

Problemática abordada

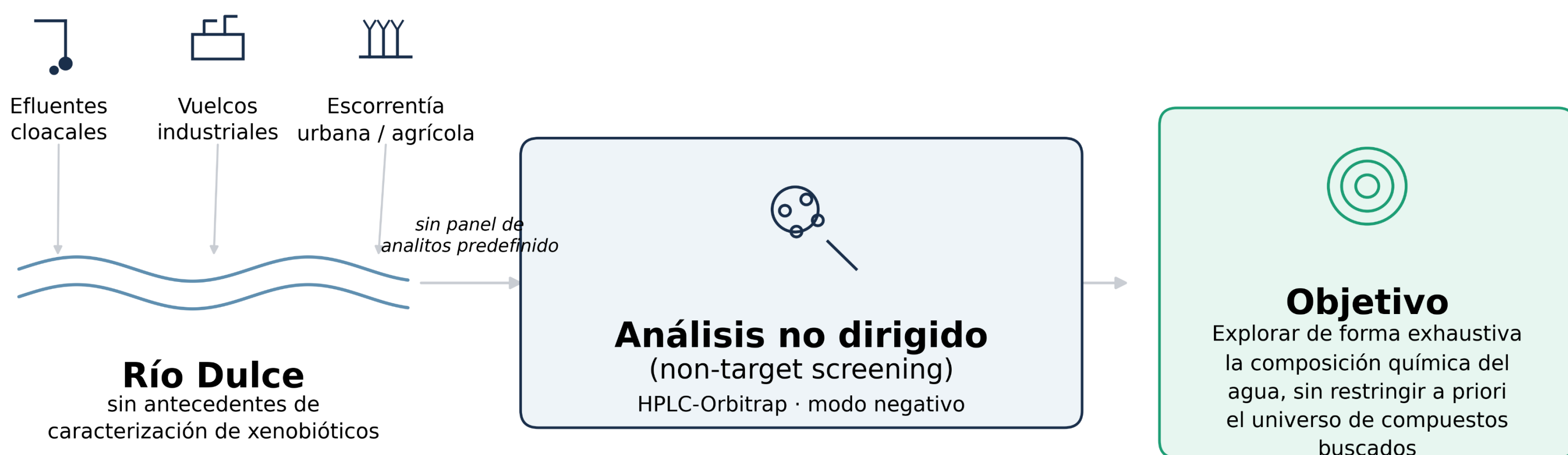


Tabla 1. Distribución de niveles de confianza de Schymanski sobre el total de 556 features prefiltrados ($\Delta\text{Mass} \pm 3$ ppm, $\text{PR} \geq 5$).

Nivel Schymanski	Definición operativa	N° de features	% del total (556)
Nivel 1	Estándar auténtico co-analizado	0	0 %
Nivel 2a	Nombre candidato + MS2 propio	86	15 %
Nivel 2b	Nombre candidato + base de datos, sin MS2	64	12 %
Nivel 3	Candidato tentativo ("similar a")	6	1 %
Nivel 4	Fórmula molecular confirmada, sin estructura	400	72 %
Nivel 5	Señal sin nombre ni fórmula asignable	0	0 %

Metodologías aplicadas

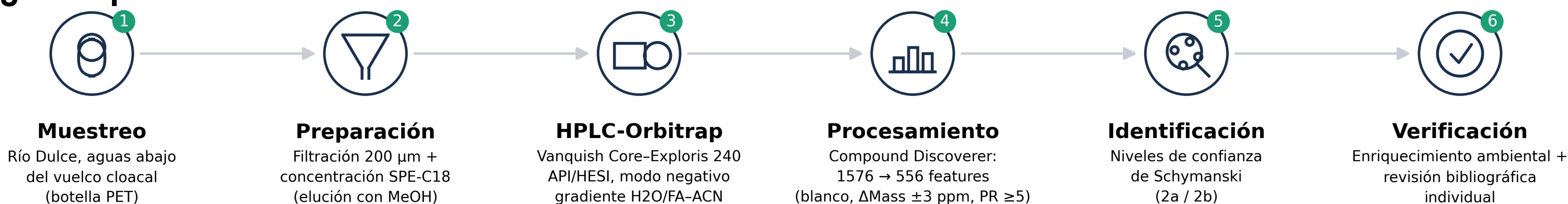
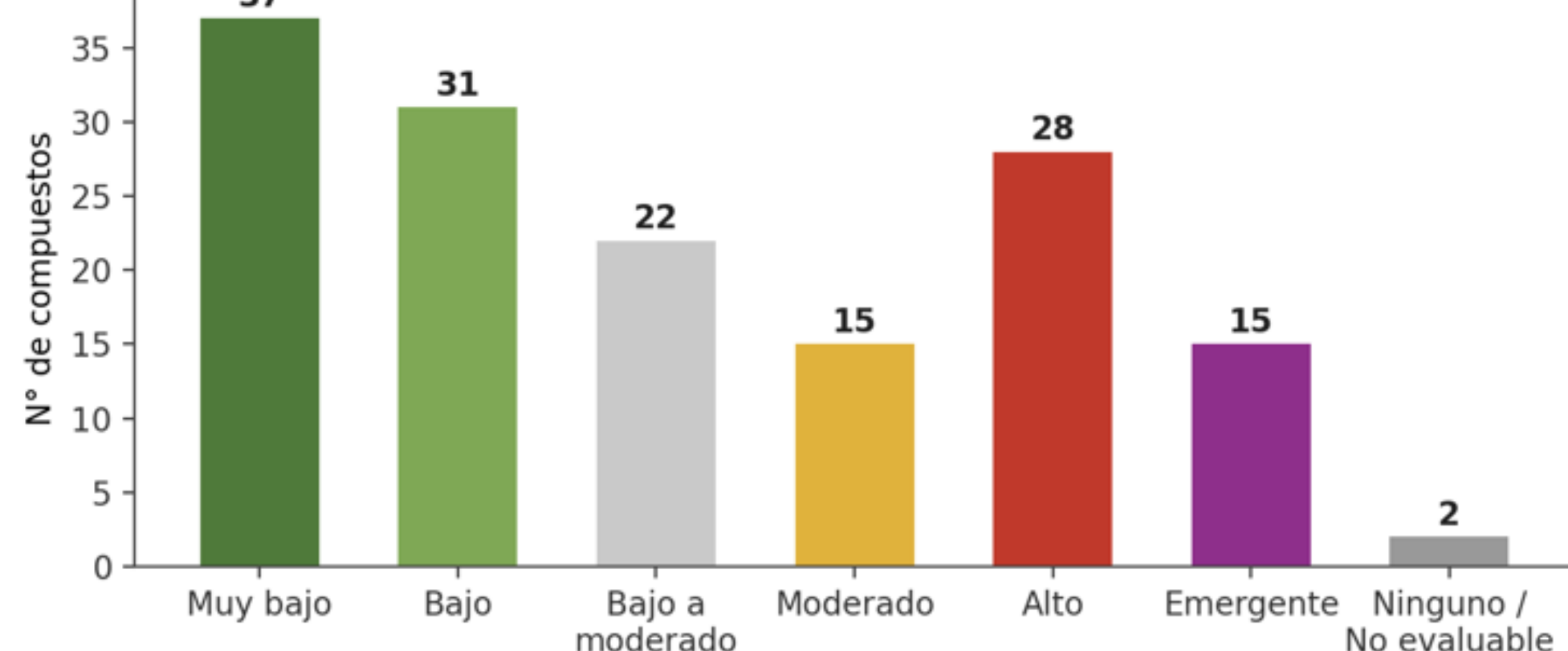


Tabla 2. Indicadores evaluados en compuestos de nivel 2.

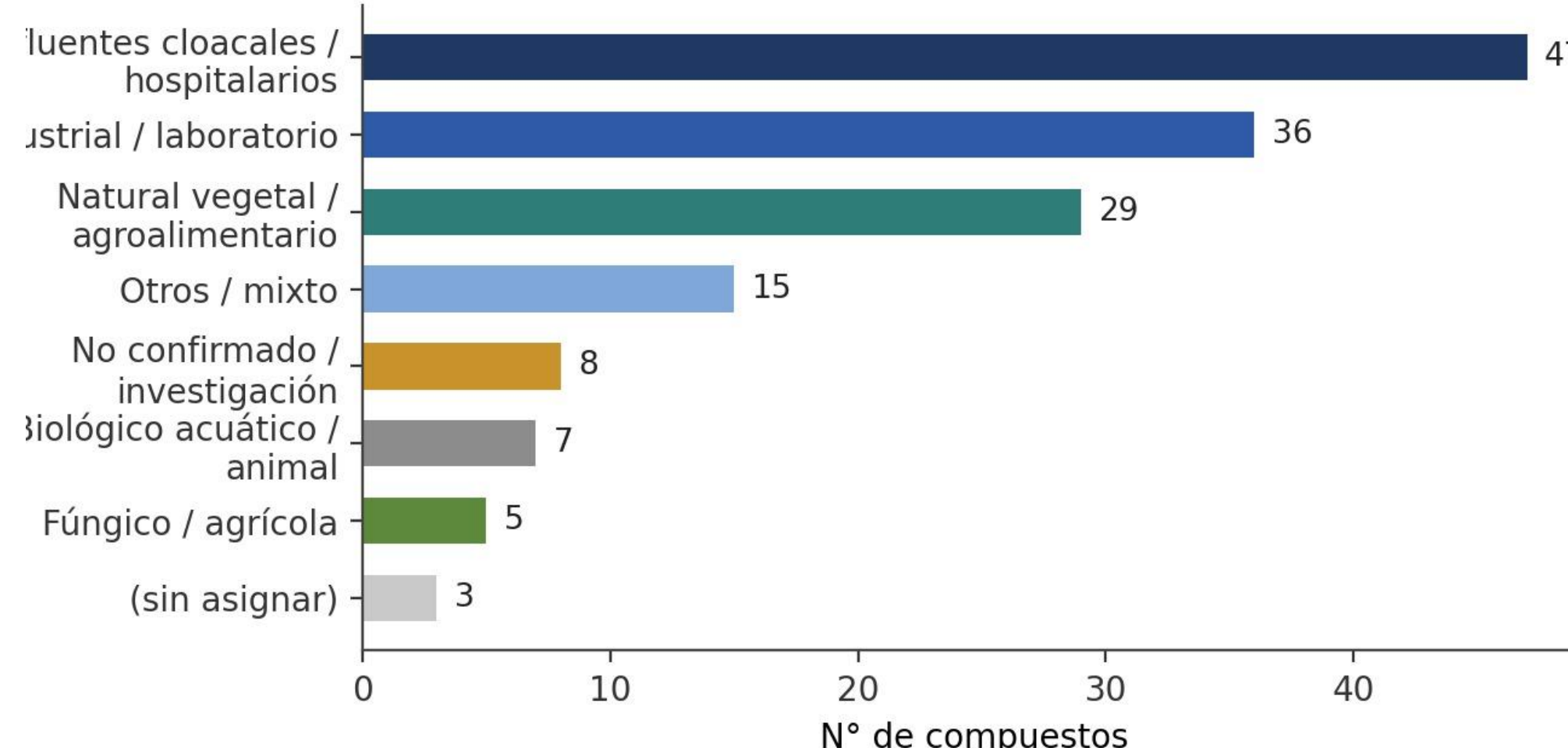
Indicador	Valor
Compuestos candidatos evaluados (nivel 2a/2b)	150
Nombres de compuesto únicos	134 (13 grupos de duplicados/isómeros, 32 filas)
Nivel de confianza 2a	86 (57 %)
Nivel de confianza 2b	64 (43 %)
Compuestos de preocupación ambiental alta	28 (19 %)
Contaminantes emergentes	15 (10 %)
Compuestos con presencia "muy probable" en agua del río	67 (45 %)

Resultados

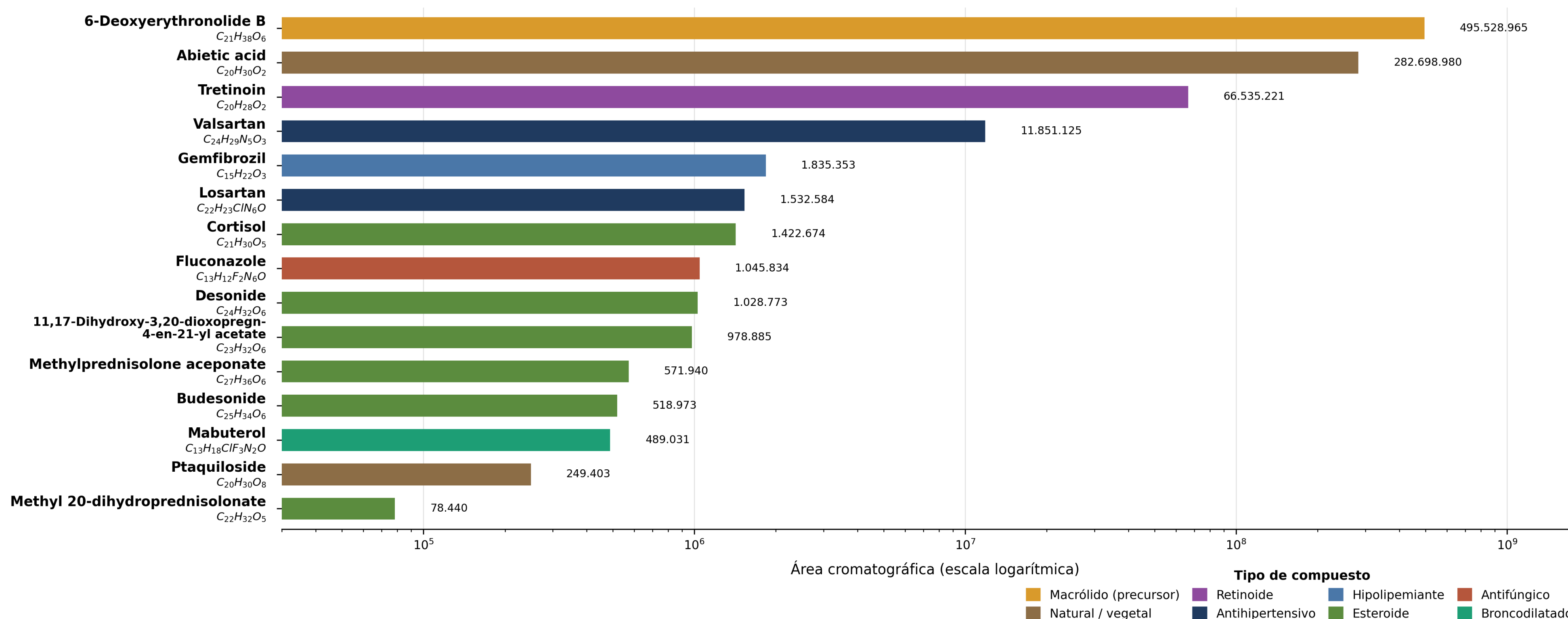
Nivel de preocupación ambiental (n=150)



Origen probable agrupado (n=150)



Compuestos prioritarios para seguimiento ambiental



Conclusiones

Perfil dominado por fármacos humanos activos, de origen mayoritariamente cloacal/hospitalario e industrial, consistente con aporte de efluentes cloacales y escorrentía urbana.