

# ÍNDICE GENERAL

---

---

<b>RESUMEN</b> .....	I
<b>RESUM</b> .....	V
<b>ABSTRACT</b> .....	IX
<b>ÍNDICE DE FIGURAS</b> .....	XVII
<b>ÍNDICE DE TABLAS</b> .....	XXI
<b>ÍNDICE DE ANEXOS</b> .....	XXVII
<b>CAPÍTULO 1 INTRODUCCIÓN</b> .....	1
1.1 Importancia de los embalses.....	1
1.2 Calidad del agua en almacenamientos .....	2
1.2.1 Temperatura.....	3
1.2.2 Concentración de oxígeno .....	6
1.2.3 pH.....	7
1.2.4 Conductividad .....	9
1.3 El fenómeno de la eutrofización .....	10
1.4 Objetivos.....	12
1.5 Estructura del documento .....	13
<b>CAPÍTULO 2 ESTADO DEL ARTE DE LOS MÉTODOS MULTIVARIANTES</b> 15	
2.1 Desarrollo histórico de los métodos multivariantes.....	15
2.2 Surgimiento del método PLSR .....	17
2.3 Aplicación de métodos multivariantes en determinación de calidad del recurso hídrico en cuerpos de agua continentales .....	19
<b>CAPÍTULO 3 ESTADO DEL ARTE DE LA MODELACIÓN CON MÉTODOS MECANICISTAS DE LA CALIDAD DEL AGUA EN EMBALSES</b> .....	29
3.1 Necesidad de los modelos mecanicistas de calidad del agua para embalses .....	29
3.2 Estado del arte .....	29
<b>CAPÍTULO 4 PANORAMA DE LOS MÉTODOS MULTIVARIANTES</b> .....	35
4.1 Introducción.....	35
4.1.1 Suposición de distribución normal multivariante.....	37
4.1.2 Suposición de homoscedasticidad.....	38
4.1.3 Suposición de linealidad .....	38
4.1.4 Transformaciones de datos .....	39
4.2 Análisis de componentes principales (PCA) .....	42
4.3 Análisis factorial (FA) .....	52
4.3.1 Descomposición factorial .....	52
4.3.2 Análisis factorial .....	54
4.3.3 Rotación de factores .....	58

4.3.4 Puntuaciones factoriales.....	59
4.3.5 Aplicación del análisis factorial .....	60
4.4 Análisis cluster (CA) .....	61
4.4.1 Métodos de agrupación no jerárquica .....	64
4.4.2 Métodos de agrupación jerárquica .....	66
4.4.3 Análisis cluster de variables.....	68
4.5 Análisis discriminante (DA) .....	69
4.6 Modelo lineal de regresión múltiple (MLR).....	73
4.7 Análisis de correlación canónica (CCA).....	85
4.8 PLSR .....	89
4.8.1 El PLSR para una sola variable Y (Algoritmo PLS1).....	101
4.8.2 El PLSR para varias variables Y (Algoritmo PLS2).....	101
4.8.3 Error de predicción.....	103
4.8.4 Validación cruzada (Cross validation) .....	104
4.8.5 Metodología de aplicación .....	110

## **CAPÍTULO 5 DESCRIPCIÓN DEL MODELO MECANICISTA..... 113**

5.1 Introducción.....	113
5.2 Datos necesarios.....	117
5.3 Orden de los procesos a realizar en las capas del embalse para cada día del periodo de simulación .....	118
5.4 Estabilidad de la estructura de capas .....	119
5.5 Unión de capas con espesor por debajo del mínimo.....	120
5.6 División de capas con espesor mayor al espesor máximo especificado.....	122
5.7 Cálculo de la difusión turbulenta .....	123
5.8 Ubicación de caudales que ingresan al embalse.....	127
5.9 Extracción de caudales por tomas y vertedor.....	129
5.10 Flujos de calor en las capas del almacenamiento .....	138
5.11 Precipitación, evaporación e infiltración.....	144
5.12 Proceso para el cálculo de temperatura en cada una de las capas .....	145

## **CAPÍTULO 6 DESCRIPCIÓN DEL SITIO DE ESTUDIO ..... 157**

6.1 Ubicación geográfica.....	157
6.2 Antecedentes .....	158
6.3 Información básica de la zona.....	159
6.4 Descripción de la cuenca .....	160
6.5 Descripción del embalse .....	162
6.6 Clima .....	163
6.7 Geología y usos del suelo.....	166
6.8 Información demográfica.....	167
6.9 Vertidos al embalse y demandas.....	168
6.10 Normatividad aplicable al recurso hídrico en el embalse.....	169
6.11 Descripción de la sonda.....	171

## **CAPÍTULO 7 APLICACIÓN DE LOS MÉTODOS MULTIVARIANTES ..... 175**

7.1 Introducción.....	175
7.2 Software .....	180
7.3 Exploración inicial de los datos .....	182
7.4 Transformación de los datos .....	195
7.5 Análisis de componentes principales .....	197
7.5.1 Exploración de datos .....	197
7.5.2 Puntuaciones .....	205
7.6 Análisis factorial .....	206
7.6.1 Periodo completo de estudio y variables sin transformar .....	207
7.6.2 Periodo de calibración, variables sin transformar.....	216
7.6.3 Periodo de validación, variables sin transformar .....	217

7.6.4 Normalidad de las puntuaciones factoriales extraídas, periodo completo de estudio .....	218
7.6.5 Periodo completo de estudio, variables transformadas.....	219
7.6.6 Periodo de calibración, variables transformadas .....	227
7.6.7 Periodo de validación, variables transformadas .....	228
7.6.8 Normalidad de las puntuaciones factoriales extraídas, variables transformadas, periodo completo de estudio .....	230
7.7 Análisis cluster .....	231
7.7.1 Exploración inicial, datos sin anómalos y sin transformar - Periodo completo de estudio .....	231
7.7.2 Formación de conglomerados para predicción de calidad del agua – Periodo de calibración, variables sin transformar .....	233
7.7.3 Formación de conglomerados para predicción de calidad del agua – Periodo de validación, variables sin transformar .....	234
7.7.4 Formación de conglomerados para predicción de calidad del agua – Periodo de calibración, variables transformadas.....	236
7.7.5 Formación de conglomerados para predicción de calidad del agua – Periodo de validación, variables transformadas .....	237
7.7.6 Formación de conglomerados para predicción de calidad del agua – Periodo de calibración, puntuaciones en componentes principales de variables sin transformar .....	238
7.7.7 Formación de conglomerados para predicción de calidad del agua – Periodo de validación, puntuaciones en componentes principales de variables sin transformar .....	238
7.7.8 Formación de conglomerados para predicción de calidad del agua – Periodo de calibración, puntuaciones factoriales de las variables sin transformar .....	239
7.7.9 Formación de conglomerados para predicción de calidad del agua – Periodo de validación, puntuaciones factoriales de las variables sin transformar .....	240
7.7.10 Análisis cluster de variables – Variables estandarizadas y sin transformar .....	241
7.7.11 Análisis cluster de variables – Variables transformadas .....	241
7.8 Análisis discriminante .....	242
7.8.1 Periodo completo de estudio – Variables sin transformar .....	242
7.8.2 Periodo completo de estudio – Variables transformadas .....	247
7.8.3 Periodo completo de estudio – Puntuaciones en componentes principales de las variables sin transformar.....	249
7.8.4 Periodo completo de estudio – Puntuaciones factoriales de las variables sin transformar .....	250
7.9 Modelo lineal de regresión múltiple.....	252
7.9.1 MLR en grupos formados con las variables estandarizadas.....	254
7.9.2 MLR en grupos formados con las variables transformadas .....	255
7.9.3 MLR en grupos formados con puntuaciones en componentes principales .....	256
7.9.4 MLR en grupos formados con las puntuaciones factoriales.....	257
7.10 Análisis de correlación canónica.....	258
7.10.1 CCA sobre periodos de calibración y validación completos.....	259
7.10.2 CCA sobre las variables originales estandarizadas .....	261
7.10.3 CCA sobre las variables transformadas .....	262
7.10.4 CCA sobre las puntuaciones en componentes principales .....	262
7.10.5 CCA sobre las puntuaciones factoriales.....	262
7.11 PLSR .....	263
7.11.1 Periodos de calibración y validación completos .....	263
7.11.2 Variables originales estandarizadas .....	264
7.11.3 Variables transformadas .....	264
7.11.4 Puntuaciones en componentes principales .....	265
7.11.5 Puntuaciones factoriales.....	265
7.12 Mejora de los resultados .....	266
7.12.1 Variables predictivas físicas.....	266

7.12.2 Recortado de datos.....	266
7.12.3 Modelo reducido – Términos lineales .....	267
7.12.4 Matriz extendida de entradas.....	269
7.12.5 Modelación usando la correlación entre variables respuesta.....	271
<b>CAPÍTULO 8 APLICACIÓN DEL MODELO MECANICISTA .....</b>	<b>273</b>
8.1 Revisión y tratamiento de los datos .....	273
8.2 Cobertura de nubes y temperatura superficial del embalse .....	274
8.3 Inicio de la simulación .....	285
8.4 Calibración.....	286
8.5 Validación.....	295
<b>CAPÍTULO 9 ANÁLISIS DE RESULTADOS Y DISCUSIÓN.....</b>	<b>301</b>
9.1 Obtención de variables predictivas .....	301
9.1.1 De operación del embalse .....	301
9.1.2 Meteorológicas.....	302
9.2 Estudio inicial de los datos por métodos multivariantes .....	303
9.3 Aplicación del PCA.....	306
9.4 Resultados del análisis factorial.....	310
9.4.1 Periodo completo de estudio, variables sin transformar.....	310
9.4.2 Periodo de calibración, variables sin transformar .....	315
9.4.3 Periodo de validación, variables sin transformar .....	316
9.4.4 Normalidad de las puntuaciones factoriales .....	318
9.4.5 Variables transformadas .....	318
9.5 Resultados del análisis cluster .....	320
9.6 Análisis discriminante.....	326
9.7 Modelo lineal de regresión múltiple.....	331
9.8 Resultados del análisis de correlación canónica .....	338
9.9 Resultados del PLSR .....	342
9.9.1 Usando 17 variables predictivas .....	343
9.9.2 Empleando 16 variables predictivas .....	345
9.9.3 Recortado de datos.....	346
9.9.4 Modelo reducido en términos lineales .....	348
9.9.5 Matriz extendida de entradas - INLR .....	350
9.10 Predicción de variables de calidad del agua con métodos multivariantes.....	353
9.11 Resultados del modelo mecanicista.....	361
9.12 Comparativo de modelación con PLSR y método mecanicista .....	362
<b>CAPÍTULO 10 CONCLUSIONES Y LÍNEAS FUTURAS.....</b>	<b>371</b>
10.1 Conclusiones.....	371
10.2 Aplicaciones y líneas futuras.....	380
<b>CAPÍTULO 11 REFERENCIAS .....</b>	<b>387</b>

# ÍNDICE DE FIGURAS

FIGURA 1 Pre-procesamiento de datos. Los datos para cada variable son representados por una barra de varianza y su centro. (A) Los datos sin tratar se observan así. (B) El resultado después del centrado en media solamente. (C) El resultado después de escalar la varianza solamente. (D) El resultado después de centrado en media y escalamiento de la varianza .....	36
FIGURA 2 Cambio de ejes y reducción de la dimensionalidad de los datos.....	52
FIGURA 3 Rotación de factores. Los puntos representan variables .....	58
FIGURA 4 Proyecciones ortogonales de las variables originales $x_1$ y $x_2$ sobre los factores $f_1$ y $f_2$ .....	60
FIGURA 5 Ilustración de la idea principal detrás del análisis cluster representado para dos variables.....	63
FIGURA 6 Diagrama de árbol jerárquico o dendograma.....	67
FIGURA 7 Midiendo la proximidad entre grupos. Método del vecino más cercano usando la distancia Euclidiana .....	68
FIGURA 8 Dos ejemplos de heteroscedasticidad.....	74
FIGURA 9 Función densidad de probabilidad normal.....	84
FIGURA 10 Puntuaciones ( $t$ ) y saturaciones ( $p$ ) son obtenidas proyectando $X$ dentro de los vectores.....	96
FIGURA 11 Aproximaciones lineales locales.....	101
FIGURA 12 Comportamiento lineal con poco ruido, homoscedástico, sin sesgo, de un modelo utilizado para obtener las observaciones estimadas.....	104
FIGURA 13 Validación de modelos PLSR .....	106
FIGURA 14 Error promedio de validación para modelos con distinto número de factores .....	107
FIGURA 15 Esquema de modelo unidimensional de embalse.....	114
FIGURA 16 Orden de numeración de las capas, iniciando desde el fondo del embalse .....	116
FIGURA 17 Capas con las que se representa un embalse .....	118
FIGURA 18 División de la capa $i$ en dos capas y re-numeración de las capas por encima de la capa $i$ .....	123
FIGURA 19 Representación de algunas variables para obtener el número de Richardson ...	125
FIGURA 20 Rangos típicos del Coeficiente de difusión en aguas naturales y sedimentos ....	126
FIGURA 21 Esquema de posibles ubicaciones, a distintos niveles, de un flujo que ingresa a un embalse .....	127
FIGURA 22 Ubicación de un caudal de entrada en la capa $i$ .....	128
FIGURA 23 Patrón de extracción.....	130
FIGURA 24 Definición de las características de la extracción.....	133
FIGURA 25 Definición esquemática de variables para calcular los perfiles de velocidad.....	135
FIGURA 26 Extracción por vertedor.....	138
FIGURA 27 Flujos de radiación solar con la profundidad.....	140
FIGURA 28 Difusión turbulenta.....	147
FIGURA 29 Factores que intervienen en la obtención de la temperatura de una capa .....	147
FIGURA 30 Flujos de energía térmica en una capa $i$ .....	148
FIGURA 31 Algunas de las variables empleadas en las ecuaciones en diferencias finitas ....	148
FIGURA 32 Significado físico de la variable $Z_{med}$ .....	151
FIGURA 33 Ubicación geográfica de la Provincia de Alicante .....	157
FIGURA 34 Ubicación del Sistema de Explotación Marina Baja.....	158
FIGURA 35 Curva calado-volumen del Embalse Amadorio .....	159
FIGURA 36 Cuenca del Río Amadorio .....	161
FIGURA 37 Unidades hidrogeológicas asociadas a la Cuenca del Río Amadorio.....	161
FIGURA 38 Radiación solar global diaria en Villajoyosa .....	165
FIGURA 39 Precipitación diaria en la Estación Villajoyosa .....	165
FIGURA 40 Evapotranspiración diaria en la Estación Villajoyosa.....	166
FIGURA 41 Zonas del dominio Bético .....	167
FIGURA 42 Trabajos de instalación de equipos para la sonda multiparamétrica autoposicionable.....	173
FIGURA 43 Vista de la caseta donde opera la sonda multiparamétrica .....	174

FIGURA 44	Diagramas de caja y bigotes para las variables con los datos iniciales sin transformar para el periodo completo de estudio (31/03/2004 a 19/09/2005) .....	190
FIGURA 45	Histogramas de datos iniciales sin transformar para el periodo completo de estudio .....	192
FIGURA 46	Gráfico de dispersión matricial para seis variables .....	193
FIGURA 47	Gráfico de sedimentación para los autovalores en el periodo de calibración .....	199
FIGURA 48	Diagrama de dispersión de las componentes 3 y 4 en la calibración después de hacer correcciones en los datos .....	201
FIGURA 49	Gráfico de sedimentación para los autovalores en el periodo de validación .....	203
FIGURA 50	Gráfico de pesos de las componentes 1 y 2 en la validación después de hacer correcciones en los datos .....	204
FIGURA 51	Gráficos de caja y bigotes agrupados por periodos de calibración y validación, para temperatura del agua estandarizada, variables sin transformar y estandarizadas .....	235
FIGURA 52	Coefficientes estandarizados del modelo PLSR, 16 variables predictivas .....	268
FIGURA 53	Variación horaria de la radiación solar de onda corta después de difusión, absorción y reflexión en la superficie del agua .....	275
FIGURA 54	Matriz de gráficas para variables del embalse .....	279
FIGURA 55	Gráfico de ajuste para temperatura del agua y día juliano .....	283
FIGURA 56	Gráfico de ajuste para temperatura del agua en función de la temperatura del aire .....	284
FIGURA 57	Perfil de temperaturas simulada y observada (sonda) para el mes de marzo de 2004 .....	290
FIGURA 58	Perfil de temperaturas simulada y observada (sonda) para el mes de abril de 2004 .....	290
FIGURA 59	Perfil de temperaturas simulada y observada (sonda) para el mes de julio de 2004 .....	291
FIGURA 60	Perfil de temperaturas simulada y observada (sonda) para el mes de agosto de 2004 .....	291
FIGURA 61	Perfil de temperaturas simulada y observada (sonda) para el mes de septiembre de 2004 .....	292
FIGURA 62	Perfil de temperaturas simulada y observada (sonda) para el mes de octubre de 2004 .....	292
FIGURA 63	Perfil de temperaturas simulada y observada (sonda) para el mes de noviembre de 2004 .....	293
FIGURA 64	Perfil de temperaturas simulada y observada (sonda) para el mes de diciembre de 2004 .....	293
FIGURA 65	Perfil de temperaturas simulada y observada (sonda) para el mes de enero de 2005 .....	294
FIGURA 66	Perfil de temperaturas simulada y observada (sonda) para el mes de febrero de 2005 .....	294
FIGURA 67	Perfil de temperaturas simulada y observada (sonda) para el mes de marzo de 2005 .....	296
FIGURA 68	Perfil de temperaturas simulada y observada (sonda) para el mes de abril de 2005 .....	296
FIGURA 69	Perfil de temperaturas simulada y observada (sonda) para el mes de mayo de 2005 .....	297
FIGURA 70	Perfil de temperaturas simulada y observada (sonda) para el mes de junio de 2005 .....	297
FIGURA 71	Perfil de temperaturas simulada y observada (sonda) para el mes de julio de 2005 .....	298
FIGURA 72	Perfil de temperaturas simulada y observada (sonda) para el mes de agosto de 2005 .....	298
FIGURA 73	Perfil de temperaturas simulada y observada (sonda) para el mes de septiembre de 2005 .....	299
FIGURA 74	Diagrama de caja y bigotes de oxígeno disuelto para los periodos de calibración y validación .....	305
FIGURA 75	Histograma de humedad relativa (%) para el periodo completo de estudio .....	305
FIGURA 76	Diagrama Q – Q de evapotranspiración para el periodo de estudio completo .....	306
FIGURA 77	Diagrama de dispersión de las componentes 5 y 6 en el periodo de	

calibración mostrando algunos probables datos atípicos .....	308
FIGURA 78 Gráfico de pesos de los componentes 1 y 2 en la validación, datos sin corregir.....	309
FIGURA 79 Diagrama de dispersión de las componentes 19 y 20 en el periodo de validación mostrando algunos probables datos atípicos.....	309
FIGURA 80 Gráfico de sedimentación para el periodo completo de estudio .....	312
FIGURA 81 Diagramas de caja y bigotes para comparación de temperatura del agua estandarizada en distintos conglomerados formados con las variables estandarizadas y sin transformar, para calibración y validación.....	322
FIGURA 82 Diagramas de caja y bigotes para comparación de oxígeno disuelto estandarizado en distintos conglomerados formados con las variables estandarizadas y sin transformar, para calibración y validación.....	322
FIGURA 83 Diagramas de caja y bigotes para comparación de conductividad estandarizada en grupos formados con puntuaciones en componentes principales, calibración y validación .....	323
FIGURA 84 Diagramas de caja y bigotes para comparación de conductividad estandarizada en distintos conglomerados formados con las puntuaciones factoriales de variables predictivas, para calibración y validación .....	324
FIGURA 85 Dendograma del primer conglomerado usando el método del promedio entre grupos para conglomerados formados con las variables estandarizadas y sin transformar, periodo completo de estudio .....	324
FIGURA 86 Dendograma del segundo conglomerado usando el método del promedio entre grupos para conglomerados formados con las variables estandarizadas y sin transformar, periodo completo de estudio .....	325
FIGURA 87 Dendograma del cuarto conglomerado usando el método del promedio entre grupos para conglomerados formados con las variables transformadas, periodo completo de estudio .....	325
FIGURA 88 Dendograma del séptimo conglomerado usando el método del promedio entre grupos para conglomerados formados con las variables transformadas, periodo completo de estudio .....	326
FIGURA 89 Gráfico de observaciones y predicciones para la temperatura del agua, periodo de calibración .....	332
FIGURA 90 Gráfico de observaciones y predicciones para oxígeno disuelto, periodo de validación.....	332
FIGURA 91 Gráfico de observaciones y predicciones para el pH, periodo de validación.....	333
FIGURA 92 Gráfico de observaciones y predicciones para la conductividad, periodo de calibración .....	334
FIGURA 93 Gráfico de la temperatura observada ( $T_a$ ) contra la evapotranspiración de referencia ( $ET_o$ ) para el conglomerado 16 formado con variables estandarizadas .....	335
FIGURA 94 Gráfico de oxígeno disuelto observado ( $O_{dis}$ ) contra la cuarta componente principal para el tercer conglomerado formado con puntuaciones en componentes principales.....	337
FIGURA 95 Gráfico del primer par de variables canónicas usando 17 variables predictivas estandarizadas .....	340
FIGURA 96 Gráfico del primer par de variables canónicas usando 9 variables predictivas estandarizadas .....	342
FIGURA 97 Coeficientes estandarizados del PLSR para la temperatura del agua usando 17 variables predictivas .....	343
FIGURA 98 Gráfico de observaciones y predicciones para la temperatura del agua usando 17 variables predictivas .....	344
FIGURA 99 Coeficientes estandarizados del PLSR para la conductividad usando 17 variables predictivas .....	344
FIGURA 100 Gráfico de observaciones y predicciones para la conductividad del agua usando 17 variables predictivas .....	344
FIGURA 101 Coeficientes estandarizados del PLSR para el oxígeno disuelto usando 16 variables predictivas.....	345
FIGURA 102 Gráfico de observaciones y predicciones para el oxígeno disuelto usando 16 variables predictivas.....	346
FIGURA 103 Coeficientes estandarizados del PLSR para el pH obtenidos con las	

variables recortadas .....	347
FIGURA 104 Gráfico de observaciones y predicciones para el pH usando las variables del recortado .....	348
FIGURA 105 Coeficientes estandarizados más significativos del PLSR para el oxígeno disuelto (modelo reducido) .....	349
FIGURA 106 Gráfico de observaciones y predicciones para la temperatura del agua, modelo reducido en términos lineales.....	349
FIGURA 107 Gráfico de observaciones y predicciones para el oxígeno disuelto, modelo reducido.....	350
FIGURA 108 Coeficientes estandarizados más significativos del PLSR para la conductividad considerando términos no lineales .....	350
FIGURA 109 Gráfico de observaciones y predicciones para la conductividad considerando términos no lineales .....	351
FIGURA 110 Gráfico de observaciones y predicciones para la temperatura al efectuar la regresión sobre el modelo reducido lineal y las observaciones.....	352
FIGURA 111 Gráfico de observaciones y predicciones para el pH al efectuar la regresión sobre el modelo reducido lineal y las observaciones.....	353
FIGURA 112 Gráfico de temperatura del agua observada durante el periodo de validación ..	355
FIGURA 113 Gráfico de temperatura del agua estimada durante el periodo de validación....	356
FIGURA 114 Gráfico de oxígeno disuelto observado durante el periodo de validación.....	356
FIGURA 115 Gráfico de oxígeno disuelto estimado durante el periodo de validación.....	357
FIGURA 116 Gráfico de pH observado durante el periodo de validación .....	358
FIGURA 117 Gráfico de pH estimado durante el periodo de validación.....	359
FIGURA 118 Gráfico de conductividad observada para el periodo de validación.....	359
FIGURA 119 Gráfico de conductividad estimada para el periodo de validación .....	360
FIGURA 120 Gráfico de temperatura del agua estimada con el método mecanicista durante el periodo de validación .....	362
FIGURA 121 Gráfico de temperatura del agua observada durante el periodo de calibración	364
FIGURA 122 Gráfico de temperatura del agua estimada durante el periodo de calibración para el mejor ajuste efectuado usando el método PLSR.....	365
FIGURA 123 Gráfico de temperatura del agua estimada durante el periodo de calibración usando el modelo mecanicista .....	365
FIGURA 124 Gráfico de diferencias entre valores observados de temperatura del agua y valores estimados usando el método PLSR durante el periodo de calibración..	366
FIGURA 125 Gráfico de diferencias entre valores observados de temperatura del agua y valores estimados usando el método mecanicista durante el periodo de calibración .....	367
FIGURA 126 Gráfico de diferencias entre valores observados de temperatura del agua y valores estimados usando el método PLSR durante el periodo de validación..	368
FIGURA 127 Gráfico de diferencias entre valores observados de temperatura del agua y valores estimados usando el modelo mecanicista durante el periodo de validación .....	369
FIGURA 128 Esquema de una red neuronal artificial para estimar las variables de calidad del agua en un embalse.....	383
FIGURA 129 Modelo gráfico para tres variables .....	385

**NOTA:** CUANDO UNA FIGURA SEA DE ELABORACIÓN PROPIA, NO PERTENECIENTE A FUENTE EXTERNA, NO SE INDICARÁ LA FUENTE.



## ÍNDICE DE TABLAS

---

TABLA 1 Breve cronología del desarrollo de aplicaciones de los modelos matemáticos en almacenamientos estratificados.....	33
TABLA 2 Transformación para aproximar los datos a una normal.....	39
TABLA 3 Matriz de confusión con 2 poblaciones.....	72
TABLA 4 Transformaciones para linealizar el modelo.....	83
TABLA 5 Resumen de las características del Embalse Amadorio.....	163
TABLA 6 Población de los municipios que forman el Consorcio de Abastecimiento de Aguas y Saneamiento “Marina Baja”.....	168
TABLA 7 Demanda consuntiva en el ámbito del Plan Hidrológico del Júcar.....	169
TABLA 8 Algunos límites de variables de calidad del grupo A2.....	170
TABLA 9 Disponibilidad de información en la sonda.....	179
TABLA 10 Paquetes de análisis estadístico para propósitos en general.....	181
TABLA 11 Observaciones consideradas para los procesos de calibración y validación.....	183
TABLA 12 Variables con las que se inicia el análisis.....	184
TABLA 13 Estadística descriptiva de los datos iniciales.....	188
TABLA 14 Prueba de normalidad de Kolmogorov-Smirnov para las variables sin transformar.....	194
TABLA 15 Resumen del análisis de componentes principales para el periodo de calibración.....	199
TABLA 16 Resumen del análisis de componentes principales para el periodo de validación.....	202
TABLA 17 Variables (independientes) que se usaron para obtener las puntuaciones de las observaciones en las componentes.....	206
TABLA 18 Medida de adecuación muestral de Kaiser-Meyer-Olkin (KMO) y Prueba de esfericidad de Bartlett para el periodo de estudio completo, los datos sin contener anómalos evidentes y sin transformar.....	208
TABLA 19 Extracción de factores por el Método de componentes principales en el periodo completo de estudio, variables sin anómalos y sin transformar.....	209
TABLA 20 Matriz de componentes de los 5 factores extraídos por el Método de componentes principales, periodo de estudio completo, datos sin anómalos evidentes y sin transformar.....	210
TABLA 21 Matriz de componentes de los 5 factores extraídos por el Método de componentes principales, periodo de estudio completo, variables sin transformar y Rotación Varimax.....	211
TABLA 22 Comunalidades de las variables al extraerse los factores por el Método de máxima verosimilitud para el periodo completo de estudio, variables sin transformar.....	212
TABLA 23 Varianza total explicada por cada factor para el periodo completo de estudio, sin datos anómalos, variables sin transformar y Método de extracción de máxima verosimilitud.....	213
TABLA 24 Varianza total explicada por cada uno de los factores al ser extraídos con el Método de máxima verosimilitud en cinco iteraciones, para el periodo completo de estudio y las variables sin transformar.....	214
TABLA 25 Matriz factorial de los 5 factores extraídos por el Método de máxima verosimilitud con cinco iteraciones efectuadas, periodo de estudio completo, datos sin anómalos y sin transformar.....	215
TABLA 26 Matriz de factores rotados de los 5 factores extraídos por el Método de máxima verosimilitud para cinco iteraciones, periodo de estudio completo, variables sin transformar y Rotación Varimax.....	216
TABLA 27 Estadísticos descriptivos de los 5 factores extraídos en el periodo completo de estudio, variables sin datos anómalos y sin transformar.....	219
TABLA 28 Pruebas de normalidad de Kolmogorov-Smirnov para los cinco factores obtenidos en el periodo completo de estudio, información sin datos anómalos y variables sin transformar.....	219
TABLA 29 Extracción de factores por el Método de componentes principales en el periodo completo de estudio, variables sin anómalos y transformadas.....	220
TABLA 30 Matriz de componentes de los 5 factores extraídos por el Método de	

	componentes principales, periodo de estudio completo, datos sin anómalos evidentes y transformados .....	221
TABLA 31	Matriz de componentes de los 5 factores extraídos por el Método de componentes principales, periodo de estudio completo, variables transformadas y Rotación Varimax .....	222
TABLA 32	Matriz de componentes de 4 factores extraídos por el Método de componentes principales, periodo de estudio completo, variables transformadas y Rotación Varimax.....	223
TABLA 33	Comunalidades de las variables al extraerse los factores por el Método de máxima verosimilitud, para el periodo completo de estudio, variables sin transformar .....	224
TABLA 34	Varianza total explicada por cada factor para el periodo completo de estudio, sin datos anómalos, variables sin transformar y Método de extracción de máxima verosimilitud .....	225
TABLA 35	Matriz factorial de los 5 factores extraídos por Máxima verosimilitud con cinco iteraciones, periodo de estudio completo, datos sin anómalos y transformados.....	226
TABLA 36	Matriz de factores rotados de los 5 factores extraídos por Máxima verosimilitud para cinco iteraciones, periodo de estudio completo, variables transformadas y Rotación Varimax .....	226
TABLA 37	Matriz de factores rotados de los 5 factores extraídos por el Método de componentes principales, periodo de calibración, variables transformadas y Rotación Varimax .....	228
TABLA 38	Matriz de factores rotados de 5 factores extraídos por el Método de componentes principales, periodo de validación, variables transformadas y Rotación Varimax .....	229
TABLA 39	Estadísticos descriptivos de los 5 factores extraídos en el periodo completo de estudio, variables sin datos anómalos y transformadas .....	230
TABLA 40	Pruebas de normalidad de Kolmogorov-Smirnov para los cinco factores obtenidos en el periodo completo de estudio, información sin datos anómalos y variables transformadas .....	230
TABLA 41	Criterio de selección del número de conglomerados para el periodo completo de datos .....	232
TABLA 42	Comparación del número de casos para 14 y 15 conglomerados en el periodo completo de estudio .....	233
TABLA 43	Número de conglomerados y distribución de casos, periodo de calibración, variables sin transformar .....	234
TABLA 44	Número de conglomerados y distribución de casos, centros los obtenidos para el periodo de calibración, observaciones del periodo de validación, variables sin transformar .....	235
TABLA 45	Número de conglomerados y distribución de casos, periodo de calibración, variables transformadas y sin estandarizar.....	236
TABLA 46	Número de conglomerados y distribución de casos, centros los obtenidos para calibración, observaciones del periodo de validación, variables transformadas y sin estandarizar .....	237
TABLA 47	Número de conglomerados y distribución de casos, periodo de calibración, puntuaciones en componentes principales de variables sin transformar y estandarizadas .....	238
TABLA 48	Número de conglomerados y distribución de casos, periodo de calibración, puntuaciones en componentes principales de variables sin transformar y estandarizadas .....	239
TABLA 49	Número de conglomerados y distribución de casos, periodo de calibración, puntuaciones factoriales de variables sin transformar y estandarizadas.....	240
TABLA 50	Número de conglomerados y distribución de casos, periodo de validación, puntuaciones factoriales de variables sin transformar y estandarizadas.....	240
TABLA 51	Grupos y su probabilidad previa de ser clasificados correctamente por mero azar, periodo de estudio completo, variables sin transformar y no estandarizadas .....	242
TABLA 52	Resultados de la clasificación (Matriz de confusión), periodo de estudio completo, variables sin transformar y no estandarizadas .....	243

TABLA 53 Grupos y su probabilidad previa de ser clasificados correctamente por mero azar, periodo de estudio completo, variables sin transformar y estandarizadas con los parámetros del periodo de calibración.....	244
TABLA 54 Resultados de la clasificación (Matriz de confusión), periodo de estudio completo, variables sin transformar y estandarizadas con los parámetros del periodo de calibración .....	245
TABLA 55 Grupos y su probabilidad previa de ser clasificados correctamente por mero azar, periodo de estudio completo, variables sin transformar y estandarizadas por separado en los periodos de calibración y validación.....	246
TABLA 56 Resultados de la clasificación (Matriz de confusión), periodo de estudio completo, variables sin transformar y estandarizadas por separado para los periodos de calibración y validación.....	247
TABLA 57 Grupos y su probabilidad previa de ser clasificados correctamente por mero azar, periodo de estudio completo, variables transformadas.....	248
TABLA 58 Resultados de la clasificación (Matriz de confusión), periodo de estudio completo, variables transformadas .....	248
TABLA 59 Grupos y su probabilidad previa de ser clasificados correctamente por mero azar, periodo de estudio completo, puntuaciones en componentes principales (con estandarización) .....	249
TABLA 60 Resultados de la clasificación (Matriz de confusión), periodo de estudio completo, puntuaciones en componentes principales (con estandarización).....	250
TABLA 61 Grupos y su probabilidad previa de ser clasificados correctamente por mero azar, periodo de estudio completo, puntuaciones factoriales (tres factores).....	251
TABLA 62 Resultados de la clasificación (Matriz de confusión), periodo de estudio completo, puntuaciones factoriales (tres factores).....	251
TABLA 63 Resultados del ajuste inicial efectuado para los periodos de calibración y validación de las variables de calidad del agua .....	252
TABLA 64 Resultados de la regresión múltiple efectuada para 15 grupos seleccionados (de 19) que poseen registros en los periodos de calibración y validación.....	255
TABLA 65 Resultados de la regresión múltiple efectuada para 12 grupos seleccionados (de 15) que poseen registros en los periodos de calibración y validación.....	256
TABLA 66 Resultados de la regresión múltiple efectuada para los periodos de calibración y validación usando puntuaciones en componentes principales .....	257
TABLA 67 Resultados de la regresión múltiple efectuada para los periodos de calibración y validación usando puntuaciones factoriales (considerando tres factores).....	257
TABLA 68 Resultados del CCA aplicado para el periodo de validación usando 17 variables predictivas expresadas en su escala original.....	259
TABLA 69 Resultados del CCA aplicado para el periodo de validación usando 11 variables predictivas expresadas en su escala original.....	259
TABLA 70 Resultados del CCA aplicado para el periodo de validación usando 17 variables predictivas estandarizadas.....	260
TABLA 71 Resultados del CCA aplicado para el periodo de validación usando 17 variables predictivas, estandarizadas con los parámetros del periodo de calibración.....	260
TABLA 72 Resultados del CCA aplicado para el periodo de validación usando 16 variables predictivas, estandarizadas con los parámetros del periodo de calibración.....	261
TABLA 73 Resultados del CCA aplicado para el periodo de validación usando 9 variables predictivas, estandarizadas con los parámetros del periodo de calibración.....	261
TABLA 74 Resultados del PLSR aplicado a los periodos de calibración y validación, algoritmo PLS1 .....	264
TABLA 75 Resultados del PLSR aplicado al periodo de validación, algoritmo PLS1, 16 variables predictivas .....	266
TABLA 76 Resultados del PLSR aplicado al periodo de validación, algoritmo PLS1 y recortado de los datos, 16 variables predictivas .....	267
TABLA 77 Resultados del PLSR aplicado al periodo de validación, algoritmo PLS1, modelo reducido en términos lineales.....	268
TABLA 78 Resultados del PLSR aplicado al periodo de validación, algoritmo PLS1, usando la matriz extendida de entradas .....	269
TABLA 79 Resultados del PLSR aplicado a los periodos de calibración y validación, modelación no lineal, usando los resultados del modelo reducido en términos	

lineales.....	270
TABLA 80 Correlaciones para variables del embalse.....	280
TABLA 81 Análisis de varianza con todas las variables .....	281
TABLA 82 Análisis de varianza con sólo cinco variables .....	282
TABLA 83 Valores iniciales para la calibración.....	288
TABLA 84 Rangos de variación típicos de algunas constantes y parámetros .....	288
TABLA 85 Valores obtenidos en la calibración .....	289
TABLA 86 Porcentaje de varianza explicada por las primeras componentes principales para el periodo de calibración, variables estandarizadas .....	306
TABLA 87 Tabla de pesos de los primeros siete componentes en el periodo de calibración .....	307
TABLA 88 Porcentaje de varianza explicada por las primeras componentes principales para el periodo de validación, variables estandarizadas .....	308
TABLA 89 Parte de la matriz de correlaciones, periodo completo de estudio, variables sin transformar .....	311
TABLA 90 Varianza total explicada por los factores incluidos en el modelo, periodo completo de estudio .....	313
TABLA 91 Comunalidades de las variables para el periodo completo de estudio .....	313
TABLA 92 Matriz de componentes de los 5 factores extraídos por Máxima verosimilitud, periodo completo de estudio, variables sin transformar y Rotación Varimax .....	314
TABLA 93 Varianza total explicada por los factores incluidos en el modelo, periodo de calibración .....	315
TABLA 94 Matriz de componentes rotados para cinco factores, periodo de calibración, variables sin transformar .....	316
TABLA 95 Varianza total explicada por los factores incluidos en el modelo, periodo de validación.....	316
TABLA 96 Matriz de componentes rotados considerando 5 factores, periodo de validación, variables sin transformar .....	317
TABLA 97 Varianza total explicada considerando cinco factores, periodo completo de estudio, variables transformadas .....	319
TABLA 98 Formación de las componentes por el Método de componentes principales, periodo de estudio completo, variables sin transformar.....	319
TABLA 99 Formación de las componentes por el Método de componentes principales, periodo de estudio completo, datos transformados .....	320
TABLA 100 Resultados de la clasificación, periodo completo de estudio, variables sin transformar y no estandarizadas.....	327
TABLA 101 Resultados de la clasificación, periodo completo de estudio, variables sin transformar y estandarizadas con los parámetros del periodo de calibración ....	327
TABLA 102 Resultados de la clasificación, periodo completo de estudio, variables sin transformar y los periodos de calibración y validación estandarizados por separado y luego reunidos para efectuar el análisis.....	328
TABLA 103 Resultados de la clasificación, periodo completo de estudio, variables transformadas .....	329
TABLA 104 Resultados de la clasificación, periodo completo de estudio, grupos formados con las puntuaciones en componentes principales.....	330
TABLA 105 Resultados de la clasificación, periodo completo de estudio, grupos formados con las puntuaciones factoriales .....	330
TABLA 106 Análisis de correlación canónica con 17 variables predictivas estandarizadas ...	339
TABLA 107 Análisis de correlación canónica con 16 variables predictivas estandarizadas ...	340
TABLA 108 Coeficientes para las variables canónicas de la primera serie después de seleccionar sólo 9 variables .....	341
TABLA 109 Análisis de correlación canónica con 9 variables predictivas estandarizadas .....	341
TABLA 110 Coeficientes para las variables sin estandarizar en la expresión de temperatura del agua con 17 variables predictivas .....	342
TABLA 111 Coeficientes para las variables estandarizadas en la expresión de oxígeno disuelto con 16 variables predictivas.....	345
TABLA 112 Coeficientes para las variables estandarizadas en la expresión del pH usando el recortado.....	347
TABLA 113 Coeficientes para las variables sin estandarizar en la expresión del oxígeno disuelto con 4 variables predictivas.....	348
TABLA 114 Coeficientes estandarizados en el PLSR para determinar conductividad	

usando términos no lineales relevantes .....	350
TABLA 115 Resumen del modelo para estimar la temperatura del agua usando como entrada las estimaciones del modelo reducido lineal.....	351
TABLA 116 Resumen del modelo para estimar el pH usando como entrada las estimaciones del modelo reducido lineal .....	352
TABLA 117 Resumen de resultados de los mejores ajustes obtenidos .....	354
TABLA 118 Resumen de resultados del modelo mecanicista aplicado a temperatura del agua en el embalse .....	361
TABLA 119 Evaluación de los mejores ajustes obtenidos con PLSR para las variables Ta y Odis .....	377

**NOTA:** CUANDO UNA TABLA SEA DE ELABORACIÓN PROPIA, NO PERTENECIENTE A FUENTE EXTERNA, NO SE INDICARÁ LA FUENTE.



## ÍNDICE DE ANEXOS DIGITALES (CD)

---

ANEXO 1. ESTRUCTURA INICIAL DE LOS DATOS DEL MODELO .....	2
ANEXO 2. ESTADÍSTICA DESCRIPTIVA DE PERIODOS DE CALIBRACIÓN Y VALIDACIÓN .....	6
ANEXO 3. DIAGRAMAS DE CAJA Y BIGOTES AGRUPADOS EN PERIODOS DE CALIBRACIÓN Y VALIDACIÓN PARA CADA UNA DE LAS VARIABLES .....	9
ANEXO 4. HISTOGRAMAS DE LOS DATOS INICIALES EN PERIODOS DE CALIBRACIÓN Y VALIDACIÓN POR CADA VARIABLE .....	12
ANEXO 5. DIAGRAMAS Q-Q DE DATOS INICIALES PARA EL PERIODO COMPLETO DE ESTUDIO .....	17
ANEXO 6. GRÁFICOS DE DISPERSIÓN MATRICIAL PARA LOS DATOS METEOROLÓGICOS, HIDROLÓGICOS Y DE CALIDAD DEL AGUA EN EL PERIODO COMPLETO DE ESTUDIO .....	22
ANEXO 7. PCA DE LOS DATOS METEOROLÓGICOS, HIDROLÓGICOS Y DE CALIDAD DEL AGUA EN EL PERIODO DE CALIBRACIÓN, DATOS ORIGINALES .....	25
ANEXO 8. PCA DE LOS DATOS METEOROLÓGICOS, HIDROLÓGICOS Y DE CALIDAD DEL AGUA EN EL PERIODO DE CALIBRACIÓN, CORREGIDOS (SIN DATOS ANÓMALOS) .....	36
ANEXO 9. PCA DE LOS DATOS METEOROLÓGICOS, HIDROLÓGICOS Y DE CALIDAD DEL AGUA EN EL PERIODO DE VALIDACIÓN, DATOS ORIGINALES .....	48
ANEXO 10. PCA DE LOS DATOS METEOROLÓGICOS, HIDROLÓGICOS Y DE CALIDAD DEL AGUA EN EL PERIODO DE VALIDACIÓN, CORREGIDOS (SIN DATOS ANÓMALOS) .....	59
ANEXO 11. PUNTUACIONES DE LOS COMPONENTES EN LOS PERIODOS DE CALIBRACIÓN Y VALIDACIÓN (SIN DATOS ANÓMALOS) .....	71
ANEXO 12. ANÁLISIS FACTORIAL PARA EL PERIODO COMPLETO DE ESTUDIO, SIN DATOS ANÓMALOS Y LAS VARIABLES SIN TRANSFORMAR .....	79
ANEXO 13. ANÁLISIS FACTORIAL DEL PERIODO DE CALIBRACIÓN, SIN DATOS ANÓMALOS Y VARIABLES SIN TRANSFORMAR .....	93
ANEXO 14. ANÁLISIS FACTORIAL DEL PERIODO DE VALIDACIÓN, SIN DATOS ANÓMALOS Y VARIABLES SIN TRANSFORMAR .....	99
ANEXO 15. ANÁLISIS FACTORIAL EN EL PERIODO COMPLETO DE ESTUDIO, SIN DATOS ANÓMALOS Y LAS VARIABLES TRANSFORMADAS .....	106
ANEXO 16. ANÁLISIS FACTORIAL DEL PERIODO DE CALIBRACIÓN, SIN DATOS ANÓMALOS Y VARIABLES TRANSFORMADAS .....	119
ANEXO 17. ANÁLISIS FACTORIAL DEL PERIODO DE VALIDACIÓN, SIN DATOS ANÓMALOS Y VARIABLES TRANSFORMADAS .....	125
ANEXO 18. ANÁLISIS CLUSTER DEL PERIODO COMPLETO DE ESTUDIO, SIN DATOS ANÓMALOS Y VARIABLES SIN TRANSFORMAR (15 CONGLOMERADOS)..	131
ANEXO 19. CENTROS DE LOS CONGLOMERADOS, CALIBRACIÓN, VARIABLES SIN TRANSFORMAR (19 CONGLOMERADOS) .....	135
ANEXO 20. ANÁLISIS CLUSTER, PERIODO VALIDACIÓN, VARIABLES SIN TRANSFORMAR (19 GRUPOS), CENTROS PROCEDENTES DE CALIBRACIÓN .....	137
ANEXO 21. COMPARACIÓN DE CONGLOMERADOS EN LOS PERIODOS DE CALIBRACIÓN Y VALIDACIÓN, VARIABLES SIN TRANSFORMAR Y ESTANDARIZADAS (19 GRUPOS), GRÁFICOS DE CAJA Y BIGOTES DE VARIABLES RESPUESTA .....	140
ANEXO 22. COMPARACIÓN DE CONGLOMERADOS EN PERIODOS DE CALIBRACIÓN Y VALIDACIÓN, VARIABLES TRANSFORMADAS Y SIN ESTANDARIZAR (15 GRUPOS), GRÁFICOS DE CAJA Y BIGOTES DE VARIABLES RESPUESTA .....	145
ANEXO 23. COMPARACIÓN DE CONGLOMERADOS EN PERIODOS DE CALIBRACIÓN Y VALIDACIÓN, USANDO PARA AGRUPAR PUNTUACIONES EN COMPONENTES PRINCIPALES DE LAS VARIABLES ESTANDARIZADAS (18 GRUPOS), VARIABLES RESPUESTA ESTANDARIZADAS, GRÁFICOS DE CAJA Y BIGOTES DE VARIABLES RESPUESTA .....	150
ANEXO 24. COMPARACIÓN DE CONGLOMERADOS EN PERIODOS DE CALIBRA-	

	CIÓN Y VALIDACIÓN, USANDO PARA AGRUPAR PUNTUACIONES FACTORIALES DE VARIABLES PREDICTIVAS SIN TRANSFORMAR Y ESTANDARIZADAS (14 GRUPOS), GRÁFICOS DE CAJA Y BIGOTES DE VARIABLES RESPUESTA ESTANDARIZADAS .....	155
ANEXO 25.	ANÁLISIS CLUSTER PARA LAS VARIABLES ESTANDARIZADAS Y SIN TRANSFORMAR .....	160
ANEXO 26.	ANÁLISIS CLUSTER PARA LAS VARIABLES TRANSFORMADAS .....	168
ANEXO 27.	ANÁLISIS DISCRIMINANTE PARA LAS VARIABLES SIN TRANSFORMAR, NO ESTANDARIZADAS (19 GRUPOS), PERIODO COMPLETO DE ESTUDIO .....	175
ANEXO 28.	ANÁLISIS DISCRIMINANTE PARA LAS VARIABLES SIN TRANSFORMAR, SIENDO ESTANDARIZADAS (19 GRUPOS), PERIODO COMPLETO DE ESTUDIO .....	183
ANEXO 29.	ANÁLISIS DISCRIMINANTE DE VARIABLES TRANSFORMADAS (15 GRUPOS), PERIODO COMPLETO DE ESTUDIO .....	198
ANEXO 30.	ANÁLISIS DISCRIMINANTE DE PUNTUACIONES EN COMPONENTES PRINCIPALES (18 GRUPOS), PERIODO COMPLETO DE ESTUDIO .....	206
ANEXO 31.	ANÁLISIS DISCRIMINANTE DE PUNTUACIONES FACTORIALES (3 FACTORES Y 14 GRUPOS), PERIODO COMPLETO DE ESTUDIO .....	214
ANEXO 32.	ANÁLISIS DE CORRELACIÓN CANÓNICA, CON 17 VARIABLES PREDICTIVAS EN SU ESCALA ORIGINAL .....	220
ANEXO 33.	ANÁLISIS DE CORRELACIÓN CANÓNICA, CON 11 VARIABLES PREDICTIVAS EN SU ESCALA ORIGINAL .....	223
ANEXO 34.	ANÁLISIS DE CORRELACIÓN CANÓNICA, CON 17 VARIABLES PREDICTIVAS ESTANDARIZADAS .....	226
ANEXO 35.	ANÁLISIS DE CORRELACIÓN CANÓNICA, CON 16 VARIABLES PREDICTIVAS ESTANDARIZADAS .....	229
ANEXO 36.	ANÁLISIS DE CORRELACIÓN CANÓNICA, CON 9 VARIABLES PREDICTIVAS ESTANDARIZADAS .....	232
ANEXO 37.	PLSR DESARROLLADO DENTRO DEL PERIODO DE CALIBRACIÓN (17 VARIABLES PREDICTIVAS) .....	235
ANEXO 38.	PLSR EN PERIODO DE CALIBRACIÓN – MODELO REDUCIDO EN TÉRMINOS LINEALES .....	248