5.1 Hiperparámetros y Banco de imágenes.....	18
2.5.2 Función de pérdida durante el entrenamiento de la CNN.....	20
2.5.3 Métricas para validar el modelo CNN.....	21
2.5.4 Interpretabilidad de la CNN mediante Grad-CAM.....	22
3 ANTECEDENTES	23
4 JUSTIFICACIÓN.....	26
5 HIPÓTESIS.....	27
5.1 HIPÓTESIS ALTERNATIVA (H_1):.....	27
5.2 HIPÓTESIS NULA (H_0):.....	27
6 OBJETIVOS.....	28
6.1 OBJETIVO GENERAL.	28
6.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	28
7 MATERIALES Y MÉTODOS	29
7.1 SISTEMA DE REMOCIÓN A PARTIR DE <i>DESULFOVIBRIO ALASKENSIS</i>	29
7.1.1 Preparación y siembra de la cepa <i>D. alaskensis</i> 6SR.....	29
7.1.2 Inoculación de la cepa a distintas concentraciones de cadmio	30
7.2 CONSTRUCCIÓN DEL BANCO DE IMÁGENES POR 10 CLASES	30
7.2.1 Instrumentación del sistema de adquisición de imagen.....	30
7.2.2 Preprocesamiento de imágenes.....	31
7.2.3 Obtención de la región de interés empleando Roboflow.....	32

7.2.4	<i>Estructura de entrada y preparación de los datos</i>	33
7.2.5	<i>Construcción de una Red Neuronal Convolucional</i>	33
7.3	VALIDACIÓN DE LA CNN.....	34
7.3.1	<i>Evaluación del desempeño y la interpretabilidad de la CNN</i>	34
7.4	VALIDACIÓN DEL MODELO BAJO CONDICIONES NO VISTAS.....	35
7.4.1	<i>Evaluación de la red empleando imágenes no vistas</i>	35
8	RESULTADOS Y DISCUSIÓN	37
8.1	OBSERVACIONES CUALITATIVAS Y ACTIVIDAD MICROBIANA	37
8.1.1	<i>Cinética de crecimiento de D. alaskensis</i>	38
8.2	CONSTRUCCIÓN Y CALIDAD DEL BANCO DE IMÁGENES	39
8.2.1	<i>Definición de la región de interés</i>	40
8.3	ENTRENAMIENTO DE LA CNN	41
8.3.1	<i>Métricas de seguimiento durante el entrenamiento de la CNN</i>	43
8.3.2	<i>Dinámica de aprendizaje del modelo CNN</i>	45
8.4	VALIDACIÓN DE LA CNN.....	46
8.4.1	<i>Matriz de confusión y métricas por clase</i>	46
8.4.2	<i>Interpretabilidad de la CNN mediante mapas de calor</i>	48
8.5	EVALUACIÓN DE LA RED A 170 PPM DE Cd(II).	49
8.5.1	<i>Cinética de remoción de Cd (II)</i>	49
8.5.2	<i>Clasificación y estimación de la concentración residual de Cd(II) de las imágenes acorde a la cinética de remoción.</i>	50
8.5.3	<i>Comparación entre las concentraciones residuales determinadas por AAS y CNN ..</i>	52
9	CONCLUSIONES	54
	REFERENCIAS	56
	LISTA DE FIGURAS	63
	LISTA DE TABLAS	64
	ANEXOS	65

1 INTRODUCCIÓN

La contaminación hídrica, producto de las actividades humanas como el consumo residencial, producción agrícola, extracción minera y procesos industriales, representa uno de los mayores desafíos ambientales en la actualidad. Estas actividades emiten una alta concentración de contaminantes de alta toxicidad, entre los que destacan los metales pesados (Beltrán & Gómez, 2015). La producción de aleaciones metálicas y baterías, síntesis química (incluyendo plásticos como el PVC), la minería y el uso de fertilizantes son responsables de la contaminación por metales (Verma & Sharma, 2017; Zhang et al., 2023). Entre los metales pesados de mayor preocupación en el agua se encuentra el cadmio (Cd) por su alta toxicidad, persistencia en efluentes y requerir una pequeña demanda biológica para provocar daños irreversibles a los seres vivos. Es por ello que la disponibilidad de métodos fisicoquímicos, como la adsorción y uso de floculantes, aportan opciones viables para la remoción y recuperación de metales. No obstante, estas técnicas resultan ser costosas y generadoras de residuos que se convierten en contaminantes secundarios (Hou et al., 2018; Zhang et al., 2023).

De esta manera, la biorremediación en el agua ofrece ser una alternativa a los métodos convencionales para la remoción de metales pesados. El proceso de adsorción con materia biológica, conocido como biosorción, se basa en el uso de organismos vivos como plantas, hongos y microorganismos, o residuos orgánicos, para la inmovilización de metales pesados para remover su presencia y mejorar la calidad de agua (Verma & Sharma, 2017; Hou et al., 2018). En particular, se ha reportado el uso de bacterias sulfato reductoras (BSR) para la precipitación de metales pesados como cadmio (Cd), plomo (Pb), zinc (Zn), cromo (Cr) y mercurio (Hg); donde el sulfuro, producto de la degradación orgánica por reducción de sulfato, funge como donador de electrones para la precipitación de iones metálicos (Hao et al., 2014; López Pérez, 2015).

Aunque el desarrollo de tecnologías biológicas busca reducir costos, minimizar el impacto ambiental y simplificar su ejecución, aún existen limitantes en la operación como la falta de sistemas de monitoreo eficaces en tiempo real (Gargalo et al., 2020). Actualmente, se requiere mejorar los sistemas de monitoreo capaces de seguir de manera precisa la concentración de metales pesados en forma elemental o precipitado. Si bien, técnicas como

la Espectroscopia de Absorción Atómica (AAS, por sus siglas en inglés) para la identificación de metales fungen como un método de monitoreo preciso, sin embargo, la técnica es invasiva y destructiva para la toma de muestra, además de tardar horas para generar datos del proceso, lo que retrasa la acción de medidas correctivas si el sistema presenta variaciones críticas en los parámetros dentro del proceso, en específico, en la operación de reactores o plantas de tratamiento de aguas residuales.

Desde esta perspectiva, la era de la industria 4.0 ha introducido herramientas mediante la automatización y digitalización mediante inteligencia artificial (IA). Estas tecnologías tienen la capacidad de predecir, clasificar, aprender y operar de forma autónoma para la toma de decisiones (Abeliuk & Gutiérrez, 2021). Un ejemplo es la visión por computadora mediante redes neuronales convolucionales (CNN, por sus siglas en inglés) ofrece un monitoreo óptico no invasivo, rápido, relativamente más económico y potencialmente escalable. Este enfoque innovador, permite estimar variables a partir de elementos visibles, como el color, mediante el análisis y procesamiento de imágenes (Khan et al., 2023; Ma et al., 2023).

Es el caso de bacterias sulfato reductoras (BSR) para el tratamiento de aguas residuales, en presencia de metales pesados, donde la formación de precipitados metálicos a partir de la excreción de sulfuro biogénico (H_2S) genera un cambio cromático característico, lo que abre la posibilidad de estimar la concentración del metal a partir de parámetros ópticos.

En este contexto, se plantea el diseño e implementación de un sistema de monitoreo en tiempo real mediante visión por computadora basado en adquisición y procesamiento de imágenes para un sistema sulfato reductor biológico, utilizando la cepa *Desulfovibrio alaskensis* 6SR. Lo anterior, permitió correlacionar de manera indirecta la concentración de cadmio, en forma de sulfuro de cadmio (CdS), precipitado en cultivos en lote a partir de colorimetría. De modo que, se busca innovar en el diseño de sensores aplicando la tecnología que ofrece la IA en problemas ambientales como la contaminación hídrica por cadmio. Esto permitirá monitorear la concentración de cadmio permisible de acuerdo a las normas de la región donde se implemente este sistema de monitoreo.

2 MARCO TEÓRICO

2.1 Precipitación de cadmio

2.1.1 Consideraciones generales del cadmio en el ambiente

Los metales pesados se encuentran de manera natural en la corteza terrestre en bajas concentraciones. Sin embargo, diversas actividades humanas incrementan la liberación y acumulación en el ambiente, lo que superan los valores de referencia establecidos (0.9 a 0.1 $\mu\text{g}/\text{m}^3$). Debido a su persistencia y capacidad de bioacumulación, los niveles elevados pueden ser nocivos para cualquier ser vivo (Beltrán & Gómez, 2015; Wołowiec et al., 2019). El cadmio (Cd), es uno de los metales pesados perjudiciales debido a su dificultad para biodegradarse en el ambiente, se propaga universalmente y es carcinógeno. Los iones cadmio, Cd(II), son altamente solubles en agua y se propagan fácilmente en distintos fluidos como la sangre y sistemas vasculares vegetales (Shahat et al., 2021). Su toxicidad se debe a su capacidad de destruir sitios enzimáticos activos y alterar el sistema nervioso en seres humanos, incluso a concentraciones menores a 10 mg/día (Pérez et al., 2020).

Los iones Cd(II) tiene una alta afinidad por los grupos tiol y grupos disulfuro presentes en macromoléculas, alterando principalmente el plegamiento de las proteínas. En plantas, la presencia de iones Cd(II) disminuye la tasa de germinación, aumenta la producción de fitoquelatinas, interfiere en la simbiosis entre microorganismos y plantas, además de incrementar la susceptibilidad a la infestación por hongos (Beltrán & Gómez, 2015; Irfan et al., 2021). Por otro lado, en ecosistemas acuáticos, la exposición del metal aumenta la formación de especies reactivas de oxígeno, lo que provoca daño oxidativo en las células. La contaminación de Cd en suelos agrícolas afecta la fertilidad y toxicidad de la flora de la zona, que, en consecuencia, se refleja en la cadena trófica. Las sales de cadmio en aguas contaminadas pueden incorporarse en los alimentos, plantas acuáticas y organismos mediante procesos naturales como la bioacumulación y biomagnificación (Pérez et al., 2020).

2.1.2 Regulación de la concentración de cadmio en efluentes

Las principales fuentes de Cd proceden de efluentes, cargas de aguas con residuos procedentes de industrias basadas en pinturas, plásticos, herrajes, barras de control de reactores nucleares, desechos electrónicos, baterías y placas de circuitos de computadora (Nazmul et al., 2020). La purificación de estos efluentes se realiza mediante una serie de

etapas con técnicas específicas para la remoción de contaminantes conocido como proceso de tratamiento de aguas residuales (PTAR). El objetivo principal es obtener la calidad exigida en la normatividad vigente, a nivel nacional o internacional, para permitir la descarga de efluentes a cuerpos de agua o su reutilización en otras actividades (Ortega Ramírez & Sánchez Rodríguez, 2021). Cada etapa tiene características diferentes que se definen por el tipo de tratamiento, objetivo y contaminante a remover (Tabla 1).

Tabla 1. Características de las etapas del PTAR.

Tratamiento	Pretratamiento	Primario	Secundario	Terciario
Objetivo	Eliminar residuos de gran volumen.	Separación de partículas de menor volumen.	Remoción por biorremediación.	Proporcionar calidad y pureza de acuerdo a la normatividad.
Métodos de tratamiento	Físicos.	Físicos y químicos.	Biológicos.	Biológicos, físicos y químicos.
Tipos de residuos removidos	Basura, rocas, ramas, desechos orgánicos.	Sólidos suspendidos, aceites y grasas.	Compuestos orgánicos e inorgánicos, metales pesados, contaminantes emergentes, etc.	Sólidos suspendidos, materia orgánica no biodegradable, microorganismos, etc.

A nivel internacional, la Organización Mundial de la Salud (OMS) establece la concentración máxima permitida de Cd(II) en el agua potable debe ser inferior a 3.0 µg/L. Por su parte, la Agencia de Protección Ambiental de EE.UU. establece un límite máximo disuelto en agua dulce, que es de 1.8 µg/L, mientras que, en Europa, el límite máximo permitido en aguas superficiales es de 0.45 µg/L (Nazmul et al., 2020; Shahat et al., 2021). En México, la NOM-117-SSA1-1994 establece como límite máximo 0.005 mg/L de Cd, sea en forma sólida o disuelto en el agua (Secretaría de Salud, 2021).

2.1.3 Métodos para la remoción de cadmio

Los métodos de tratamiento o remoción son técnicas que tienen la función de reducir la carga de contaminantes sea en el agua, suelo y aire (Wołowiec et al., 2019). En el caso del agua, se han probado distintas técnicas para la remoción de iones de metales pesados de efluentes y otros sistemas hídricos, naturales o sintéticos (Tabla 2). Se ha reportado que la adsorción es el método más adecuado debido a su alta eficiencia, bajo costo y facilidad de operación. Además, se ha implementado el uso de microorganismos como biosorbentes para aprovechar sus características metabólicas dando una opción más viable y sustentable (Pérez et al., 2020; Ortega Ramírez & Sánchez Rodríguez, 2021).

2.2 Mecanismo sulfato-reductor de *Desulfovibrio alaskensis*

2.2.1 Generalidades de las bacterias sulfato reductoras

Las bacterias sulfato reductoras (BSR) son microorganismos anaeróbicos heterótrofos capaces de oxidar compuestos orgánicos simples, utilizando sulfato como aceptor de electrones para reducirlo a sulfuro (Tripathi et al., 2021). Las BSR desempeñan un papel clave en la conversión biológica de azufre participando en la formación de sulfuros, la volatilización de sulfuro de hidrógeno (H_2S), y la precipitación de sulfuros metálicos (Hao et al., 2014). Durante su crecimiento, las BSR producen una gran cantidad de H_2S que contribuye al mantenimiento de una atmósfera anaeróbica y naturalmente, incorporar el compuesto en el ciclo del azufre (Neria-González & Aguilar-López, 2021).

Este grupo de bacterias crece en una amplia gama de ambientes con temperatura desde 0 °C hasta 100 °C, presentan tolerancia a la salinidad y un rango de pH óptimo para su crecimiento entre 3 a 9.8 (Tripathi et al., 2021). En condiciones óptimas, las BSR forman biopelículas, las cuales, se describen como un conglomerado de bacterias asociadas a una matriz base producida por su metabolismo conocida como sustancias poliméricas extracelulares (SPE). Esta matriz es fundamental para la integridad estructural y la agrupación celular (Pal & Lavanya, 2022). Las principales funciones de una biopelícula son:

- Facilitar la adhesión a una superficie a través de interacciones electrostáticas.
- Promover la retención de agua y nutrientes como una estrategia eficaz para su supervivencia.
- La adsorción de compuestos del entorno mediados por la matriz.

Tabla 2. Métodos de remoción de iones de metales pesados.

Tratamiento	Descripción	Referencia
Precipitación química	Conversión de contaminantes sólidos e insolubles a partir de compuestos que precipiten para su posterior filtrado.	(Sheikh et al., 2023)
Adsorción	Uso de compuestos, como el carbón activado, que permitan la adhesión de iones metálicos en la superficie de esta.	(Nazmul et al., 2021; Pérez et al., 2020)
Biosorción	Uso de microorganismos, plantas y derivados orgánicos que actúen como adsorbentes.	(Pérez et al., 2020)
Intercambio iónico	Intercambio de iones entre una fase líquida y una sólida, regularmente una membrana de resina polimérica derivada de hidrocarburos.	(Wołowiec et al., 2019)
Filtración por membrana	Usada ampliamente para la remoción de partículas características y es impulsada por la diferencia de presión.	(Verma & Sharma, 2017)
Ósmosis inversa	Filtro molecular que elimina alrededor del 99% de los minerales disueltos en la solución.	(Hou et al., 2018)
Métodos electroquímicos	Uso de las propiedades eléctricas de los iones metálicos para su recuperación mediante un cátodo.	(Wołowiec et al., 2019)
Fitorremediación	Uso de plantas para la remediación parcial ante sustancias contaminantes. Se divide en fitodegradación, fitoacumulación, fitoestimulación, fitovolatilización, rizofiltración y fitoestabilización.	(Hou et al., 2018; Verma & Sharma, 2017)
Nanotecnología verde	Uso de nanomateriales con la capacidad reactiva para la captación de iones metálicos.	(Sheikh et al., 2023)

2.2.2 Características de *Desulfovibrio alaskensis*

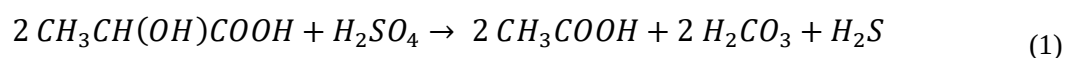
El género *Desulfovibrio* es uno de los grupos más estudiados entre las BSR. Estas bacterias son metabólicamente versátiles, pueden acoplar la oxidación de una gran variedad de donadores de electrones a la reducción del sulfato. Además de usar sulfato como aceptor de electrones, puede utilizar azufre, hidrógeno y sulfitos durante la respiración anaerobia (Neria-González & Aguilar-López, 2021). La especie *Desulfovibrio alaskensis* fue descrita

en 2004 por Feio y colaboradores, tras su aislamiento de un depósito de aceite en Alaska. A partir de su identificación, *D. alaskensis* se caracterizó como un organismo unicelular, perteneciente a las bacterias Gram-negativas, no formadoras de esporas y con morfología de Vibrio (bacilo curvado) y presentan un único flagelo polar. Requiere un pH entre 6.5 y 8.5, temperaturas de 10 a 45 °C y hasta un 10 % (p/v) de NaCl. Usa lactato como principal fuente de carbono, aunque también puede usar etanol, acetato y ácidos grasos de cadena corta (Feio et al., 2004; Neria-González & Aguilar-López, 2021).

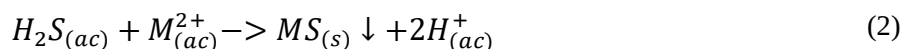
2.2.3 Mecanismo sulfato-reductor para la precipitación de metales pesados

El mecanismo sulfato reductor en *Desulfovibrio* emplea adenosín trifosfato (ATP) para la reducción de sulfato (SO_4^{2-}) a H_2S . Durante este proceso, se oxida el lactato a piruvato y luego a acetil-CoA, el cual se transforma en acetato generando un ATP a partir de un adenosin difosfato (ADP) mediante fosforilación (Xu & Chen, 2020). La reducción de SO_4^{2-} requiere 8 electrones, mientras que la oxidación del lactato a acetato produce 4 electrones. Por esta razón, el lactato y el sulfato se utilizan en una proporción molar de 2:1. El ATP producido compensa el coste energético inicial necesario para la activación del mecanismo reductor. Para que una molécula de SO_4^{2-} se pueda reducir, requiere transformarse a 5-fosfosulfato de adenosina (APS, por sus siglas en inglés) mediante la ATP sulfurilasa, requiriendo dos moléculas de ATP (Tripathi et al., 2021).

Además, el mecanismo utiliza protones provenientes de ácidos orgánicos como formiatos o alcoholes de cadena corta como donadores de electrones para la reducción de SO_4^{2-} (Álvarez-Márquez et al., 2022). Las cepas de *Desulfovibrio* oxidan lactato de forma incompleta a acetato para reducir los iones SO_4^{2-} a H_2S (Ecuación 1).



El H_2S producido en el metabolismo de las BSR, puede reaccionar con los iones metálicos presentes en el ambiente para formar precipitados metálicos (Ec. 2). Este precipitado metálico es útil para la remoción en aguas residuales, ya que presenta una alta densidad, baja solubilidad, así como buenas propiedades de deshidratación y sedimentación lo que facilita su eliminación de los efluentes (Peña-Caballero et al., 2016; Xu & Chen, 2020).



La estructura de la matriz EPS de la biopelícula contiene aminoácidos ácidos y no polares que actúan como ligandos con los iones metálicos y precipitados en la estructura proteica de la biopelícula. Este proceso sigue hasta la saturación del flóculo formado (Xu & Chen, 2020). En la Figura 1, se generaliza el mecanismo sulfato reductor de *Desulfovibrio* y otras interacciones para la remoción de metales pesados. Ejemplos de las aplicaciones de este mecanismo es el trabajo de López-Pérez et al. (2013), donde demostraron la capacidad de remoción de Cd(II) de *D. alaskensis* 6SR, cepa aislada de un acueducto en México, a partir de la precipitación selectiva mediada por H_2S , obteniendo sulfuro de cadmio (CdS), precipitado insoluble y de alto peso molecular, el cual, es adsorbido por la EPS producida bajo condiciones de estrés por el mismo metal. La cepa logró remover el 99.9% del metal presente en el medio, siendo su umbral máximo de tolerancia a 170 ppm de Cd.

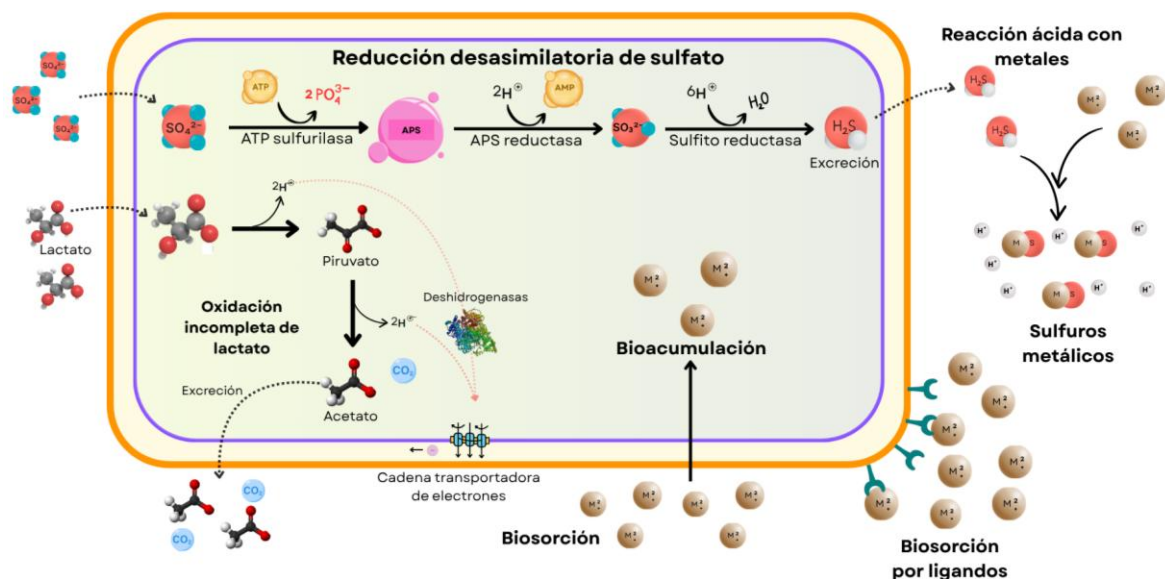


Figura 1. Mecanismos de reducción desasimilatoria de sulfato y remoción de metales por bacterias sulfatorreductoras.

2.3 Monitoreo de cadmio en aguas residuales

2.3.1 Monitoreo y control en biorreactores

Dentro de un biorreactor, las variables relacionadas a la cinética de crecimiento de los microorganismos están en constante cambio, lo que las hace complejas de medir

(Austerjost et al., 2021). Por esta razón, es fundamental monitorear y controlar todo el proceso para mantener los parámetros establecidos y tomar acciones correctivas, en caso de cualquier perturbación. El monitoreo de variables críticas permite dar un seguimiento preciso y predecir de manera adecuada del crecimiento bacteriano. De este modo, el control de estas variables mantiene un ambiente idóneo para que la reacción bioquímica se lleve a cabo de manera eficiente (Wang et al., 2020). Además, la comprensión y el control íntegro en biorreactores requieren un seguimiento y observación para desentrañar su complejidad y aprovechar su potencial.

La dificultad surge de problemas relacionados con la accesibilidad física, lo que hace que ciertas mediciones sean difíciles de cuantificar. Además, la ausencia de técnicas para el monitoreo rentables y confiables hace que algunas mediciones sean demasiado costosas de realizar (Badreldin et al., 2024). El uso de nuevos enfoques de monitoreo y control, como las herramientas de Tecnología Analítica de Procesos (PAT, por sus siglas en inglés), mejora la forma de medir y controlar variables críticas mediante sistemas robustos y fiables (Gargalo et al., 2020).

2.3.2 Sensores como método de monitoreo

Un sensor es un dispositivo que detecta cambios de una variable específica y los transmite en señales eléctricas, que después son interpretadas para obtener datos que permitan la toma de decisiones adecuada ante el fenómeno de estudio, facilitando la automatización de procesos biotecnológicos mejorando la calidad de los productos, optimizando el rendimiento y evitando pérdidas debido a fallas humanas (Busse et al., 2017). El monitoreo utilizando sensores requiere una serie de pasos que van desde la selección de la variable a medir hasta la interpretación de datos (Figura 2). Cada fase considera la dinámica de la variable, la técnica a emplear y el impacto de las perturbaciones en el proceso (Wang et al., 2020). En particular, la mayoría de las variables relacionadas con las transformaciones biológicas son difíciles de medir y monitorear.

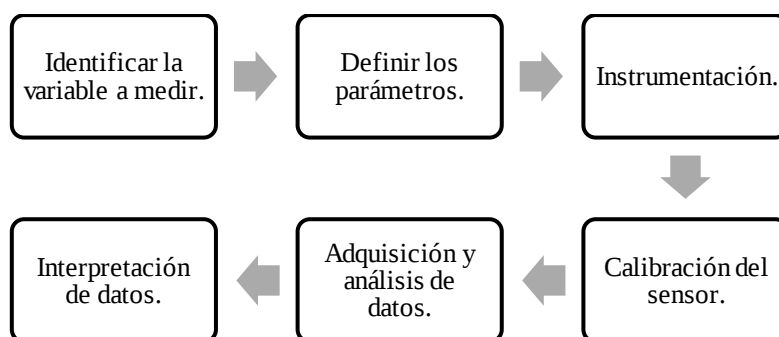


Figura 2. Etapas del monitoreo en los bioprocesos a partir de sensores.

Los métodos de monitoreo, los sensores y analizadores asociados, se pueden clasificar según su posición y contacto en el biorreactor; esta clasificación permite obtener variables de menor a mayor complejidad, dependiendo del tiempo transcurrido desde la toma de muestra hasta el resultado analítico (Figura 3).

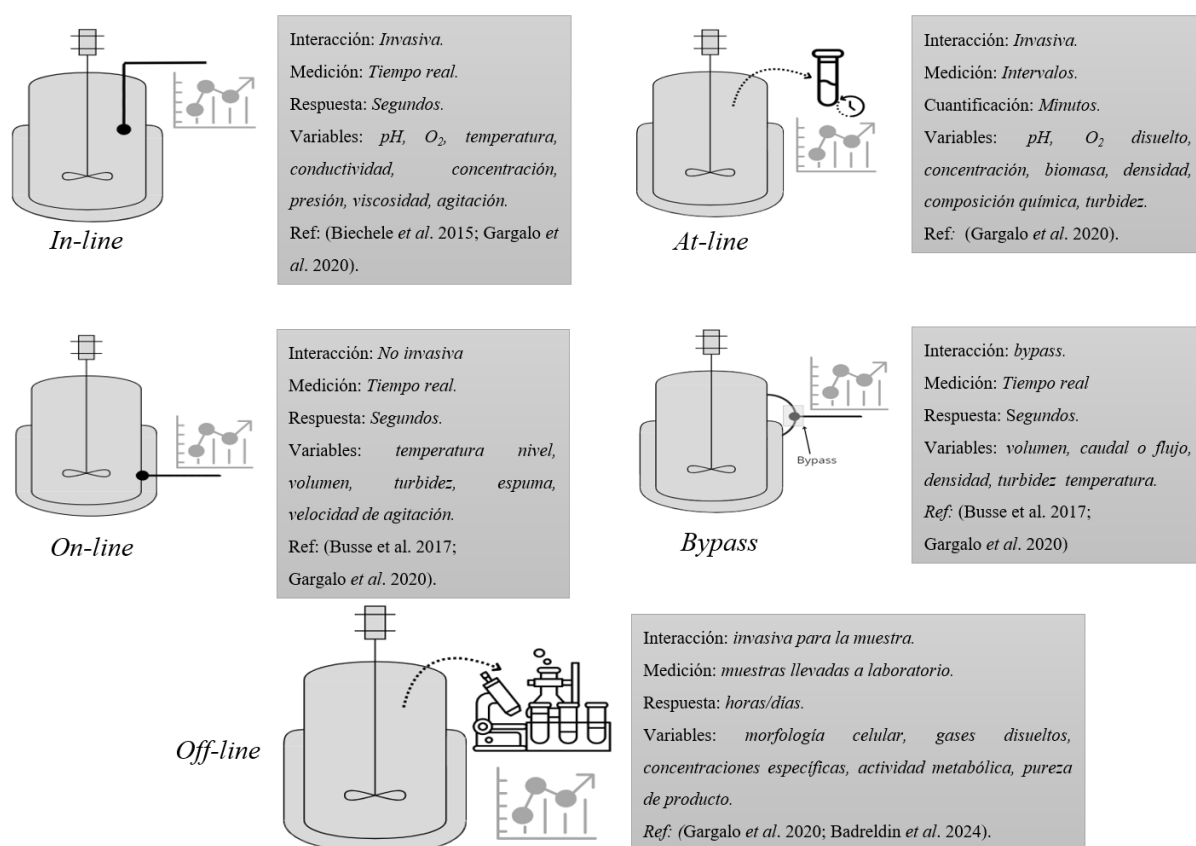


Figura 3. Clasificación de sensores respecto a su posición en la toma de muestra, interacción en el biorreactor, tiempo de respuesta y variables medibles.

2.3.3 Software sensor

La implementación de métodos computacionales para el monitoreo de sistemas biológicos ha permitido la obtención de variables complejas de forma indirecta, es decir, estimar resultados a partir de variables físicas medibles. Dependiendo de la manera de procesar y generar datos, los sensores se pueden clasificar en *model-driven* (basados en modelos) y *data-driven* (basados en datos) (Tabla 3) (Badreldin et al., 2024). Dentro de los sistemas *Model-driven* se encuentran los sensores software, o soft-sensor, que combinan un sistema físico y un algoritmo de estimación para obtener variables complejas a partir de variables simples para el monitoreo en línea (Biechele et al., 2015). El soft-sensor consta de dos componentes:

- Sensor (*hardware*) que genera variables físicas medibles del sistema.
- Algoritmo (*software*): programa para la estimación de variables de estado.

Tabla 3. Diferencias entre *model-driven* y *data-driven* (Badreldin et al., 2024).

Características	Model-driven	Data-driven
Funcionamiento	Basado en modelos matemáticos/físicos del sistema	Basado en datos y algoritmos de aprendizaje
Variables de entrada	Variables medibles (pH, temperatura, flujo)	Variables medibles (datos históricos)
Variables estimadas	Variables no medibles (biomasa, metabolismo)	Variables complejas (biomasa, estrés, etc.)
Precisión	Depende del modelo y supuestos	Depende de datos, entrenamiento y calibración
Costos	Generalmente menores (menos dependencia a datos masivos)	Pueden ser altos (datos, sensores, entrenamiento)
Aplicaciones	Modelos mecanísticos, balances, observadores	Soft sensors, Redes neuronales, regresión.

2.4 Sistemas de adquisición de imágenes mediante Redes Neuronales

2.4.1 Inteligencia artificial y aprendizaje automático

La implementación de la inteligencia artificial (IA) en los bioprocesos ha permitido desarrollar alternativas para el análisis e interpretación de una gran cantidad de datos; el

modelado y predicción de fenómenos atípicos; monitoreo, control y optimización en tiempo real de las variables críticas del sistema (Khan et al., 2023). Para proporcionar la capacidad de aprendizaje a un algoritmo del fenómeno al que debe dar solución, el *Machine Learning* (ML), subcampo de la IA, permite analizar y comparar conjuntos de datos para encontrar patrones mutuos y explorar diferencias a fin de aprender y tomar una decisión que beneficie el seguimiento del proceso sin necesidad de programar cada escenario (Gargalo et al., 2020).

Realizar un modelo automático capaz de generar salidas similares a datos experimentales o condiciones que requieren de un conjunto o base de datos que sirvan de entrenamiento para el algoritmo. Cuando se le asignan etiquetas a los datos, donde se conoce la respuesta correcta, se denomina aprendizaje supervisado (Kourounis et al., 2023). Los modelos respecto al aprendizaje supervisado incluyen:

- Algoritmos de Clasificación: permite clasificar datos respecto a un umbral dado. Toma variables discretas, para predecir etiquetas correctas a los valores desconocidos. Pueden ser valores lógicos.
- Algoritmos de Regresión: permite predecir un valor desconocido a partir de valores contemplados para su entrenamiento. Usa un modelo matemático para poder estimar correctamente la salida requerida.

En caso de no establecer un conjunto de datos etiquetados ni una salida “correcta” para su entrenamiento, el sistema opera con un aprendizaje no supervisado, buscando patrones y agrupaciones intrínsecas (clústeres) dentro de la información proporcionada (Alvi et al., 2023).

Para tareas más complejas, como el análisis de imágenes, el *Deep Learning* (DL) o aprendizaje profundo constituye la herramienta más potente. Los modelos de DL, inspirados en la estructura de redes neuronales, emplean múltiples capas de procesamiento para aprender representaciones abstractas y jerárquicas de los datos, siendo especialmente eficaces con información no estructurada como imágenes, audio o texto (Badreldin et al., 2024). Entre sus arquitecturas se encuentran las Redes Neuronales Convolucionales (CNN, por sus siglas en inglés), diseñadas específicamente para el procesamiento de datos visuales. A partir de ello, la IA ha ampliado sus funciones, lo que ha permitido realizar tareas aún más complejas (Tabla 4).

Tabla 4. Tipos de inteligencia artificial y sus principales aplicaciones en los bioprocesos.

Tipo		Descripción	Aplicaciones	Referencia
<i>Machine Learning</i>	Regresión Lineal	Explica la relación entre una variable numérica y otra mediante el ajuste de una recta.	• Predicción de crecimiento microbiano. • Predicción de sustrato/producto en un reactor.	(Gargalo et al., 2020)
	Regresión logística	Predice el comportamiento de las variables atribuyendo una función de probabilidad con valores de 0 y 1.	• Predicción del comportamiento lógico de pulsos en biosensores.	(Gargalo et al., 2020)
	Árbol de decisiones	Sistema con conjunto de n nodos que toma m opciones como salida para la toma de decisiones.	• Optimización de condiciones de cultivo. • Evaluación de riesgo.	(Choi et al., 2020)
<i>Deep Learning</i>		Buscan entender y modelar la abstracción de un fenómeno. Emplea un gran conjunto de datos y varias capas para ejecutar el modelo.	• Optimización multivariable de cinética microbiana. • Predicción de ambientes óptimos para el crecimiento de metabolismos.	(Badreldin et al., 2024; Gupta et al., 2024)
Redes neuronales	Red neuronal <i>Feedforward</i>	La información fluye en una sola dirección. Usa la misma función matemática que la regresión logística.	• Optimización de condiciones de crecimiento. • Estimación de remoción de metales en agua.	(Badreldin et al., 2024; Gupta et al., 2024)
	Red neuronal convolucional	Procesamiento de imágenes y el reconocimiento de objetos dentro de las imágenes.	• Detección visual de morfología. • Detección de contaminantes en agua. • Estimación de variables de crecimiento.	(Choi et al., 2020; Gupta et al., 2024)

2.4.2 Visión artificial y procesamiento de imágenes

La visión por computadora busca emular el sistema visual humano mediante algoritmos que procesan imágenes digitales para extraer características de interés que pueden ser cuantificadas (Alonso & Jara, 2016). Matemáticamente, una imagen digital se define como una función bidimensional discreta $I(x, y)$, donde (x, y) representan las coordenadas espaciales de un píxel, y el valor de la función corresponde a su intensidad (escala de grises) o a un vector de componentes en un espacio de color (RGB, HSV, etc.). La adquisición de imagen en bioprocesos se basa principalmente en el uso de sensores ópticos que muestrean esta función, generando una matriz de dimensiones $M \times N \times C$, donde, M es el número de filas (alto), N el número de columnas (ancho), C es el número de canales en un rango $[0, 255]$, o $[0, 1]$ en un rango normalizado (Van der Velden et al., 2022; Mhade & Kaushik, 2023). Las imágenes son exportadas y procesadas por un algoritmo, el cual, segmenta las imágenes y analiza por áreas de acuerdo al número de píxeles (Ragi et al., 2023).

El procesamiento de imágenes, permite la descomposición de una imagen en estructuras significativas para facilitar tareas como la detección, reconocimiento y clasificación de objetos a partir de transformaciones matemáticas sobre la matriz obtenida de la imagen (Giuliani, 2022; Mhade & Kaushik, 2023). Los pasos del procesamiento de imágenes permiten ahondar en patrones reconocibles, dados por una base de datos, para identificar o dar una respuesta al problema (Figura 4). Para facilitar los requerimientos en el análisis se utilizan descriptores, los cuales permiten acotar las características de interés. Los más usados son los descriptores geométricos (contorno, área, tamaño o distancia) y descriptores visuales locales de bajo nivel (color, textura, brillo) o de alto nivel (profundidad, posición espacial, emociones, etc) (Alonso & Jara, 2016; Ragi et al., 2023).

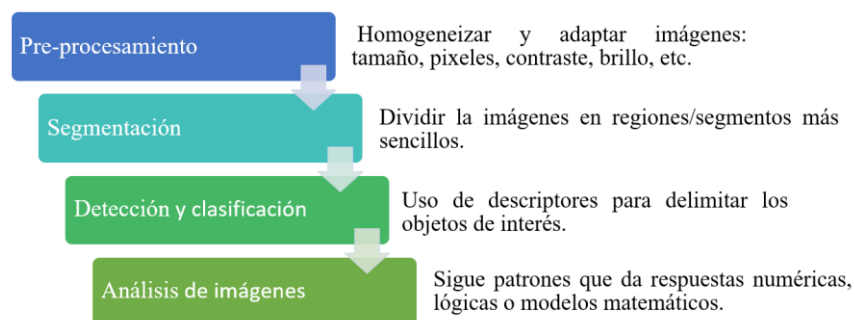


Figura 4. Etapas del procesamiento y análisis de imágenes.

2.4.3 Estructura de una neurona en las Redes neuronales

Las redes neuronales artificiales (ANN, por sus siglas en inglés) son modelos que emulan el funcionamiento del cerebro humano. La unidad básica de transmisión de información en la red, al igual que en el cerebro, se conoce como neurona o perceptrón, la cual consta de cuatro componentes: datos (x), función de entrada regida por los pesos (w), los resultados (y) definidos por una función de activación (σ) y el sesgo dado por la suma ponderada de los datos de entrada (b) (Figura 5A) (Cantero et al., 2016; Alvi et al., 2023). El modelo más común de una neurona está dado por la función:

$$y = \sigma(wx + b) \quad (3)$$

La arquitectura de una ANN está dada por la designación de las capas de neuronas en jerarquías conectadas parcial o totalmente (Figura 5B):

1. Capa de entrada: entrada de datos, hay n neuronas respecto a n datos asignados a la red.
2. Capas ocultas: puede tener dos o más, las capas ocultas le dan el concepto de profundidad a una red.
3. Capa de salida: Las salidas de la capa son el mismo número de clasificadores o salidas requeridas.

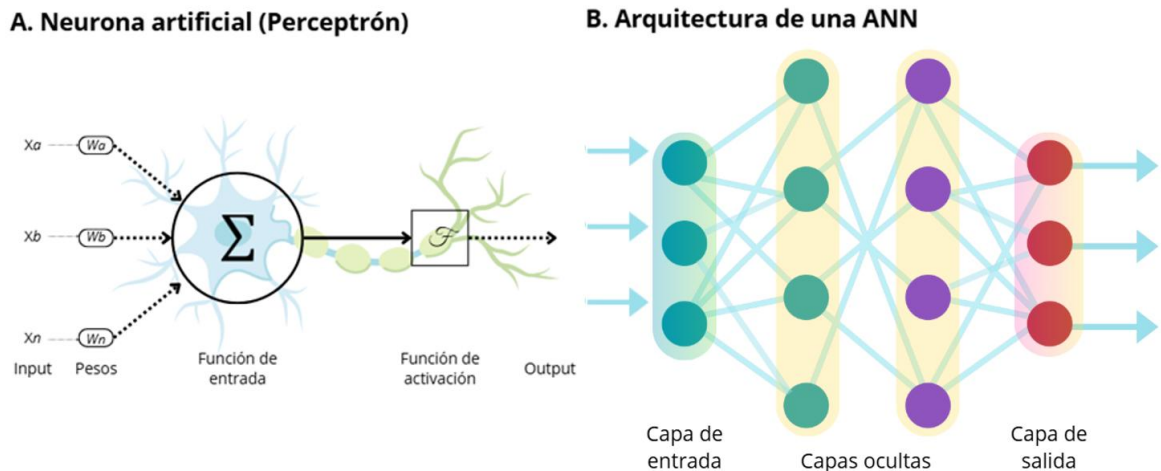
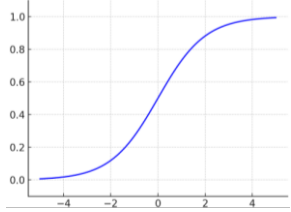
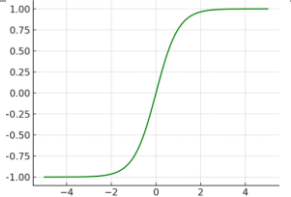
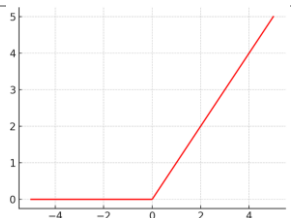
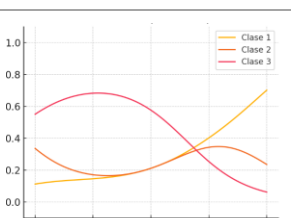


Figura 5. Estructura de una ANN. **A.** Estructura general de una neurona artificial comparada con una neurona biológica. **B.** Arquitectura general de la ANN.

Para poder activar o estimular otra neurona y la información pase a la siguiente capa, se implementan funciones de activación, con las que se simula el umbral electroquímico que permite la transmisión de información entre neuronas. En la Tabla 5, se muestran algunas de las funciones más empleadas en ANN.

Tabla 5. Funciones de activación utilizadas en Redes Neuronales.

Función de activación	Expresión matemática	Rango	Descripción	Gráfico
Sigmoidal	$\sigma(z) = \frac{1}{1 + e^{-z}}$	[0,1]	Curva en forma de S suavizada.	
Tangente hiperbólica	$\sigma(z) = \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}}$	[-1,1]	Curva simétrica centrada en (0, 0). Forma de S	
ReLU	$\sigma(x) = \max(0, z)$	[0, + ∞)	Línea constante para z<0, recta creciente con m=1 para z≥0.	
Softmax	$\sigma(z_i) = \frac{e^{z_i}}{\sum_{j=1}^K e^{z_j}}$ $\sum_{i=1}^k \sigma(z_i) = 1$	(0,1],	Curva exponencial normalizada en función de distribución de probabilidad.	

Nota: z es suma ponderada de las entradas ($w_{ij} \cdot x_{ij}$) más el sesgo (b).

2.4.4 Arquitectura de las Redes Neuronales Convolucionales

La percepción visual también ha inspirado a modelos IA como las CNN, diseñadas para el procesamiento de imágenes que permiten la adquisición de información a partir de características visuales (Abeliuk & Gutiérrez, 2021). A diferencia de la arquitectura de una ANN, el diseño de una CNN consta de dos etapas:

1. Las capas de extracción de características: capa convolucional, capa de agrupamiento (*pooling*) y capa de aplanamiento (*Flatten*).
2. Las capas de clasificación: red neuronal común, donde las neuronas están completamente conectadas en cada capa.

En la capa de convolución se realizan operaciones de convolución empleando filtros o *kernels* (K), previamente definidos, en la matriz de píxeles (I) con el objetivo de generar mapas de características (Hussain et al., 2025). Para una imagen, la convolución se define como:

$$(I * K)(i, j) = \sum_m \sum_n I(i - m, j - n) \cdot K(m, n) \quad (4)$$

Esta operación se realiza tantas veces como el filtro pueda desplazarse en la imagen. Los filtros funcionan como pesos de la neurona y varían de acuerdo a la cantidad de capas de convolución de la CNN.

La capa *pooling*, permite la reducción de dimensiones de la matriz obtenida de las capas de convolución. Estas capas suelen intercalarse entre cada capa de convolución. Se puede colocar al final de la extracción de características una capa de *max-pooling* para obtener el resultado máximo de la imagen evaluada.

La capa *flatten*, opera la conversión de la matriz final en un vector o matriz unidimensional, esto permite interconectar las capas de extracción de características con la arquitectura de clasificación, es decir, la ANN totalmente conectada. La última capa de la ANN contiene las mismas neuronas como clasificadores dados. La arquitectura general y operaciones en la CNN se pueden resumir en la Figura 6.

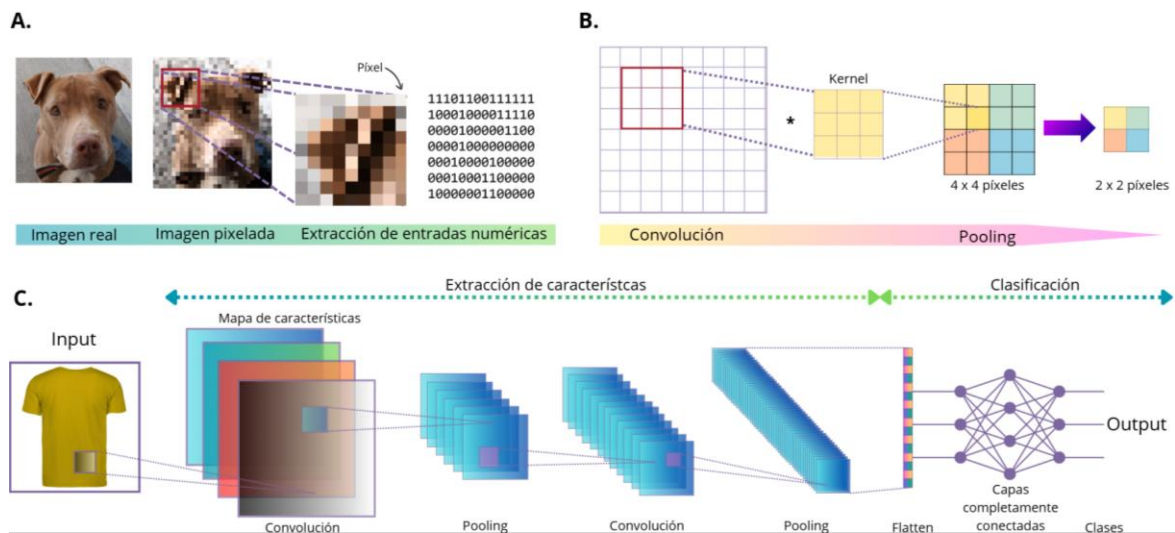


Figura 6. La extracción de características de imágenes y arquitectura de una CNN. **A.** Se extraen características numéricas de los píxeles de una imagen en un rango de 0, 255, o normalizada 0,1 para obtener una matriz. **B.** En estas matrices se aplican operaciones de convolución a partir de un filtro (kernel) definido. **C.** Este proceso se realiza en cada capa de la CNN. La arquitectura muestra dos etapas: la extracción de características y la clasificación mediante capas completamente conectadas.

2.5 Métricas importantes para evaluar una CNN

Al evaluar de manera rigurosa una CNN se requiere analizar un conjunto de métricas que permiten cuantificar el aprendizaje, la capacidad de generalización del modelo, así como parámetros esenciales que afectan la arquitectura y el desempeño del modelo. En esta sección, se presentan algunas métricas importantes para el modelo que ayudan a entender cómo y qué tan bien aprende la red a detectar errores, así como el ajuste de hiperparámetros esenciales para obtener un modelo robusto (Maxwell et al., 2021).

2.5.1 Hiperparámetros y Banco de imágenes

Los hiperparámetros de una CNN son variables de configuración previas al entrenamiento del modelo y son seleccionados mediante ensayos de prueba y error, iteraciones y/o criterios teóricos. Estos influyen en la arquitectura de la red, así como, en el comportamiento durante el entrenamiento (Goodfellow et al., 2016; Chotel, 2017). En la Tabla 6, se mencionan algunos de los hiperparámetros más relevantes a tomar en cuenta al diseñar, entrenar y/o validar una CNN.

Tabla 6. Hiperparámetros clave para la arquitectura de la CNN.

Hiperparámetro	Descripción
Tamaño de imagen	Dimensión de la imagen introducidas a la red.
Épocas	Número de ciclos.
Lote	Número de imágenes procesadas por ciclos.
Tasa de aprendizaje	Controla el paso de actualización de los pesos
Paciente	Número del mínimo de ciclos sin mejora durante el entrenamiento.
Dropout	Función para "dormir" neuronas con el fin de evitar el sobreajuste del modelo.
Capas ocultas	Capas intermedias entre la capa de entrada y la de salida.
Kernel	Tamaño de la matriz filtro para la extracción de características en una imagen.

Al procesar el conjunto de imágenes, la CNN divide la base de datos en tres subconjuntos:

- Entrenamiento: permite determinar y ajustar los parámetros e hiperparámetros que definen la red. Se calculan y actualizan los pesos, aprende de los patrones.
- Validación: Este subconjunto permite evaluar el rendimiento durante el ajuste de hiperparámetros. Se debe evitar el sobreajuste de la red. Se miden las métricas de precisión, pérdida y recall.
- Prueba/Test: son datos no vistos por la CNN durante el entrenamiento y la validación, los cuales, se utilizan para evaluar el desempeño de la red ante imágenes nuevas.

La distribución empleada comúnmente de la base de datos se asigna en 70% entrenamiento, 20% validación y 10% para el test (Ferreira & Camacho, 2021). Esta división garantiza la evaluación robusta del modelo.

2.5.2 Función de pérdida durante el entrenamiento de la CNN

La pérdida (*Loss*), es una métrica que expresa el progreso del error entre las predicciones del modelo respecto a los valores reales durante las épocas asignadas. El objetivo de monitorear esta métrica, es minimizar el error entre la predicción y la etiqueta, lo que nos permite obtener los mejores pesos de la red (Chotell, 2017). La pérdida se calcula mediante la siguiente ecuación:

$$Loss = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N L(y_i, \hat{y}_i) \quad (5)$$

Donde y_i es el valor real, $\hat{y}_i$ el valor predicho por el modelo, L la función de pérdida, N el número de épocas.

La función de pérdida depende de si el modelo es de clasificación o regresión. Para este proyecto, que se enfoca en una clasificación multiclase se optó por usar la entropía cruzada categórica. Esta función favorece las distribuciones de probabilidad que asignen alta probabilidad a la clase real. Durante el entrenamiento, una disminución en los valores calculados indica que el modelo está aprendiendo a separar correctamente las clases.

$$L_{CCE} = - \sum_{c=1}^C y_c \log(\hat{y}_c) \quad (6)$$

Donde C es el número de clases, y_c es el valor real de la clase y $\hat{y}_c$ es la probabilidad predicha por el modelo obtenido de la función *softmax*.

Además, existe una actualización de pesos (w_{t+1}) dada por la siguiente ecuación. Donde el gradiente de pérdida (∇L) y la tasa de aprendizaje (η) controlan el ajuste de los pesos (w_t) en cada iteración del algoritmo (t). Esta ecuación describe el descenso de gradiente empleado para entrenar modelos de aprendizaje automático.

$$w_{t+1} = w_t - \eta \nabla L(w_t) \quad (7)$$

El tiempo de entrenamiento por época y el tiempo de inferencia son métricas relevantes para evaluar la eficiencia del modelo. Estas métricas son especialmente

importantes en aplicaciones en tiempo real o con restricciones computacionales (Ferreira & Camacho, 2021).

2.5.3 Métricas para validar el modelo CNN

Antes de definir las métricas individuales, se introduce la matriz de confusión, que es la matriz base para todas las métricas derivadas (Bishop & Nasrabadi, 2006; Maxwell et al., 2021; Jain & Srihari, 2024):

$$\text{Matriz de Confusión} = \begin{bmatrix} VP & FP \\ FN & VN \end{bmatrix}$$

- Verdaderos positivos (VP): Casos de la clase real que el modelo predice correctamente.
- Falsos positivos (FP): Casos de otras clases que el modelo predice erróneamente como esa clase.
- Verdaderos negativos (VN): Casos no propios de la clase analizada donde el modelo predice correctamente su exclusión.
- Falsos negativos (FN): Casos de la clase real que el modelo predice como otra clase.

Exactitud: Métrica que mide la proporción de predicciones correctas respecto al total de predicciones: Es útil para obtener una visión general del desempeño del modelo.

$$\text{Exactitud} = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN} \quad (8)$$

Precisión: Indica en un rango de [0, 1] cuántas imágenes han sido clasificadas correctamente en una clase determinada.

$$\text{Precisión} = \frac{TP}{TP + FP} \quad (9)$$

Exhaustividad (*Recall*): Mide la capacidad para detectar correctamente los casos de una clase en particular.

$$\text{Exhaustividad} = \frac{TP}{TP + FN} \quad (10)$$

F1-score: Es la métrica que permite evaluar el desempeño del modelo en cada categoría, representando el equilibrio entre la precisión y la exhaustividad.

$$F1 = \frac{2 * (Precisión * Recall)}{Precisión + Recall} \quad (11)$$

2.5.4 Interpretabilidad de la CNN mediante Grad-CAM

La falta de transparencia en el manejo de información dentro de la red, conocido como el problema de la caja negra (*black box*), ha motivado el desarrollo de técnicas que permitan interpretar y explicar como un modelo CNN identifica regiones clave que influyen en la predicción del modelo (Arrieta et al., 2020). La técnica *Gradient-weighted Class Activation Mapping* (Grad-CAM), se basa en la idea de localizar regiones discriminativas de la imagen dentro de la matriz de características dependientes de gradientes de activación dados por la importancia de los pesos en cada clase.

El resultado de Grad-CAM, es un mapa de calor superpuesto a la imagen original, donde los valores altos indican regiones que contribuyen de manera más significativa a la predicción de la clase (Selvaraju et al., 2017). Durante el análisis de una CNN, estos mapas permiten:

- Verificar si el modelo se enfoca en regiones semánticamente relevantes.
- Detectar posibles sesgos o correlaciones espurias en los datos.
- Evaluar la coherencia entre la decisión del modelo y el conocimiento experto.

3 ANTECEDENTES

El monitoreo de metales pesados en aguas residuales constituye una actividad esencial para asegurar la calidad del recurso hídrico y el cumplimiento de las normativas ambientales vigentes. Entre las técnicas analíticas convencionales empleadas para la determinación de metales disueltos se encuentran la espectroscopía de absorción atómica, la espectroscopía de UV visible, la espectroscopía de emisión óptica con plasma acoplado inductivamente, la espectrometría de masas con plasma acoplado inductivamente. Estas técnicas, destacan por su precisión y alta sensibilidad; sin embargo, requieren infraestructura especializada, personal especializado y procedimientos de muestreo ex situ, lo que limita su aplicación en sistemas de monitoreo continuo o en tiempo real (Fu & Wang, 2011; Arbab-Zavar et al., 2020).

En este contexto, el desarrollo de sensores ópticos ha surgido como alternativa viable para la detección indirecta de iones metálicos mediante cambios en propiedades fisicoquímicas observables, tales como la absorbancia o la coloración del medio. Estos enfoques se basan en la interacción del ión metálico utilizando ligandos específicos o en la formación de compuestos insolubles que presentan propiedades ópticas distintivas. Por ejemplo, Nazmul et al. (2021) desarrollaron un sensor basado en ligandos orgánicos inmovilizados en una superficie de sílice capaces de detectar Cd(II) mediante cambios cromáticos asociados a su adsorción superficial alcanzando límites de detección de 0.36 µg/L.

Desde una perspectiva fisicoquímica, algunos iones metálicos pueden reaccionar con sulfuros biogénicos generando precipitados metálicos con características ópticas particulares. En sistemas anaerobios sulfato reductores, bacterias del género *Desulfovibrio* producen H₂S el cual reacciona con iones metálicos formando sulfuros metálicos insolubles, como el sulfuro de cadmio (CdS), cuya constante de solubilidad favorece su precipitación en medios acuosos (Muyzer & Stams, 2008; Neria-González & Aguilar-López, 2021).

El CdS presenta un intervalo de banda prohibida directa (E_g) aproximado de 2.42 eV, lo que le confiere propiedades semiconductoras y una absorción selectiva a la región visible del espectro electromagnético. Esta propiedad permite que la formación del precipitado se manifieste visualmente como una tonalidad amarilla característica, cuya intensidad depende

de la concentración de Cd(II) presente en el medio (Park y Faivre, 2022). Este fenómeno constituye el fundamento que permite establecer una relación indirecta entre la concentración residual del metal y los descriptores cromáticos observables del cultivo.

El uso de este tipo de señales ópticas ha sido facilitada recientemente mediante el uso de herramientas de IA orientadas al análisis de imágenes. En particular, el uso de CNN ha demostrado una capacidad de identificar patrones espaciales en matrices de características. A diferencia de ANN, las cuales requieren la extracción manual de características, estas permiten la identificación automática de descriptores relevantes directamente desde los valores de intensidad de los píxeles (LeCun et al., 2015).

El uso de CNN ha sido ampliamente reportado en múltiples aplicaciones relacionadas a la estimación indirecta de variables fisicoquímicas. Austerjost et al. (2021) emplearon la visión artificial para detectar espuma en sistemas de tratamiento biológico, mientras que Salgado et al. (2023) reportaron la estimación del crecimiento microbiano mediante el análisis del RGB, así como en Nie et al. (2025) monitoreando la turbidez del agua mediante la extracción de características de imágenes.

En sistemas biotecnológicos, el monitoreo no invasivo mediante visión computacional, ha permitido el desarrollo de soft-sensors capaces de estimar variables críticas de proceso sin necesidad de muestreo directo. Gutiérrez-Ramírez et al. (2025) demostraron la capacidad de un modelo de CNN para predecir las fases de crecimiento de *Chlorella vulgaris* a partir de los parámetros cromáticos del espacio RGB, iluminación, temperatura y pH, el modelo alcanzó una precisión global de 98.6%. Además, se evaluó la robustez del modelo, siendo la iluminación un parámetro sensible que afecta directamente la precisión del modelo. También, se refuerza la viabilidad de los modelos por visión por computadora en Wu et al. (2025), donde se monitoreó la biomasa de cultivos fúngicos de *Lyophyllum decastes*, reportando correlaciones de 99.36% para concentración de micelio, 99.27% para biomasa fresca y 97.31% para biomasa seca entre estimaciones visuales y biomasa real empleando modelos de regresión basados en imágenes.

No obstante, la aplicabilidad de estos modelos depende de su capacidad de generalización frente a condiciones no incluidas durante el entrenamiento. En sistemas donde la variable de interés se estima indirectamente a partir de señales ópticas, variaciones

intermedias en la intensidad cromática pueden generar ambigüedades en la clasificación cuando no se cuenta con representaciones discretas suficientes dentro del banco de imágenes (Goodfellow et al., 2016). Es por ello que la evaluación del desempeño bajo concentraciones o imágenes no vistas constituye un paso crítico para determinar la viabilidad como herramientas de monitoreo indirecto.

Por ejemplo, Trejo-Zúñiga et al. (2024) emplearon un modelo CNN de clasificación de muestras de agua en relación con su turbidez, medida experimentalmente en unidades NTU, alcanzando una precisión de 97% en muestras de laboratorio y para muestras reales no vistas por el modelo alcanzó una precisión de clasificación del 85%. Esto demuestra el potencial de las CNN como una alternativa útil para medir parámetros de manera precisa, generalizando las condiciones controladas con datos de entornos cotidianos.

En este sentido, el uso de modelos CNN aplicados al análisis de cambios cromáticos derivados de la formación de sulfuros metálicos representa una alternativa potencial para el monitoreo indirecto de remoción de Cd(II) en cultivos anaerobios, integrando fundamentos microbiológicos, fisicoquímicos y computacionales en un enfoque no invasivo orientado a la estimación de variables de estado en tiempo real.

4 JUSTIFICACIÓN

Las alternativas biotecnológicas para la remoción de metales pesados mediante la formación de sulfuros metálicos insolubles han demostrado una alta capacidad de remover concentraciones de metales pesados, como el cadmio, mediante mecanismos de precipitación. Sin embargo, a pesar de los avances en la optimización de estos procesos biológicos, el monitoreo de la remoción de metales continúa dependiendo principalmente de técnicas analíticas convencionales, como la espectroscopía de absorción atómica, las cuales requieren muestreo periódico, preparación de muestras, equipamiento especializado y tiempos de análisis que dificultan la obtención de información continua del proceso.

Simultáneamente, la formación de sulfuro de cadmio (CdS) genera cambios cromáticos observables asociados a sus propiedades ópticas, los cuales reflejan la evolución del proceso de precipitación durante la remoción biológica del metal. Estos cambios visuales constituyen una fuente potencial de información que puede ser aprovechada mediante herramientas de visión artificial para inferir indirectamente el estado del sistema sin alterar las condiciones del cultivo.

Los avances en visión artificial, particularmente en CNN, han demostrado una elevada capacidad para identificar patrones complejos en imágenes y estimar variables fisicoquímicas a partir de señales ópticas. No obstante, la aplicación de estas herramientas en sistemas sulfato reductores orientados al monitoreo de precipitados metálicos es limitada, lo que representa una oportunidad para desarrollar estrategias de inferencia indirecta aplicadas a procesos de biorremediación.

Por lo anterior, la presente investigación propone evaluar la capacidad de una CNN para reconocer patrones visuales asociados a la formación de CdS durante la remoción biológica de iones Cd(II) mediante *Desulfovibrio alaskensis* 6SR. Con ello, se busca generar evidencia sobre la viabilidad de emplear señales ópticas como variables observables para el desarrollo futuro de sistemas de monitoreo no invasivos, de bajo costo y potencialmente integrables a esquemas de supervisión y control de bioprocesos anaerobios.

5 HIPÓTESIS

5.1 Hipótesis alternativa (H_1):

Los cambios cromáticos asociados a la formación de CdS durante la remoción biológica de Cd(II) por *Desulfovibrio alaskensis* 6SR contienen características visuales suficientes para clasificar niveles discretos de concentración del metal mediante redes neuronales convolucionales, mostrando concordancia con la tendencia de concentración residual determinada por Espectroscopía de Absorción Atómica.

5.2 Hipótesis nula (H_0):

Los cambios cromáticos asociados a la formación de CdS durante la remoción biológica de Cd(II) por *Desulfovibrio alaskensis* 6SR no contienen descriptores visuales para la clasificación de la concentración del metal mediante redes neuronales convolucionales, por lo que no existe relación con la concentración residual determinada por Espectroscopía de Absorción Atómica.

6 OBJETIVOS

6.1 Objetivo general.

Diseñar y evaluar un sistema basado en una red neuronal convolucional (CNN) para clasificar distintos niveles de concentración de Cd(II), indirectamente en sulfuro de cadmio (CdS), utilizando a *Desulfovibrio alaskensis* 6SR.

6.2 Objetivos específicos.

Construir un banco de imágenes a partir de cultivos en lote de *Desulfovibrio alaskensis* 6SR expuestos a distintas concentraciones de Cd(II), registrando los cambios cromáticos observables asociados a la formación de CdS durante la cinética de remoción.

Entrenar un modelo de CNN para la clasificación automática de las concentraciones de Cd(II) empleando imágenes preprocesadas como datos de entrada.

Evaluar el desempeño del modelo de CNN mediante métricas de clasificación multiclase y técnicas de interpretabilidad visual.

Analizar la capacidad de generalización del modelo de CNN a partir de imágenes correspondientes a una concentración no vista (170 ppm), comparando la tendencia de clasificación con la cinética de remoción determinada por espectroscopía de absorción atómica.

7 MATERIALES Y MÉTODOS

7.1 Sistema de remoción a partir de *Desulfovibrio alaskensis*

En esta etapa, se realizó la experimentación enfocada en la construcción del banco de imágenes y la obtención de datos cinéticos de remoción de Cd(II) a partir de sistemas anaerobios con *D. alaskensis* 6SR cultivada en lotes. Se emplearon descriptores colorimétricos para diferenciar la intensidad de las tonalidades de amarillo visibles durante la cinética de remoción de iones Cd(II) en forma de CdS. La formación de CdS se infiere a partir del cambio cromático característico reportado para sulfuros metálicos en sistemas sulfatorreductores (López-Pérez et al., 2015; Cheng et al., 2022).

7.1.1 Preparación y siembra de la cepa *D. alaskensis* 6SR

Para el cultivo de *D. alaskensis* 6SR, se prepararon 100 mL del medio Postgate C para la inoculación y 1000 mL para la cinética de remoción, descartando $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ de la composición original con el fin de evitar la presencia de otros metales que pudieran interferir en la remoción de cadmio (Tabla 7). Se adicionó 3.0 % (p/v) de NaCl y se ajustó con un valor de 7.0 de pH a una concentración 1M de NaOH.

Tabla 7. Composición del medio Postgate C modificado para esta investigación (Postgate, 1984).

Reactivo	Concentración (g/L)
Lactato	6.0
Na_2SO_4	4.5
NH_4Cl	1.0
Extracto de levadura	1.0
KH_2PO_4	0.5
$\text{C}_6\text{H}_5\text{Na}_3\text{O}_7 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	0.3
$\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$	0.06
$\text{CaCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	0.06
$\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$	No añadido

En dos frascos viales de 120 mL se dispensaron 45 mL de medio, los cuales, fueron sellados al vacío y esterilizados (121 °C, 1.5 kg/cm², 20 min). Para mantener condiciones de

anaerobiosis se empleó gas nitrógeno como agente de desplazamiento de oxígeno. Cada frasco se inoculó con 5 mL (10% v/v) de la cepa preconditionada y se incubó a 37 °C durante 24 h hasta obtener una densidad óptica (DO_{580}) entre 0.35 y 0.4.

7.1.2 Inoculación de la cepa a distintas concentraciones de cadmio

Se preparó una solución stock de acetato de cadmio ($Cd(CH_3COO)_2$), como fuente del ion metálico, a una concentración de 5000 ppm, esterilizada mediante filtración (0.22 μm). Se adicionaron alícuotas a los frascos con medio Postgate C para obtener concentraciones finales de 25, 50, 75, 100, 125, 150, 175 y 200 ppm de Cd, completando 45 mL de medio. Se realizaron tres réplicas biológicas. El control de la cepa fue sin presencia de Cd(II) en el medio. Cada frasco fue inoculado con 5mL (10% v/v) de cultivo activo y se incubó a 37° C durante 120 h (López-Pérez et al., 2015). Los cultivos se agitaron una hora previa a la adquisición de imagen y toma de muestra. Se obtuvo cada 24 horas una muestra de 5 mL para cuantificar el crecimiento de la cepa por peso seco.

7.2 Construcción del banco de imágenes por 10 clases

Para el desarrollo del flujo de trabajo computacional se emplearon distintos entornos y herramientas. Visual Studio Code se utilizó para el desarrollo local del código; Roboflow®, para la anotación y designación de la región de interés (ROI, por sus siglas en inglés) en las imágenes; y Google Colab, como entorno de ejecución para el entrenamiento y validación de los modelos de aprendizaje profundo. El procesamiento se realizó en Python, empleando librerías como OpenCV, TensorFlow y Keras, para la adquisición y procesamiento de imágenes.

7.2.1 Instrumentación del sistema de adquisición de imagen

Para la adquisición de imágenes se implementó un sistema compuesto por una cámara industrial de alta resolución (Hotpet®, Modelo IMX179); y una caja de fondo blanco (Anexo B). La cámara se situó a 15 cm de distancia respecto a la muestra dentro de la caja (Figura 7). Se emplearon los parámetros de captura de la cámara en automático (ISO) a la configuración predeterminada, el sistema operó bajo iluminación tenue (200 ± 15 lux). El código utilizado para la adquisición de imágenes se incluye en el Anexo D. La adquisición de imágenes se llevó a cabo del 26 de mayo de 2025 al 4 de julio de 2025, tomando en cuenta 5 días hábiles (Anexo C).

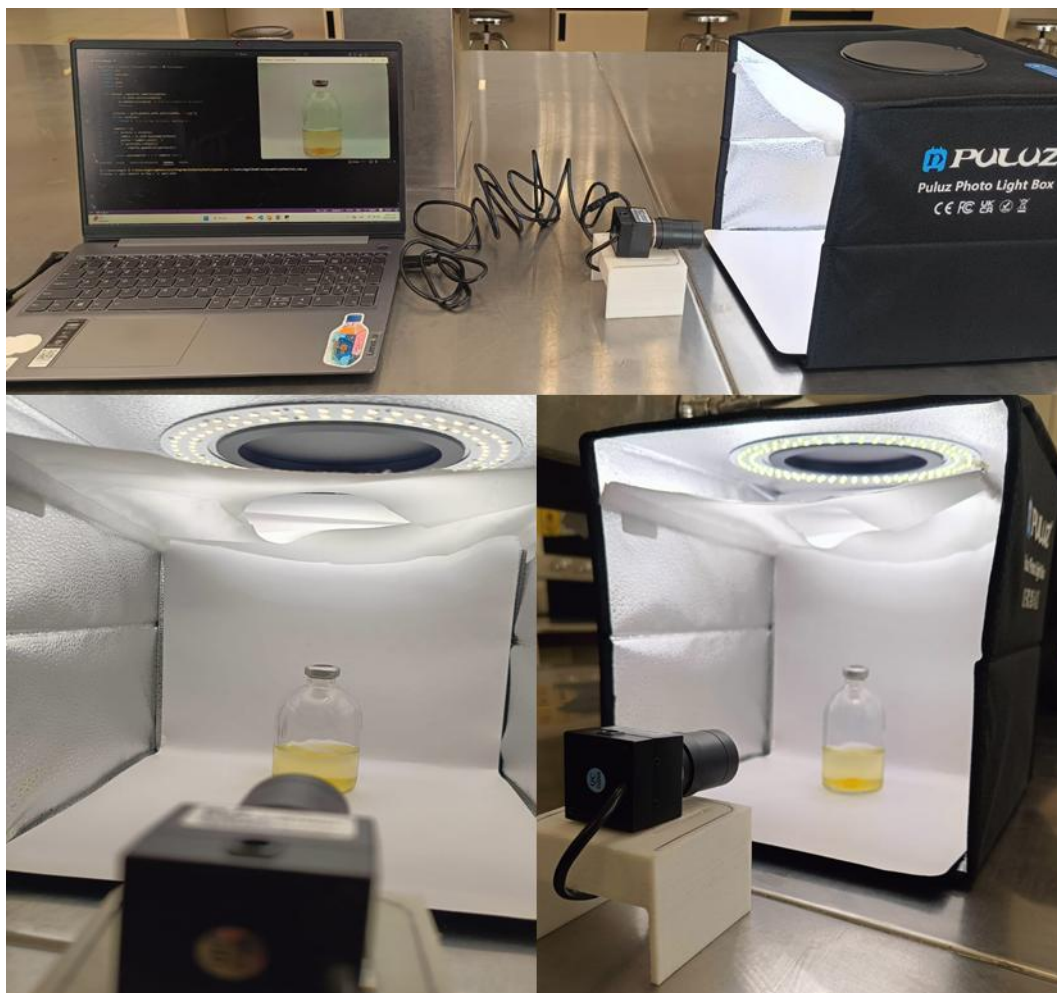


Figura 7. Sistema de adquisición de imagen para la captura de imágenes de los cultivos.

7.2.2 Preprocesamiento de imágenes

La captura de imagen se realizó durante los 5 días de la cinética de remoción de cadmio de la BSR, obteniendo 40 imágenes de cada clase por día. Las imágenes se almacenaron con la extensión .jpg, en espacio de color RGB y con resolución de 640 x 640 px. Posteriormente, se organizaron en una carpeta de Google Drive con el nombre “Banco de imágenes”, conteniendo 10 subcarpetas etiquetadas con los nombres: 1. medio, 2. control (*D. alaskensis*), y 3 – 10 ocho concentraciones de cadmio (25, 50, 75, 100, 125, 150, 175 y 200 ppm). Se descartó un porcentaje de imágenes correspondientes a capturas con desenfoque, reflejos excesivos o iluminación delimitada, con el objetivo de preservar la calidad y consistencia del banco de imágenes.

7.2.3 Obtención de la región de interés empleando Roboflow.

Para optimizar la calidad y consistencia del conjunto de datos utilizado para el entrenamiento de la CNN, se delimitó la ROI correspondiente al área del frasco donde ocurre el proceso de precipitación de CdS. La ROI no introduce nueva información, solo estandariza la región seleccionada debido a la presencia de un cambio cromático visible, lo que la convierte en la principal fuente visual para la clasificación. Las imágenes se cargaron en Roboflow®, plataforma que permite la anotación, preprocesamiento y exportación de imágenes para tareas de visión por computadora.

Se empleó la herramienta *Bounding Box* para identificar manualmente la ROI del frasco delimitado en un rectángulo donde el precipitado CdS fue visible (Figura 8). Las imágenes anotadas se redimensionaron a 350 x 350 px y se dividieron en 70% entrenamiento, 20% validación y 10% test. El conjunto de imágenes exportó en formato TFRecord (TensorFlow), garantizando la estandarización del área analizada y la reducción de sesgos por iluminación o posición.

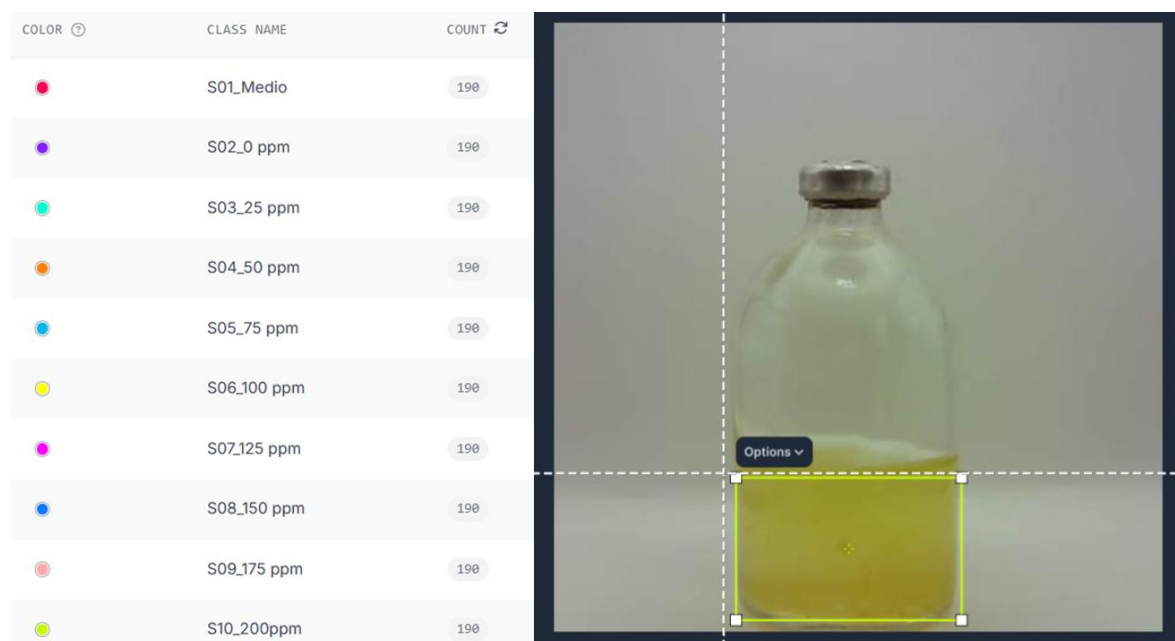


Figura 8. Organización del conjunto de datos y anotación de imágenes en la plataforma Roboflow. Se muestra la distribución de clases correspondientes a las distintas concentraciones de Cd(II) así como un ejemplo del proceso de anotación de ROI, delimitada manualmente en la zona inferior del frasco donde se concentra el cultivo de *Desulfovibrio alaskensis* 6SR y el precipitado de CdS.

7.2.4 Estructura de entrada y preparación de los datos

Si bien, el procesamiento de banco de imágenes requiere un coste computacional local alto, se optó por emplear el entorno *Google Colaboratory (Google Colab)* utilizando python 3.10 y la librería TensorFlow versión 2.15 con interfaz Keras. El proceso se ejecutó empleando un acelerador de hardware GPU T4 con 16 G de memoria.

Se montó la carpeta “imágenes.tfrecord” desde Drive, estructurado en tres archivos independientes con los datos para el entrenamiento, validación y test. Las clases se definieron como 10 categorías y los archivos .tfrecord fueron leídos mediante *pipelines* optimizados de TensorFlow. Los lotes de entrenamiento se establecieron en un tamaño de 8 imágenes. La aleatorización del conjunto de imágenes se realizó durante la generación de los subconjuntos en la plataforma de Roboflow. Para mejorar la reproducibilidad del entrenamiento, se estableció una semilla aleatoria (random seed) de 42 para los generadores de números aleatorios de Python, NumPy y TensorFlow.

7.2.5 Construcción de una Red Neuronal Convolutiva

El diseño de la arquitectura de la CNN se basó en los modelos de Austerjost et al. (2021), Ferreira & Camacho (2021), Alvi et al. (2023), Vijay Anand et al. (2023), Trejo-Zúñiga et al. (2024) y Gutiérrez-Ramírez et al. (2025). La arquitectura secuencial de la CNN, implementada en keras, se presenta en la Figura 9.

El modelo predictivo se compiló utilizando el optimizador Adam (tasa de aprendizaje inicial: 0.001). Se monitoreó principalmente la exactitud (*accuracy*) y la función de pérdida (*categorical_crossentropy*). Para prevenir el sobreajuste, se implementó la función *Early Stopping* con una paciencia de 10 épocas en caso de no mejorar. Se ejecutó con un máximo de 100 épocas registrando durante cada época las métricas de pérdida (*loss*) y exactitud para ambos conjuntos de imágenes, así como la velocidad de aprendizaje del modelo.

```
def build_cnn(input_shape=(*IMG_SIZE,3), num_classes=NUM_CLASSES, lr=LR):
    policy = mixed_precision.global_policy()
    model = Sequential(name="CNN_CdS_optimized")
    model.add(InputLayer(input_shape=input_shape))

    #Capa de entrada
    model.add(Conv2D(32, (5,5), activation='relu', padding='same'))
    model.add(BatchNormalization(name='bn_input'))
    model.add(MaxPooling2D((2,2), name='pool_input'))

    #Capa Oculta 1
    model.add(Conv2D(64, (3,3), activation='relu', padding='same'))
    model.add(BatchNormalization(name='bn_64'))
    model.add(MaxPooling2D((2,2), name='pool_64'))

    #Capa oculta 2
    model.add(Conv2D(128, (3,3), activation='relu', padding='same'))
    model.add(BatchNormalization(name='bn_128'))
    model.add(MaxPooling2D((2,2), name='pool_128'))

    # Clasificador
    model.add(GlobalAveragePooling2D())
    model.add(Dense(128, activation='relu'))
    model.add(Dropout(0.5, name='dropout_0.5'))

    #Capa de salida
    model.add(Dense(num_classes, activation='softmax', name='output_softmax'))

    # Optimizador Adam y compilación del modelo.
    optimizer = Adam(learning_rate=lr)
    model.compile(optimizer=optimizer, loss='categorical_crossentropy', metrics=['accuracy'])
    return model
```

Figura 9. Arquitectura de la CNN

Una vez finalizado el entrenamiento, se generaron los archivos `history.pkl`, `best_model.h5` y `best_model.keras` que contiene el historial de entrenamiento y los mejores pesos durante el entrenamiento necesarios para validar la CNN.

7.3 Validación de la CNN

7.3.1 Evaluación del desempeño y la interpretabilidad de la CNN

La evaluación se realizó analizando las métricas de pérdida (*val_loss*) y exactitud (*val_accuracy*). Las predicciones se generaron utilizando la función `model.predict`, seleccionando las clases con mayor probabilidad, y se compararon con las etiquetas reales. Se obtuvo la matriz de confusión, así como, las métricas de desempeño (precisión, exhaustividad y F1-score) globales y las específicas de cada clase.

Para evaluar la interpretabilidad del modelo se aplicó la técnica de Grad-CAM que permite visualizar las regiones más relevantes consideradas por la CNN al clasificar las imágenes (Selvaraju et al., 2017). Los mapas de activación se superpusieron sobre las imágenes originales, verificando que el modelo se centrara principalmente en las zonas de

variación en la intensidad de color debido a la presencia de CdS. El modelo Grad-CAM se empleó únicamente con fines interpretativos y no como criterio de ajuste del modelo.

7.4 Validación del modelo bajo condiciones no vistas.

La capacidad de generalización del modelo de clasificación frente a condiciones experimentales no incluidas dentro del banco de imágenes, se realizaron cultivos independientes de *D. alaskensis* 6SR expuestos a una concentración inicial de 170 ppm de Cd(II) inicial, con tres réplicas biológicas. Este valor no fue empleado previamente para el entrenamiento ni validación del modelo.

La concentración de 170 mg/L fue seleccionada con el propósito de evaluar el desempeño del sistema de clasificación ante variaciones intermedias en la intensidad cromática asociada a la formación de precipitados metálicos durante el proceso de remoción correspondiente a la concentración mínima inhibitoria reportada previamente para esta cepa (López-Pérez et al., 2015).

Durante la cinética de remoción, se tomaron alícuotas de 5 mL cada 24 h. Las muestras fueron centrifugadas a 13,000 rpm durante 10 minutos para separar el precipitado sólido del sobrenadante. Posteriormente, el sobrenadante fue recuperado y filtrado mediante membranas de 0.22 µm. Las muestras filtradas fueron diluidas en una relación 1:10 en una solución de ácido nítrico (HNO₃) al 2% (v/v). La concentración de Cd(II) disuelto se determinó mediante AAS, utilizando un equipo calibrado con estándares certificados de Cd en un rango de 0–200 mg/L. La eficiencia de remoción se calculó empleando la ecuación:

$$Remoción (\%) = \frac{C_0 - C_t}{C_0} \times 100 \quad (12)$$

donde:

- C_0 = Concentración inicial de Cd(II) (mg/L)
- C_t = Concentración de Cd(II) al tiempo t (mg/L)

7.4.1 Evaluación de la red empleando imágenes no vistas.

Para evaluar la capacidad de generalización ante condiciones no incluidas durante el entrenamiento, se analizaron imágenes correspondientes a cultivos a una concentración inicial de 170 ppm de Cd(II), adquiridas cada 24 h mediante el sistema descrito en la sección de instrumentación. Cada toma de muestra, se capturaron tres imágenes independientes,

obteniendo un total de 18 imágenes correspondientes a cada tiempo de la cinética de remoción.

Se implementó un enfoque híbrido de clasificación-regresión para evaluar la capacidad predictiva de la CNN sobre los cambios cromáticos asociados a la formación de CdS. Debido a que la concentración residual de Cd(II) constituye una variable continua y el modelo fue entrenado bajo clasificación discreta, la salida probabilística generada por el modelo fue transformada en una estimación continua de concentración (C_{CNN}). Para ello se calculó el valor esperado de la distribución de la probabilidad generada por la función *softmax* del modelo.

$$p = [p_1, p_2, \dots, p_i] \quad (13)$$

Siendo p el vector de probabilidades predichas para cada clase. La estimación continua de concentración se calculó mediante:

$$C_{CNN} = \sum_i^n p_i * C_i \quad (14)$$

donde:

- p_i corresponde a la probabilidad predicha para la clase i .
- C_i representa la concentración nominal asociada a dicha clase.
- n es el número total de clases consideradas durante el entrenamiento.

Esta transformación permitió obtener una estimación continua de la concentración a partir del análisis de imágenes. Las concentraciones residuales de Cd(II) estimadas mediante el modelo fueron posteriormente comparadas con los valores experimentales determinados mediante AAS.

El análisis estadístico y la generación de gráficos se realizaron en Python utilizando las librerías NumPy, SciPy y Matplotlib. La comparación entre métodos se evaluó mediante el coeficiente de correlación de Pearson, el cálculo del error absoluto medio (MAE, por sus siglas en inglés) y la raíz del error cuadrático medio (RMSE, por sus siglas en inglés).

8 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En esta sección se detallan los hallazgos más relevantes en relación a los objetivos de la investigación, integrando los sistemas biológicos de *Desulfovibrio alaskensis* 6SR respecto a el desempeño del modelo de CNN diseñado para la clasificación automática de imágenes de precipitado de CdS.

8.1 Observaciones cualitativas y actividad microbiana

Las imágenes adquiridas durante el cultivo mostraron diferencias cromáticas bien definidas entre cada clase evaluada, particularmente en función de la concentración inicial de Cd(II) y el tiempo de incubación (Figura 10). Donde se observó un aumento gradual en la tonalidad amarilla en los tratamientos a concentraciones iniciales de 150, 175 y 200 ppm posterior a las 24 h, mientras que en las concentraciones intermedias de 75 y 100 ppm el cambio fue evidente posterior a las 48 h. En contraste, el tratamiento control presentó una apariencia turbia y de color blanco.

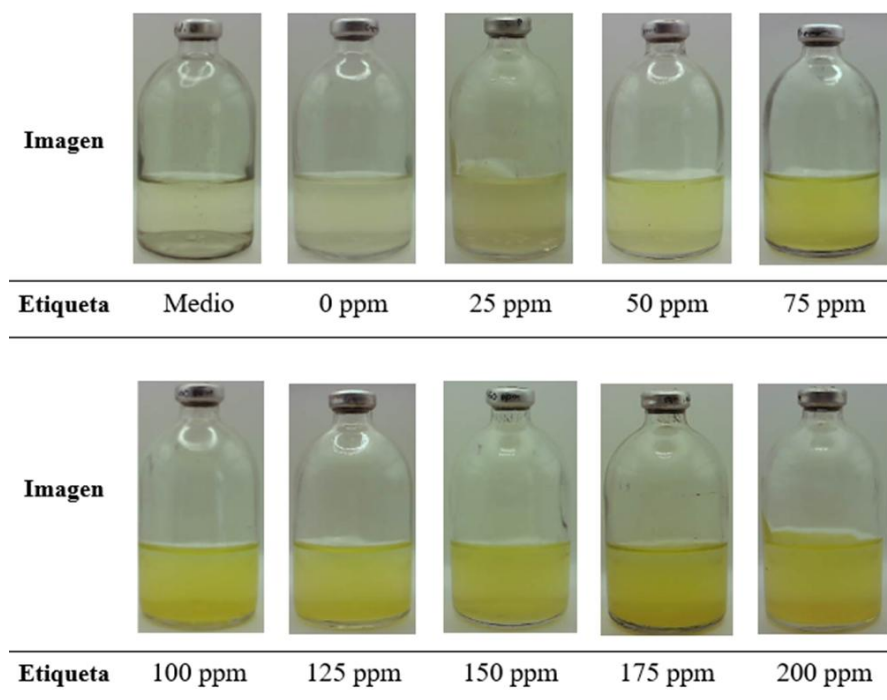


Figura 10. Observaciones cualitativas de las diferencias entre cada clase, ilustrando las diferencias de tonalidad observadas durante la cinética. Se muestran imágenes de cultivos de *Desulfovibrio alaskensis* 6SR correspondientes al medio sin inocular, al control sin cadmio y a diferentes concentraciones de Cd (25–200 ppm), adquiridas a las 72 h de incubación.

Estos cambios cromáticos pueden atribuirse a la formación extracelular de CdS como resultado de la reducción biológica de sulfato llevada a cabo por la cepa. La coloración amarilla del precipitado se encuentra asociada a sus propiedades ópticas semiconductoras y a su banda prohibida directa que permite la absorción en el espectro visible (Li et al., 2017). Diversos estudios han reportado que la nucleación y crecimiento de nanopartículas de CdS biosintetizadas puede generar variaciones en la intensidad de color observado, dependiendo de la concentración inicial del metal y de la cinética de formación del precipitado (Suresh et al., 2011; López-Pérez et al., 2015). En este sentido, la intensidad cromática observada experimentalmente puede considerarse un indicador indirecto de la cantidad de CdS formado durante la remoción biológica del metal.

A partir de estas observaciones, se realizó un cribado visual inicial destinado a identificar rangos de respuesta relevantes en el banco de imágenes respecto a los descriptores colorimétricos. En base a este criterio, se seleccionaron tres clases representativas para el seguimiento cinético: control (0 ppm), 100 ppm y 175 ppm, correspondientes a una respuesta nula, una respuesta intermedia y cercana al umbral de inhibición reportado para esta cepa (~170 ppm) (López-Pérez, 2015). Las clases restantes fueron conservadas para su posterior análisis mediante técnicas de clasificación computacional.

8.1.1 Cinética de crecimiento de *D. alaskensis*

En la Figura 11 se muestra la cinética de crecimiento de *D. alaskensis* 6SR en presencia de dos concentraciones iniciales de Cd (100 ppm y 175 ppm), comparadas con el control sin metal. Durante las primeras 24 horas de incubación, los cultivos expuestos a Cd presentaron un incremento mayor de biomasa respecto al control, lo que sugiere una respuesta temprana al estrés por metales. Sin embargo, a partir de las 40 horas se observó una disminución progresiva en la biomasa, particularmente en el cultivo con 175 ppm de Cd, lo cual evidencia un efecto inhibitorio del cadmio dependiente del tiempo y la concentración.

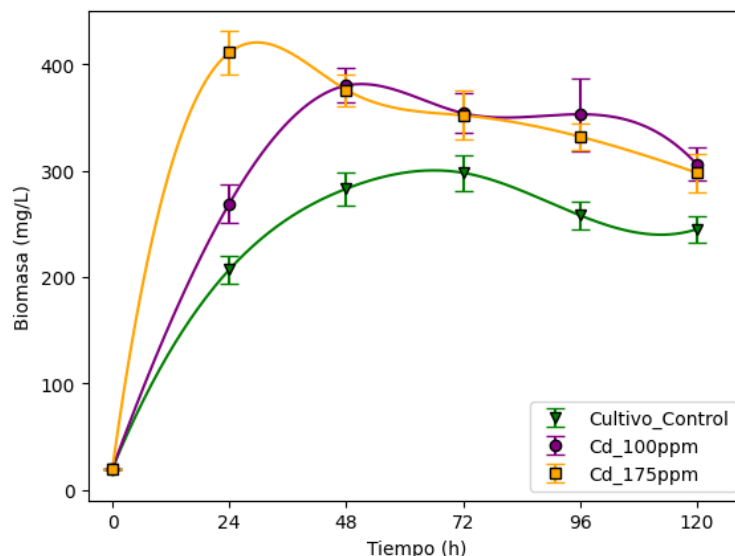


Figura 11. Cinética de crecimiento de *Desulfovibrio alaskensis* 6SR en cultivos con Cd a 100 ppm (línea morada) y 175 ppm (línea amarilla), comparados con un control (línea verde). Los puntos representan la media de biomasa (mg/L) en función del tiempo (h).

Este comportamiento concuerda con lo reportado por López-Pérez et al. (2013), quien señaló una disminución de la tasa específica de crecimiento (μ) de esta cepa en presencia de cadmio a concentraciones cercanas a 170 ppm, atribuidas a interferencias en rutas metabólicas asociadas a la reducción de sulfato.

Además, estudios realizados en otras cepas del género *Desulfovibrio*, como en *D. desulfuricans* han demostrado que la exposición a compuestos de CdS puede inducir estrés oxidativo intracelular, provocando una disminución en la actividad metabólica y en el crecimiento de la bacteria (Cheng et al., 2022). En conjunto, estos resultados respaldan que a concentraciones elevadas de Cd pueden desencadenar una respuesta de formación de biomasa rápida debido a una estimulación inicial seguida de una inhibición metabólica.

8.2 Construcción y calidad del banco de imágenes

La estandarización de las condiciones de adquisición (iluminación, distancia y geometría) favoreció la consistencia de los descriptores cromáticos, permitiendo que las variaciones observadas estuvieran predominantemente asociadas al fenómeno biológico de formación de CdS. En particular, el control de iluminación constituyó un factor determinante para el descriptor amarillo asociado a CdS.

El banco final de imágenes estuvo integrado por 1900 imágenes balanceadas (190 por clase), tras la eliminación de imágenes con ruido visual (desenfoco, reflejos excesivos, obstrucciones parciales del frasco o variaciones elevadas de iluminación). La depuración del conjunto incrementó la calidad del conjunto de datos. Esto es relevante para evitar sesgos en el proceso de aprendizaje supervisado y asegurar una representación equitativa de las clases durante el entrenamiento, así como la reducción de la variabilidad en cada clase observable durante el entrenamiento (Shorten y Khoshgoftaar, 2019; Jeon y Lee, 2025).

Este control experimental contribuyó en la estabilidad del entrenamiento de la CNN; lo cual se reflejó en la convergencia de la función de pérdida, así como los altos valores de exactitud (Shorten y Khoshgoftaar, 2019).

8.2.1 Definición de la región de interés

La selección de la ROI permitió excluir elementos irrelevantes como los bordes del frasco, el fondo de la imagen y reflejos generados por la iluminación, los cuales pueden introducir variabilidad no relacionada con los cambios cromáticos derivados de la formación de CdS. La delimitación de la ROI se realizó de manera consistente para todas las imágenes, manteniendo las dimensiones y posición del *bounding box*, para garantizar la comparabilidad entre clases y tiempos de adquisición.

Como se muestra en la Figura 12, la imagen original contiene elementos visuales que no aportan información útil para la clasificación, tales como el cuello del frasco y reflejos de iluminación. En contraste, el recorte de la ROI permite aislar la zona donde ocurre la formación de precipitados, representando la entrada directa utilizada por la CNN.

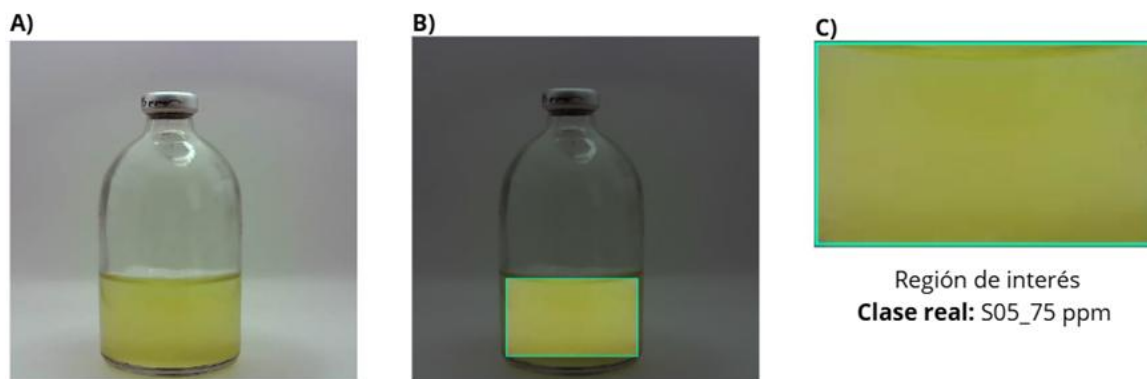


Figura 12. Definición de la región de interés empleada para el análisis de imágenes. Se muestra **A)** una imagen original del cultivo y **B)** la correspondiente imagen después de delimitar la ROI mediante la plataforma Roboflow, así como **C)** la ampliación de la ROI seleccionada para incluir la zona de formación. La imagen corresponde a un cultivo con una concentración inicial de 75 ppm de Cd(II).

Desde el punto de vista del procesamiento de imágenes, delimitar la ROI permite concentrar el análisis en las zonas que contienen información relevante, reduciendo la influencia del fondo y de características irrelevantes, lo que puede mejorar la eficiencia y precisión de los modelos de clasificación (Jeon y Lee, 2025). En aplicaciones para sistemas biotecnológicos, Gutiérrez-Ramírez et al. (2025) demostraron que la delimitación explícita de regiones relevantes en imágenes de cultivos de microalgas mejora significativamente la estabilidad del procesamiento y el desempeño de los modelos de inferencia en tiempo real, al minimizar la influencia de información visual irrelevante. De manera similar, Wu et al. (2025) reportaron que la definición adecuada de la ROI es un factor determinante para el desarrollo de soft sensors basados en visión artificial, orientados a la estimación no invasiva de biomasa en cultivos líquidos. Tomar este enfoque, es coherente para el análisis en la zona cromática asociada a la precipitación de CdS, lo cual resulta consistente con el objetivo de desarrollar un modelo basado en descriptores visuales para la clasificación de concentraciones de Cd mediante aprendizaje profundo.

8.3 Entrenamiento de la CNN

Una vez definida la arquitectura de la CNN, se procedió a su entrenamiento con un máximo de 100 épocas, empleando un total de 1330 imágenes para el conjunto de entrenamiento y 380 imágenes para el conjunto de validación, divididas equitativamente en

las 10 clases. Esta división permitió mantener el balance de clases, reduciendo sesgos durante el aprendizaje.

La arquitectura, resumida en la Tabla 8, fue diseñada bajo un enfoque jerárquico de extracción de características, principio fundamental en este tipo de redes (LeCun et al., 2015). El modelo consistió en tres bloques convolucionales secuenciales (Conv2D), normalización por lotes (*Batch Normalization*) y reducción de dimensiones mediante *MaxPooling2D*. Este esquema permite que las primeras capas detecten patrones simples como variaciones locales de color e intensidad, mientras que las capas posteriores capturan representaciones abstractas relacionadas al fenómeno de precipitación. La incorporación de normalización de lotes contribuyó a estabilizar el gradiente durante la retropropagación, reduciendo la sensibilidad a la inicialización de pesos y acelerando la convergencia (Ioffe & Szegedy, 2015).

Tabla 8. Parámetros estructurales de la CNN.

Tipo de capa	Nombre	Salida	Parámetros
Entrada	conv_input_5x5 (Conv2D)	(None, 350, 350, 32)	2,432
	bn_input (BatchNormalization)	(None, 350, 350, 32)	128
	pool_input (MaxPooling2D)	(None, 175, 175, 32)	0
Oculta	conv_64_3x3 (Conv2D)	(None, 175, 175, 64)	18 496
	bn_64 (BatchNormalization)	(None, 175, 175, 64)	256
	pool_64 (MaxPooling2D)	(None, 87, 87, 64)	0
Oculta	conv_128_3x3 (Conv2D)	(None, 87, 87, 128)	73856
	bn_128 (BatchNormalization)	(None, 87, 87, 128)	512
	pool_128 (MaxPooling2D)	(None, 43, 43, 128)	0
	gap (GlobalAveragePooling2D)	(None, 128)	0
Clasificadora	dense_128 (Dense)	(None, 128)	16512
	dropout_0.5 (Dropout)	(None, 128)	0
Salida	output_softmax (Dense)	(None, 10)	1290

Por su parte, las capas *MaxPooling2D* redujeron las dimensiones de las imágenes, disminuyendo el costo computacional y favoreciendo la estabilidad frente a pequeñas variaciones espaciales (Goodfellow et al., 2016). Posteriormente, se empleó una *Global Average Pooling* (gap), la cual transforma los mapas de activación en un vector de

características compacto. Esto reduce el número de parámetros entrenables y el riesgo de sobreajuste, especialmente en conjuntos de datos de tamaño moderado (Lin et al., 2014). La reducción de complejidad resulta particularmente relevante considerando que el banco de imágenes total comprende 1900 imágenes.

La etapa de clasificación incluyó una capa densa de 128 neuronas y activación ReLU, seguida de una capa *Dropout* (0.5) como mecanismo para prevenir el sobreajuste del modelo. Finalmente, la capa de salida empleó la función de activación *softmax* con 10 neuronas correspondientes a las clases evaluadas. En conjunto, la arquitectura mantiene un equilibrio entre la representación de cada clase y la complejidad computacional, lo cual es consistente para la clasificación multiclase en problemas de visión artificial con conjuntos de datos estructurados y relativamente pequeños (Goodfellow et al., 2016).

8.3.1 Métricas de seguimiento durante el entrenamiento de la CNN

El desempeño del modelo fue evaluado mediante el monitoreo de la función de pérdida (*loss*) y exactitud (*accuracy*) durante el entrenamiento, empleando entropía cruzada categórica (*categorical cross-entropy*) como función de costo, dado que el problema corresponde a una clasificación multiclase (Goodfellow et al., 2016).

Como se observa en las Figuras 13 y 14, el entrenamiento presentó una disminución progresiva de la pérdida y un incremento gradual de la exactitud tanto en el conjunto de entrenamiento como en el de validación a lo largo de las épocas, indicando una tendencia estable. La pérdida de entrenamiento (*train_loss*) mostró una tendencia decreciente hasta aproximadamente un promedio mínimo de 0.21. De manera paralela, la exactitud de entrenamiento (*train_acc*) aumentó gradualmente hasta aproximarse a 0.95, lo que indicó una mejora estable en la capacidad del modelo para clasificar correctamente las imágenes durante el ajuste de parámetros.

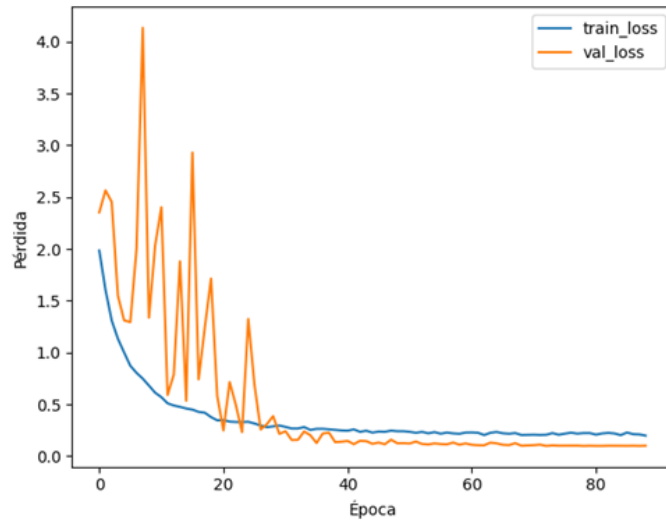


Figura 13. Seguimiento de la pérdida durante el entrenamiento (curva azul) y validación (curva naranja) de la CNN.

Respecto al conjunto de validación, las métricas presentaron una mayor variabilidad durante las primeras 30 épocas, particularmente entre las épocas 10 y 25, donde se observaron incrementos transitorios en la pérdida (*val_loss*) y descensos en la exactitud (*val_acc*). Este comportamiento puede atribuirse al proceso de ajuste inicial de los filtros convolucionales frente a datos no observados previamente, fenómeno común durante las etapas tempranas de optimización (LeCun et al., 2015).

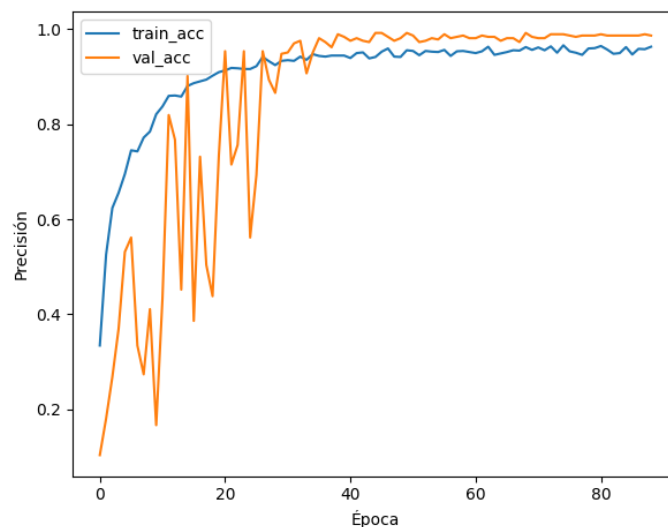


Figura 14. Comportamiento de la exactitud durante el entrenamiento (curva azul) y validación (curva naranja) de la CNN.

Posteriormente, ambas métricas mostraron una estabilización de valores, alcanzando un valor mínimo de *val_loss* de 0.0984 en la época 79 y una exactitud máxima de 0.9863. La convergencia observada entre las curvas de entrenamiento y validación, sugiere que el modelo logró generalizar adecuadamente los patrones cromáticos presentes en el banco de imágenes, evitando el sobreajuste. El hecho de que la exactitud en la validación sea ligeramente superior a la de entrenamiento puede atribuirse a la presencia de mecanismos de ejecución como *Dropout* y *Batch Normalization*, los cuales introducen ruido controlado durante el entrenamiento y pueden resultar en un desempeño ligeramente menor respecto al conjunto de validación (Ioffe & Szegedy, 2015).

El entrenamiento fue detenido en la época 89 mediante la implementación del criterio *Early Stopping*, el cual interrumpe el proceso cuando no se observan mejoras significativas en la pérdida de validación durante épocas consecutivas (Anexo E). Este criterio actúa como un mecanismo de control de varianza, previniendo el sobreajuste y favoreciendo la selección de un modelo con mejor capacidad de generalización (Goodfellow et al., 2016). En conjunto, los resultados indican que el modelo alcanzó un estado de convergencia estable posterior a aproximadamente 30 épocas, manteniendo los valores de exactitud superiores al 90% en ambos conjuntos, consistente a lo reportado en aplicaciones de clasificación basadas en procesamiento de imágenes mediante CNN (Trejo-Zúñiga et al., 2024).

8.3.2 Dinámica de aprendizaje del modelo CNN

La dinámica de aprendizaje del modelo fue analizada a partir de la evolución temporal de la función de pérdida entre épocas. En la Figura 15, durante las primeras diez épocas se registró un descenso pronunciado de la pérdida, a variaciones entre -0.35 y -0.05 , lo que corresponde a una fase inicial de aprendizaje rápido asociada al ajuste de los filtros convolucionales de bajo nivel encargados de detectar patrones cromáticos básicos como tonalidades e intensidad.

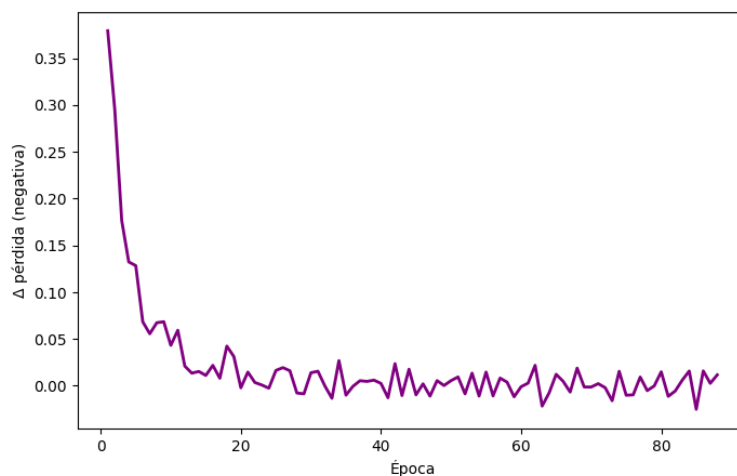


Figura 15. Velocidad de aprendizaje de la CNN

A partir de la época 20, las variaciones de pérdida se redujeron significativamente y tendieron a estabilizarse alrededor de valores cercanos a cero, indicando que el modelo alcanzó una región de convergencia en el espacio de parámetros. En esta fase, las actualizaciones de los pesos fueron de menor magnitud, pero orientadas a optimizar la clasificación de características de mayor complejidad dentro de la ROI (LeCun et al., 2015; Goodfellow et al., 2016).

8.4 Validación de la CNN

La validación del modelo se estructuró en tres etapas complementarias: 1. Análisis de matriz de confusión y métricas por clase; 2. La evaluación de interpretabilidad mediante Grad-CAM y 3. Comparación conceptual con métodos analíticos convencionales. Estos tres análisis permitieron evaluar la capacidad predictiva del modelo, así como la coherencia entre las regiones visuales activadas por la red y los fenómenos fisicoquímicos asociados a la precipitación de cadmio por el metabolismo sulfato reductor de *D. alaskensis* 6SR.

8.4.1 Matriz de confusión y métricas por clase

La evaluación final se realizó utilizando el conjunto de prueba (*test set*), compuesto por 190 imágenes (19 por clase). La matriz de confusión (Figura 16), muestra un claro predominio de verdaderos positivos (VP) sobre la diagonal principal, lo que indica una alta capacidad discriminativa entre las distintas concentraciones de Cd, así como el medio y el control. El modelo obtuvo métricas globales (Tabla 9) de 0.995 de precisión global, 0.9947 de exhaustividad (*recall*) y 0.9947 de F1-score global.

Estos valores implican, que aproximadamente 189 de las 190 imágenes fueron clasificadas correctamente, evidenciando un desempeño sobresaliente en el conjunto de prueba. La principal confusión observada se presentó entre las clases S08_150 ppm y S09_175 ppm. En particular, la clase S08_150 ppm mostró una exhaustividad de 0.9474, lo que corresponde a un único error de clasificación dentro de las 19 imágenes evaluadas.

Esta confusión, desde una perspectiva biológica, se encuentra en que ambas concentraciones se encuentran próximas al umbral de inhibición reportado para *D. alaskensis* 6SR (López-Pérez et al., 2015; Neria-González & Aguilar-López et al., 2021), donde los cambios cromáticos asociados a la precipitación de CdS tienden a presentar similitudes visuales.

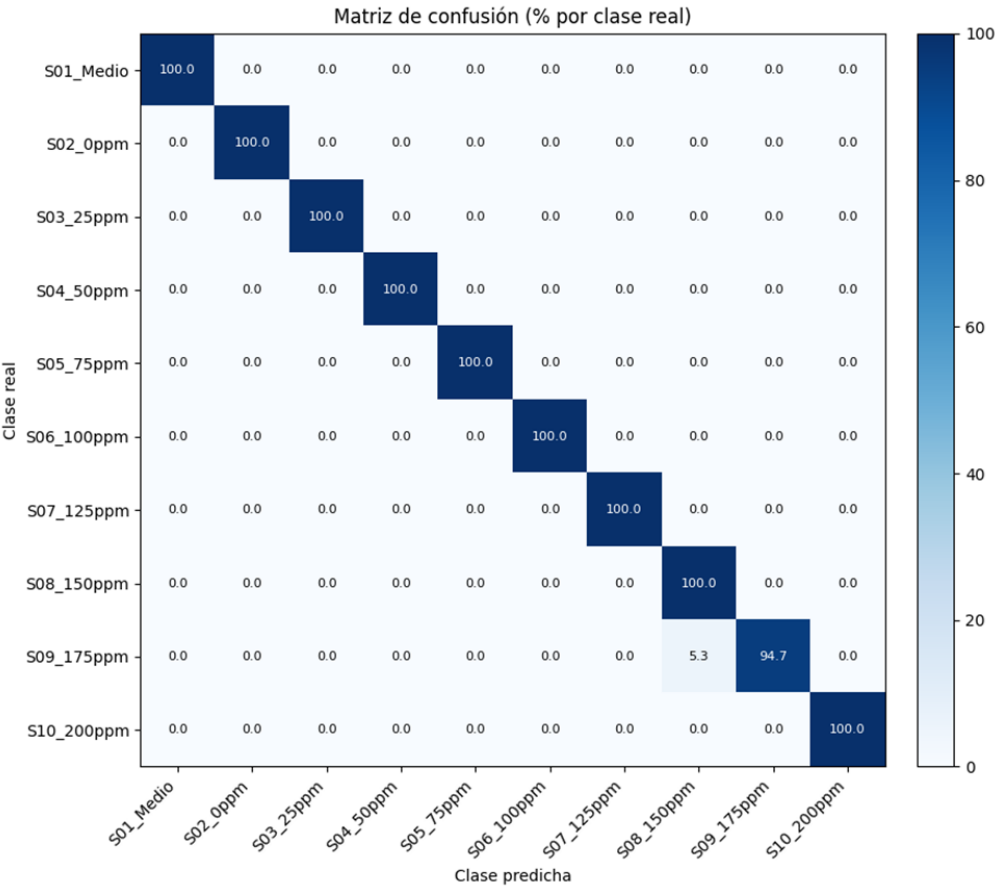


Figura 16. Matriz de confusión

Es importante destacar que debido al tamaño relativamente reducido del conjunto de prueba (n=190), un único error representa una variación aproximada de 5.26% en las métricas

por clase. Por tanto, aunque los resultados indican una alta capacidad predictiva, se reconoce que futuras validaciones con conjuntos externos de mayor tamaño permitirían fortalecer la generalización estadística del modelo.

Tabla 9. Reporte de métricas en el conjunto prueba (test) de la CNN.

Clase	Precisión	Exhaustividad	F1-score	Soporte
S01_Medio	1	1	1	19
S02_0ppm	1	1	1	19
S03_25ppm	1	1	1	19
S04_50ppm	1	1	1	19
S05_75ppm	1	1	1	19
S06_100ppm	1	1	1	19
S07_125ppm	1	1	1	19
S08_150ppm	0.95	1	0.9744	19
S09_175ppm	1	0.9474	0.973	19
S10_200ppm	1	1	1	19
Promedio	0.995	0.9947	0.9947	190

El F1-score global de 0.9947 refleja un equilibrio adecuado entre la precisión y exhaustividad, indicando que el modelo no solo minimiza los falsos positivos (FP), sino que también mantiene una alta capacidad de identificar correctamente los patrones. Resultados comparables han sido reportados Gutiérrez-Ramírez et al. (2025), donde la estandarización de la adquisición y la delimitación de la ROI contribuye significativamente al desempeño del modelo.

8.4.2 Interpretabilidad de la CNN mediante mapas de calor

Con el objetivo de aportar interpretabilidad a los resultados de clasificación obtenidos por la CNN, se empleó la técnica de Gradient-weighted Class Activation Mapping (Grad-CAM), la cual, permite identificar las regiones espaciales de la imagen que contribuyen de manera significativa a la predicción de cada clase (Selvaraju et al., 2017).

Los mapas de calor fueron generados a partir de la última capa convolucional del modelo (*conv_128_3x3*), superponiendo las activaciones normalizadas sobre las imágenes originales del conjunto de prueba. Esta metodología permite visualizar las zonas de mayor

relevancia dentro de la imagen que influyen en la decisión del modelo, facilitando la comprensión del proceso de clasificación realizado por la CNN.

En la Figura 17, se presentan los mapas de calor obtenidos para las clases correspondientes a las concentraciones de 150 ppm y 175 ppm, en ella se observa que las regiones activadas por Grad-CAM muestran similitudes en los patrones cromáticos asociados a la formación del precipitado metálico CdS. Este comportamiento explica los errores de clasificación observados entre dichas clases en la matriz de confusión. Evidenciando limitaciones en la separabilidad del sistema experimental.

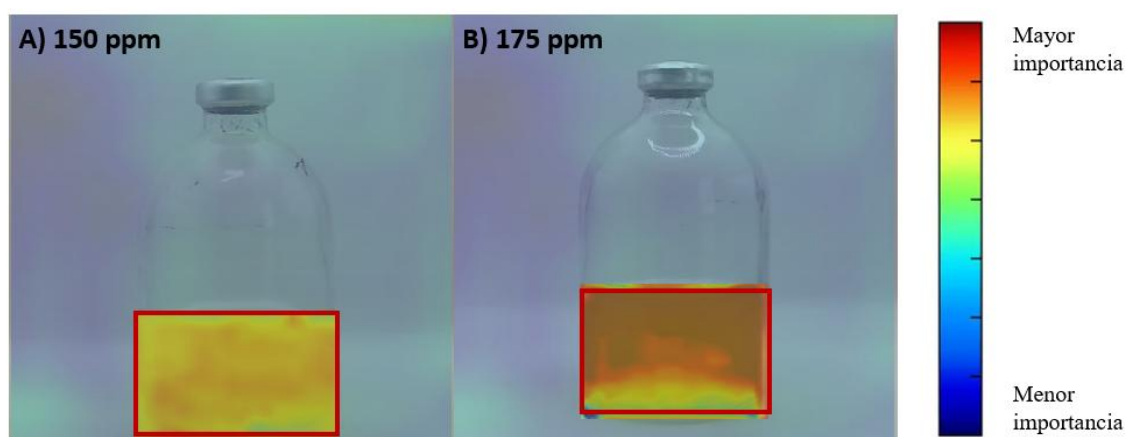


Figura 17. Mapas de calor generados mediante Grad-CAM superpuestos en imágenes de las clases 150 ppm y 175 ppm.

En clases bien diferenciadas, los mapas de calor muestran patrones consistentes y localizados, lo que sugiere que la CNN pudo reconocer los descriptores visuales asociados a la presencia o ausencia del precipitado CdS.

8.5 Evaluación de la red a 170 ppm de Cd(II).

8.5.1 Cinética de remoción de Cd (II)

La cinética de remoción de Cd(II) fue evaluada durante 120 h mediante la determinación de la concentración residual del metal utilizando AAS (Figura 18). Estudios previos indican que la tasa de precipitación biogénica de CdS depende de la disponibilidad de sulfuro y de la actividad metabólica bacteriana, mostrando generalmente una fase inicial rápida seguida de una etapa de estabilización (Kiran et al., 2017). Este comportamiento concuerda con la cinética observada en este estudio.

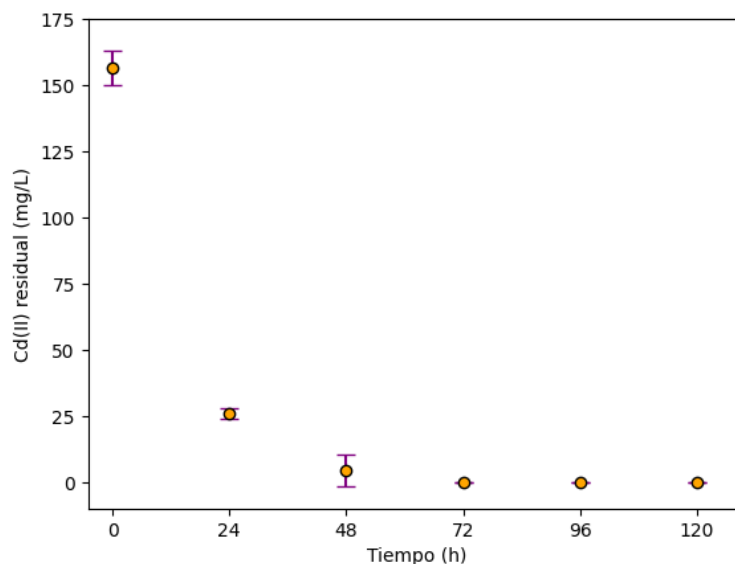


Figura 18. Cd(II) residual calculado mediante espectroscopía de absorción atómica (AAS) en función del tiempo (h) de incubación de *D. alaskensis* 6SR.

Después de 72 h de incubación, la concentración residual de Cd(II) fue cercana al límite de detección del método, lo cual, es coherente con reportes donde la eficiencia de remoción supera el 95% bajo condiciones anaerobias óptimas (López-Pérez et al., 2015; Zhao et al., 2021), lo que respalda la actividad metabólica efectiva de *D. alaskensis* 6SR en el sistema evaluado.

8.5.2 Clasificación y estimación de la concentración residual de Cd(II) de las imágenes acorde a la cinética de remoción.

El análisis de imágenes correspondientes a la concentración no incluida en el entrenamiento (170 mg/L) permitió evaluar la capacidad de generalización del modelo. En la Tabla 9 se muestra la clase inferida por el modelo, la probabilidad asociada a dicha predicción y la concentración de CdS estimada a partir del cálculo del valor esperado de la función *softmax*. A partir de esta estimación, se calculó indirectamente la concentración residual de Cd(II) en el sistema.

En el tiempo inicial (0 h), el modelo clasificó las imágenes dentro de la clase de 25 ppm, con una probabilidad de 0.99, lo cual indica que el modelo no responde a la concentración nominal inicial, sino al estado cromático del sistema en el momento de adquisición. Conforme avanzó la cinética de remoción, las predicciones obtuvieron

probabilidades en clases de mayor concentración nominal (150 y 200 ppm), coincidiendo en el aumento de la intensidad a la formación de CdS. Este comportamiento puede atribuirse al hecho de que la señal óptica en sistemas BSR está directamente relacionada a la acumulación de sulfuros metálicos insolubles (Zhao et al., 2021).

Tabla 10. Clase inferida, probabilidad y concentración indirecta de Cd, mediante CdS, por la CNN durante la cinética de remoción de Cd(II) (170 mg/L).

Tiempo (h)	Clase inferida	Probabilidad	CdS estimado CNN (mg/L)	Cd(II) residual (mg/L)
0	S03_25ppm	0.99	34.24	135.76
24	S08_150ppm	0.83	126.01	43.99
48	S10_200ppm	0,47	157.74	12.26
72	S10_200ppm	0.44	173.44	0
96	S09_175ppm	0.89	174.37	0
120	S09_175ppm	0.62	178.43	0

La disminución de la probabilidad en las clases de 200 ppm en 48 y 72 h sugiere una transición visual entre estados cromáticos, posiblemente asociada a cambios en la morfología o dispersión del precipitado. La literatura indica que la formación de CdS puede presentar variaciones en tamaño de partícula y distribución espacial conforme evoluciona la cinética de precipitación (Liu et al., 2020), lo que podría explicar la dispersión probabilística observada en la salida *softmax* del modelo.

Posterior a las 72 h, la estimación de Cd(II) residual alcanzó valores de 0 mg/L. Estos valores no deben interpretarse como concentraciones nulas, sino como el resultado de la aplicación de una restricción matemática que limita las predicciones negativas del modelo a cero, para mantener la consistencia fisicoquímica en las estimaciones de las concentraciones (Niu et al., 2016).

En este sentido, las clases inferidas reflejan principalmente la intensidad cromática asociada al precipitado formado y no exclusivamente la concentración disuelta remanente. Esto respalda la hipótesis alternativa de que la característica óptica empleada por la CNN

está vinculada al fenómeno biológico de formación de CdS y no a un parámetro arbitrario del sistema.

8.5.3 Comparación entre las concentraciones residuales determinadas por AAS y CNN

La Figura 19, muestra la comparación entre las concentraciones residuales de Cd(II) determinadas experimentalmente mediante AAS y aquellas estimadas por el modelo CNN a partir del análisis de imágenes adquiridas durante la cinética de remoción correspondiente a un cultivo suplementado a una concentración inicial de 170 mg/L.

Se observó una correlación entre ambos métodos ($r = 0.987$), mostrando concordancia entre las concentraciones residuales determinadas experimentalmente y las estimadas mediante el modelo de visión artificial. Estos resultados sugieren que los cambios cromáticos durante la formación de CdS pueden ser utilizados como descriptor óptico indirecto del estado de remoción del metal.

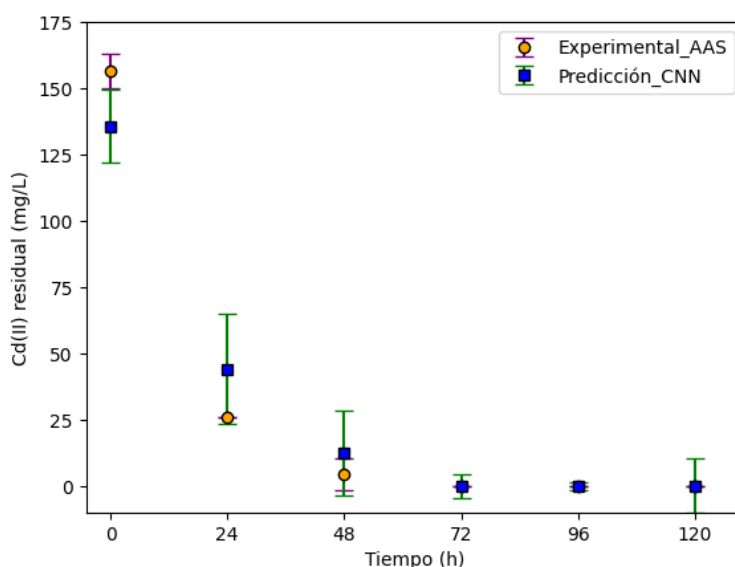


Figura 19. Comparación de la cinética de remoción de Cd(II) determinada mediante AAS y estimada por la CNN bajo condiciones no vistas (170 mg/L).

Con el propósito de evaluar el desempeño del modelo como sensor virtual de concentración, se calcularon métricas de error respecto al método de inferencia basado en AAS. El modelo presentó un MAE de 7.81 mg/L y un RMSE de 11.66 mg/L.

El mayor error absoluto se registró en el tiempo inicial (25.24 mg/L), el cual, puede explicarse por la naturaleza discreta del entrenamiento del modelo, dado que la red fue entrenada en clases nominales separadas por intervalos de concentración, la estimación continua obtenida mediante el valor esperado de la distribución de probabilidades generada por la función *softmax*. Posterior a las 48 h, el modelo obtuvo errores menores a 10 mg/L, lo que podría indicar el incremento en la formación de CdS y su cromaticidad característica más visible.

En concentraciones cercanas al límite de detección (<0.1 mg/L), el modelo tendió a estimar valores muy cercanos a cero. Para evitar concentraciones a valores negativos que carecen de significado fisicoquímico, se aplicó una restricción matemática que limita las estimaciones al intervalo $C \geq 0$. Este tipo de corrección es común en modelos reportados de clasificación ordinal transformados a regresión continua cuando se evalúan valores cercanos a cero (Niu et al., 2016).

En conjunto, los resultados respaldan que los cambios cromáticos derivados de la formación de CdS constituyen un descriptor óptico confiable del estado de remoción del metal. Esta correlación de AAS sugiere que el análisis de imágenes mediante CNN puede emplearse como herramienta complementaria para la estimación indirecta de Cd(II) residual en sistemas anaerobios controlados.

9 CONCLUSIONES

Se desarrolló un sistema basado en redes neuronales convolucionales (CNN) capaz de clasificar imágenes de cultivos de *Desulfovibrio alaskensis* 6SR de acuerdo con la concentración de Cd(II), utilizando como descriptor indirecto los cambios cromáticos relacionados a la formación de sulfuro de cadmio (CdS) durante la cinética de remoción.

La construcción de un banco de datos de 1900 imágenes balanceadas, así como, la estandarización de las condiciones de adquisición y la delimitación de la región de interés (ROI), contribuyeron a reducir la variabilidad no asociada al fenómeno biológico y a mejorar la consistencia del análisis visual.

La arquitectura CNN propuesta alcanzó valores de exactitud de 0.9549 en el conjunto de entrenamiento y 0.9863 en el conjunto de validación, obteniendo valores superiores a 0.90 de exactitud a partir de la época 30 de entrenamiento.

La evaluación del modelo con el conjunto de prueba permitió obtener métricas globales de precisión (0.995), exhaustividad (0.9947) y F1-score (0.9947), así como la identificación de regiones asociadas a cambios cromáticos mediante Grad-CAM, indicando una alta capacidad de clasificación de imágenes bajo las condiciones experimentales establecidas.

La evaluación del modelo con imágenes adquiridas bajo una condición no incluida en el entrenamiento (170 mg/L) permitió estimar la concentración residual de Cd(II) a partir del análisis cromático asociado a la formación de CdS, mostrando concordancia a los valores determinados experimentalmente mediante espectrofotometría de absorción atómica (AAS), lo cual, evidencia la capacidad de generalización del sistema ante condiciones no vistas.

Si bien, el sistema desarrollado demostró un desempeño elevado bajo condiciones controladas de laboratorio, es necesario evaluar su comportamiento en escenarios más complejos. Una línea prioritaria de trabajo consiste en validar el modelo en muestras reales de aguas contaminadas con Cd(II), donde la presencia de otros iones, materia orgánica o variaciones en turbidez podrían influir en la señal óptica y, por tanto, en la capacidad de clasificación.

Asimismo, se propone explorar la adaptación del modelo a otros metales pesados que formen sulfuros insolubles bajo condiciones anaerobias para de ampliar el alcance del enfoque desarrollado a sistemas multimetálicos.

Finalmente, futuras investigaciones podrían considerar el desarrollo de modelos orientados a regresión continua para estimar directamente concentraciones residuales, así como la posible integración del sistema en esquemas de monitoreo en línea que complementen las técnicas analíticas convencionales utilizadas en bioprocesos anaerobios.

REFERENCIAS

- Abeliuk, A., & Gutiérrez, C. (2021). Historia y evolución de la inteligencia artificial. *Revista Bits de Ciencia*, (21), 14-21.
- Alonso, A. D. C., & Jara, E. A. M. (2016). Visión por computadora: identificación, clasificación y seguimiento de objetos. *FPUNE Scientific*, (10).
- Álvarez-Márquez, D. E., Bernal-González, M., & Durán-Domínguez-de-Bazúa, M. D. C. (2022). Principales microorganismos sulfato reductores (MSR) de reactores anaerobios alimentados con efluentes ácidos, una revisión bibliográfica. *Revista Colombiana de Biotecnología*, 24(1), 62-76.
- Alvi, M., Batstone, D., Mbamba, C. K., Keymer, P., French, T., Ward, A., Dwyer, J. & Cardell-Oliver, R. (2023). Deep learning in wastewater treatment: a critical review. *Water research*, 245, 120518. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2023.120518>
- Arbab-Zavar, M. H., Zare, H. R., Heidari, M. M., & Khalafi-Nezhad, A. (2020). Electrochemical sensors for determination of cadmium: A review. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 325, 128818. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2020.128818>
- Arrieta, A. B., Díaz-Rodríguez, N., Del Ser, J., Bannetot, A., Tabik, S., Barbado, A., García, S., Gil-Lopez, S., Molina, D., Benjamins, R., Chatila, R. & Herrera, F. (2020). Explainable Artificial Intelligence (XAI): Concepts, taxonomies, opportunities and challenges toward responsible AI. *Information Fusion*, 58, 82–115. <https://doi.org/10.1016/j.inffus.2019.12.012>
- Austerjost, J., Söldner, R., Edlund, C., Trygg, J., Pollard, D., & Sjögren, R. (2021). A Machine Vision Approach for Bioreactor Foam Sensing. *SLAS technology*, 26(4), 408–414. <https://doi.org/10.1177/24726303211008861>
- Badreldin, N., Cheng, X. & Youssef, A. (2024). An Overview of Software Sensor Applications in Biosystem Monitoring and Control. *Sensors (Basel, Switzerland)*, 24(20), 6738. <https://doi.org/10.3390/s24206738>
- Beltrán, M. E. & Gómez, A. M. (2015). Metales pesados (Cd, Cr y Hg): Su impacto en el ambiente y posibles estrategias biotecnológicas para su remediación. *Revista I3+*, 2(2), 82-112.
- Biechele, P., Busse, C., Solle, D., Scheper, T. & Reardon, K. (2015). Sensor systems for bioprocess monitoring. *Engineering in Life Sciences*, 15(5), 469–488. <https://doi.org/10.1002/elsc.201500014>
- Bishop, C. M., & Nasrabadi, N. M. (2006). Pattern recognition and machine learning. Vol. 4, No. 4, pp. 738. New York: springer.

- Busse, C., Biechele, P., de Vries, I., Reardon, K. F., Solle, D., & Scheper, T. (2017). Sensors for disposable bioreactors. *Engineering in life sciences*, 17(8), 940–952. <https://doi.org/10.1002/elsc.201700049>
- Cantero, A., Alcides, D., Martínez, & Eustaquio, A. (2016). Visión por computadora: identificación, clasificación y seguimiento de objetos. *FPUNE Scientific*, (10).
- Cao, W., Mirjalili, V., & Raschka, S. (2020). Rank consistent ordinal regression for neural networks with application to age estimation. *Pattern Recognition Letters*, 140, 325–331. <https://doi.org/10.1016/j.patrec.2020.11.008>
- Cheng, G., Ding, H., Chen, G., Shi, H., Zhang, X., Zhu, M., & Tan, W. (2022). Effects of cadmium sulfide nanoparticles on sulfate bioreduction and oxidative stress in *Desulfovibrio desulfuricans*. *Bioresources and bioprocessing*, 9(1), 35. <https://doi.org/10.1186/s40643-022-00523-5>
- Choi, R. Y., Coyner, A. S., Kalpathy-Cramer, J., Chiang, M. F., & Campbell, J. P. (2020). Introduction to Machine Learning, Neural Networks, and Deep Learning. *Translational vision science y technology*, 9(2), 14. <https://doi.org/10.1167/tvst.9.2.14>
- Chollet, F. (2017). Deep Learning with Python. Manning.
- Fieo, M. J., Zinkevich, V., Beech, I. B., Llobet-Brossa, E., Eaton, P., Schmitt, J., & Guezennec, J. (2004). *Desulfovibrio alaskensis* sp. nov., a sulphate-reducing bacterium from a soured oil reservoir. *International journal of systematic and evolutionary microbiology*, 54(Pt 5), 1747–1752. <https://doi.org/10.1099/ijs.0.63118-0>
- Ferreira, U., & Camacho, J. (2021). Clasificador de red neuronal convolucional para identificar enfermedades del fruto de aguacate (*Persea americana* Mill.) a partir de imágenes digitales. *Agrociencia*, 55(8), 695-709.
- Fu, F., & Wang, Q. (2011). Removal of heavy metal ions from wastewaters: A review. *Journal of Environmental Management*, 92(3), 407–418. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2010.11.011>
- Gargalo, C. L., Udugama, I., Pontius, K., Lopez, P. C., Nielsen, R. F., Hasanzadeh, A., Mansouri, S. S., Bayer, C., Junicke, H., & Gernaey, K. V. (2020). Towards smart biomanufacturing: a perspective on recent developments in industrial measurement and monitoring technologies for bio-based production processes. *Journal of industrial microbiology y biotechnology*, 47(11), 947–964. <https://doi.org/10.1007/s10295-020-02308-1>
- Giuliani D. (2022). Metaheuristic Algorithms Applied to Color Image Segmentation on HSV Space. *Journal of imaging*, 8(1), 6. <https://doi.org/10.3390/jimaging8010006>
- Goodfellow, I., Bengio, Y., & Courville, A. (2016). Deep learning. MIT Press.

- Gupta, R., Ouderji, Z.H., Uzma, Yu, Z., Sloan, T. W. & You, S. (2024). Machine learning for sustainable organic waste treatment: a critical review. *npj Mater. Sustain.* 2, 5. <https://doi.org/10.1038/s44296-024-00009-9>
- Gutiérrez-Ramírez, J. J., Macias-Jamaica, R. E., Zamudio-Rodríguez, V. M., Sotelo, H. A., Velázquez-Vázquez, D. A., de Anda-Suárez, J., & Gutiérrez-Hernández, D. A. (2025). A Modular Framework for RGB Image Processing and Real-Time Neural Inference: A Case Study in Microalgae Culture Monitoring. *Eng*, 6(9), 221. <https://doi.org/10.3390/eng6090221>
- Hao, T. W., Xiang, P. Y., Mackey, H. R., Chi, K., Lu, H., Chui, H. K., van Loosdrecht, M. C., & Chen, G. H. (2014). A review of biological sulfate conversions in wastewater treatment. *Water research*, 65, 1–21. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2014.06.043>
- Hou, Y., Cheng, K., Li, Z., Ma, X., Wei, Y., Zhang, L., & Wang, Y. (2018). Correction: Biosorption of Cadmium and Manganese Using Free Cells of *Klebsiella* sp. Isolated from Waste Water. *PloS one*, 10(10), e0140962. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0140962>
<https://doi.org/10.1038/nature14539>
- Hussain, W., Mushtaq, M.F., Shahroz, M. Akram, U., Ghith E. S., Tlija M., Kim, T. & Ashraf, I. (2025). Ensemble genetic and CNN model-based image classification by enhancing hyperparameter tuning. *Sci Rep* 15, 1003. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-76178-3>
- Ioffe, S., & Szegedy, C. (2015). Batch normalization: Accelerating deep network training by reducing internal covariate shift. *Proceedings of ICML*, 448–456.
- Irfan, M., Liu, X., Hussain, K., Mushtaq, S., Cabrera, J., & Zhang, P. (2023). The global research trend on cadmium in freshwater: a bibliometric review. *Environmental science and pollution research international*, 30(28), 71585–71598. <https://doi.org/10.1007/s11356-021-13894-7>
- Jain, M., & Srihari, A. (2024). Comparison of machine learning models for stress detection from sensor data using long short-term memory (LSTM) networks and convolutional neuronal networks (CNNs). *International Journal of Scientific Research and Management*, 12(12), 1775–1792. <https://doi.org/10.18535/ijssrm/v12i12.ec02>
- Jeon, H. -G., & Lee, K.-H. (2025). Region-of-interest extraction method to increase object-detection performance in remote monitoring systems. *Applied Sciences*, 15(10), 5328. <https://doi.org/10.3390/app15105328>
- Khan, M., Chuenchart, W., Surendra, K. C., & Kumar Khanal, S. (2023). Applications of artificial intelligence in anaerobic co-digestion: Recent advances and prospects. *Bioresour Technol*, 370, 128501. doi:10.1016/j.biortech.2022.128501

- Kiran, M. G., Pakshirajan, K., & Das, G. (2017). Heavy metal removal from multicomponent system by sulfate reducing bacteria: Mechanism and cell surface characterization. *Journal of hazardous materials*, 324(Pt A), 62–70. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2015.12.042>
- Kourounis, G., Elmahmudi, A. A., Thomson, B., Hunter, J., Ugail, H. & Wilson, C. (2023). Computer image analysis with artificial intelligence: a practical introduction to convolutional neural networks for medical professionals. *Postgraduate medical journal*, 99(1178), 1287–1294. <https://doi.org/10.1093/postmj/qgad095>
- LeCun, Y., Bengio, Y., & Hinton, G. (2015). Deep learning. *Nature*, 521, 436–444. <https://doi.org/10.1038/nature14539>
- Li, X., Xu, H., Chen, Z. S., & Chen, G. (2017). Biosynthesis of nanoparticles by microorganisms and their applications. *Journal of Nanomaterials*, 2017, 1–16. <https://doi.org/10.1155/2017/140365>
- Lin, M., Chen, Q., & Yan, S. (2014). Network in network. *Proceedings of ICLR*. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1312.4400>
- Liu, Y., Wang, J., Li, P., Xie, Y., Xie, H., Xie, T., & Zhang, Y. (2020). Bioconversion of high-concentration chelated cadmium to nano-CdS photocatalyst by sulfate-reducing bacteria. *Environmental Technology & Innovation*, 19, 100824. <https://doi.org/10.1016/j.eti.2020.100824>
- López-Pérez, P. A., Neria-González, M. I., Flores-Cotera, L. B., & Aguilar-López, R. (2013). A mathematical Model for Cadmium Removal using A sulfate Reducing Bacterium: *Desulfovibrio alaskensis* 6SR. *Int. J. Environ. Res*, 7(2), 501-512.
- López-Pérez, P. A., Neria-González, I. & Aguilar-López, R. (2015). A biotechnological alternative in the cadmium removal at high concentration: *Desulfovibrio alaskensis* 6SR. *Int J Environ Sci Technol*. 12:1975-1986
- Ma, B., Song, W., Zhang, X., Chen, M., Li, J., Yang, X., & Zhang, L. (2023). Potential application of novel cadmium-tolerant bacteria in bioremediation of Cd-contaminated soil. *Ecotoxicol Environ Saf*. 255, 114766. doi:10.1016/j.ecoenv.2023.114766
- Maxwell, A. E., Warner, T. A., & Guillén, L. A. (2021). Accuracy Assessment in Convolutional Neural Network-Based Deep Learning Remote Sensing Studies—Part 2: Recommendations and Best Practices. *Remote Sensing*, 13(13), 2591. <https://doi.org/10.3390/rs13132591>
- Mhade, S. & Kaushik, K. S. (2023). Tools of the Trade: Image Analysis Programs for Confocal Laser-Scanning Microscopy Studies of Biofilms and Considerations for Their Use by Experimental Researchers. *ACS omega*, 8(23), 20163–20177. <https://doi.org/10.1021/acsomega.2c07255>

- Muyzer, G., & Stams, A. J. M. (2008). The ecology and biotechnology of sulphate-reducing bacteria. *Nature Reviews Microbiology*, 6(6), 441–454. <https://doi.org/10.1038/nrmicro1892>
- Nazmul, M., Shad, M., Islam, A., Znad, H., & Munjur, M. (2020). Sustainable composite sensor material for optical cadmium(II) monitoring and capturing from wastewater. *Microchemical Journal*, 105800. doi:10.1016/j.microc.2020.105800
- Neria-González, MI, & Aguilar-López, R. (2021). Procesos de remoción de metales pesados mediante bacterias sulfato-reductoras. En *Contaminación ambiental y remediación* (pp. 367-394). Singapur: Springer Singapur.
- Nie, Y., Chen, Y., Guo, J., Li, S., Xiao, Y., Gong, W., & Lan, R. (2025). An improved CNN model in image classification application on water turbidity. *Scientific reports*, 15(1), 11264. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-93521-4>
- Niu, Z., Zhou, M., Wang, L., Gao, X., & Hua, G. (2016). Ordinal regression with multiple output CNN for age estimation. *Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, 4920–4928. <https://doi.org/10.1109/CVPR.2016.532>
- Ortega Ramírez, A. T., & Sánchez Rodríguez, N. (2021). Tratamientos avanzados para la potabilización de aguas residuales. *Ciencia e Ingeniería Neogranadina*, 31(2), 121–134. <https://doi.org/10.18359/rcin.5343>
- Pal, M.K., & Lavanya, M. (2022). Microbial Influenced Corrosion: Understanding Bioadhesion and Biofilm Formation. *J Bio Tribo Corros* 8, 76. <https://doi.org/10.1007/s40735-022-00677-x>
- Park, Y., & Faivre, D. (2022). Diversity of Microbial Metal Sulfide Biomineralization. *ChemPlusChem*, 87(1), e202100457. <https://doi.org/10.1002/cplu.202100457>
- Peña-Caballero, V., Aguilar-López, R., López-Pérez, P. A., & Neria-González, M. I. (2016). Reduction of Cr (VI) utilizing biogenic sulfide: an experimental and mathematical modeling approach. *Desalination and Water Treatment*, 57(28), 13056-13065.
- Pérez, L., Martínez, A., Salgado, I., Valdés, L. A., Cruz, M., Veitía, S. A., & Carballo, M. E. (2020). Remoción bacteriana de cinc y cadmio: estudio de factores asociados con el proceso. *Tecnología y ciencias del agua*, 11(3), 309-341.
- Postgate J.R. (1984) The Sulphate Reducing Bacteria. Cambridge University Press, Cambridge
- Ragi, S., Rahman, M. H., Duckworth, J., Jawaharraj, K., Chundi, P., & Gadhamshetty, V. (2023). Artificial Intelligence-Driven Image Analysis of Bacterial Cells and Biofilms. *IEEE/ACM Trans Comput Biol Bioinform*, 20(1), 174-184. doi:10.1109/tcbb.2021.3138304
- Salgado, E. M., Esteves, A. F., Gonçalves, A. L., & Pires, J. C. M. (2023). Microalgal cultures for the remediation of wastewaters with different nitrogen to phosphorus ratios: Process

- modelling using artificial neural networks. *Environmental Research*, 231, 116076. <https://doi.org/10.1016/j.envres.2023.116076>
- Secretaría de Salud. (2021). NOM-117-SSA1-1994: Bienes y servicios. Método de prueba para la determinación de cadmio, arsénico, plomo, estaño, cobre, fierro, zinc y mercurio en alimentos, agua potable y agua purificada por espectrometría de absorción atómica. Ciudad de México. Diario Oficial de la Federación.
- Selvaraju, R. R., Cogswell, M., Das, A., Vedantam, R., Parikh, D., & Batra, D. (2017). Grad-CAM: Visual Explanations From Deep Networks via Gradient-Based Localization. *Proceedings of the IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV)*, pp. 618–626
- Shahat, A., Kubra, K. T., Salman, M. S., Hasan, M. N., & Hasan, M. M. (2021). Novel solid-state sensor material for efficient cadmium(II) detection and capturing from wastewater. *Microchemical Journal*, 164, 105967. doi:10.1016/j.microc.2021.105967
- Sheikh, M. C., Hasan, M. M., Hasan, M. N., Salman, M. S., Kubra, K. T., Awual, M. E., & Awual, M. R. (2023). Toxic cadmium (II) monitoring and removal from aqueous solution using ligand-based facial composite adsorbent. *Journal of Molecular Liquids*, 389, 122854.
- Shorten, C., & Khoshgoftaar, T. M. (2019). A survey on image data augmentation for deep learning. *Journal of Big Data*, 6, 60. <https://doi.org/10.1186/s40537-019-0197-0>
- Suresh, A. K., Pelletier, D. A., & Doktycz, M. J. (2011). Relating nanomaterial properties and microbial toxicity. *Nanoscale*, 3(7), 2873–2886. <https://doi.org/10.1039/c1nr10129a>
- Trejo-Zúñiga, I., Moreno, M., Santana-Cruz, R. F., & Meléndez-Vázquez, F. (2024). Deep-Learning-Driven Turbidity Level Classification. *Big Data and Cognitive Computing*, 8(8), 89.
- Tripathi, A.K., Thakur, P., Saxena, P., Rauniyar, S., Gopalakrishnan, V., Singh, R.N., Gadhamshetty, V., Gnimpieba, E.Z., Jasthi, B.K. & Sani, R.K. (2021). Gene Sets and Mechanisms of Sulfate-Reducing Bacteria Biofilm Formation and Quorum Sensing with Impact on Corrosion. *Front. Microbiol.*, 12, 3120
- Van der Velden, B. H. M., Kuijf, H. J., Gilhuijs, K. G. A., & Viergever, M. A. (2022). Explainable artificial intelligence (XAI) in deep learning-based medical image analysis. *Medical image analysis*, 79, 102470. <https://doi.org/10.1016/j.media.2022.102470>
- Verma, N., & Sharma, R. (2017). Bioremediation of Toxic Heavy Metals: A Patent Review. *Recent patents on biotechnology*. 11(3), 171–187. doi:10.2174/187220831166617011111631
- Vijay Anand, M., Sohitha, C., Saraswathi, G. N., & Lavanya, G. (2023). Water quality prediction using CNN. *Journal of Physics. Conference Series*. 2484(1) <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2484/1/012051>.

- Wang, B., Wang, Z., Chen, T., & Zhao, X. (2020). Development of Novel Bioreactor Control Systems Based on Smart Sensors and Actuators. *Frontiers in bioengineering and biotechnology*, 8, 7. <https://doi.org/10.3389/fbioe.2020.00007>
- Wołowiec, M., Komorowska-Kaufman, M., Pruss, A., Rzepa, G., & Bajda, T. (2019). Removal of Heavy Metals and Metalloids from Water Using Drinking Water Treatment Residuals as Adsorbents: A Review. *Minerals*, 9(8), 487. doi:10.3390/min9080487
- Wu, L., Xiao, G., Huang, D., Zhang, X., Ye, D., & Weng, H. (2025). Edge computing-based machine vision for non-invasive and rapid soft sensing of mushroom liquid strain biomass. *Agronomy*, 15(1), 242. <https://doi.org/10.3390/agronomy15010242>
- Xu, Y., & Chen, Y. (2020). Advances in heavy metal removal by sulfate-reducing bacteria. *Water Science and Technology*. <https://doi.org/10.2166/wst.2020.227>
- Zhang, P., Yang, M., Lan, J., Huang, Y., Zhang, J., Huang, S., Yang, Y., & Ru, J. (2023). Water Quality Degradation Due to Heavy Metal Contamination: Health Impacts and Eco-Friendly Approaches for Heavy Metal Remediation. *Toxics*, 11(10), 828. <https://doi.org/10.3390/toxics11100828>
- Zhao, Q., Li, X., Xiao, S., Peng, W., & Fan, W. (2021). Integrated remediation of sulfate-reducing bacteria and nano zero-valent iron on cadmium contaminated sediments. *Journal of Hazardous Materials*, 406, 124680. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2020.124680>

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Mecanismos de reducción desasimilatoria de sulfato y remoción de metales por bacterias sulfatorreductoras.	8
Figura 2. Etapas del monitoreo en los bioprocesos a partir de sensores.....	10
Figura 3. Clasificación de sensores respecto a su posición en la toma de muestra, interacción en el biorreactor, tiempo de respuesta y variables medibles.....	10
Figura 4. Etapas del procesamiento y análisis de imágenes.	14
Figura 5. Estructura de una ANN. A. Estructura general de una neurona artificial comparada con una neurona biológica. B. Arquitectura general de la ANN.	15
Figura 6. La extracción de características de imágenes y arquitectura de una CNN. A. Se extraen características numéricas de los píxeles de una imagen en un rango de 0, 255, o normalizada 0,1 para obtener una matriz. B. En estas matrices se aplican operaciones de convolución a partir de un filtro (kernel) definido. C. Este proceso se realiza en cada capa de la CNN. La arquitectura muestra dos etapas: la extracción de características y la clasificación mediante capas completamente conectadas.	18
Figura 7. Sistema de adquisición de imagen para la captura de imágenes de los cultivos.	31
Figura 8. Organización del conjunto de datos y anotación de imágenes en la plataforma Roboflow. Se muestra la distribución de clases correspondientes a las distintas concentraciones de Cd(II) así como un ejemplo del proceso de anotación de ROI, delimitada manualmente en la zona inferior del frasco donde se concentra el cultivo de <i>Desulfovibrio alaskensis</i> 6SR y el precipitado de CdS.	32
Figura 9. Arquitectura de la CNN.	34
Figura 10. Observaciones cualitativas de las diferencias entre cada clase, ilustrando las diferencias de tonalidad observadas durante la cinética. Se muestran imágenes de cultivos de <i>Desulfovibrio alaskensis</i> 6SR correspondientes al medio sin inocular, al control sin cadmio y a diferentes concentraciones de Cd (25–200 ppm), adquiridas a las 72 h de incubación.....	37
Figura 11. Cinética de crecimiento de <i>Desulfovibrio alaskensis</i> 6SR en cultivos con Cd a 100 ppm (línea morada) y 175 ppm (línea amarilla), comparados con un control (línea verde). Los puntos representan la media de biomasa (mg/L) en función del tiempo (h).	39
Figura 12. Definición de la región de interés empleada para el análisis de imágenes. Se muestra A) una imagen original del cultivo y B) la correspondiente imagen después de delimitar la ROI mediante la plataforma Roboflow, así como C) la ampliación de la ROI seleccionada para incluir la zona de formación. La imagen corresponde a un cultivo con una concentración inicial de 75 ppm de Cd(II).	41
Figura 13. Seguimiento de la pérdida durante el entrenamiento (curva azul) y validación (curva naranja) de la CNN.....	44
Figura 14. Comportamiento de la exactitud durante el entrenamiento (curva azul) y validación (curva naranja) de la CNN.....	44
Figura 15. Velocidad de aprendizaje de la CNN.....	46
Figura 16. Matriz de confusión.....	47

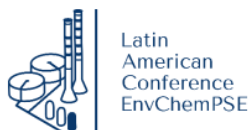
Figura 17. Mapas de calor generados mediante Grad-CAM superpuestos en imágenes de las clases 150 ppm y 175 ppm.....	49
Figura 18. Cd(II) residual calculado mediante espectroscopía de absorción atómica (AAS) en función del tiempo (h) de incubación de <i>D. alaskensis</i> 6SR.	50
Figura 19. Comparación de la cinética de remoción de Cd(II) determinada mediante AAS y estimada por la CNN bajo condiciones no vistas (170 mg/L).....	52

LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Características de las etapas del PTAR.	4
Tabla 2. Métodos de remoción de iones de metales pesados.....	6
Tabla 3. Diferencias entre model-driven y data-driven (Badreldin et al., 2024).....	11
Tabla 4. Tipos de inteligencia artificial y sus principales aplicaciones en los bioprocesos.	13
Tabla 5. Funciones de activación utilizadas en Redes Neuronales.	16
Tabla 6. Hiperparámetros clave para la arquitectura de la CNN.....	19
Tabla 7. Composición del medio Postgate C modificado para esta investigación (Postgate, 1984).....	29
Tabla 8. Parámetros estructurales de la CNN.....	42
Tabla 9. Reporte de métricas en el conjunto prueba (test) de la CNN.....	48
Tabla 10. Clase inferida, probabilidad y concentración indirecta de Cd, mediante CdS, por la CNN durante la cinética de remoción de Cd(II) (170 mg/L).	51

ANEXOS

Anexo A. Productos de la investigación.



Latin
American
Conference
EnvChemPSE



October 9th, 2025

This is to certify that the poster

**Seguimiento en tiempo real de precipitados metálicos en un sistema anaerobio mediante
visión por computadora**

L. A. Millán-Téllez, P. A. López-Pérez, F. Meléndez-Vázquez, A. Castillo-Hernández, M. I. Neria-González

**has been presented in the Latin American Conference on Environmental and Chemical
Process Systems Engineering #LatinEnvChemPSE 2025.**



TECNOLÓGICO
NACIONAL DE MÉXICO

Prof. Adrián Bonilla-Petriciolet

Chairman of the Organizing Committee of #LatinEnvChemPSE



Instituto Tecnológico
de Aguascalientes



COLOQUIO INTERNACIONAL
DE MECATRÓNICA

CONSTANCIA

La organización del 3er Coloquio Internacional de Mecatrónica y la Industria 4.0
otorga el presente reconocimiento a:

Luis Ángel Millán Téllez
Adriana Castillo Hernández
Dr. Pablo Antonio López Pérez
Dr. Fidel Meléndez Vázquez

por su participación en la sesión de carteles con el trabajo
Seguimiento en tiempo real de precipitados metálicos en un sistema anaerobio
mediante adquisición y procesamiento de imagen vía inteligencia artificial.

07 y 08 de mayo de 2025, Apan Hidalgo


Director General
Mtro. Jasso Juan Manuel Martínez
del Estado de Hidalgo
Dirección General


Coordinadora del Evento
Mtra. María del Refugio Barrientos
del Estado de Hidalgo
Dirección General


Organizador del Evento
Mtro. Jesús García Blancas



INGENIERÍA MECATRÓNICA



Universidad
Tecnológica
del Perú



Anexo B. Características de la cámara y la caja blanca.

Tabla B.1. Características de la cámara empleada en la instrumentación.

		Longitud focal máxima:	50 mm
		Apertura máxima:	2 f
		Color:	Negro
		Distancia del objeto:	5 cm - 100 m
		Resolución:	600 LW/PH
		Interfaz:	USB 2.0 de alta velocidad
		Formatos de salida:	YUYV/MJPEG
		Tipo de sensor:	Sony (1/3.2")
		Tamaño de matriz activa:	3264X2448
Marca:	Hotpet	Iluminación mínima:	50 lux
Modelo:	IMX179	Relación S/N:	44 dB
Enfoque:	Manual	Rango dinámico:	83,5 dB
Resolución de captura de video:	2448 p	Compatibilidad:	Universal, USB.

Tabla B.2. Características de la caja blanca empleada en la instrumentación.

		Número de perlas de lámpara:	96 perlas
		Brillo de la lámpara	24 - 26 lm
		Temperatura blanca positive	5500 K
		Rango de atenuación	1% - 100 %
		Potencia	1 - 10 W
		Voltaje	5 V
		Fuente de alimentación:	Interfaz USB
		Tamaño del artículo:	245 * 245 * 245 mm
		High CRI	96
Marca:	Generic	Tipo de fondo:	12 colores
Modelo:	PULUZ LED 12 PU5025B	Portatil:	Sí

Anexo C: Cronograma para la captura de imágenes.

Etiquetas	26 – 30 mayo	2 – 6 junio	9 – 13 junio	16 – 20 junio	23 – 27 junio	30 junio – 4 julio
Medio	X					
Control	X					
25 ppm		X				
50 ppm		X				
75 ppm			X			
100 ppm			X			
125 ppm				X		
150 ppm				X		
175 ppm					X	
200 ppm					X	
170 ppm						X

Anexo D: Código de etiquetado de imágenes.

El siguiente código, en lenguaje *Python*, se implementó para la toma de imágenes mediante el sistema de adquisición propuesto, se recomienda su uso en un entorno local.

```
# Librerías necesarias para ejecutar el algoritmo
import cv2
import datetime
import os
import glob
import time
import numpy as np

# Definir las siguientes funciones:
def obtener_siguiente_numero(carpeta): # Numerar imágenes
    if not os.path.exists(carpeta):
        os.makedirs(carpeta)
    return 1
    archivos = glob.glob(os.path.join(carpeta, "*.jpg"))
    if not archivos:
        return 1
    numeros = []
    for archivo in archivos:
        nombre = os.path.basename(archivo)
        partes = nombre.split("_")
        if partes[0].isdigit():
            numeros.append(int(partes[0]))
    return max(numeros) + 1 if numeros else 1
```

```

# Guardar fotos adquiridas en su respectiva carpeta
def guardar_foto(frame, concentracion, numero_foto, carpeta=""): # COLOCAR NOMBRE CARPETA
    ahora = datetime.datetime.now()
    etiqueta = ahora.strftime("%Y-%m-%d_%H-%M-%S")
    nombre_archivo = f"{numero_foto:03d}_{concentracion.replace(' ', '_')}_{etiqueta}.jpg"
    etiqueta = os.path.join(carpeta, nombre_archivo)
    cv2.imwrite(ruta_completa, frame)
    print(f"Imagen guardada como {etiqueta}")
    return numero_foto + 1

# Las siguientes funciones se pueden implementar para automatizar, o no, el tiempo entre cada foto. El algoritmo cuenta con un modo
manual y otro automático

# MODO MANUAL
def capturar_foto(concentracion): # CAPTURAR LAS IMÁGENES
    carpeta = " " # COLOCA EL NOMBRE DE LA CARPETA DONDE LAS IMÁGENES SERÁN GUARDADAS
    numero_foto = obtener_siguiete_numero(carpeta)

# Colocar 0 si es cámara de equipo, en caso de ser extra a él, colocar 1 en el primer paréntesis.
cap = cv2.VideoCapture(#)
if not cap.isOpened():
    print("Error: No se pudo abrir la cámara.")
    return
print("Presiona 's' para capturar la foto y 'q' para salir.")
while True:
    ret, frame = cap.read()
    if not ret:
        print("Error: No se pudo capturar la imagen.")
        break
    cv2.imshow("Presiona 's' para tomar la foto", frame)
    key = cv2.waitKey(1) & 0xFF
    if key == ord('s'):
        numero_foto = guardar_foto(frame, concentracion, numero_foto)
    elif key == ord('q'):
        break
    cap.release()
    cv2.destroyAllWindows()

# MODO AUTOMÁTICO
def capturar_foto_periodicamente(concentracion, intervalo_minutos=1):
    carpeta = " " # COLOCAR NOMBRE DE LA CARPETA
    intervalo_segundos = intervalo_minutos * 30 # Se puede cambiar el intervalo de espera
    numero_foto = obtener_siguiete_numero(carpeta)
    print(f"Iniciando captura automática cada {intervalo_minutos} minutos")
    print("Presiona 'q' en la ventana de control para detener la captura de imagen")
    # Configurar ventanas
    cv2.namedWindow("Control")

```

```

cv2.resizeWindow("Control", 300,100)
cv2.moveWindow("Control", 100, 100)
cv2.setWindowTitle("Control", "Presiona 'q' para detener")
# Ventana de vista previa
cv2.namedWindow("Vista Previa")
cv2.resizeWindow("Vista Previa", 640, 480)
cv2.moveWindow("Vista Previa", 450, 100)
cv2.setWindowTitle("Vista Previa", "Vista de la cámara")
ultima_captura = time.time()
cap = cv2.VideoCapture(1)
if not cap.isOpened():
    print("Error: No se pudo abrir la cámara.")
    return
try:
    while True:
        ret, frame = cap.read()
        if not ret:
            print("Error: No se pudo capturar la imagen.")
            break
        # Mostrar vista previa
        cv2.imshow("Vista Previa", frame)
        # Verificar si es tiempo de capturar
        ahora = time.time()
        if ahora - ultima_captura >= intervalo_segundos:
            if ret:
                numero_foto = guardar_foto(frame, concentracion, numero_foto, carpeta)
            else:
                print("Error en la captura")
                ultima_captura = ahora
        # Mostrar mensaje en ventana de control
        tiempo_restante = max(0, int(intervalo_segundos - (ahora - ultima_captura)))
        texto_control = f"Proxima captura en: {tiempo_restante}s"
        imagen_control = np.zeros((100, 300, 3), dtype=np.uint8)
        cv2.putText(imagen_control, texto_control, (10, 50),
        cv2.FONT_HERSHEY_SIMPLEX, 0.7, (255, 255, 255), 2)
        cv2.imshow("Control", imagen_control)
        # Comprobar tecla de salida
        if cv2.waitKey(500) & 0xFF == ord('q'):
            break
    finally:
        cap.release()
        cv2.destroyAllWindows()
        print("Captura automática detenida")

# USO DEL ALGORITMO
#capturar_foto("") # Modo manual_("Nombre de la carpeta")
capturar_foto_periodicamente("") # Modo automático_("Nombre de la carpeta")

```

Anexo E. Evolución de las métricas de entrenamiento y validación durante 89 épocas previo a la interrupción por el criterio *Early stopping*.

Época	Tiempo (s)	Accuracy	Loss	Val_acc	Val_loss
1	27	0.1041	2.1436	0.1041	2.3516
2	25	0.4969	1.6616	0.1808	2.5641
3	9	0.5770	1.3891	0.2685	2.4529
4	10	0.6384	1.1830	0.3699	1.5474
5	19	0.6930	1.0359	0.5315	1.3100
10	10	0.8367	0.6051	0.1671	2.0326
15	10	0.8833	0.4570	0.9014	0.5340
20	11	0.9053	0.3341	0.7342	0.5786
25	9	0.9152	0.3559	0.5616	1.3239
30	9	0.9368	0.2824	0.9479	0.2149
35	10	0.9465	0.2502	0.9507	0.2015
40	10	0.9479	0.2466	0.9836	0.1388
45	9	0.9280	0.2431	0.9918	0.1190
50	9	0.9577	0.2281	0.9918	0.1248
55	20	0.9583	0.2144	0.9781	0.1227
60	19	0.9497	0.2322	0.9808	0.1223
65	9	0.9616	0.2095	0.9753	0.1233
70	9	0.9465	0.2182	0.9836	0.1032
75	10	0.9599	0.2315	0.9890	0.1008
79	10	0.9549	0.2152	0.9863	0.0984
80	9	0.9516	0.2319	0.9863	0.1000
85	9	0.9672	0.1863	0.9863	0.0997
89	21	0.9657	0.1852	0.9863	0.1001

Anexo F. Código para la estimación con imágenes no vistas ejecutado en *Google Colab*.

```
import numpy as np
import os
import pandas as pd
from tensorflow.keras.models import load_model
from tensorflow.keras.preprocessing import image
from google.colab import drive
drive.mount('/content/drive')
from google.colab import files

model = load_model('modelo.keras') #insertar el link de acceso al modelo
C0 = 170 #ppm se agregó la concentración a estimar con los datos experimentales del AAS.
clases = ["S01_Medio", "S02_0ppm", "S03_25ppm", "S04_50ppm", "S05_75ppm",
"S06_100ppm", "S07_125ppm", "S08_150ppm", "S09_175ppm", "S10_200ppm"]
concentraciones = np.array([0, 0, 25, 50, 75, 100, 125, 150, 175, 200])

ruta_imagenes = '' #Insertar la liga de la carpeta donde se encuentren las imágenes
imagenes = os.listdir(ruta_imagenes)

predicciones = []
for img_name in imagenes:
    ruta = os.path.join(ruta_imagenes, img_name)

    img = image.load_img(ruta, target_size=(350,350))
    img_array = image.img_to_array(img)
    img_array = img_array / 255.0
    img_array = np.expand_dims(img_array, axis=0)

    probs = model.predict(img_array)

    clase_idx = np.argmax(probs[0])
    clase_predicha = clases[clase_idx]
    prob_max = probs[0][clase_idx]

    conc_esperada = np.sum(probs[0] * concentraciones)
    conc_esperada = max(0, conc_esperada)

    remocion = ((C0 - conc_esperada) / C0) * 100
    remocion = np.clip(remocion, 0, 100)

    conc_esperada = round(conc_esperada, 4)
    remocion = round(remocion, 4)
    prob_max = round(prob_max, 4)
```

```

predicciones.append([
    img_name,
    clase_idx,
    clase_predicha,
    prob_max,
    conc_esperada,
    remocion
])

df = pd.DataFrame(predicciones, columns=[
    "Imagen",
    "Clase_idx",
    "Clase_nombre",
    "Probabilidad",
    "Concentracion_esperada",
    "remocion"
])

df.head()

df.to_csv("predicciones_170ppm.csv", index=False)
files.download("predicciones_170ppm.csv")

```

Efectos de sustancias poliméricas extracelulares (SPE) en la biocorrosión/biolixiviación en procesos industriales: avances y perspectivas

Luis Ángel Millán-Téllez¹, María Isabel Nería-González², Pablo Antonio López-Pérez^{1*}

¹Escuela Superior de Apan, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Carretera Apan-Calpulalpan Km. 8, C.P. 43900, Chimalpa Tlalayote, Apan, Hidalgo, México. ²División de Ingeniería Química y Bioquímica, TecNM: Tecnológico de Estudios Superiores de Ecatepec, Ecatepec de Morelos, Edo. México, México.

*Correspondencia: pablo_lopez@uaeh.edu.mx, save1991@yahoo.com.mx

Introducción	1
La corrosión inducida microbiológicamente	3
Bacterias que inducen la MIC	4
Bacterias Sulfato Reductoras	5
El género <i>Desulfovibrio</i>	6
Mecanismo sulfato – reductor	7
Formación de Biopelícula	8
Composición bioquímica de la SPE	10
El papel de los grupos funcionales en la SPE	11
Factores ambientales que modulan la SPE	12
Mecanismos moleculares de la biocorrosión mediante la interacción de SPE	12
Despolarización catódica	13
Transferencia directa de electrones	14
Mediadores de la transferencia de electrones	15
Potencial de la SPE para la lixiviación de metales pesados	17
Mecanismos microbianos de interacción con metales pesados	18
Limitaciones de la SPE como agente biosorbente	19
Aplicación de la remoción de metales pesados mediante <i>Desulfovibrio</i>	19
Aplicaciones en sistemas de tratamiento de aguas	20
Recuperación de metales en la industria minera	22
Síntesis de nanopartículas a partir de residuos metálicos	22
Potencial de la SPE para la prevención del MIC	23
Conclusiones y perspectivas	23
Bibliografía	24

Introducción

Las sustancias poliméricas extracelulares (SPE) constituyen el principal componente estructural y funcional de las biopelículas, desempeñando funciones esenciales en la adhesión, estabilidad y protección de las comunidades bacterianas. Estas matrices están compuestas en su gran mayoría por polisacáridos, proteínas, ácidos nucleicos y lípidos, cuya composición y organización dependen de las condiciones ambientales en las que los microorganismos se desarrollan. Bajo condiciones de estrés o ambientes desfavorables, las bacterias formadoras de biopelícula incrementan la producción de SPE como un mecanismo de supervivencia, lo que además permite establecer interacciones fisicoquímicas con superficies inertes, como aleaciones y estructuras metálicas basadas en hierro.