

L'ús de la intel·ligència artificial aplicada a la gestió de l'aigua potable

Hèctor Monclús (hector.monclus@udg.edu)



Càtedra **ATL**
de l'**aigua potable**

Universitat
de Girona

ATL
Càtedra d'Abastament
d'Aigua Ter-Llobregat

Generalitat
de Catalunya

- **Què és el LEQUIA i que fem?**
- **Antecedents (introducció)**
- **Casos d'estudi sobre l'ús de la IA en la gestió de l'aigua potable**

- **Què és el LEQUIA i que fem?**
- Antecedents (introducció)
- Casos d'estudi sobre l'ús de la IA en la gestió de l'aigua potable

- Som un grup de recerca de la Universitat de Girona (GRCT0044) fundat al 1992, centrat en les solucions Ambientals eco-innovadores. Estem adscrits a l'Institut de Medi Ambient de la UdG.
- Som un grup de recerca consolidat per la Generalitat de Catalunya (2021-SGR-1352)
- Som un grup TECNIO, on treballem amb experts del sector per fer recerca aplicada i transferència tecnològica



Línies de recerca

- Processos innovadors de potabilització i de tractament d'aigües
- Tractament de gasos i de bioconversió del diòxid de carboni
- Digitalització i aplicació de la intel·ligència artificial al cicle de l'aigua



- **8 professors permanents:** 5 catedràtics d'universitat, 2 titulars d'universitat i 1 professor agregat “Serra Húnter” (ICREA Acadèmia)
- **10 investigadors seniors/post-doctorals:** 2 Ramón y Cajal, 2 Juan de la Cierva Incorporación, 5 contractats per projecte.
- **15 estudiants de doctorat** (5 doctorats industrials)
- **1 promotora**
- **1 tècnica de laboratori**
- **3 tècnics de suport a la recerca**
- **Becaris d'estudis de grau/màster**

RECERCA

- Projectes europeus **(5)**: H2020/Horizon col·laboratiu-recerca: 2; Marie Skłodowska Curie: 2; H2020 Erasmus+ (líders)
- Projectes de R+D+I – Retos/Generación del conocimiento - AEI **(3)**
- Projectes de R+D+I – Transición Ecológica y Digital – AEI **(2)**
- Xarxes de R+D+I – AEI **(2)**

TRANSFERÈNCIA

- Projectes de doctorat industrial **(4)**
- Projectes “Llabor” – AGAUR **(1)**
- Projectes “Prueba de Concepto” – AEI **(1)**
- Projectes “Líneas estratégicas” – AEI **(1)**
- Projectes “Colaboración Público-Privada” – AEI **(1)**
- Projectes “Nuclis R+D” – ACCIÓ **(1)**
- Xarxes de R+D+I – AGAUR **(2)**

- Què és el LEQUIA i que fem?
- **Antecedents (introducció)**
- Casos d'estudi sobre l'ús de la IA en la gestió de l'aigua potable

DrinkIA – Digital Twin[®] és el primer sistema de **suport a la presa de decisions** que integra diferents fonts de coneixement (expert, dades, experimentals,...) per a la gestió de l'aigua potable



DrinkIA – Digital Twin[®] proporciona el marc per **sistematitzar** i **estandarditzar** les decisions estratègiques i de gestió.

- Integra **models matemàtics** i d'**IA** amb **coneixements experts** per oferir respostes a problemàtiques recurrents de manera estructurada, per proporcionar a l'usuari una millor comprensió del problema i augmentar la seva capacitat de decisió.
- Fa front a la complexa presa de decisions del subministrament d'aigua, augmentant la **resiliència** d'aquestes instal·lacions davant els canvis en la qualitat de l'aigua de la font en el context del **canvi global**.

Què és la intel·ligència artificial?



- La intel·ligència artificial (IA) és una branca de la informàtica que busca crear sistemes capaços de realitzar tasques que, normalment, requereixen **intel·ligència humana**. Aquestes tasques poden incloure la **resolució de problemes**, el reconeixement de patrons, la **presa de decisions**, l'aprenentatge de noves habilitats i la comprensió del llenguatge natural.

Aprenentatge
automàtic

Processament
llenguatge
natural

Visió per
computador

- La intel·ligència artificial (IA) aplicada al cicle urbà de l'aigua consisteix en l'ús d'**algoritmes** i tecnologies **d'aprenentatge automàtic** per **optimitzar i gestionar** de manera **intel·ligent** totes les etapes del procés de l'aigua

Captació

Tractament

Distribució

Aigües
residuals

Reutilització

- Amb IA, el cicle urbà de l'aigua pot ser més **eficient, sostenible i resilient** davant de reptes com el **canvi climàtic** i el creixement de la població. Alguns dels principals àmbits d'aplicació són:

Predicció i
planificació de
la demanda

Detecció de
fuites i pèrdues
d'aigua

Optimització
del tractament

Gestió de les
aigües residuals

Reutilització i
gestió

Sistemes d'ajuda a la decisió (SAD)

Environmental Decision Support Systems (EDSS)

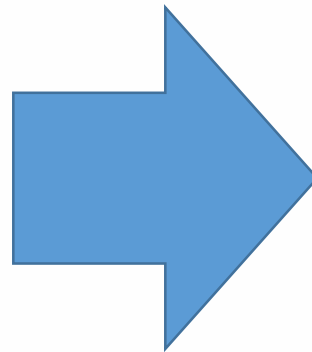
Son eines que milloren la presa de decisions, millorant la robustesa i reduint la incertesa del procés, així com reduint el temps en la presa de decisions.



Gran volum de dades numèriques

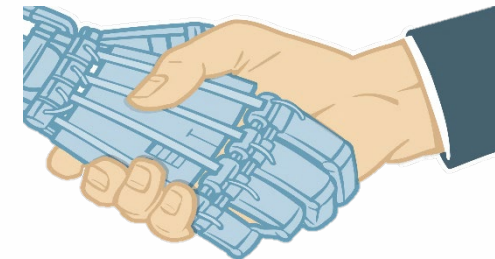


Coneixement expert i qualitatiu



Elements de
control

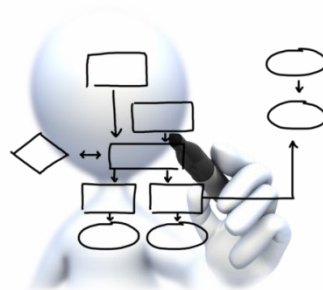
Intel·ligència
artificial



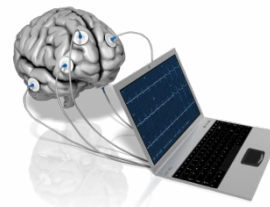
Ajuda en la gestió d'un procés



+



+



+



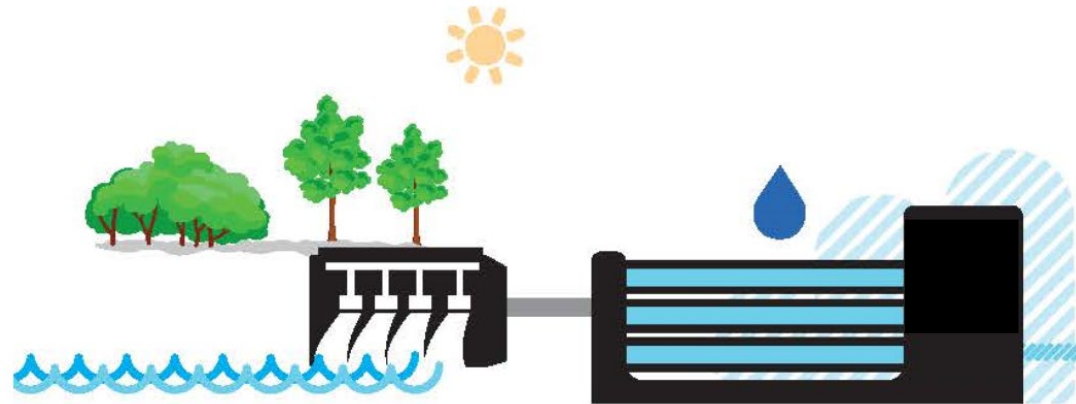
=



Sistemes d'ajuda a la decisió (SAD)

Environmental Decision Support Systems (EDSS)

Control clàssic vs control avançat



Classic Controllers → Control automàtic

P, PI, PID... Operacions bàsiques
de control

Exemples:

- Bomba d'impulsió per garantir un cabal (L/s)
- Bomba de dosificació de reactiu per complir amb una consigna (mg/L)

Advanced controllers

Model-based control

Altres aplicacions que no
es poden solucionar amb
controladors clàssics

Exemples:

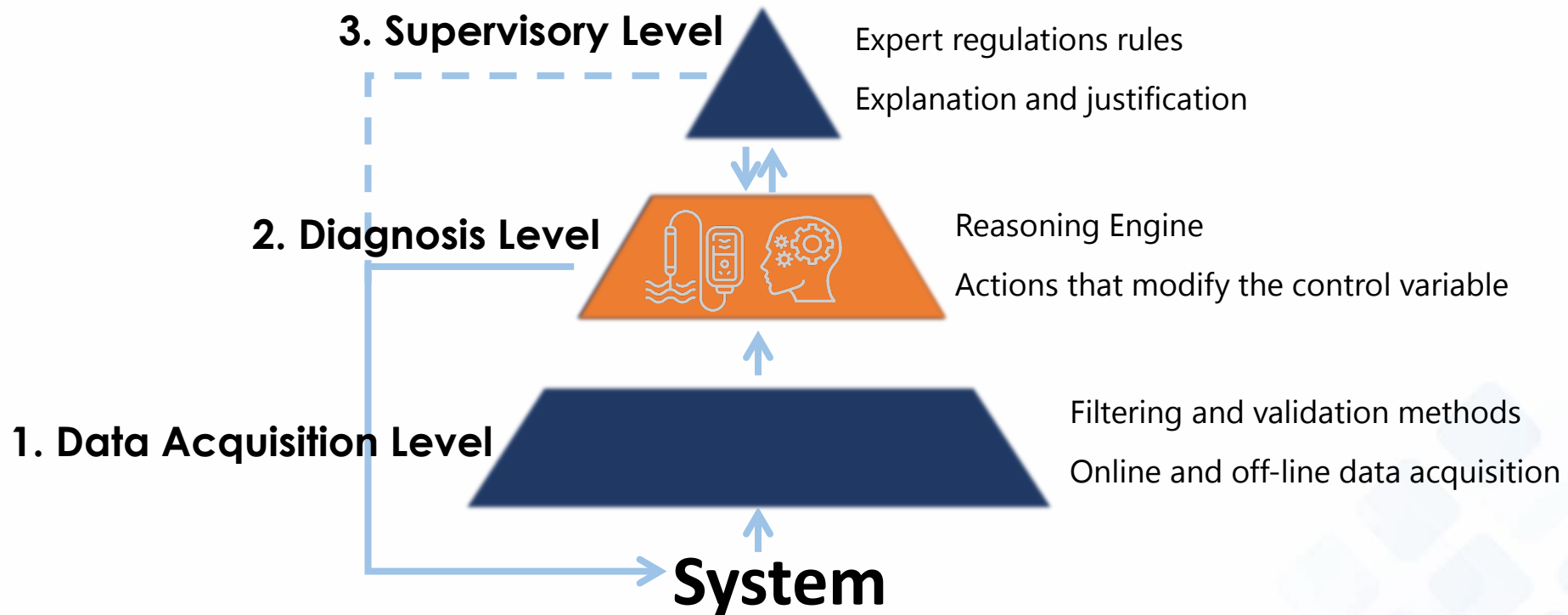
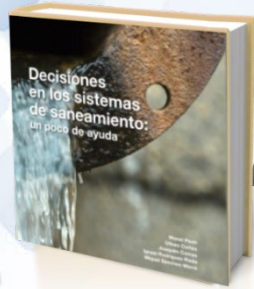
- Predicció de la dosificació necessària de reactiu en funció de la qualitat d'entrada

Control automàtic

Sistemes d'Ajuda a la Decisió

Sistemes d'ajuda a la decisió (SAD)

Environmental Decision Support Systems (EDSS)



Sistemes d'ajuda a la decisió (SAD)

Environmental Decision Support Systems (EDSS)

Tipus de models:

Models mecànístics Ex: Equació de Monod (creixement biomassa)

Descriure un fenomen físic/químic

Derivats de balanç de matèria, cinètiques químiques...

$$\frac{dX}{dt} = \frac{\mu_m \cdot S}{K_s + S} \cdot X$$

Models basats en dades

Buscar patrons entre les dades

Models estadístics

**Aprenentatge automàtic
(Machine Learning)**

Deep Learning...

Models basats en coneixement

Consolidar un coneixement

Sistemes basats en regles

Sistemes basats en casos

Intel·ligència Artificial



Sistemes d'ajuda a la decisió (SAD)

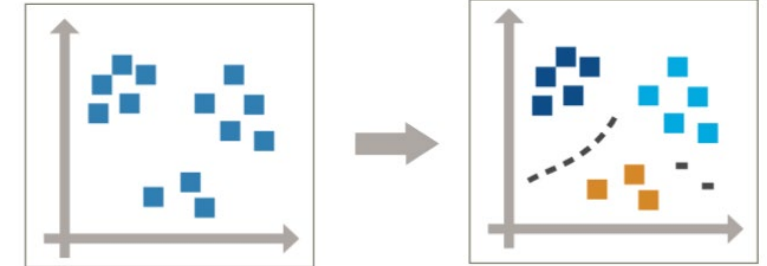
Environmental Decision Support Systems (EDSS)

Selecció del model Models d'aprenentatge automàtic (Machine Learning) per buscar patrons o tendències en sèries de dades.

Aprenentatge no-supervisat
Descobrir patrons a partir de
dades no etiquetades

Algoritmes d'agrupació (Clustering)

Agrupament per grups de dades "similars".
Aplicacions per mineria de dades



Aprenentatge supervisat
L'algoritme estableix
relacions entre les
dades etiquetades
(tipus input-output)

- **Algoritmes de classificació**

Predicció de variables tipus "discretes"

- **Algoritmes de regressió**

Predicció de variables tipus "contínues"

Regressió lineal (Linear Regression)

Arbres de decisió (Decision trees)

Xarxes neuronals artificials (Artificial neural networks)

Models predictius

Aplicacions per control de processos!

Sistemes d'ajuda a la decisió (SAD)

Environmental Decision Support Systems (EDSS)

Exemples

Aprentatge No-supervisat

Agrupació (clustering)

Aprentatge Supervisat

Classificació

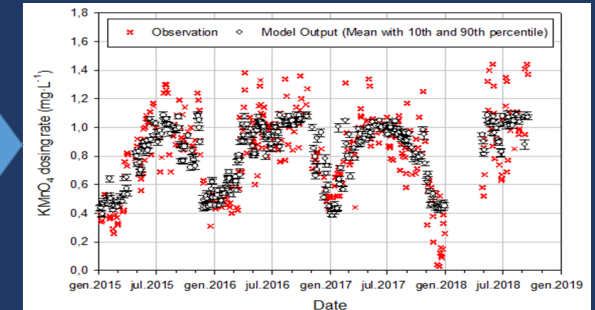
Regressió

1. Disposem d'una base de dades de qualitat d'aigua a l'entrada d'una potabilitzadora, juntament amb la dosificació òptima de reactius químics. Donades les condicions d'entrada d'avui, volem predir quina serà la dosificació òptima.

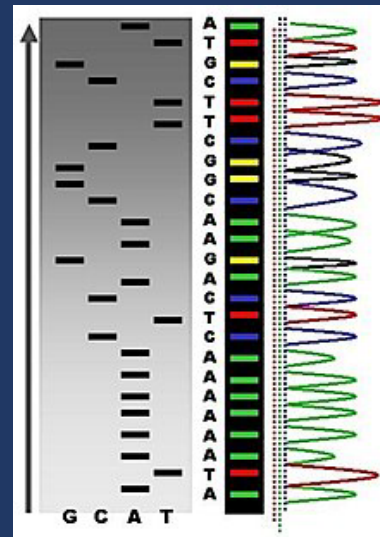
DATA	Terb DL	AP1	OV1	Q1	AP2	OV2
22/8/2018 3:00	NaN	1169	NaN	141	916	63
22/8/2018 4:00	NaN	1233	65	134	930	61
22/8/2018 5:00	NaN	1359	69	145	1020	62
22/8/2018 6:00	NaN	1478	72	149	1199	71
22/8/2018 7:00	NaN	28	2	2	1177	67
22/8/2018 8:00	NaN	119	55	143	1215	67
22/8/2018 9:00	NaN	159	57	148	1321	69
22/8/2018 10:00	NaN	223	58	149	1434	71
22/8/2018 11:00	NaN	272	57	144	1626	89
22/8/2018 12:00	NaN	314	56	140	161	56
22/8/2018 13:00	NaN	382	57	140	201	58
22/8/2018 14:00	NaN	472	59	143	240	60
22/8/2018 15:00	NaN	536	59	147	288	56
22/8/2018 16:00	NaN	643	61	145	341	58
22/8/2018 17:00	NaN	716	59	140	375	57
22/8/2018 18:00	NaN	783	54	120	390	51

KMnO₄
(mg/L)

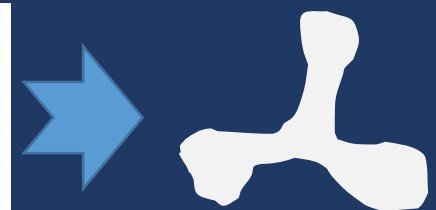
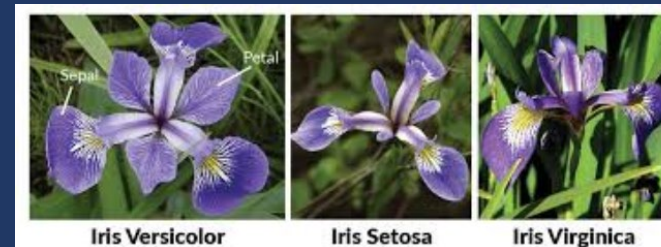
1.02
9.52
8.31
12.21
9.40
...



2. Estem treballant amb una base de dades de seqüències genètiques, i ens agradaria organitzar les dades per poder trobar característiques similars entre les mostres.

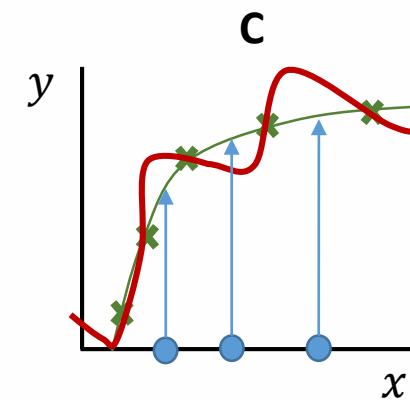
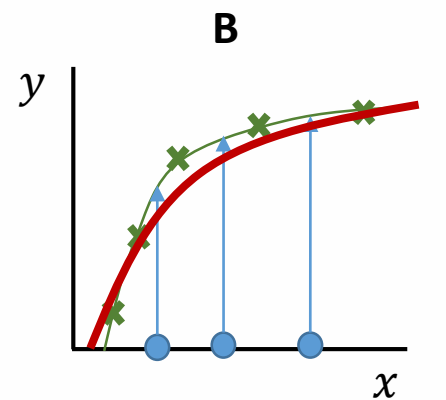
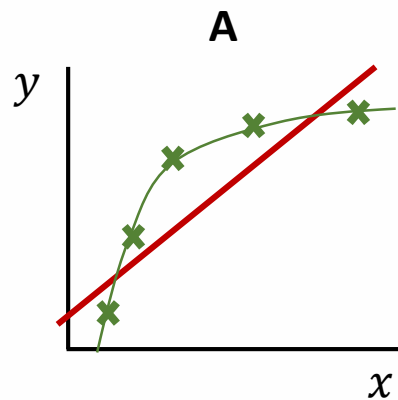


3. Disposem d'una base de dades amb les característiques dels pètals de diferents espècies de plantes, juntament amb l'espècie a la que corresponen. A partir de noves mesures, volem predir quina espècie de planta serà.



Validació del model

- **Capacitat replicativa (replicative validation):** Capacitat del model matemàtic per imitar el comportament sobre dades utilitzades durant la calibratge del model.
- **Capacitat predictiva (predictive validation):** Capacitat del model matemàtic per imitar el comportament sobre dades NO utilitzades durant la calibratge del model.



- ✕ Observacions
- Funció real
- Model ajustat
- Noves observacions

Sistemes d'ajuda a la decisió (SAD)

Environmental Decision Support Systems (EDSS)

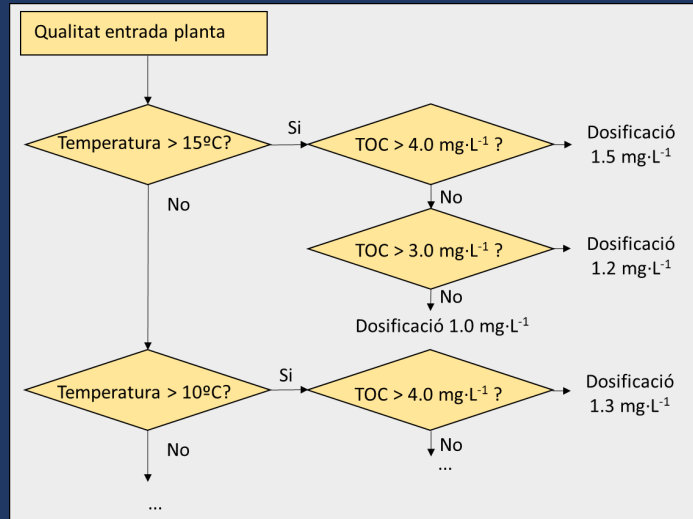
Selecció del model Models basats en coneixement: Busquen consolidar el coneixement o expertesa d'uns procés

Arbres de decisió

- Variables numèriques per fer regles basades en coneixement
- Mètode molt intuïtiu i útil quan es disposa del coneixement.

Limitacions

- El procés d'obtenció de coneixement ha d'ésser contrastat (depèn de la percepció del procés).
- Discriminació en valors límit en el rang de decisió.



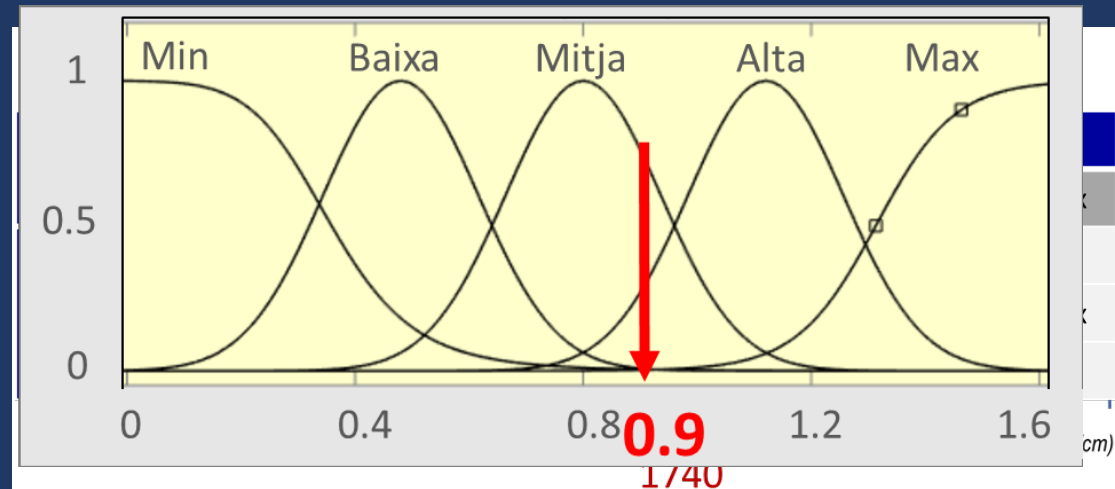
Lògica difusa

És una forma de la lògica basada en el concepte **multivalor**.

És una de les tipologies de la lògica que millor s'adapta al raonament humà i a més a més funciona amb les "nostres expressions".

Limitacions

- El procés d'obtenció de coneixement ha d'ésser contrastat (depèn de la percepció del procés).



La gestió de l'aigua potable: CAPTACIÓ



Naturally occurring pollutants

- Organic Matter (NOM)
- Dissolved salts
- Microorganisms



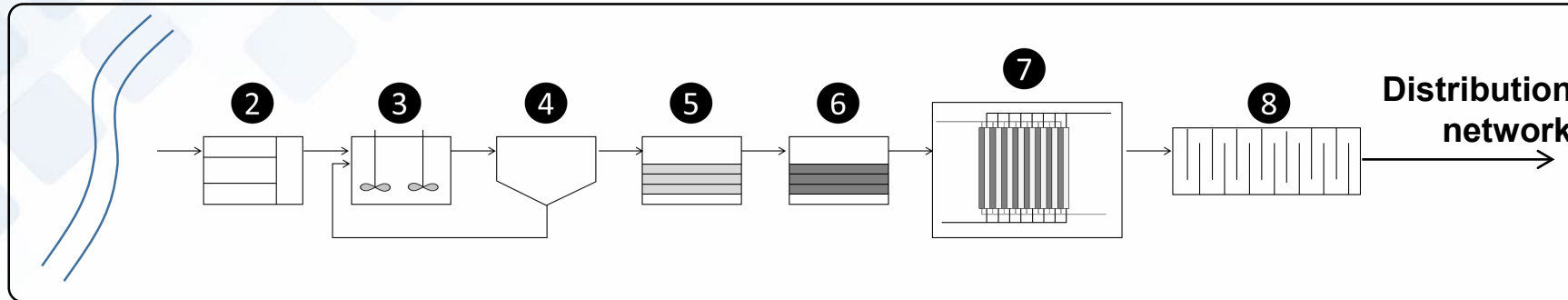
Urban/ Industrial impacts

- Organic matter, NH_4^+ , NO_3^-
- Pharmaceuticals
- Faecal-related microorganisms



La gestió de l'aigua potable: CAPTACIÓ

Drinking water treatment plant (DWTP)



Drinking Water



Waterborn pathogens

Disinfection by-products (DBPs)



DBPs Precursors

Natural Organic Matter



+ Inorganic ions
(Br⁻, I⁻, NO₂⁻)

Disinfectant



Cl₂ NaOCl,
ClO₂ NH₂Cl
O₃

pH
Temperature
Time

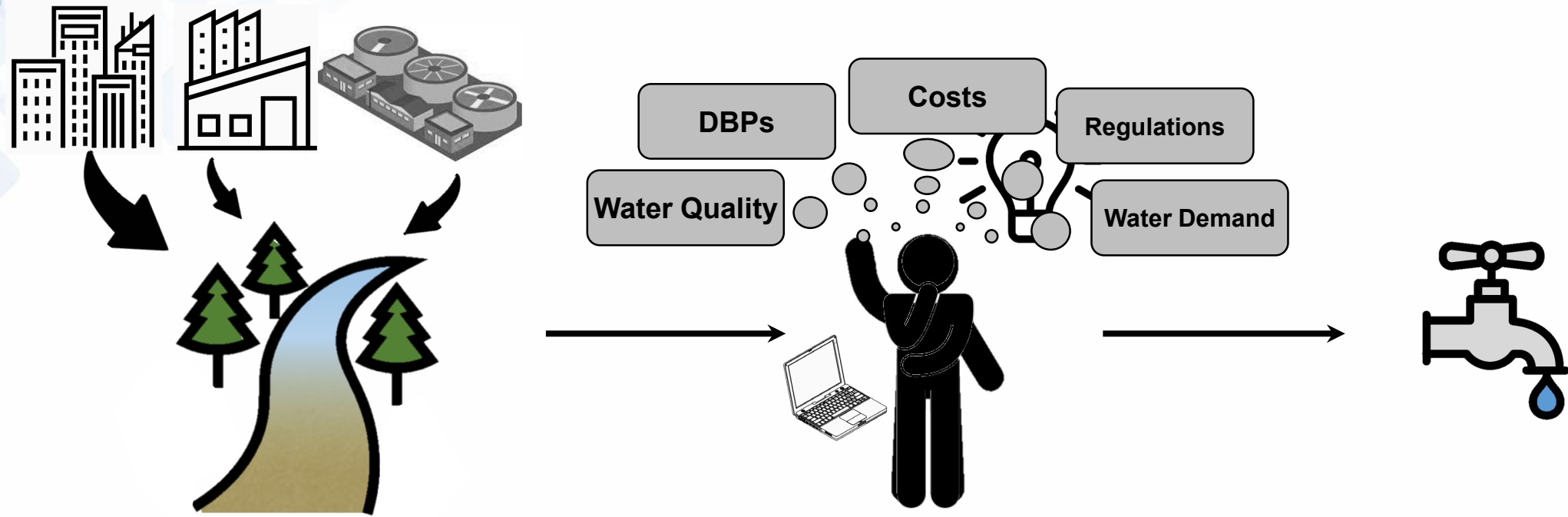
Disinfection By-Products

Trihalomethanes (THMs)
(CHCl₃, CHBrCl₂, CHBr₂Cl, CHBr₃)

Haloacetic acids (HAA5)

N-DBPs

La gestió de l'aigua potable



Environmental Decision Support Systems (EDSS)

Falta d'estandardització
dels EDSS per treballar a
temps real

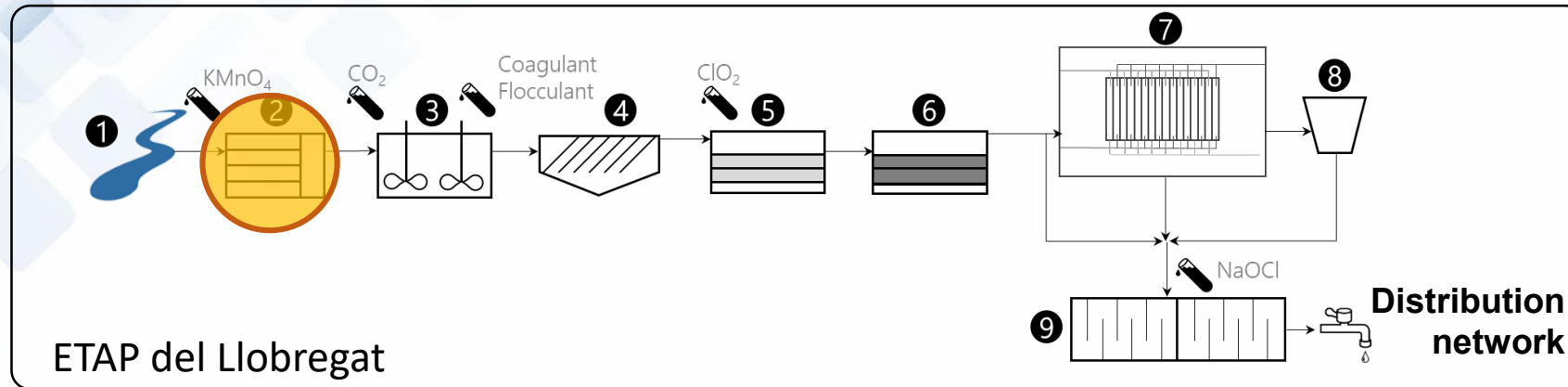
Els EDSS han de servir per
l'usuari final, però
extrapolables

Mostrar la incertesa per
ajudar als usuaris/decisions

Fiabilitat

Credibilitat

- Què és el LEQUIA i que fem?
- Antecedents (introducció)
- **Casos d'estudi sobre l'ús de la IA en la gestió de l'aigua potable**

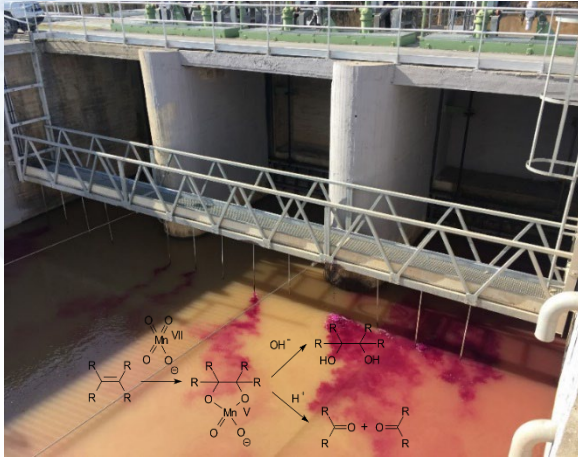


Predicting the oxidant demand in a surface water treatment plant: Model development and integration into an environmental decision support system.

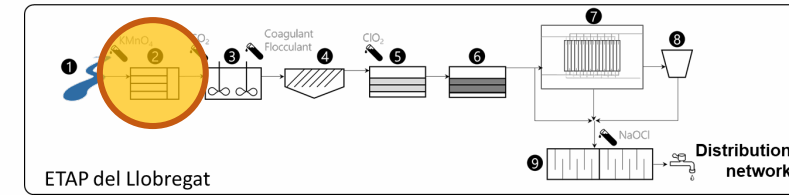
Godo-Pla, L., Emiliano, P., Valero, F., Poch, M., Sin, G., Monclús, H., **2019.** Predicting the oxidant demand in full-scale drinking water treatment using an artificial neural network: Uncertainty and sensitivity analysis. *Process Saf. Environ. Prot.* 125, 317–327. <https://doi.org/10.1016/j.psep.2019.03.017>

Godo-Pla, L., Emiliano, P., González, S., Poch, M., Valero, F., Monclús, H., **2020.** Implementation of an environmental decision support system for controlling the pre-oxidation step at a full-scale drinking water treatment plant. *Water Sci. Technol.* 81 (8), 1778-1785. <https://doi.org/10.2166/wst.2020.142>

EDSS per la gestió d'una ETAP: KMnO_4



- Fe i Mn
- Compostos olor i gust
- Precursors dels DBP



Desenvolupar un model que predigui la demanda de MnO_4^-



Problem analysis

Què volem predir?



Data and knowledge
acquisition

Què ens diuen
les dades?



Cognitive analysis

Quin model pot encaixar millor?



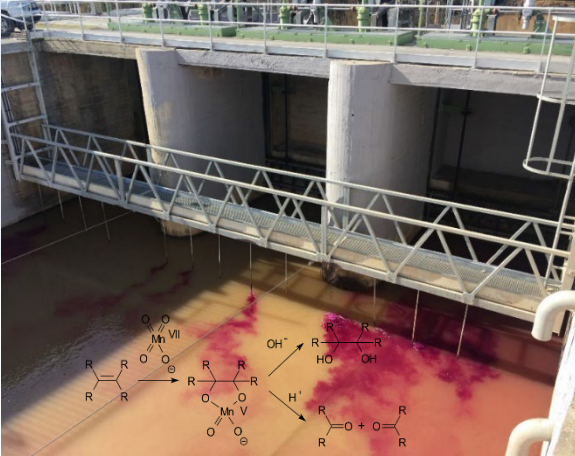
Model selection



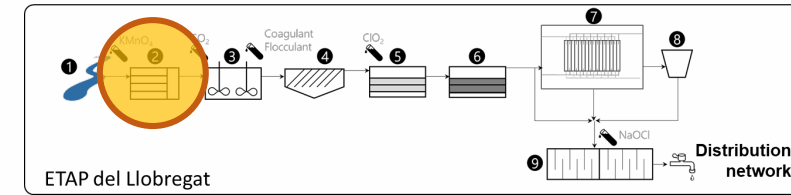
Integration and validation

L'integrem i el
validem a planta

EDSS per la gestió d'una ETAP: KMnO_4



- Fe i Mn
- Compostos olor i gust
- Precursors dels DBP



Desenvolupar un model que predigui la demanda de MnO_4^-

Selecció de l'arquitectura del model

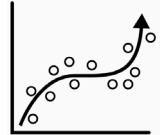
Gestió de dades

Estimació dels paràmetres

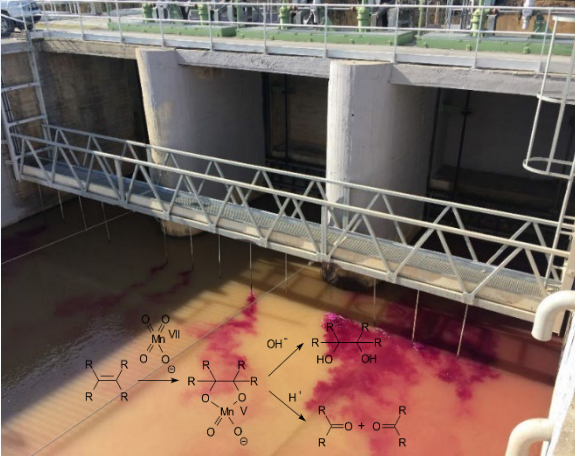
Anàlisi de la incertesa

Anàlisi de sensibilitat

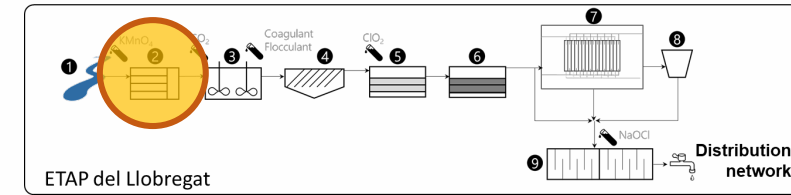
Model predictiu



EDSS per la gestió d'una ETAP: KMnO_4



- Fe i Mn
- Compostos olor i gust
- Precursors dels DBP



Desenvolupar un model que predigui la demanda de MnO_4^-

Selecció de l'arquitectura del model

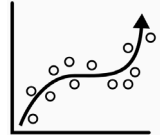
Gestió de dades

Estimació dels paràmetres

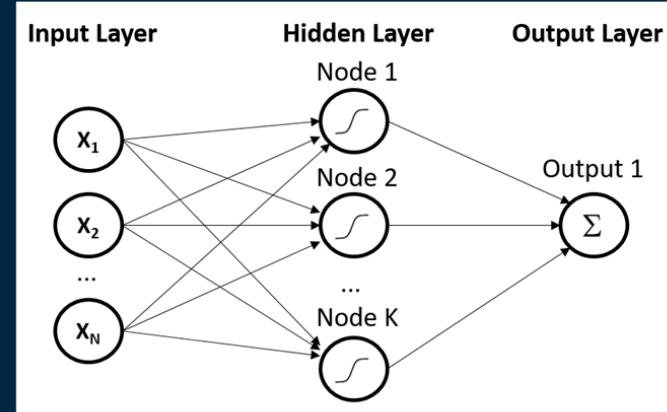
Anàlisi de la incertesa

Anàlisi de sensibilitat

Model predictiu



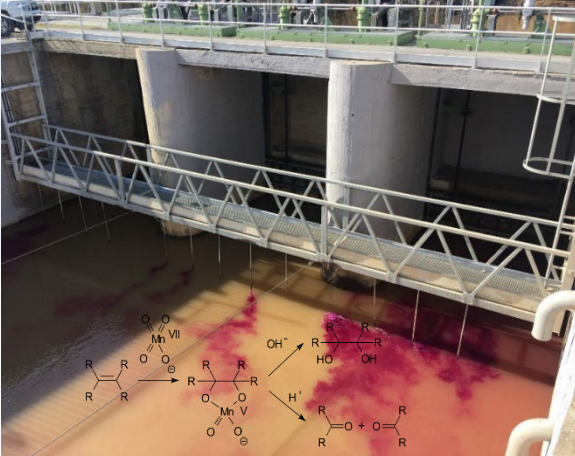
Multi-layer perceptrons (MLPs)



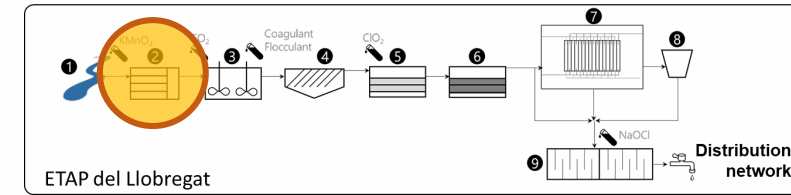
Multiple linear regression (MLR)

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_n X_n$$

EDSS per la gestió d'una ETAP: KMnO_4



- Fe i Mn
- Compostos olor i gust
- Precursors dels DBP



Desenvolupar un model que predigui la demanda de MnO_4^-

Selecció de l'arquitectura del model

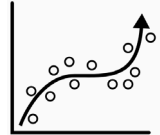
Gestió de dades

Estimació dels paràmetres

Anàlisi de la incertesa

Anàlisi de sensibilitat

Model predictiu

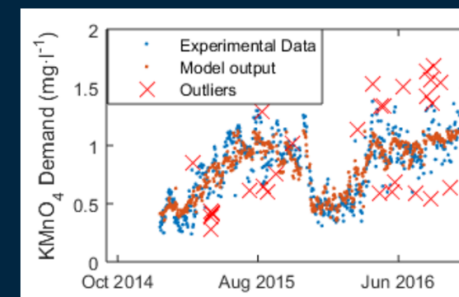


Features selection
Best subset selection
James et al. (2013)

Input features:

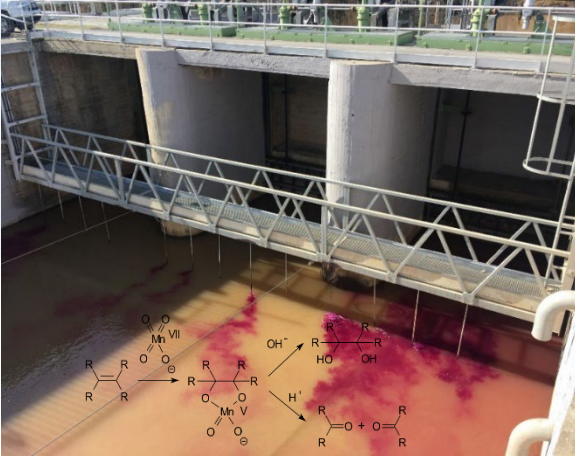
- UV_{254}
- Turbidity
- Temperature
- HRT

Outliers detection
Empirical cumulative Distribution function (ECDF)
Frutiger et al. (2015)

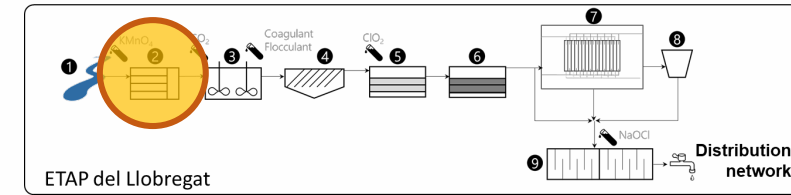


Data division
Self-organising map algorithm
May et al. (2010)

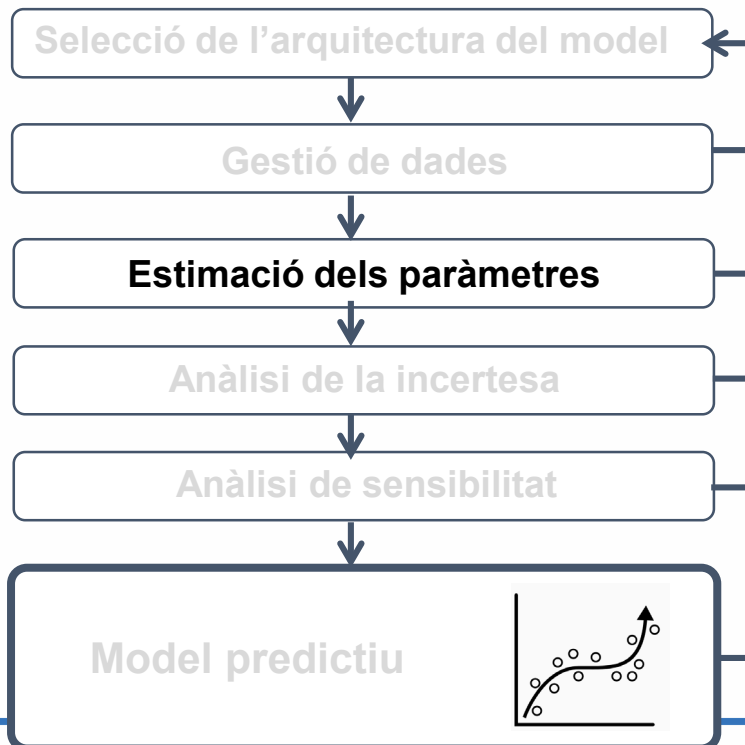
EDSS per la gestió d'una ETAP: KMnO_4



- Fe i Mn
- Compostos olor i gust
- Precursors dels DBP



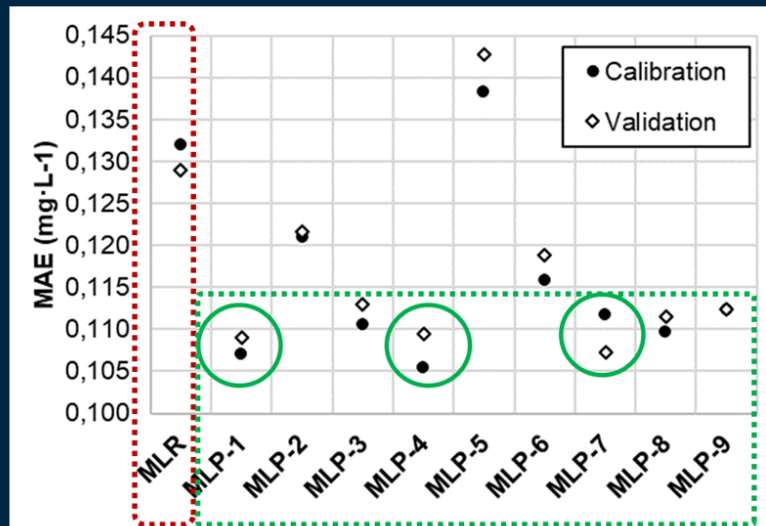
Desenvolupar un model que predigui la demanda de MnO_4^-



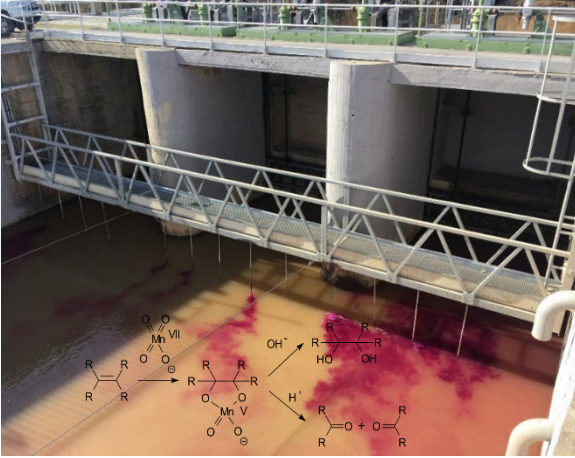
Bootstrap method (N=50)

Sin and Gernaey (2017)

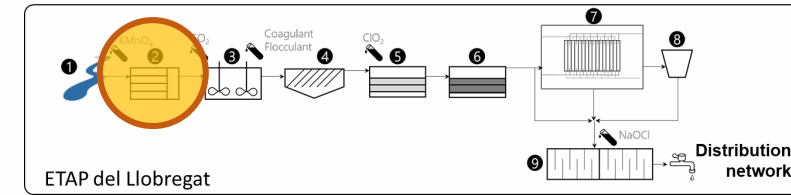
$$\hat{\theta} \sim D(\mu(\hat{\theta}), COV(\hat{\theta}))$$



EDSS per la gestió d'una ETAP: KMnO_4



- Fe i Mn
- Compostos olor i gust
- Precursors dels DBP

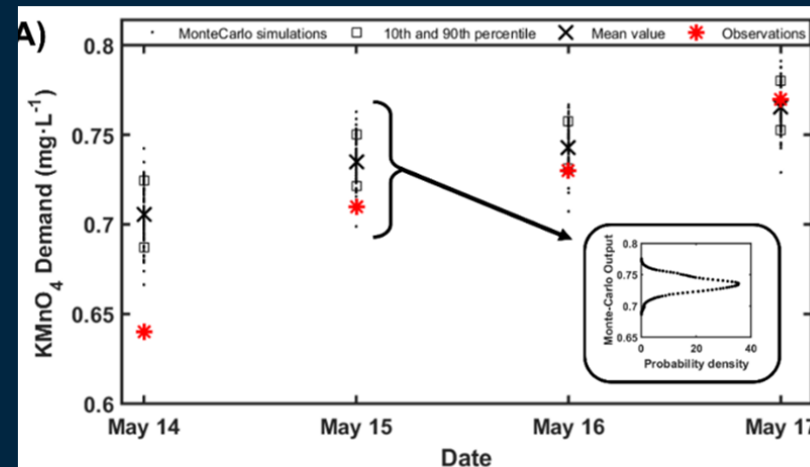


Desenvolupar un model que predigui la demanda de MnO_4^-

MonteCarlo propagation (N=100)

Sin and Gernaey (2017)

$$\hat{\theta} \sim D \left(\mu(\hat{\theta}), \text{COV}(\hat{\theta}) \right)$$



Selecció de l'arquitectura del model

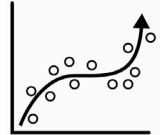
Gestió de dades

Estimació dels paràmetres

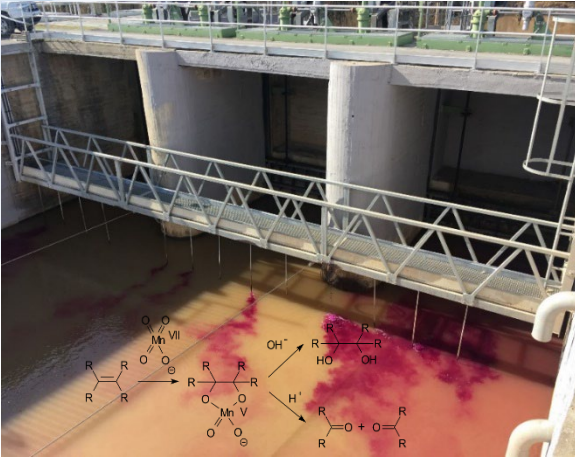
Anàlisi de la incertesa

Anàlisi de sensibilitat

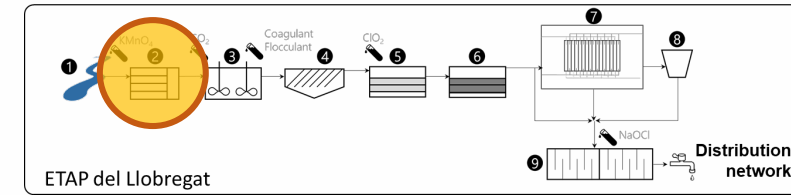
Model predictiu



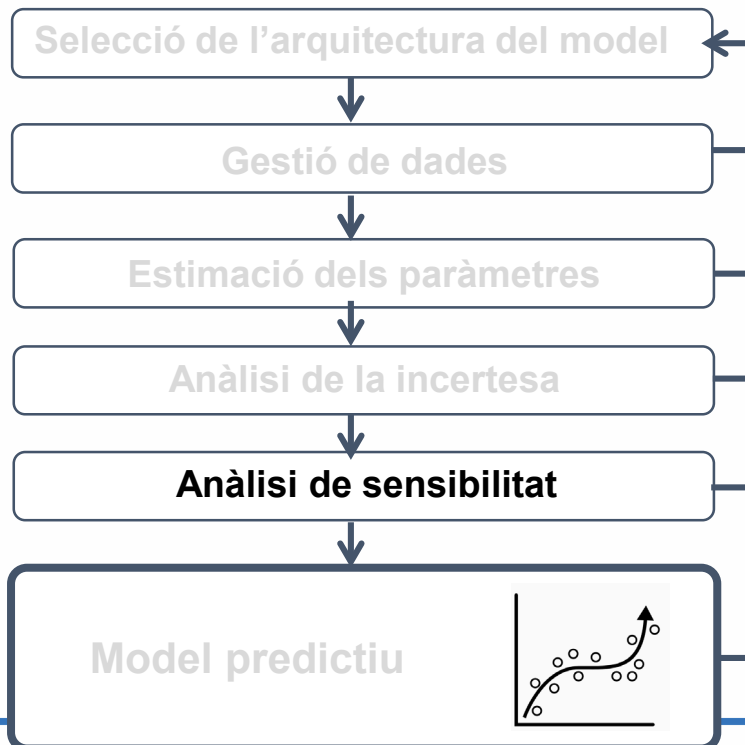
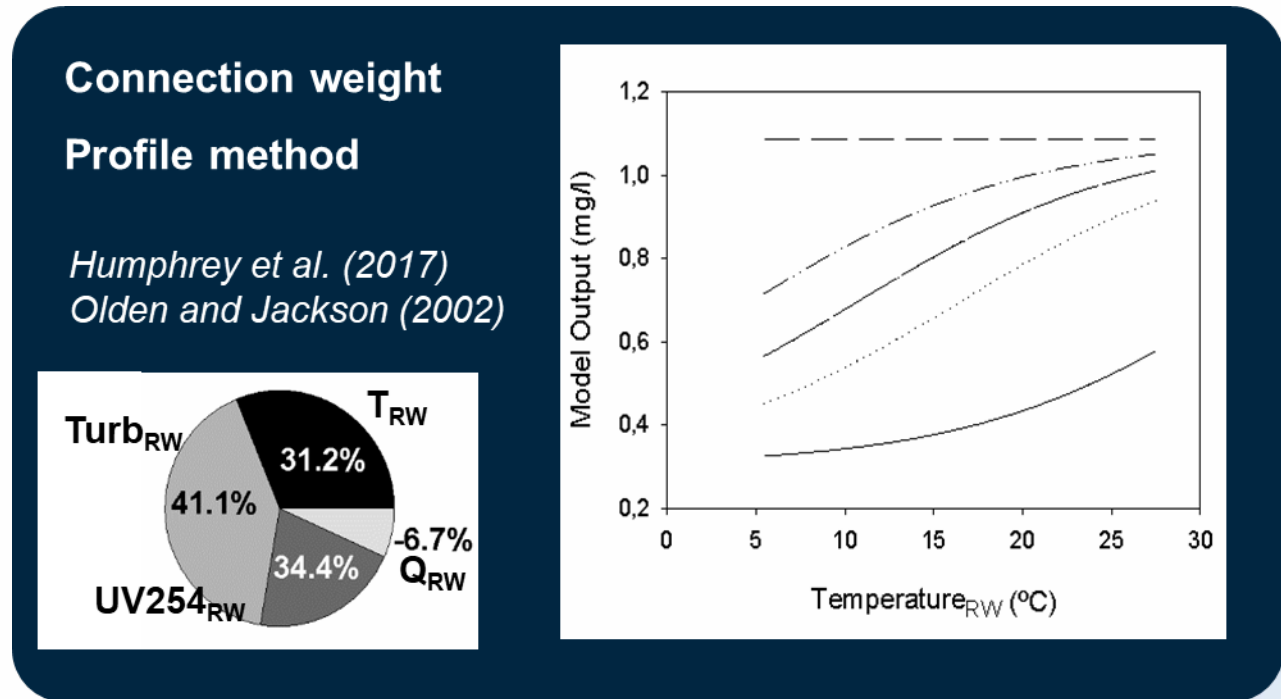
EDSS per la gestió d'una ETAP: KMnO_4



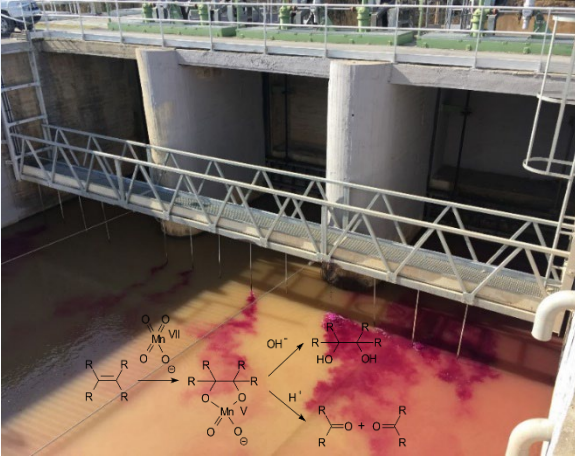
- Fe i Mn
- Compostos olor i gust
- Precursors dels DBP



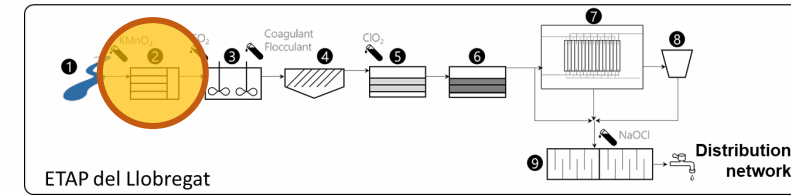
Desenvolupar un model que predigui la demanda de MnO_4^-



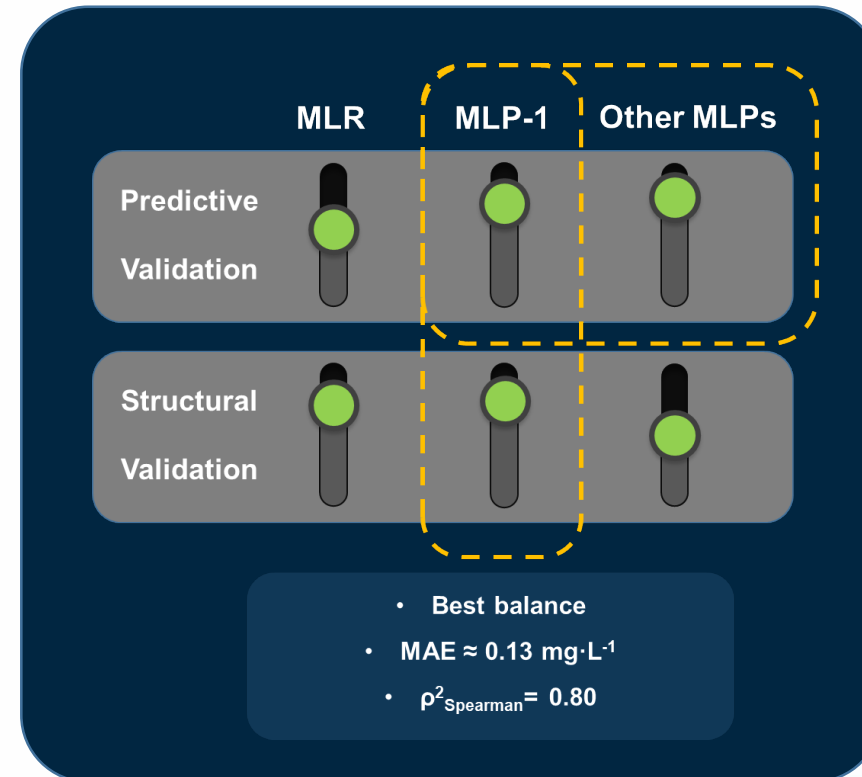
EDSS per la gestió d'una ETAP: KMnO_4



- Fe i Mn
- Compostos olor i gust
- Precursors dels DBP



Desenvolupar un model que predigui la demanda de MnO_4^-



EDSS per la gestió d'una ETAP: KMnO_4

EDSS

ETAP Llobregat

Versió Beta 1.4

Q_EP	2.00	m3/s
Temp_EP	15.00	°C
TOC_EP	4.30	mg/L
Cond_EP	1250.00	microS/cm
Terb_EP	45.00	NTU
AbsUV_EP	6.00	Abs/m
SUVA_EP	1.40	Abs·L/mg

Mode Online

Importa TAGs
22/06/2020 10:25h

Executa EDSS
22/06/2020 10:25h

DrinkIA

lequia UdG

ATL
Ebre d'Abastament
d'Aigua Ter-Llobregat

Gestió EDR
46 % EDR
2.9 mòduls EDR

Qualitat Sortida

Consignes d'operació proposades

Pre-oxidació
0.84 mg/L KMnO_4

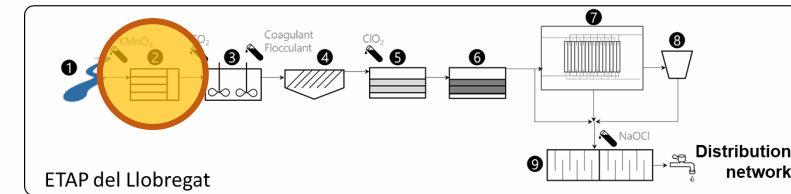
Coagulació
25 mg/L PAX

Diòxid de clor
1.72 mg/L ClO_2
12.4 kg/h ClO_2

Rentat Filtres Sorra

VALIDACIÓ

Ajuda



EDSS per la gestió d'una ETAP: KMnO_4

permanganat

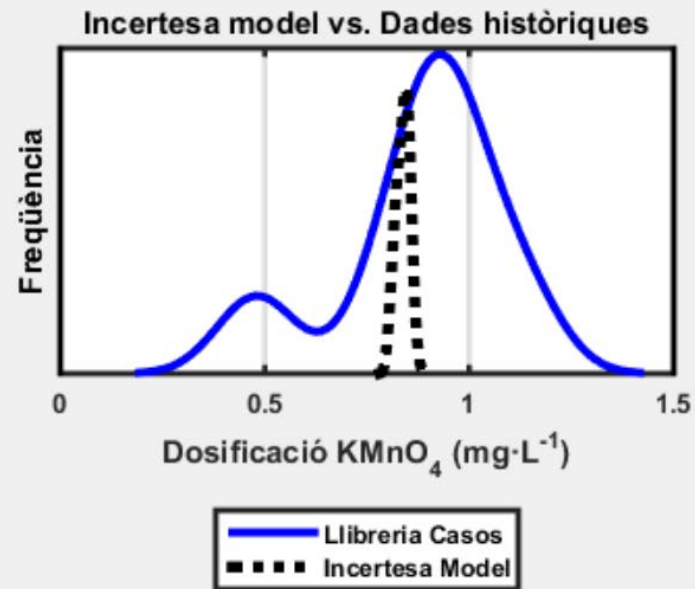
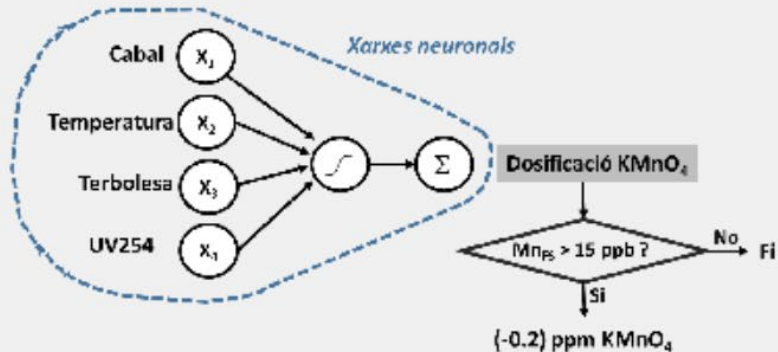
Mòdul Pre-oxidació (permanganat potàssic)

AbsUV 254	6.00	Abs/m
Terbolesa	45.00	NTU
Temperatura	15.00	°C
Cabal	2.00	m³/s

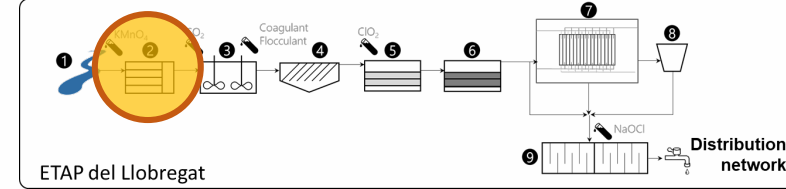
Dosi Model: 0.84 ppm KMnO_4

Dosi Real: -- ppm KMnO_4

Mn Residual (FS): 7.0 ppb



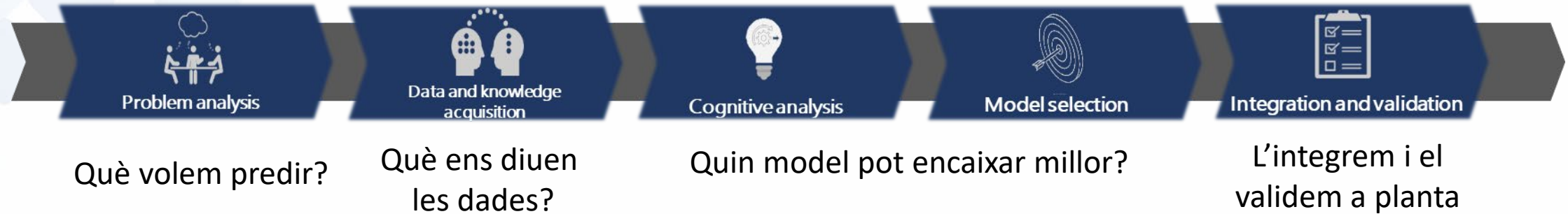
Veure validacions



EDSS per la gestió d'una ETAP: Dosi de coagulant



Desenvolupar un model que ajusti la demanda de coagulant a temps real



Assessing the effect of catchment characteristics to enhanced coagulation in drinking water treatment: RSM models and sensitivity analysis

J. Suquet, Ll. Godo-Pla, M. Valentí, L. Ferràndez, M. Verdaguer, M. Poch, M.J. Martín, H. Monclús

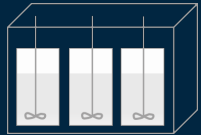
LEQUIA, Institute of the Environment, Universitat de Girona. C/Maria Aurèlia Capmany, 69, E-17003 Girona, Catalonia, Spain



EDSS per la gestió d'una ETAP: Dosi de coagulant



Desenvolupar un model que ajusti la demanda de coagulant a temps real



Enhanced coagulation

MODEL DESIGN

Factors: pH, coagulant & flocculant dose

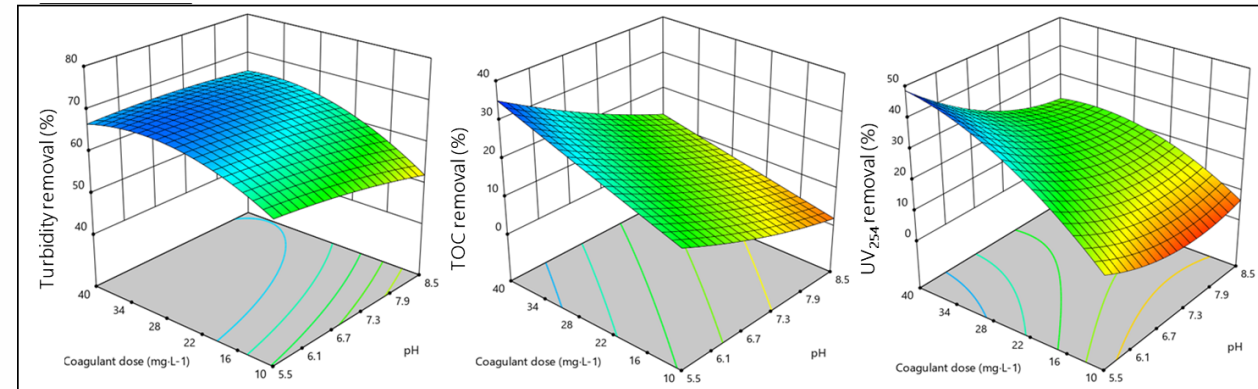
Responses: turbidity, TOC & UV₂₅₄ % removal

RSM

2 DWTPs

Baseline

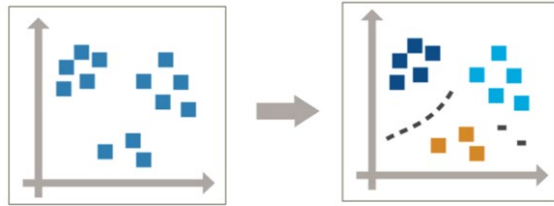
Peak



EDSS per la gestió d'una ETAP: Dosi de coagulant



Desenvolupar un model que ajusti la demanda de coagulant a temps real



Selecció de l'arquitectura del model

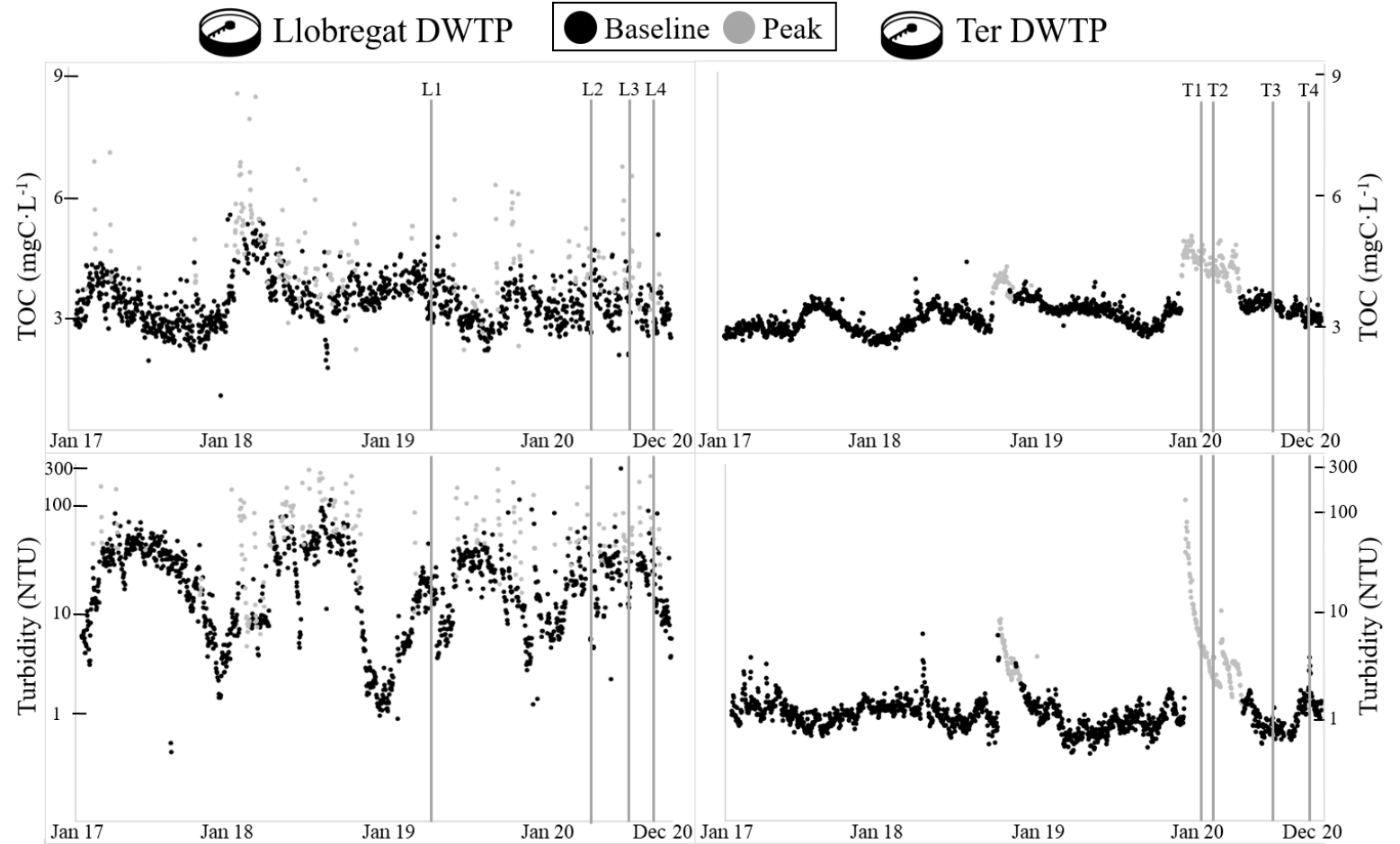
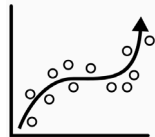
Gestió de dades

Estimació dels paràmetres

Anàlisi de la incertesa

Anàlisi de sensibilitat

Model predictiu



EDSS per la gestió d'una ETAP: Dosi de coagulant



Desenvolupar un model que ajusti la demanda de coagulant a temps real

Selecció de l'arquitectura del model



Gestió de dades



Estimació dels paràmetres



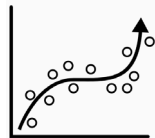
Anàlisi de la incertesa



Anàlisi de sensibilitat



Model predictiu



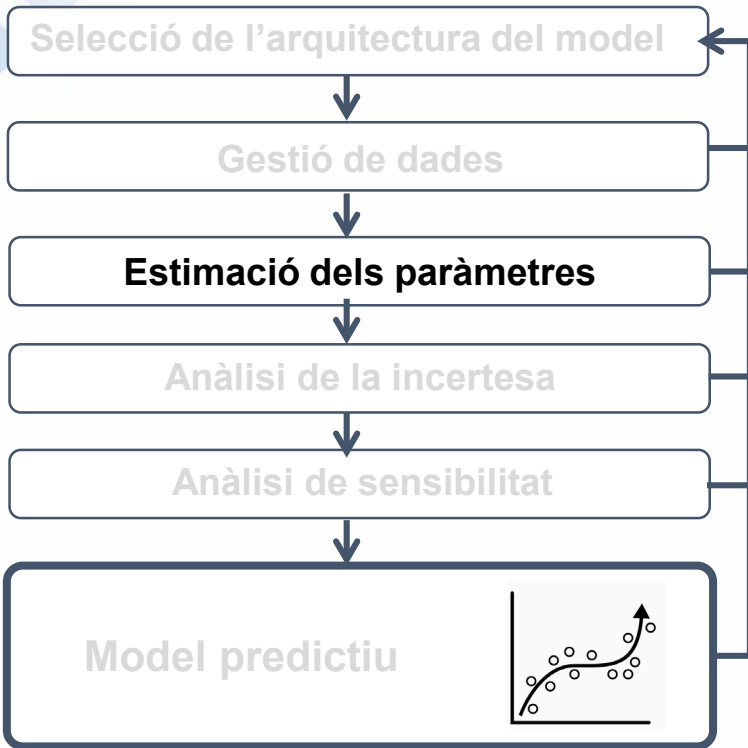
RSM	Y (% removal)	M	$\bar{X} \pm SD$ (%)	R ²	n	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6	β_7	β_8	β_9
LB	Turbidity	Q	77.1±1.6	0.99	+442.4	-123.6	+1.7	+82.4	+0.03	-0.7	-0.3	+8.8	-0.02	-34.1
	TOC	Q	25.7±1.6	0.99	+37.6	-10.3	+0.5	+21.6	-0.01	-2.7	-0.08	+0.8	+0.001	+3.01
	UV ₂₅₄	Q	37±8.9	0.86	+171.7	-48.4	+2.9	-108.7	-0.3	+13.2	+0.04	+3.7	-0.01	+7.1
LP	Turbidity	2L	96±0.9	0.85	+139.7	-5.3	-0.5	-34.3	+0.06	+3.7	+0.2	-	-	-
	TOC	Q	17.3±5.5	0.71	+32.8	-6.2	+1.1	-4	-0.1	+0.6	+0.2	+0.5	-0.004	-6.5
	UV ₂₅₄	L	27.3±2.4	0.9	+48.1	-4.4	+0.25	-0.6	-	-	-	-	-	-
TB	Turbidity	Q	78.5±6.3	0.94	-54.2	+18.8	+2.1	+43.8	-0.03	-5.7	-0.03	-0.8	-0.02	-2.1
	TOC	Q	11.3±6.2	0.65	+34.5	-3.5	+0.6	-20.2	+0.01	+1.4	-0.02	-0.1	-0.01	+6.7
	UV ₂₅₄	Q	37.7±3.8	0.93	-13.5	+8.5	+1.2	+11.1	-0.02	-1.8	-0.02	-0.6	-0.01	+1.5
TP	Turbidity	Q	89.7±3.3	0.84	-30.9	+34.4	-0.2	+2.2	+0.06	-1.1	+0.1	-2.4	-0.003	+0.3
	TOC	Q	43±6.9	0.92	-214.9	+80	-0.3	+61.1	+0.2	-6.5	+0.1	-6.5	-0.01	-11.5
	UV ₂₅₄	Q	53±2.5	0.97	+3.8	+19.1	-1.1	+22.2	+0.3	-1.1	-0.02	-2	-0.01	-6.5

$$Y = \beta_0 + \beta_1 pH + \beta_2 C_d + \beta_3 F_d + \beta_4 pH C_d + \beta_5 pH F_d + \beta_6 C_d F_d + \beta_7 pH^2 + \beta_8 C_d^2 + \beta_9 F_d^2$$

EDSS per la gestió d'una ETAP: Dosi de coagulant



Desenvolupar un model que ajusti la demanda de coagulant a temps real



Delta mean-squared (δ^{msqr})

RSM	Y	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6	β_7	β_8
LB	Turbidity	11.2	0.89	0.92	0.11	0.05	0.13	5.57	0.43
	TOC	2.56*	0.72	0.66	0.1	0.57	0.1	1.38	0.00
	UV ₂₅₄	13.8*	4.8*	3.8	3.46	3.23	0.06	7.35	0.67
LP	Turbidity	0.37	0.2	0.29	0.17	0.22	0.07	-	-
	TOC	1.87	1.9	0.15	1.2	0.15	0.29	1.06	0.28
	UV ₂₅₄	1.15	0.37	0.02	-	-	-	-	-
TB	Turbidity	1.89	1.13	0.55	0.11	0.5	0.01	0.56	0.43
	TOC	2.8*	2.6*	2.05	0.3	0.99	0.08	0.57	1.63
	UV ₂₅₄	1.65	1.25	0.27	0.15	0.3	0.02	0.81	0.39
TP	Turbidity	2.65	0.08	0.02	0.17	0.07	0.04	1.29	0.03
	TOC	12.4*	0.25	1.18	1.16	0.88	0.07	7.04	0.31
	UV ₂₅₄	2.22*	0.69	0.32	1.31	0.11	0.01	1.63	0.24

* TOC and UV₂₅₄ $\delta^{msqr} > 2$

EDSS per la gestió d'una ETAP: Dosi de coagulant



Desenvolupar un model que ajusti la demanda de coagulant a temps real

Selecció de l'arquitectura del model



Gestió de dades



Estimació dels paràmetres



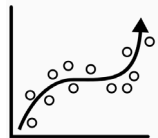
Anàlisi de la incertesa



Anàlisi de sensibilitat



Model predictiu



	Y	P	β_0	β_1	β_2	β_3	β_4	β_5	β_6	β_7	β_8	β_9	R ²
LB	Turbidity	4	34.5	-	1.4	18.1	-	-	-0.3	-	-0.01	-	0.9
	TOC	3	6.8	-	0.3	21.3	-	-2.3	-	-	-	-	0.9
	UV ₂₅₄	5	223.3	-60.4	0.6	-	-	3.9	-0.4	4.03	-	-	0.7
LP	Turbidity	4	77.7	1.6	0.5	-	-0.02	-	-	-	-0.01	-	0.8
	TOC	3	9.5	-	1.2	-	-0.1	-	-	-	-0.01	-	0.8
	UV ₂₅₄	2	33.5	-	0.3	-	-	-	-	-0.3	-	-	0.9
TB	Turbidity	5	-16.1	7.9	2	43.1	-	-6.3	-	-	-0.02	-	0.9
	TOC	5	30.2	-2.9	0.6	-19	-	-	-	-	-0.01	9.4	0.7
	UV ₂₅₄	3	23.9	-	1.1	-	-	-	-	-0.2	-0.01	-	0.9
TP	Turbidity	4	86.1	-	0.4	-	-	-0.8	0.1	-	-0.01	-	0.8
	TOC	4	-246	93.3	-	-	0.17	-	-	-7.6	-0.02	-	0.8
	UV ₂₅₄	4	74.5	-	-0.8	-	0.3	-	-	-0.7	-0.01	-	0.9

Y: model responses; P: number of predictors.

EDSS per la gestió d'una ETAP: Dosi de coagulant



Desenvolupar un model que ajusti la demanda de coagulant a temps real

Selecció de l'arquitectura del model

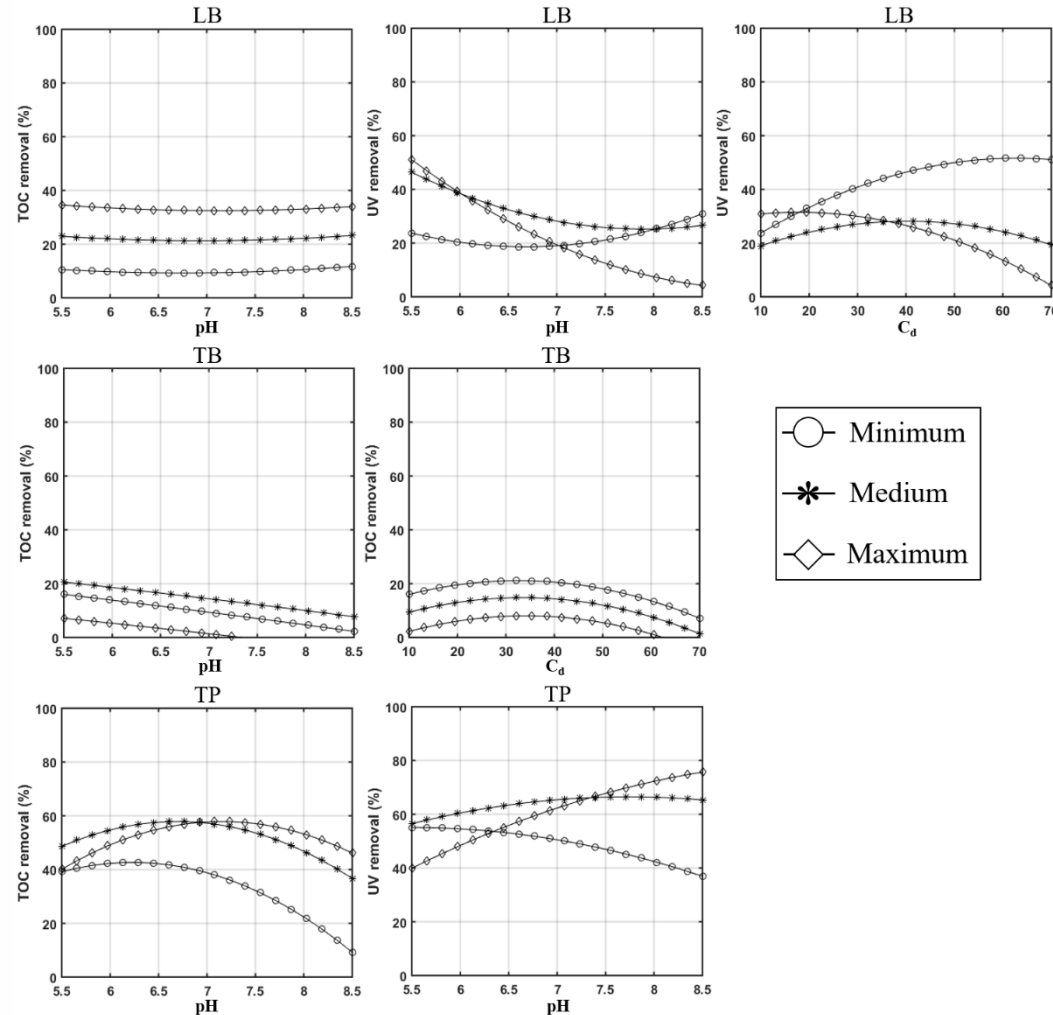
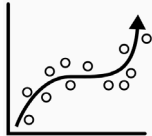
Gestió de dades

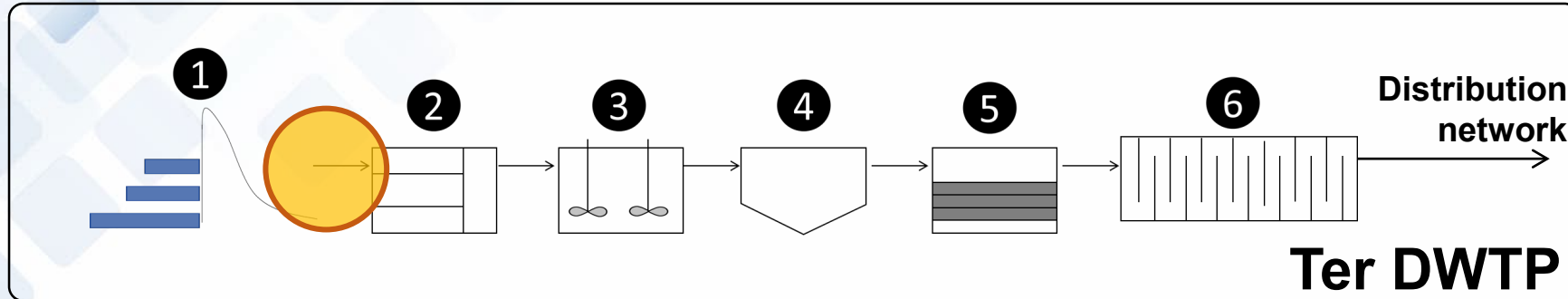
Estimació dels paràmetres

Anàlisi de la incertesa

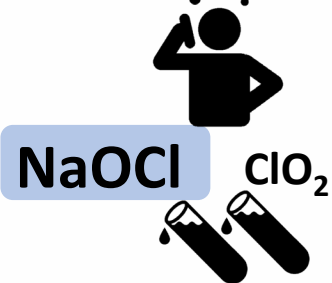
Anàlisi de sensibilitat

Model predictiu





Desenvolupa? un model que ajusti els dos desinfectants a la capçalera de l'ETAP



- ✓ Experiència acumulada
- ✓ Poques dades disponibles
- ✓ Elevada correlació entre variables (control i manipulada)

EDSS

Formació de DBP
THMs?
 ClO_2^- ?

→ Models basats en coneixement

Control of primary disinfection in a drinking water treatment plant based on a fuzzy inference system

Lluís Godo-Pla^{a,b}, Jose Javier Rodríguez^b, Jordi Suquet^a, Pere Emiliano^b,
Fernando Valero^b, Manel Poch^a, Hèctor Monclús^{a,*}

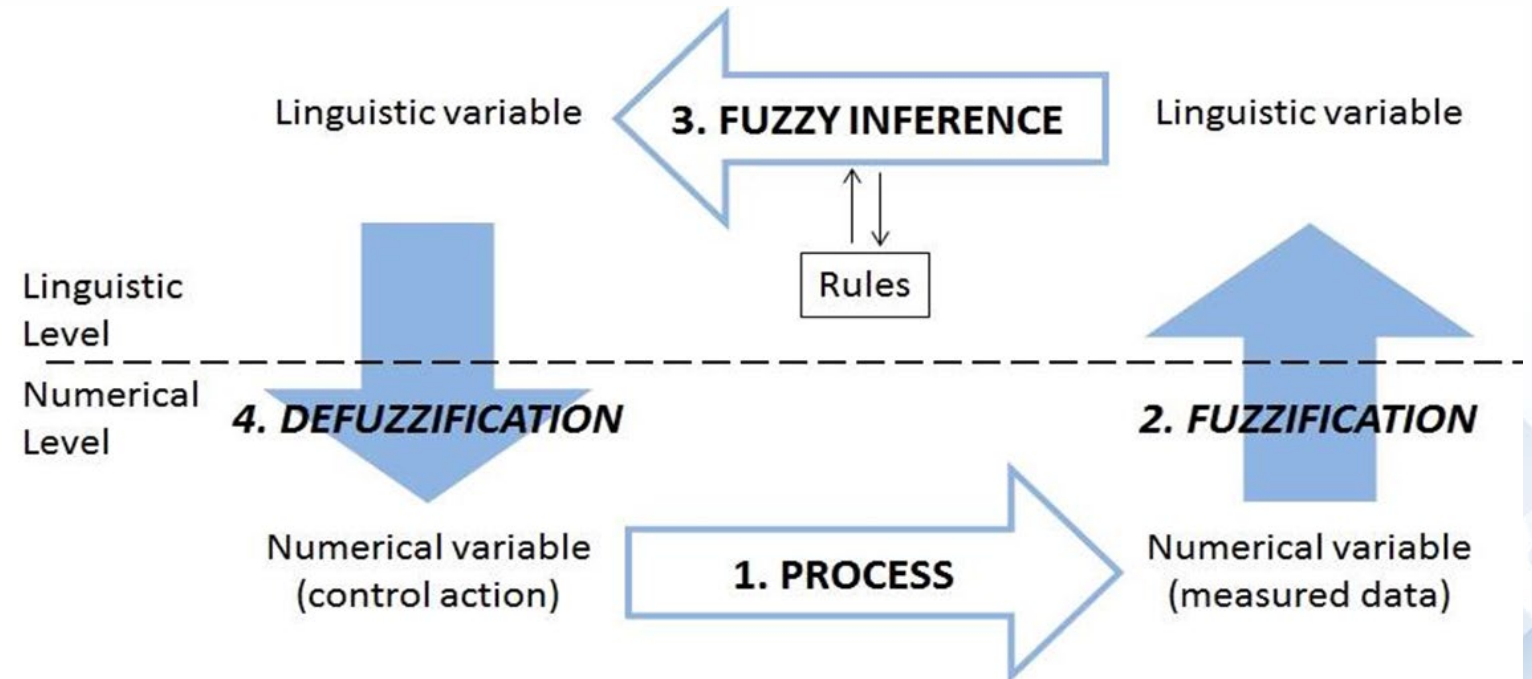
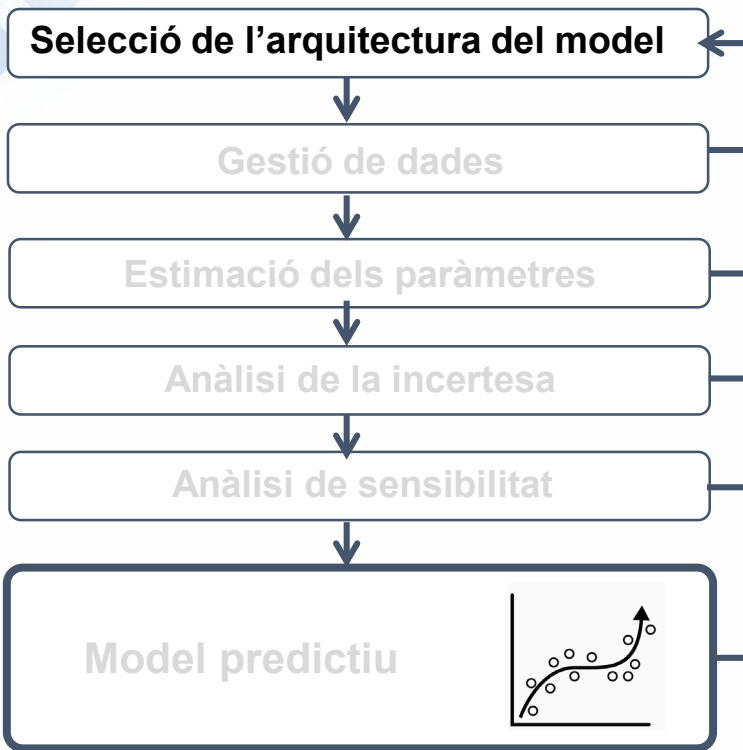
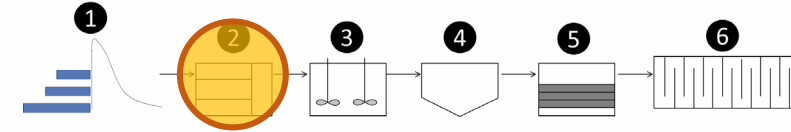
^a LEQUIA, Institute of the Environment, University of Girona, E-17003, Girona, Catalonia, Spain

^b Ens d'Abastament d'Aigua Ter-Llobregat (ATL), Sant Martí de l'Erm, 30. 08970, Sant Joan Despí, Barcelona, Spain

EDSS per la gestió d'una ETAP: Pre-desinfecció



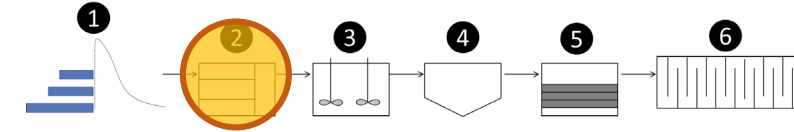
Desenvolupar un model que ajusti els dos desinfectants a la capçalera de l'ETAP



EDSS per la gestió d'una ETAP: Pre-desinfecció



Desenvolupar un model que ajusti els dos desinfectants a la capçalera de l'ETAP



Selecció de l'arquitectura del model

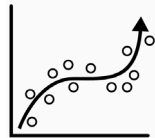
Gestió de dades

Estimació dels paràmetres

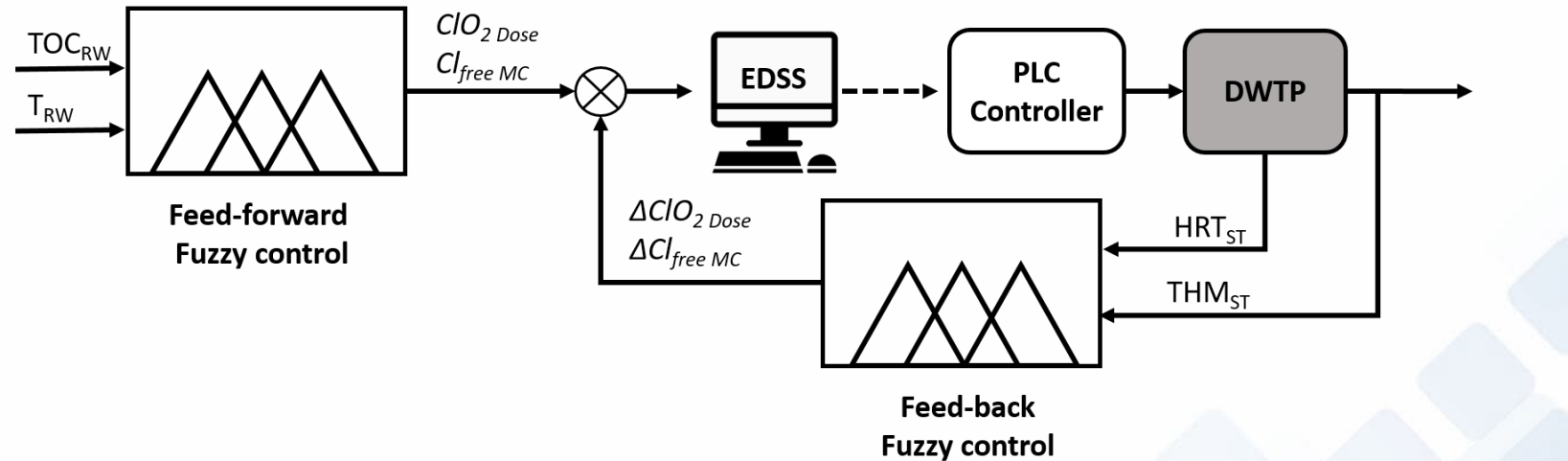
Anàlisi de la incertesa

Anàlisi de sensibilitat

Model predictiu



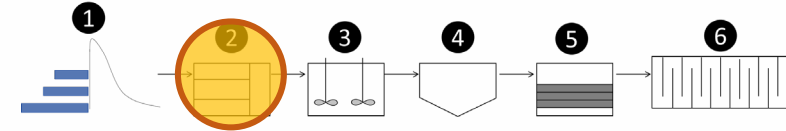
Primary Disinfection Control System



EDSS per la gestió d'una ETAP: Pre-desinfecció



Desenvolupar un model que ajusti els dos desinfectants a la capçalera de l'ETAP



Selecció de l'arquitectura del model

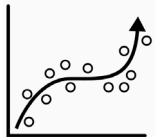
Gestió de dades

Estimació dels paràmetres

Anàlisi de la incertesa

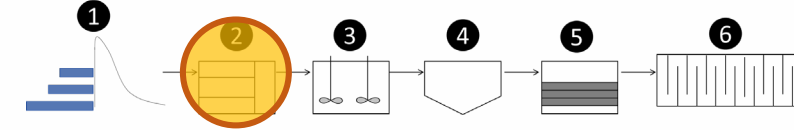
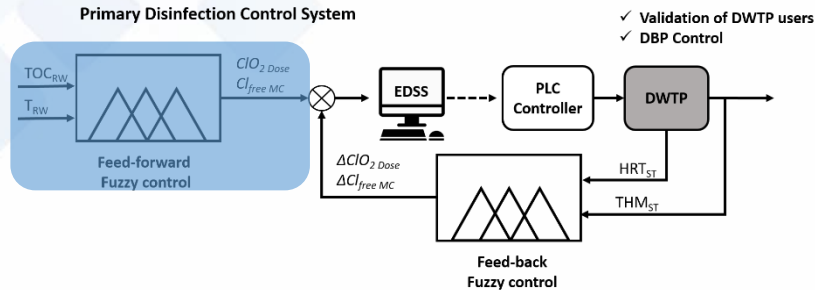
Anàlisi de sensibilitat

Model predictiu



EDSS per la gestió d'una ETAP: Pre-desinfecció

Desenvolupar un model que ajusti els dos desinfectants a la capçalera de l'ETAP



FIS₁

Objectiu:

Avaluar el risc químic (pfTHM) basat amb la qualitat d'entrada i les condicions operacionals

Variables entrada:

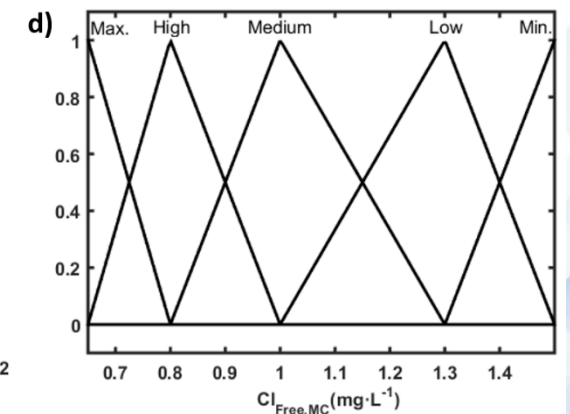
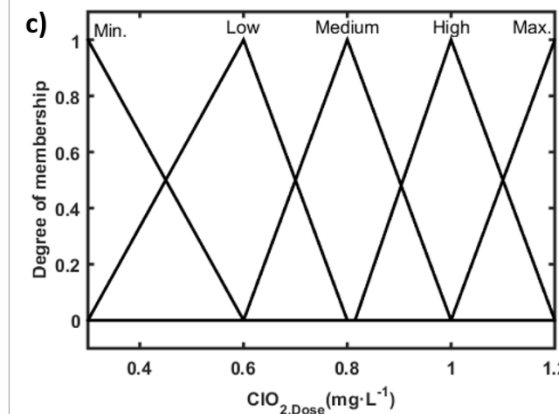
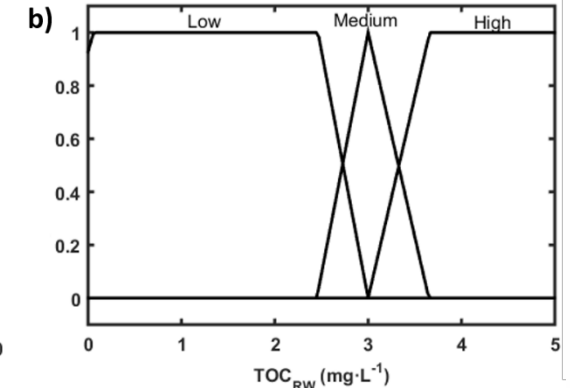
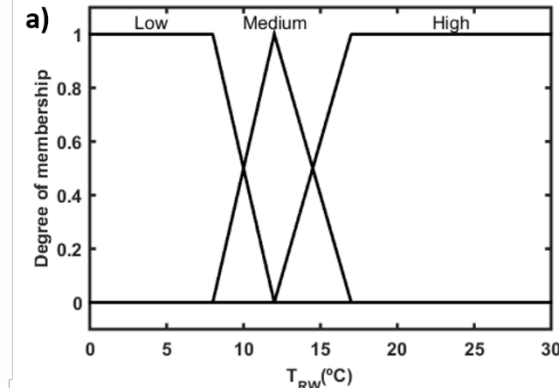
TOC_{RW} , T_{RW}

Sistema inferència:

$(TOC_{RW}, T_{RW} \rightarrow ClO_2 \text{ Dosi}, Cl_{lliure})$

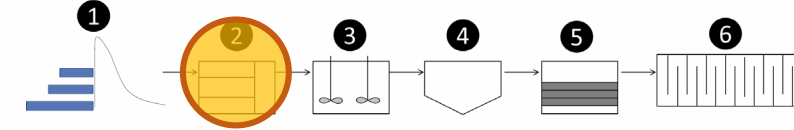
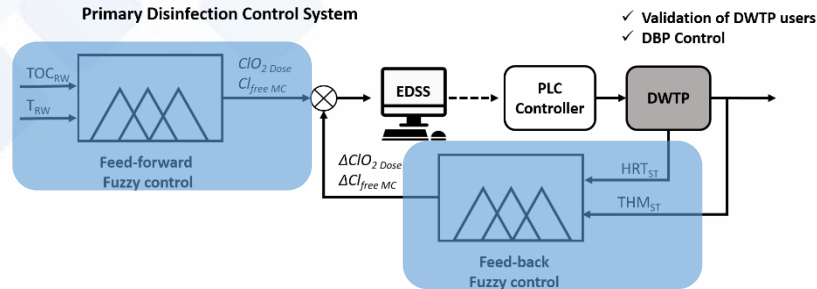
Variables de control:

$ClO_2 \text{ Dosi}$, Cl_{lliure}



EDSS per la gestió d'una ETAP: Pre-desinfecció

 **Desenvolupar un model que ajusti els dos desinfectants a la capçalera de l'ETAP**



FIS₂

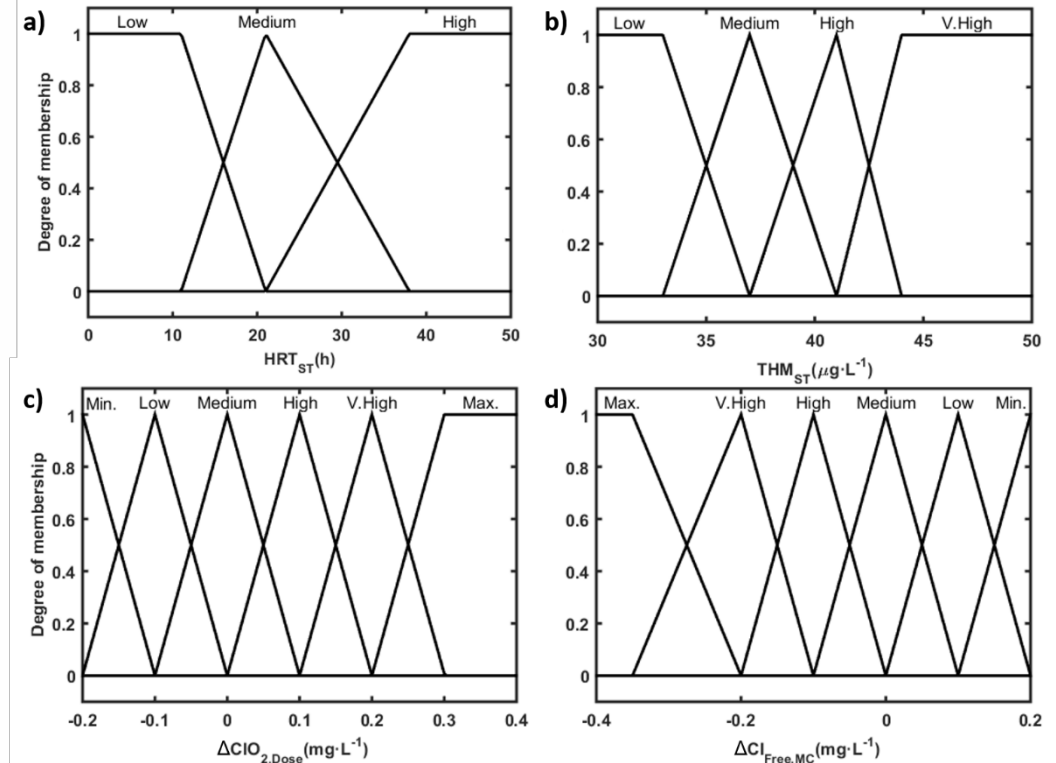
Objectiu:

Ajustar les consignes operacionals basat amb la concentració de THMs i les condicions operacionals

Variables entrada: THM_{ST} , HRT_{ST}

Sistema d'inferència: $(THM_{ST}, HRT_{ST}) \rightarrow (\Delta ClO_{2 \text{ Dose}}, \Delta Cl_{Free})$

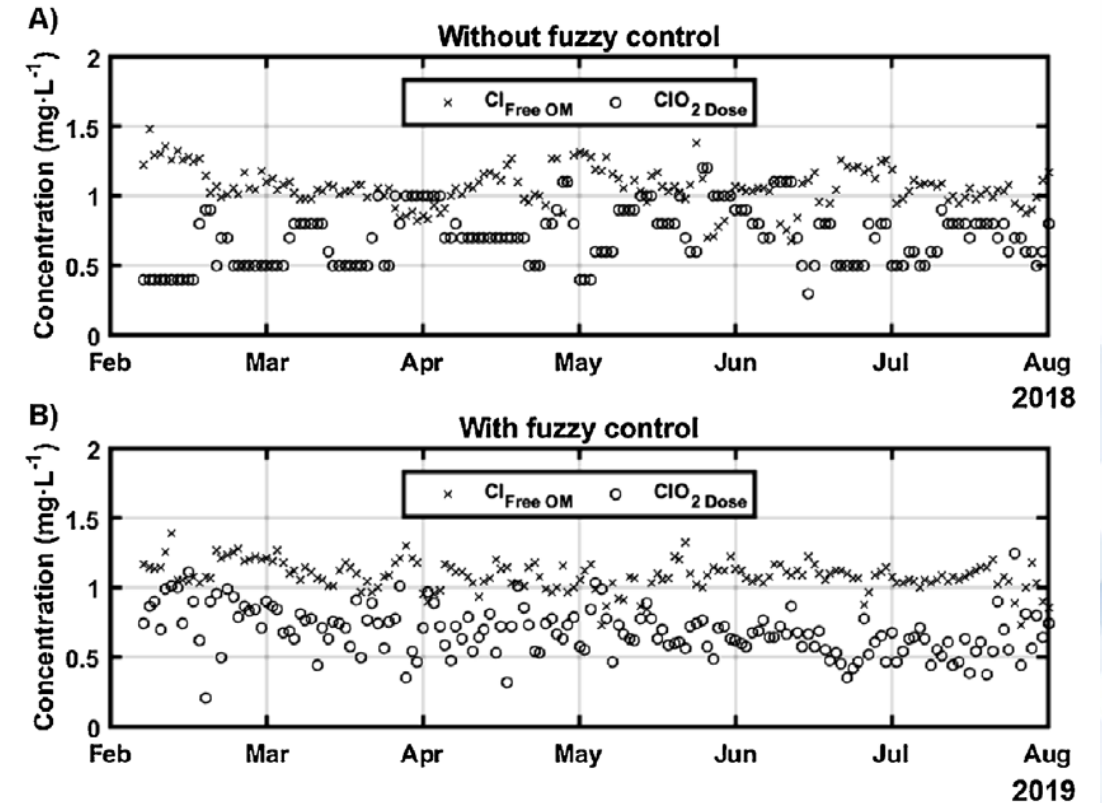
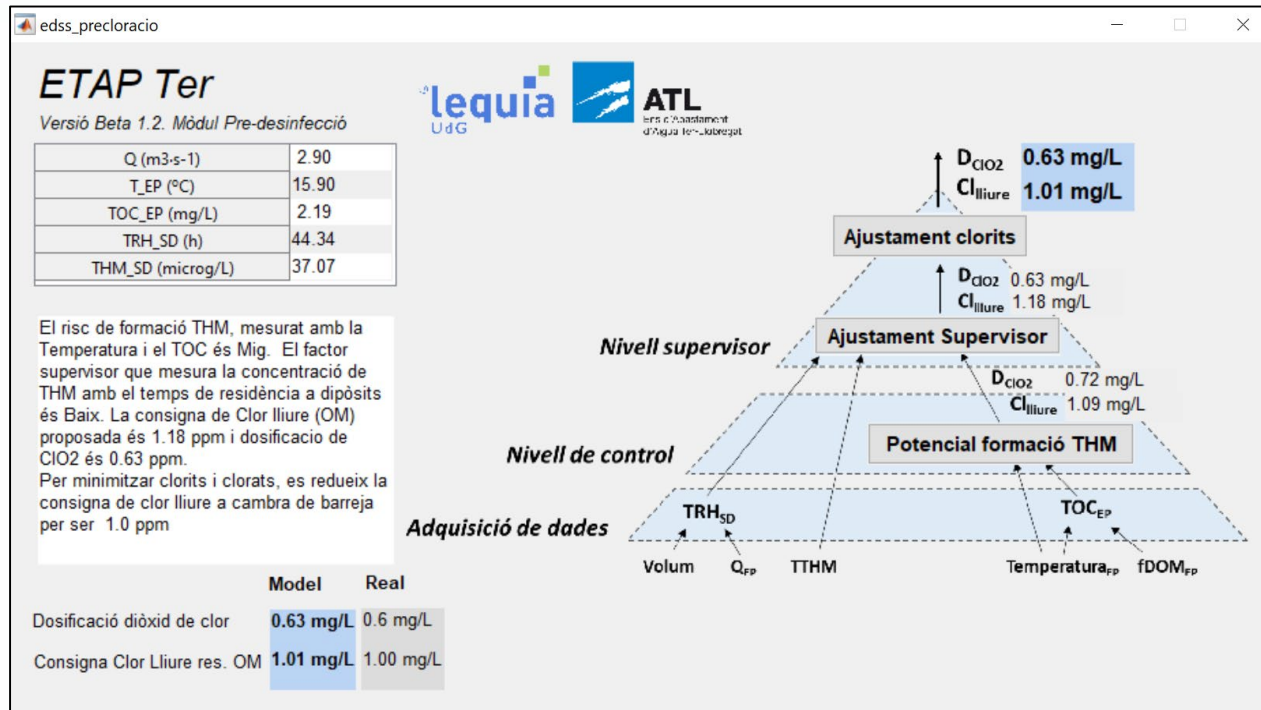
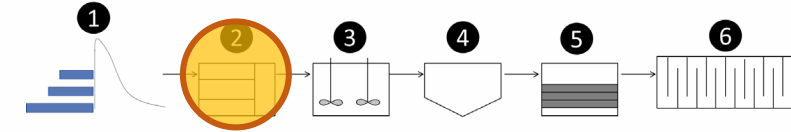
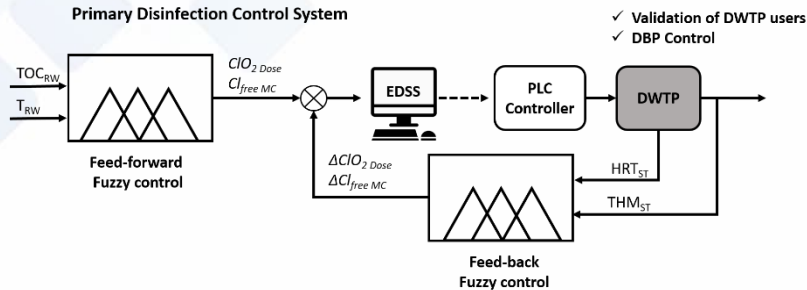
Variables de control: $\Delta ClO_{2 \text{ Dose}}$, ΔCl_{Free}



EDSS per la gestió d'una ETAP: Pre-desinfecció

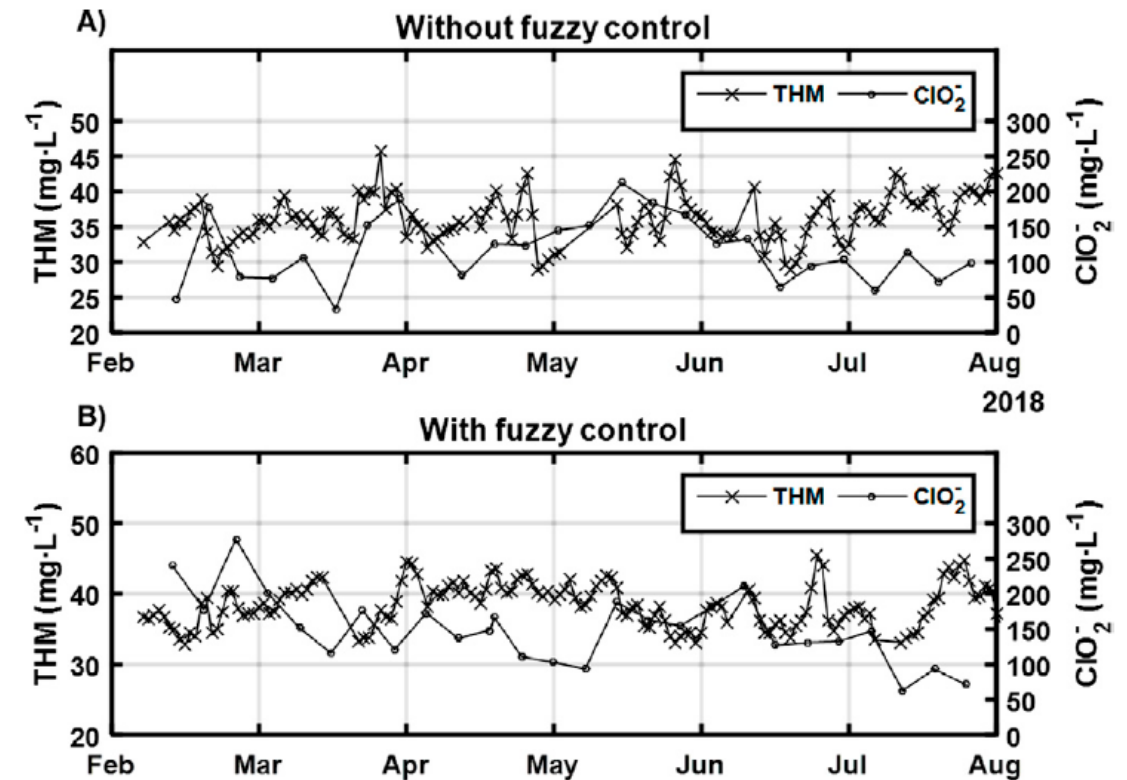
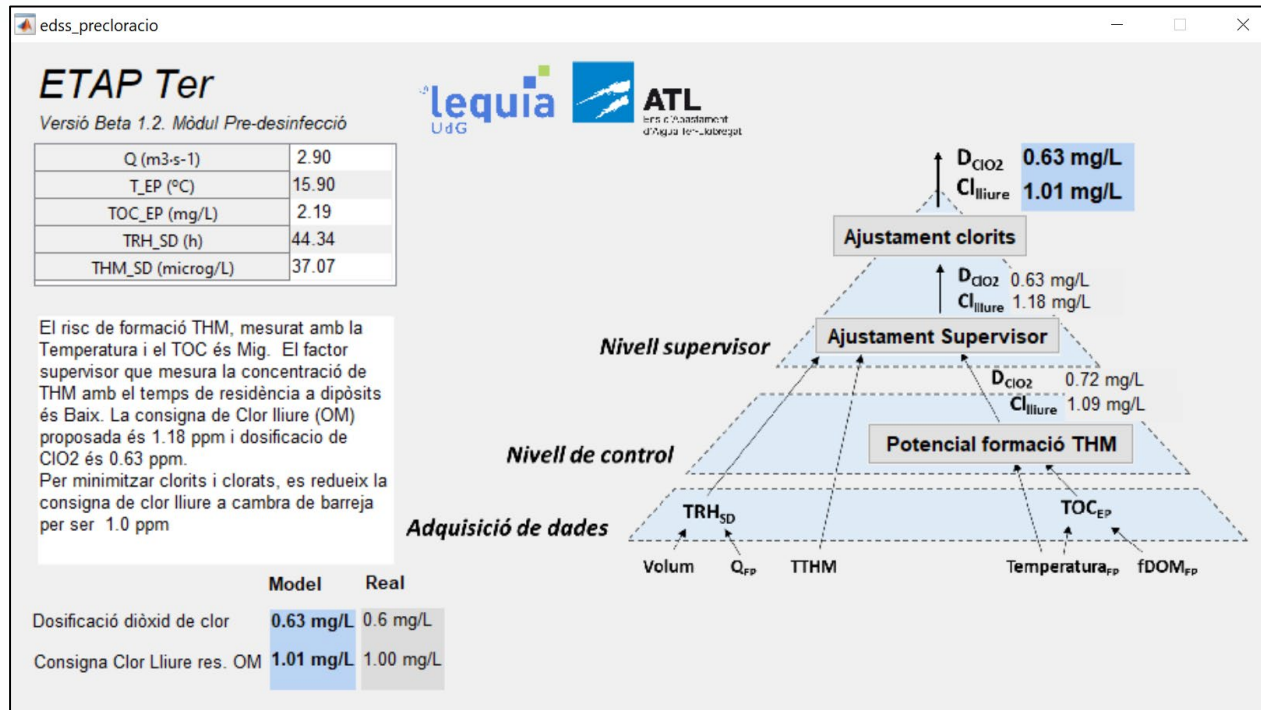
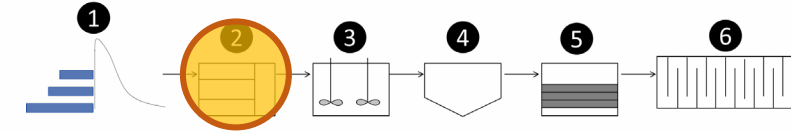
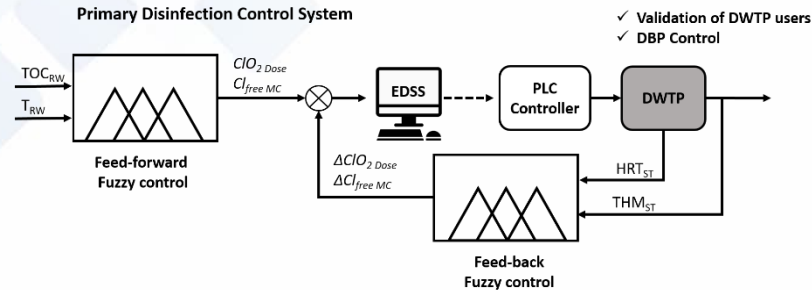
Desenvolupar un model que ajusti els dos desinfectants a la capçalera de l'ETAP

Primary Disinfection Control System



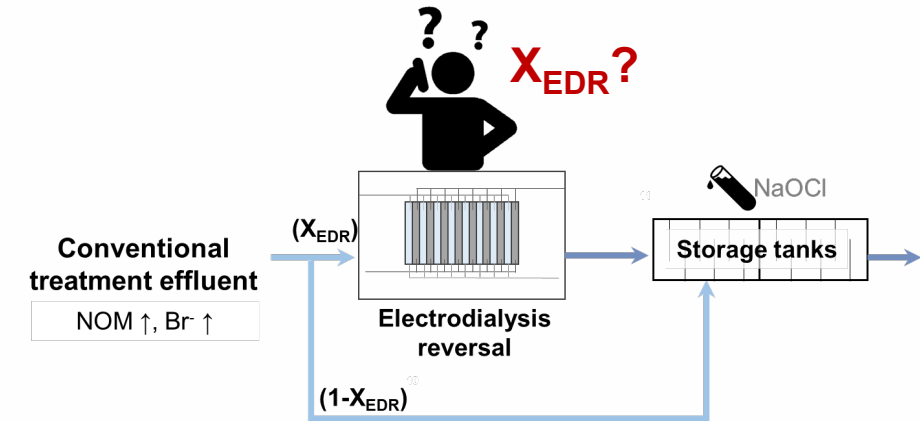
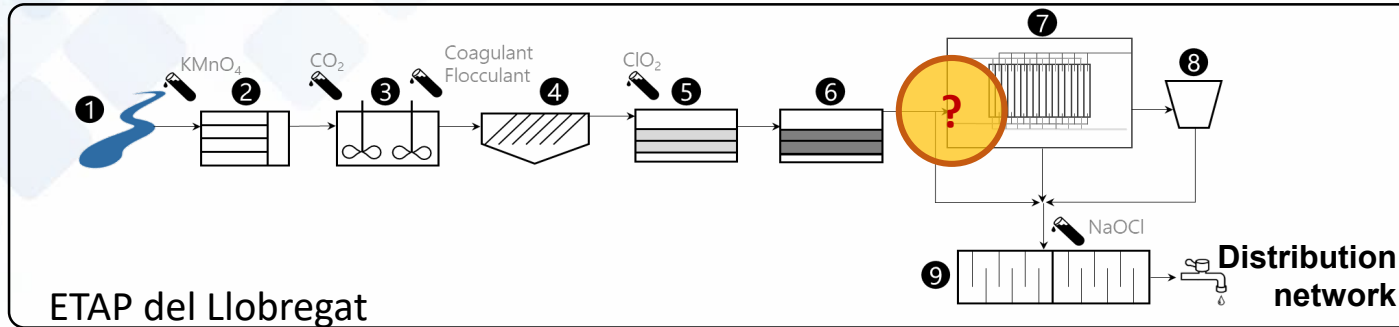
EDSS per la gestió d'una ETAP: Pre-desinfecció

Desenvolupar un model que ajusti els dos desinfectants a la capçalera de l'ETAP



EDSS per la gestió d'una ETAP:

Model predictiu de formació de THM



Desenvolupar un model predictiu per a la formació de THM

- Per vincular el rendiment de l'EDR amb la formació de THM
- Integració de models de suport en temps real en la gestió de l'DWTP

Benchmarking empirical models for THMs formation in drinking water systems: An application for decision support in Barcelona, Spain

Lluís Godo-Pla^{a,b}, Pere Emiliano^b, Manel Poch^a, Fernando Valero^b, Hèctor Monclús^{a,*}

^a LEQUIA, Institute of the Environment, University of Girona, Campus Montilivi, C/Maria Aurèlia Capmany, 69, E-17003, Girona, Catalonia, Spain

^b Ens d'Abastament d'Aigua Ter-Llobregat (ATL), Sant Martí de l'Erm, 30. 08970 Sant Joan Despí, Barcelona, Spain

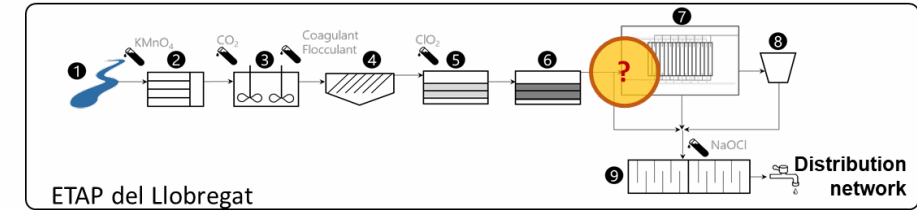


EDSS per la gestió d'una ETAP:

Model predictiu de formació de THM



Desenvolupar un model predictiu per a la formació de THM



Model architecture selection

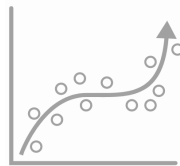
Data handling

Parameter estimation

Uncertainty analysis

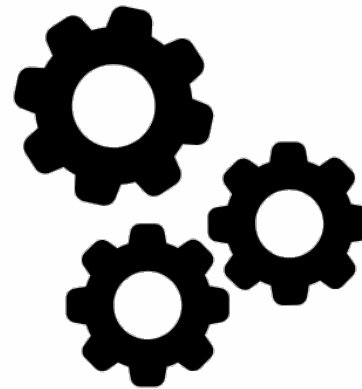
Sensitivity analysis

Predictive model



Model basat en dades

Historical Data 2019-2020
(N=573)

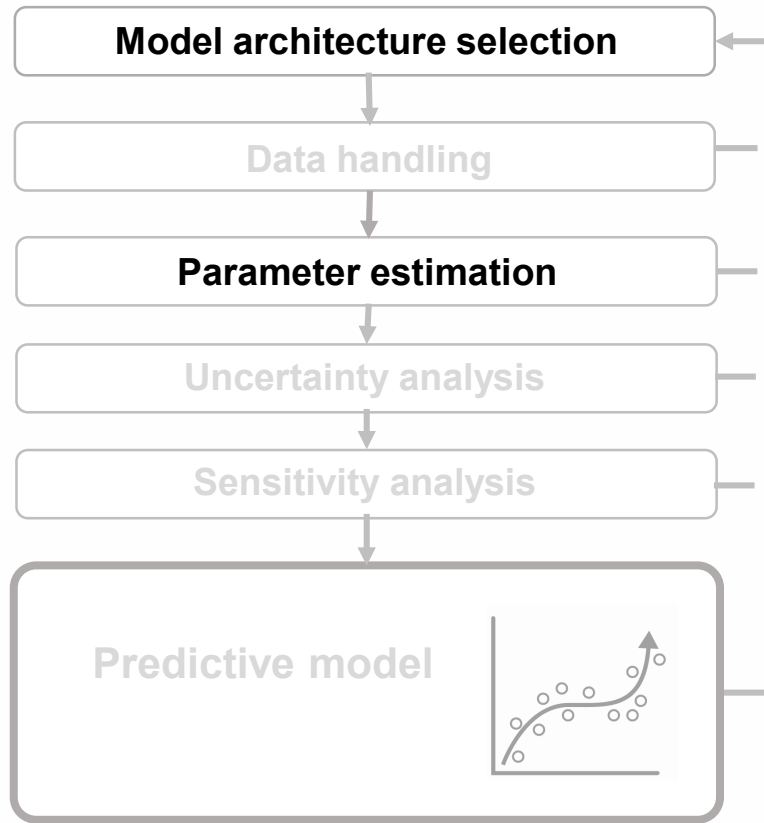
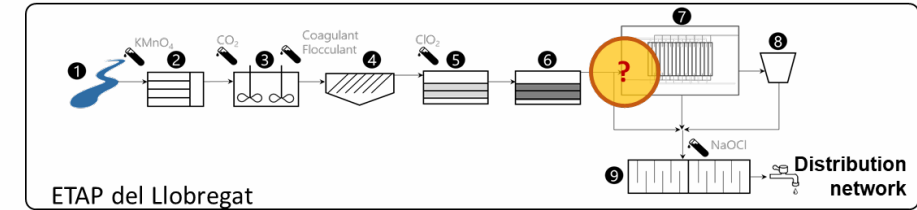


EDSS per la gestió d'una ETAP:

Model predictiu de formació de THM



Desenvolupar un model predictiu per a la formació de THM

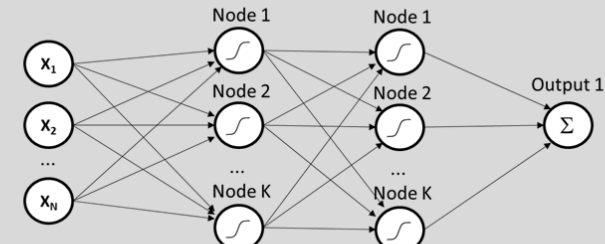
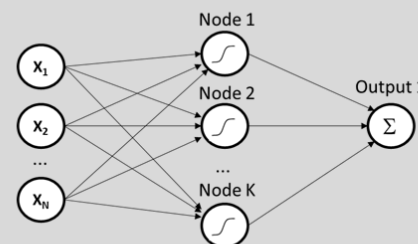


Model basat en dades

- Log-scaled multiple linear regressions (**MLR**)
Chowdhury et al. (2009)

$$[THM] = a \cdot ([UV254]+1)^b \cdot [TOC]^c \cdot [D_C]^d \cdot ([Br]+1)^e \cdot T^f \cdot pH^g \cdot HRT^h$$

- Multi-layer perceptrons (**MLPs**) with different architectures
Kulkarni et al. (2010)

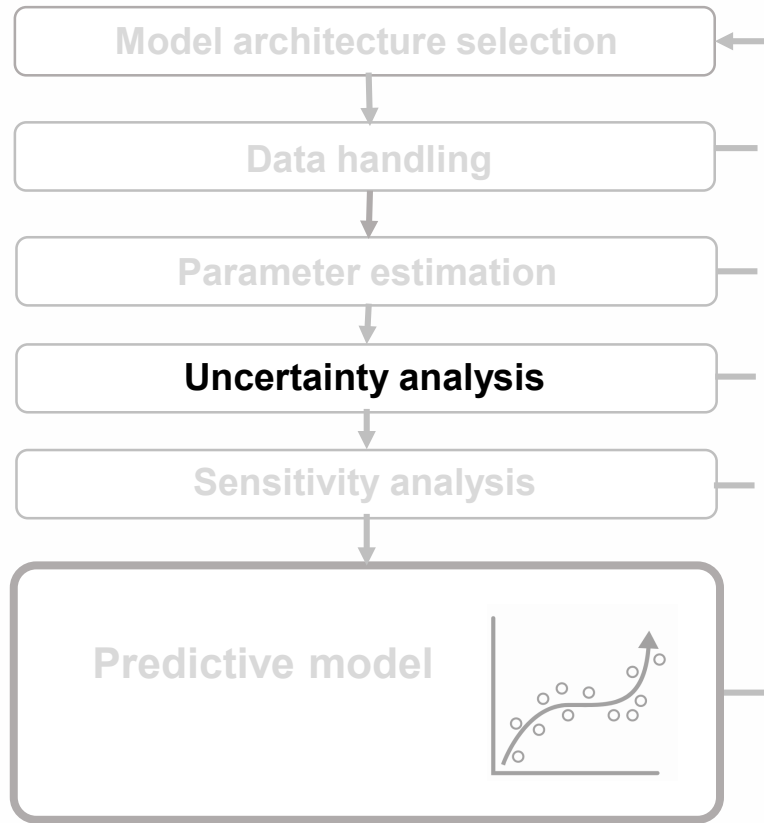
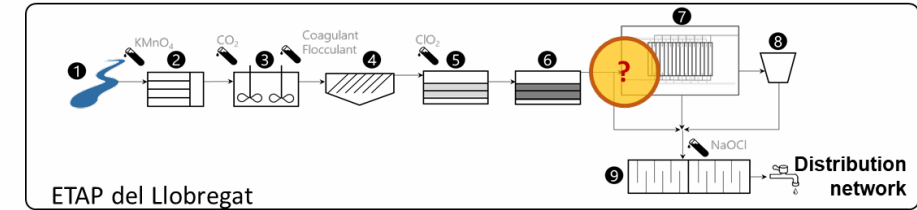


EDSS per la gestió d'una ETAP:

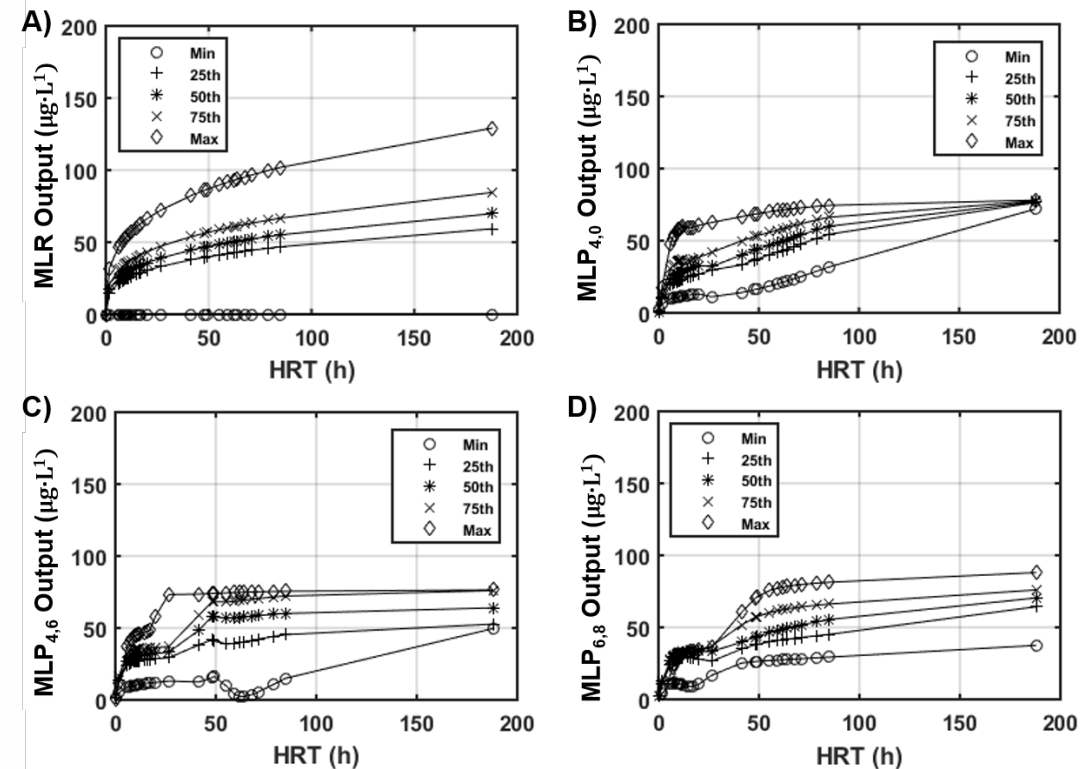
Model predictiu de formació de THM



Desenvolupar un model predictiu per a la formació de THM



Model basat en dades

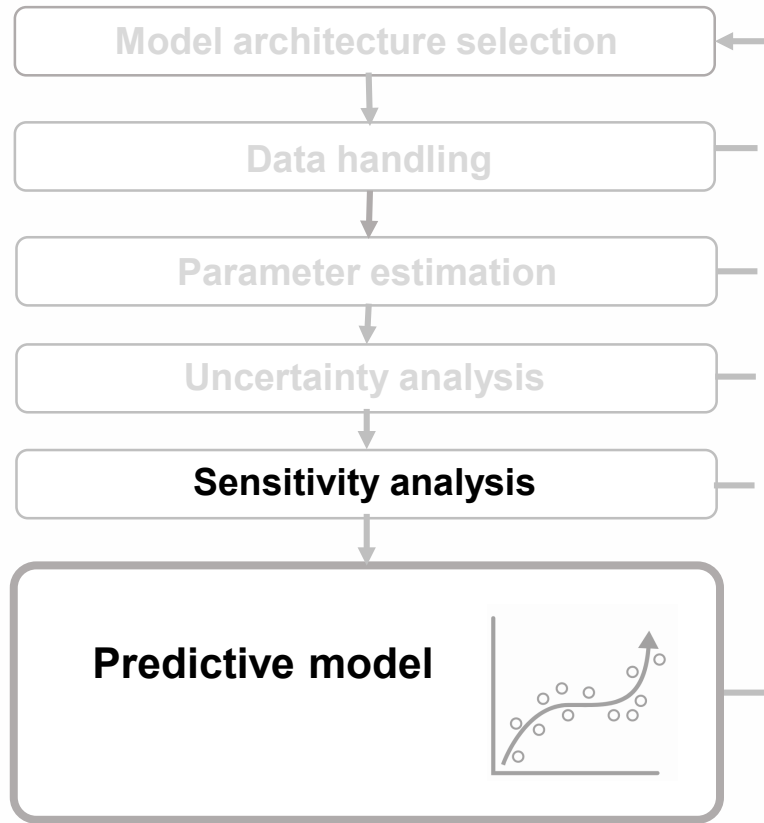
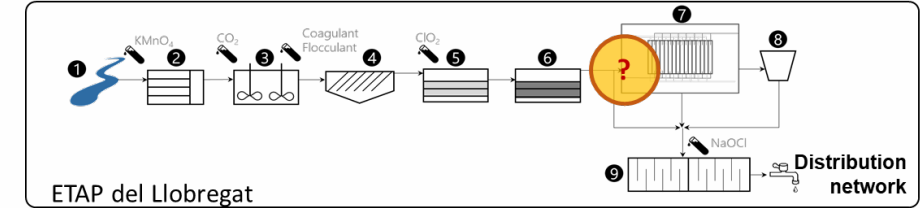


EDSS per la gestió d'una ETAP:

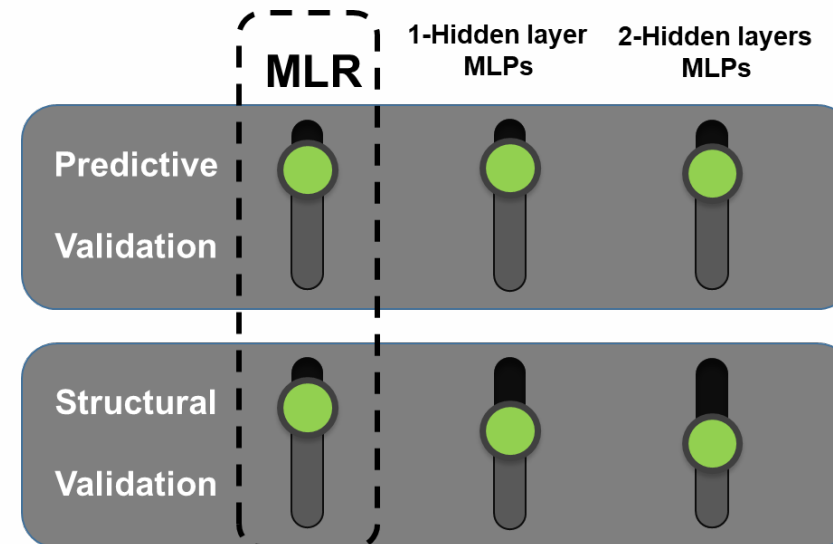
Model predictiu de formació de THM



Desenvolupar un model predictiu per a la formació de THM



Model basat en dades



Complexitat

MLR Model

$R^2 = 0.88$
 $MAE = 4 \mu\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$

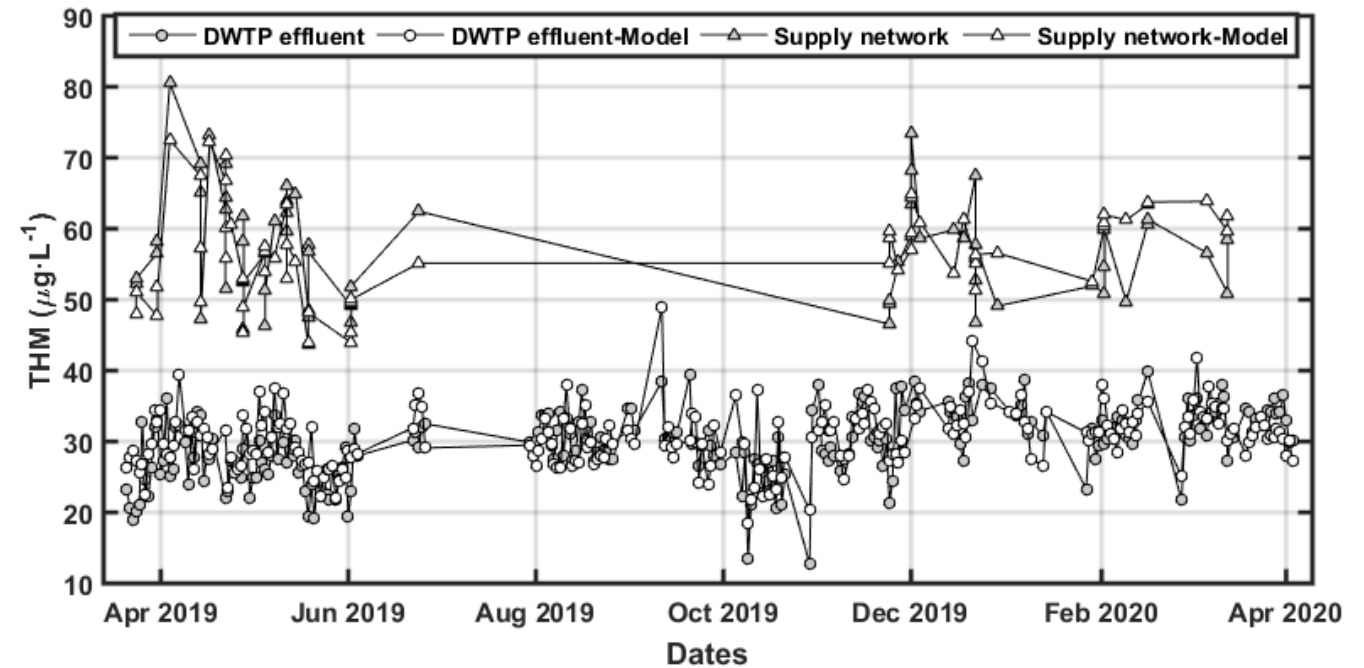
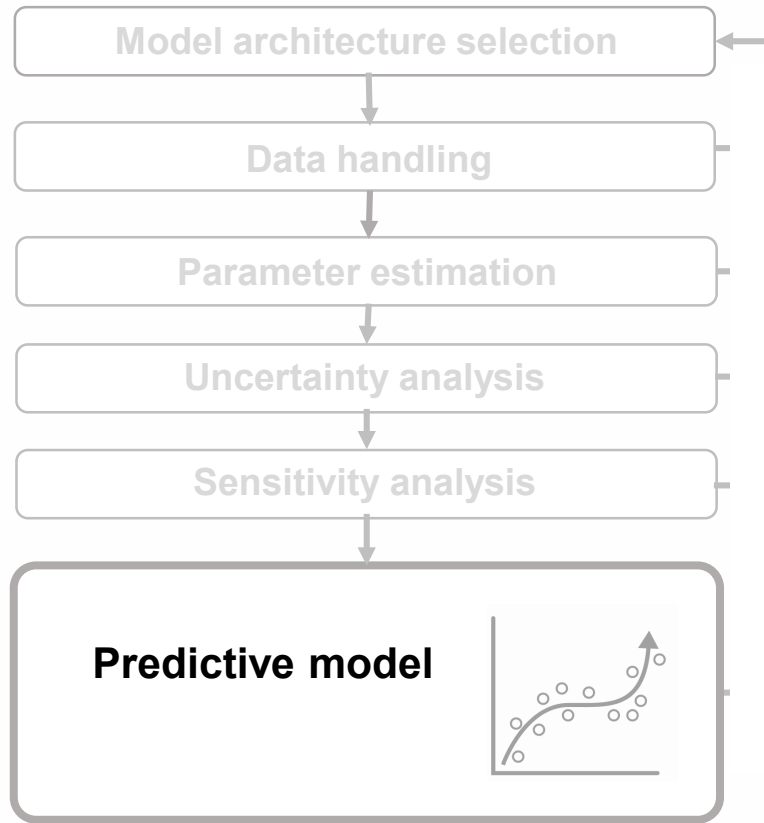
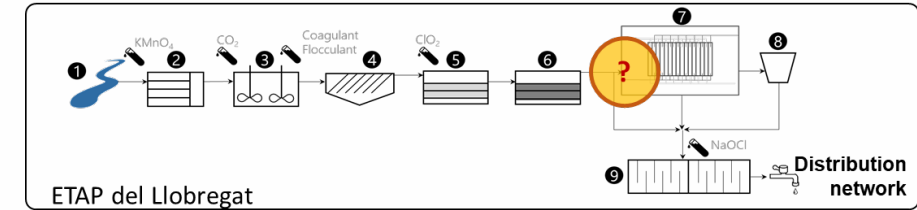
$$[THM] = 6,18 \cdot ([UV254]+1)^{3,64} \cdot [TOC]^{0,462} \cdot [D_{Cl}]^{0,42} \cdot ([Br]+1)^{0,471} \cdot T^{0,169} \cdot pH^{0,048} \cdot HRT^{0,298}$$

EDSS per la gestió d'una ETAP:

Model predictiu de formació de THM



Desenvolupar un model predictiu per a la formació de THM

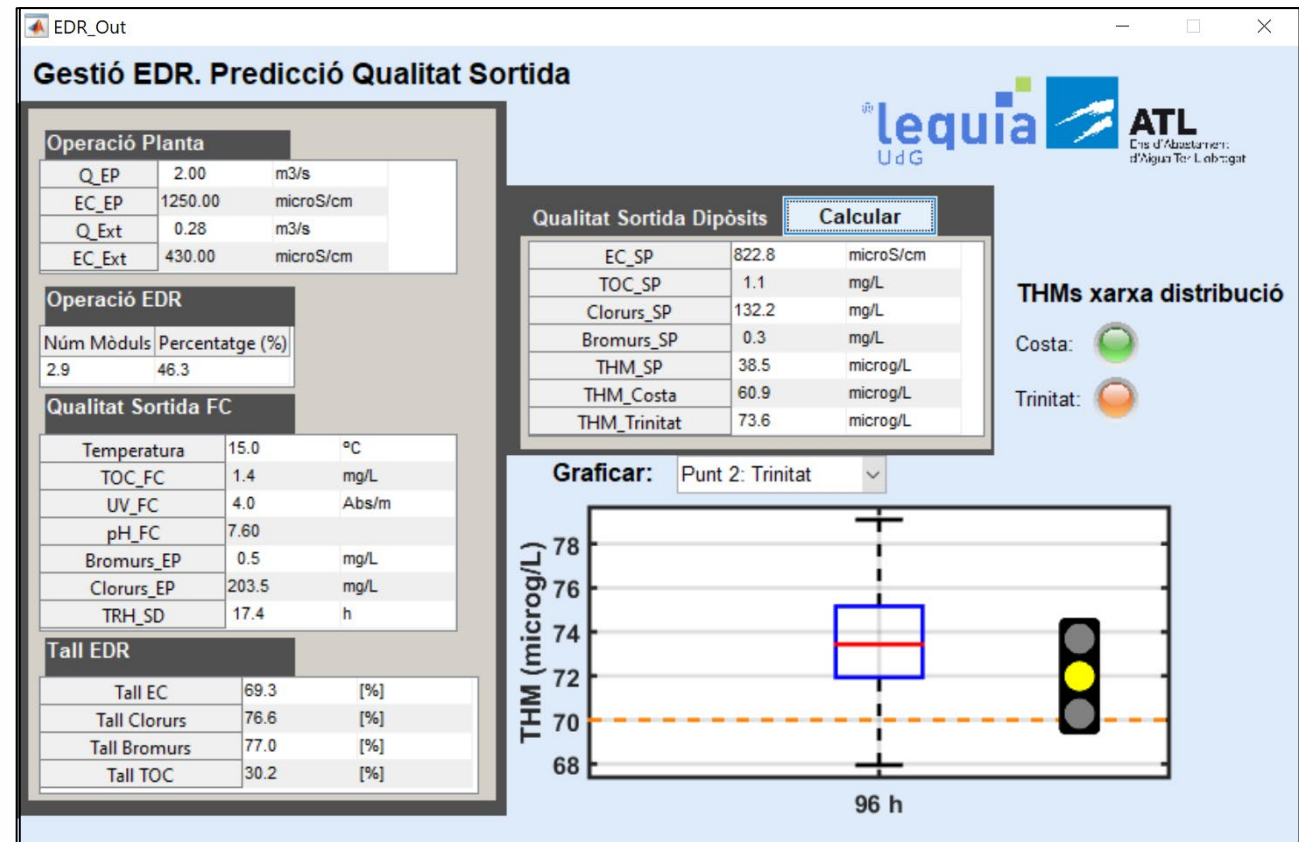
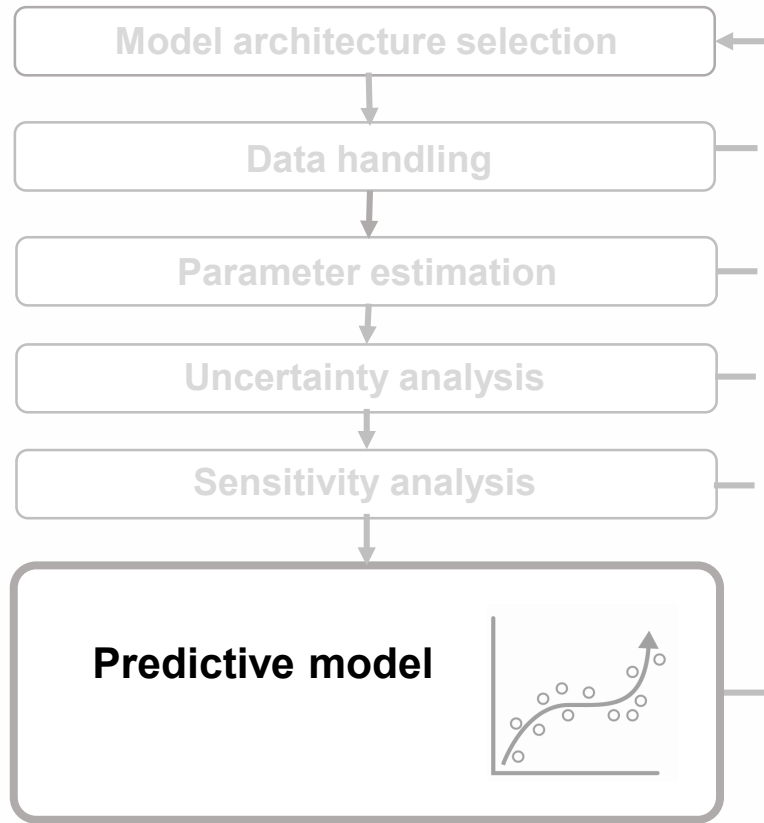
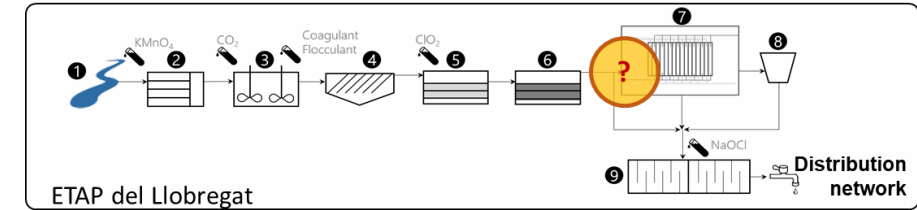


EDSS per la gestió d'una ETAP:

Model predictiu de formació de THM



Desenvolupar un model predictiu per a la formació de THM

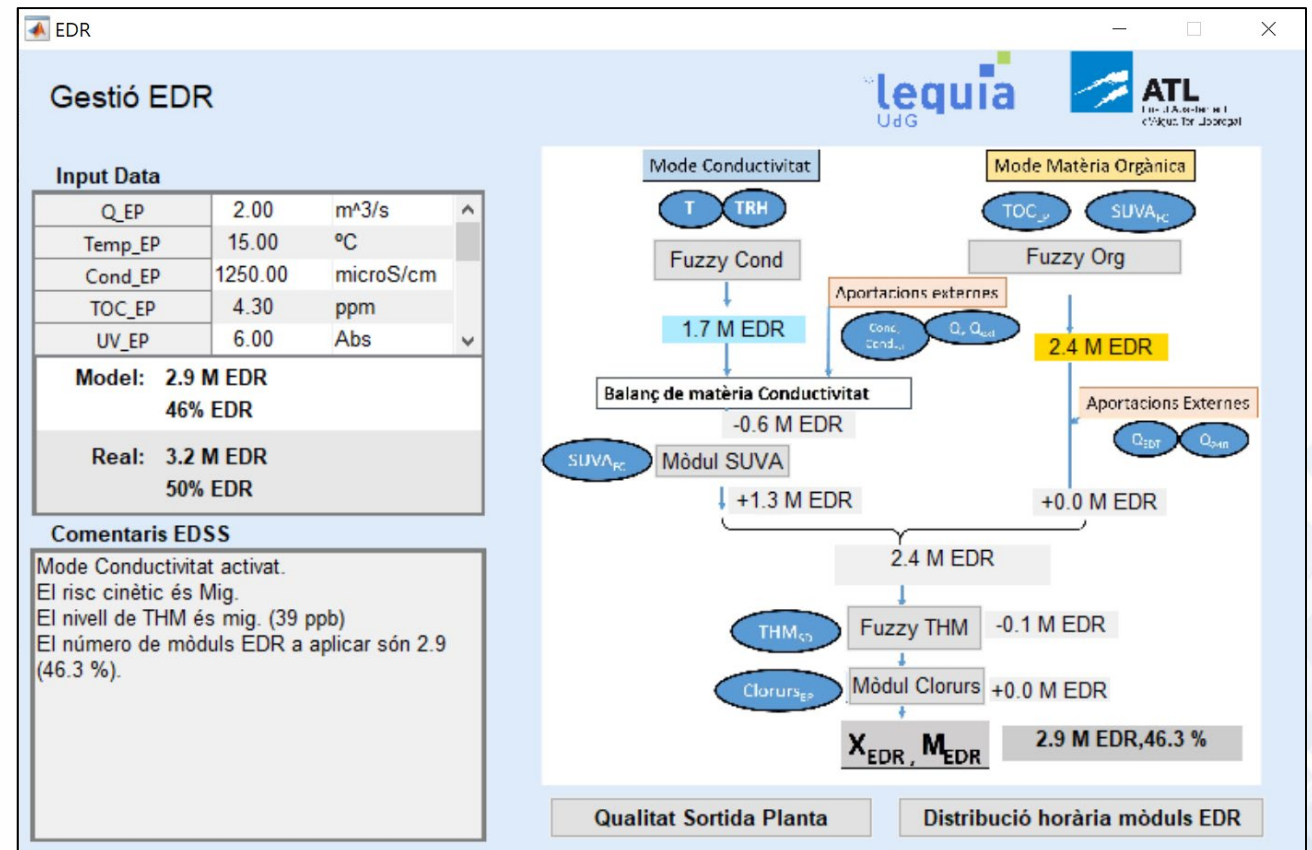
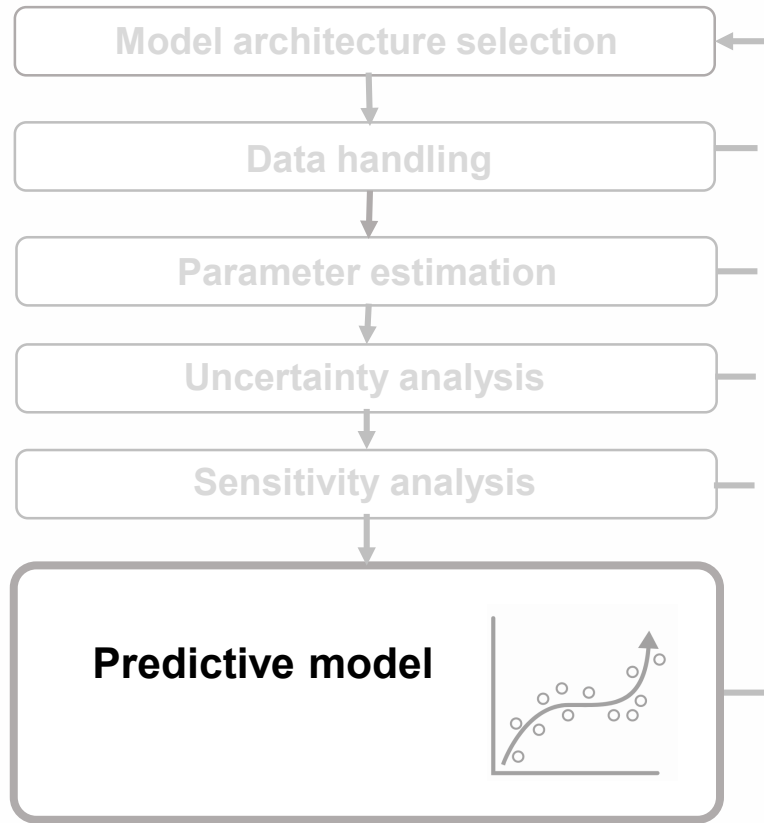
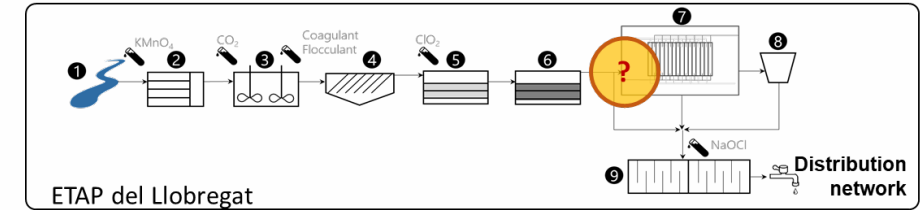


EDSS per la gestió d'una ETAP:

Model predictiu de formació de THM



Desenvolupar un model predictiu per a la formació de THM



EDSS per la gestió de la xarxa de distribució



Desenvolupar un model predictiu per a la formació de THM



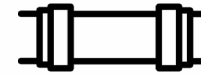
Gestió de la Xarxa/planificació de la demanda/escenaris/temps real?

$$[THM] = 6,18 \cdot ([UV254]+1)^{3,64} \cdot [TOC]^{0,462} \cdot [D_C]^{0,42} \cdot ([Br]+1)^{0,471} \cdot T^{0,169} \cdot pH^{0,048} \cdot HRT^{0,298}$$

EDSS per la gestió de la xarxa de distribució



> 100 municipis



> 1500 km



> 5.5M habitants



> 200 dipòsits

Demanda

Mix de producció

Limitacions de
producció

Qualitat

Meteorologia

Incidències

Costos

NOM fractionation by HPSEC-DAD-OCD for predicting trihalomethane disinfection by-product formation potential in full-scale drinking water treatment plants

Meritxell Valenti-Quiroga^a, Pepus Daunis-i-Estadella^b, Pere Emiliano^c, Fernando Valero^c, Maria J. Martin^{a,*}



In-depth analysis of natural organic matter fractions in drinking water treatment performance: Fate and role of humic substances in trihalomethanes formation potential

Meritxell Valenti-Quiroga^a, Alba Cabrera-Codony^a, Pere Emiliano^b, Fernando Valero^b, Hèctor Monclús^a, Maria J. Martin^{a,*}



SIZE EXCLUSION CHROMATOGRAPHY SET-UP

LC-OCD-OND

Tailor-made equipment for NOM fractionation ([DOC Labor](#))



- | # | component |
|----|--|
| 1 | Injection valve with dilutor beneath |
| 2 | Mobile phase with Acidification behind |
| 3 | Autosampler with cooled 36-sample rack |
| 4 | NDIR-detector |
| 5 | TFR reactor |
| 6 | DOCOX- and DONOX-reactor |
| 7 | Manual injection valve |
| 8 | Peltier cooler |
| 9 | ON-detector |
| 10 | UV-detector |
| 11 | HPLC-pump |
| 12 | TFR engine block |

Column: TSK HW 50S, 250 mm x 20 mm, Toso

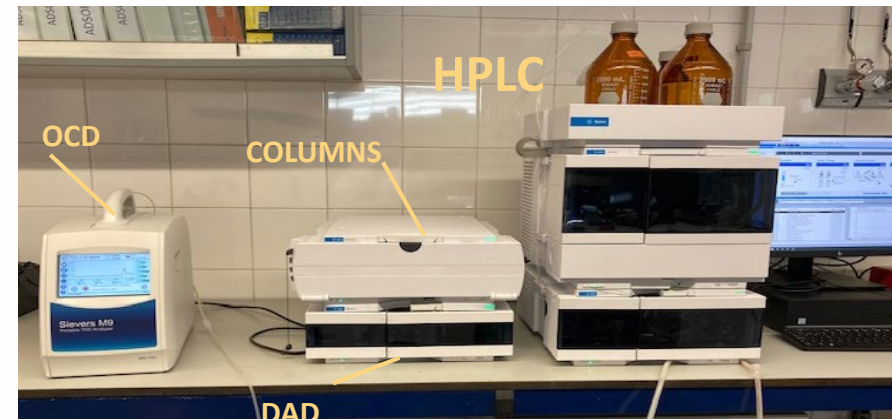
Flow: 1.1 ml/min

Mobile phase: 6.59 pH phosphate buffer 22.5 mM

Detectors: UVD (A_{254}) + OND + OCD

HPSEC-DAD-OCD

Commercial multipurpose HPLC equipment. Possible hyphenation of commercially-available liquid chromatography equipment and an organic carbon detector



Columns: PL Aquagel-OH (7.5 x 300, 5 μ m) x PL Aquagel- OH MIXED- M (7.5 x 300 mm, 8 μ m), Agilent

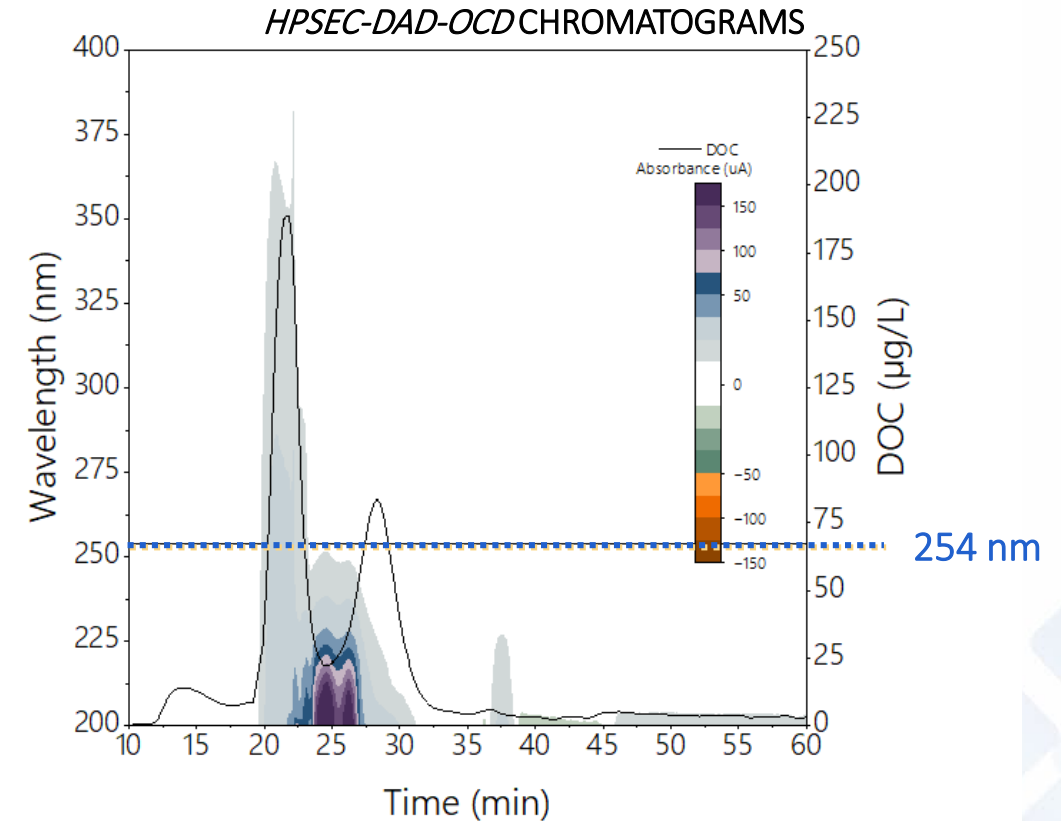
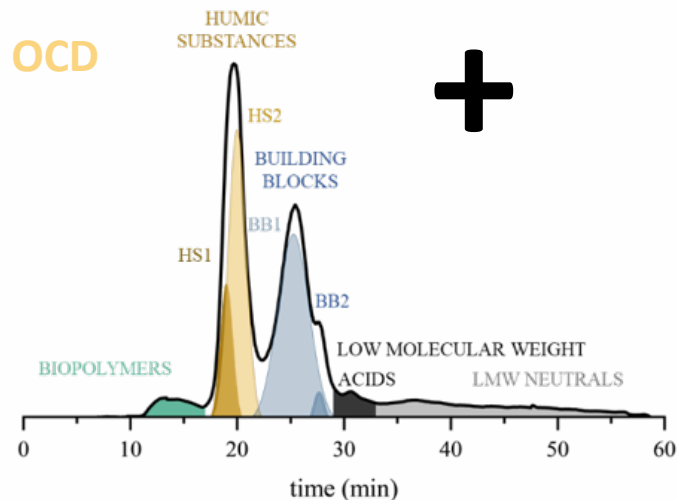
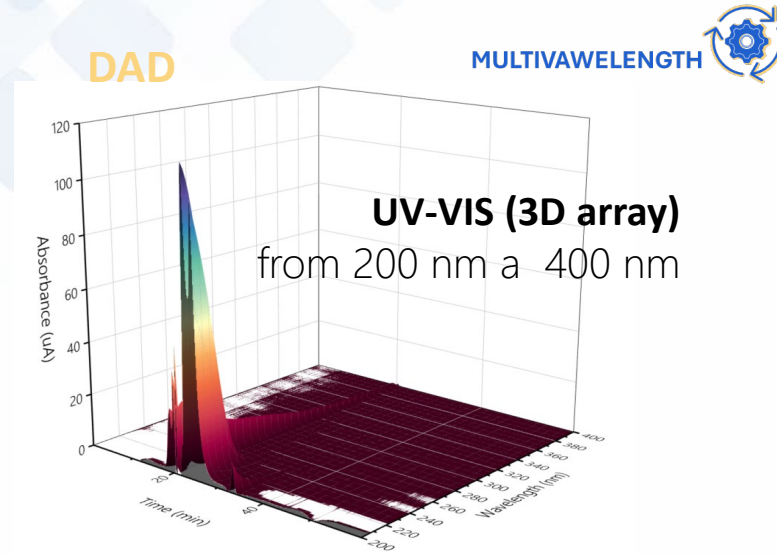
Flow: 0.75 ml/min

Mobile phase: 6.8 pH phosphate buffer 4 mM

Detection: DAD (whole sweep from 190 nm to 600 nm) + OCD

Fraccionament de la matèria orgànica

SIZE EXCLUSION CHROMATOGRAPHY SET-UP



Fraccionament de la matèria orgànica

HPSEC-DAD-OCD	$S_{HWL} - S_{LWL}$ Hybrid	0,99	0,99	0,99	0,99	0,98	0,99	0,96	0,93	0,89	0,96	0,95	0,95	0,86	0,85	0,83	0,98	0,99	0,99	0,98	0,98	0,98	0,97	0,97	0,97	0,97	0,96	0,95													
	$A_{254} - S_{LWL}$ Hybrid	0,97	0,96	0,97	0,97	0,97	0,97	0,92	0,95	0,98	0,98	0,98	0,98	0,90	0,95	0,97	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,99	0,97	0,99	0,97													
	S_{HWL}	0,98	0,98	0,97	0,98	0,97	0,98	0,95	0,92	0,89	0,92	0,89	0,90	0,86	0,84	0,81	0,96	0,97	0,97	0,96	0,97	0,97	0,95	0,96	0,96	0,80	0,86	0,86													
	$S_{350-380}$	N			N							H						N																							
	S_{LWL}	0,96	0,96	0,96	0,97	0,96	0,97	0,92	0,89	0,88	0,95	0,94	0,95	0,72	0,74	0,74	0,98	0,98	0,98	0,96	0,96	0,96	0,97	0,98	0,97	0,87	0,88	0,85													
	$S_{206-240}$	N																N																							
	A_{254}	0,97	0,96	0,97	0,97	0,96	0,97	0,91	0,88	0,85	0,93	0,90	0,90	0,79	0,79	0,77	0,95	0,95	0,95	0,97	0,95	0,97	0,87	0,91	0,88	0,75	0,82	0,74													
										H																															
	DOC	0,95	0,97	0,97	0,94	0,96	0,95	0,99	0,99	0,98	0,84	0,87	0,86	0,98	0,95	0,93	0,99	0,99	0,99	0,99	0,98	0,98	0,98	0,98	0,99	0,99	0,95	0,97	0,96												
																			N																						
LC-OCD	0,93	0,93	0,95	0,93	0,93	0,93	0,96	0,96	0,97	0,86	0,85	0,85	0,98	0,99	0,95	0,98	0,98	0,98	0,96	0,98	0,97	0,99	0,99	0,99	0,94	0,95	0,95														
BULK	SUVA	0,79	0,77	0,80	0,76	0,74	0,76	0,75	0,68	0,70	0,70	0,70	0,70	0,62	0,61	0,65	0,92	0,92	0,92	0,85	0,86	0,85	0,96	0,97	0,97	0,81	0,87	0,82													
	DOC	0,86	0,85	0,88	0,82	0,81	0,83	0,88	0,80	0,81	0,70	0,69	0,69	0,80	0,78	0,79	0,87	0,89	0,90	0,84	0,87	0,88	0,85	0,88	0,88	0,58	0,63	0,88													
	A_{254}	0,94	0,92	0,94	0,92	0,89	0,91	0,89	0,84	0,83	0,85	0,83	0,83	0,70	0,70	0,66	0,94	0,93	0,93	0,94	0,93	0,93	0,86	0,89	0,84	0,53	0,59	0,84													
		24	48	72	24	48	72	24	48	72	24	48	72	24	48	72	24	48	72	24	48	72	24	48	72	24	48	72													
		TTHM			CHBr ₂ Cl			CHBrCl ₂			CHBr ₃			CHCl ₃			TTHM			CHCl ₃			CHBrCl ₂			CHBr ₂ Cl															
		(A) PTLL																											(B) PTT+PTC												

Coeficients d'ajust de les diferents mesures de THM amb els models MLR basats amb les dades de les fraccions (HPSEC i LC)

L'ús de la intel·ligència artificial aplicada a la gestió de l'aigua potable

Hèctor Monclús