

RESUM

En aquest estudi s'ha desenvolupat un model per a l'avaluació del risc de les aigües efluentes de les depuradores de Catalunya amb més de 100.000 habitants equivalents. Les dades experimentals utilitzades en aquest treball provenen del Consell Superior d'Investigacions Científiques de Barcelona (CSIC) en el marc d'un projecte en col·laboració amb la Agència Catalana de l'Aigua (ACA).

Les aigües efluentes de les depuradores analitzades contenen substàncies de procedència molt diversa (metalls pesants, anions, organoclorats volàtils, organoclorats semivolàtils, hidrocarburs aromàtics volàtils, hidrocarburs aromàtics policíclics, herbicides, disruptors endocrins, fenols, compostos orgànics halogenats i compostos organoestànics). En total s'han analitzat 42 substàncies diferents en 22 depuradores repartides per tot Catalunya. S'han realitzat tres campanyes de recollida de mostres, en el 2008, 2009 i 2010.

El risc d'aquestes aigües efluentes de depuradora ha estat avaluat mitjançant dos models: el desenvolupat per l'Institut Fraunhofer (COMMPS) i el model desenvolupat en aquest projecte mitjançant lògica difusa.

La metodologia COMMPS permet establir la prioritat de les substàncies analitzades a partir de dos índex: el d'exposició i el d'efectes. En aquest projecte, s'han ampliat algunes de les característiques del mètode COMMPS, fent-lo capaç de caracteritzar el risc i generant un índex de situació prioritzant així les depuradores en funció del risc que tenen.

La lògica difusa permet tractar la incertesa associada a les dades de caràcter ambiental i amb el model desenvolupat en aquest projecte, es pot establir el risc de les substàncies presents en les aigües efluentes de les depuradores per la salut humana i pel medi ambient. Pel model de lògica difusa, ha estat necessari utilitzar la Fuzzy Toolbox de Matlab, que ha permès crear un model amb tres sistemes FIS de tipus Mamdani.

Els resultats dels dos models han estat comparats. Els valors de risc obtinguts per cada substància i depuradora mitjançant lògica difusa són lleugerament més conservadors que els del COMMPS. Això es deu a diverses raons relacionades amb variacions en el model de lògica difusa respecte el COMMPS entre les que destaquen: la introducció d'una nova variable (persistència), un canvi en l'estructura de les variables i l'existència de solapament en els rangs de les variables.

Finalment, els resultats obtinguts amb la metodologia del projecte, demostren que l'avaluació qualitativa del risc de les substàncies és possible mitjançant la lògica difusa i que per tant, els valors numèrics i dades bibliogràfiques poden traduir-se a uns conjunts difusos, que tracten millor les incerteses i ambigüitats associades a les variables ambientals i ofereixen com a producte final un concepte de fàcil comprensió per la ment humana com pot ser el risc Baix, Mitjà o Alt. Una informació molt útil per prendre decisions ambientals i alhora extreta d'una metodologia de fàcil ús i interpretació.





Agraïments

Primer de tot, vull agrair al CERTEC (Centre d'Estudis del Risc Tecnològic) el qual m'ha permès la realització del Projecte, especialment, a la directora Rosa Mari, a la post doctorant Alba i els companys Edgar i Stefano. Agraeixo també la participació externa de tots aquells han fet possible aquest projecte i especialment al Dr. Antoni Ginebreda del CSIC de Barcelona. Finalment, vull donar les gràcies a totes aquelles persones, familiars i amics que m'han donat suport i ajuda durant la seva realització.





ÍNDEX

RESUM	1
Agraïments	3
ÍNDEX	5
1 INTRODUCCIÓ	9
1.1 Objectius del projecte	10
1.2 Abast del projecte	10
1.3 Normativa	13
1.3.1 Regulació E-PRTR	13
1.3.2 Directiva 2008/105/CE.....	14
1.3.3 Reial Decret 508/2007	14
1.4 Estructura	14
1.5 Motivació	15
2 ZONA D'ESTUDI I DADES EXPERIMENTALS	16
2.1 Zona d'estudi	16
2.2 Dades experimentals	18
3 MÈTODE COMMPS	20
3.1 Introducció	20
3.2 Descripció del la metodologia del COMMPS	20
3.2.1 Elaboració d'una llista de substàncies tingudes en compte per la prioritització	20
3.2.2 Càlcul de l'índex d'exposició.....	21
3.2.3 Càlcul de l'índex d'efectes	21
3.2.4 Computació de l'índex de prioritat.....	21
3.2.5 Recomanació de les substàncies prioritàries a les autoritats	22
4 LA Lògica DIFUSA	23
4.1 Evolució històrica de la lògica difusa	23



4.2	Lògica difusa vers lògica clàssica	24
4.3	Conjunts clàssics i Conjunts Difusos	25
4.3.1	Conjunts clàssics o nítids	25
4.3.2	Conjunts difusos	26
4.4	Funció de pertinença (MF).....	28
4.4.1	Definició.....	28
4.4.2	Tipus de funcions de pertinença.....	28
4.5	Propietats i operacions dels conjunts difusos	32
4.6	Procediments difusos.....	33
4.6.1	Avaluació sintètica difusa (FSE)	33
4.6.2	Sistema d'inferència difusa (FIS).....	35
5	METODOLOGIA.....	37
5.1	Criteris establerts.....	37
5.1.1	Criteris de selecció de les substàncies	37
5.1.2	Criteris relacionats amb el COMMPS.....	38
5.1.3	Criteris relacionats amb lògica difusa	39
5.2	Procediment de resolució mitjançant COMMPS	39
5.2.1	Índex de prioritat	40
5.2.2	Índex d'exposició	40
5.2.3	Índex d'efectes	40
5.2.4	Exemple de procediment de COMMPS	43
5.2.5	Índex de situació.....	46
5.3	Procediment de resolució mitjançant el model de lògica difusa	46
5.3.1	Definició de les variables del sistema	47
5.3.2	Desenvolupament dels sistemes FIS del model de risc	52
5.3.3	Els pesos de les variables.....	64
5.3.4	Exemple de procediment mitjançant lògica difusa	65
6	RESULTATS I DISCUSSIÓ	69



6.1	Índex de situació de les depuradores estudiades.....	69
6.1.1	Resultats any 2008.....	69
6.1.2	Resultats any 2009.....	70
6.1.3	Any 2010.....	71
6.1.4	Mitjana de les substàncies comuns	73
6.2	Categorització del risc	74
6.3	Comparació entre COMMPS i lògica difusa per substàncies comunes	76
6.4	Exemple Besòs.....	77
6.5	Comparació de l'índex de situació normalitzat.....	79
7	CONCLUSIONS	82
8	NOMENCLATURA.....	86
	BIBLIOGRAFIA	88





1 INTRODUCCIÓ

La relació de l'home amb l'aigua, en totes les societats i en varis processos de desenvolupament socioeconòmic, ha dictat les formes de percebre l'aigua com a privilegi de la natura, com un recurs natural quasi no renovable. El desenvolupament dels pobles ha estat estretament vinculat amb l'aigua, ja que aquest és un factor important en la selecció d'espais per ubicar plantes industrials de tota mena i el desenvolupament dels centres urbans i agropecuaris.

L'aigua és el component més abundant i important del nostre planeta; el fet que tots els éssers vius depenguin de la existència de l'aigua dóna una pauta per percebre la seva importància vital. La major part de la superfície de la Terra està composta d'aigua, però només una mica del 2% és aigua dolça i la majoria es troba als pols, en estat de gel, o a dipòsits subterranis molt profunds ([DARBRA, 2011](#)).

L'aigua promou o frena el creixement econòmic i el desenvolupament social d'una regió. També afecta els patrons de vida i cultura regionals, pel que se la reconeix com a un agent preponderant al desenvolupament de les comunitats. En aquest sentit, és un factor indispensable al procés de desenvolupament regional o nacional.

El creixement demogràfic i econòmic, l'absència històrica de criteris de conservació i aprofitament sostenible dels recursos naturals, el creixement dels règims de demanda d'aigua a l'àmbit regional i la contaminació del líquid han ocasionat en diversos casos la seva escassetat.

Això condueix a una competència pel recurs, que s'aguditzava als anys de sequeres, desemboca en conflictes que afecten a les comunitats i al seu desenvolupament actual, i impacten negativament a la seva viabilitat futura.

Així, el control, l'aprofitament racional i la preservació de l'aigua als nivells nacional, regional i local són estratègics pel desenvolupament del país i la protecció de la vida digna dels éssers humans.

A l'Estat Espanyol hi ha dos lleis orgàniques per la defensa del medi ambient: la primera, és la Llei Orgànica d'Educació que cita al títol 1, article 3, que *fomenta el desenvolupament d'una consciència ciutadana per la conservació, defensa i millora de l'ambient, qualitat de vida i ús racional dels recursos naturals*; i la segona, la Llei Orgànica de l'Ambient que cita al capítol 1, article 1: *la present llei té per objectiu establir dins de la política el desenvolupament integral de la nació, els principis rectors per la conservació, defensa i millor de l'ambient en benefici de la qualitat de la vida*.

A continuació es procedeix a explicar quins són els objectius d'aquest projecte, quin abast i estructura té i quina és la motivació que m'ha portat a realitzar-lo.



1.1 Objectius del projecte

L'objectiu principal del projecte és el desenvolupament d'un mètode o model basat en la Lògica Difusa capaç d'avaluar el risc ambiental que suposen els efluents d'aigües de depuradores i comparar-lo amb un model ja existent, el COMMPS, COmbined Monitoring-based and Modelling-based Priority Setting, un sistema d'avaluació elaborat pel Fraunhofer Institut el 1999, que crea una llista de prioritats de les substàncies a partir del seu risc pel medi ambient. D'aquesta manera, es podrà comparar els resultats obtinguts amb ambdues metodologies, i analitzar quina és més precisa a l'hora d'avaluar el risc ambiental. El resultat obtingut serà de gran interès per aplicacions en l'àmbit de la gestió de risc ambiental.

També es pretén aconseguir que el model realitzat sigui extrapolable a altres àmbits d'anàlisi de risc de contaminació d'aigües, expandint així, la utilització del model com a eina d'anàlisi de risc ambiental. També es pretén portar el mètode COMMPS més enllà de ser una eina de prioritització i fer que pugui caracteritzar el risc.

Per tal d'assolir l'objectiu principal d'aquest projecte, cal implementar els següents subobjectius:

1. Anàlisi de les dades experimentals disponibles.
2. Recerca bibliogràfica completa de:
 - 2.1. Els estudis relacionats amb les variables de risc en el compartiment aquàtic
 - 2.2. Sistemes de prioritització de substàncies.
3. Selecció de les variables que es considerin pertinents per avaluar el risc de les aigües efluents de depuradora.
4. Aplicació del model COMMPS a les dades experimentals.
5. Disseny d'un model per a l'avaluació del risc ambiental de les substàncies a estudiar basat en lògica difusa.
6. Recerca bibliogràfica sobre els rangs de valor de les variables seleccionades pel model.
7. Implementació de la informació obtinguda a l'apartat 6 al model inicial.
8. Proves del model amb els casos d'estudi del projecte (22 depuradores a Catalunya, 42 substàncies a cada una i durant 3 anys).
9. Optimització i disseny del model definitiu.
10. Presentació dels resultats finals obtinguts (selecció dels punts de mostreig) per les dues metodologies.
11. Conclusions finals.

1.2 Abast del projecte

L'interès creixent sobre el medi ambient i els riscos potencials que es deriven de moltes activitats humanes han fet augmentar l'interès sobre l'avaluació del risc mediambiental. Aquest procés és una part essencial per tal de poder prendre decisions en l'àmbit de la gestió



ambiental. L'avaluació del risc ambiental és molt important per tal de minimitzar l'impacte antròpic sobre el medi ambient. També pot ser molt útil a l'hora de prioritzar accions en aquest àmbit ([DARBRA ET AL., 2008](#)).

L'administració ambiental requereix informació científica sòlida i de base sobre el risc mediambiental associat a diverses activitats per tal de poder arribar i justificar les seves decisions. Per tant, hi ha una necessitat d'avaluar tots els riscos potencials que poden causar un dany mediambiental. Els resultats d'aquest anàlisi hauria de ser comunicat als òrgans amb poder de presa de decisions i als legisladors en un llenguatge comú i senzill per tal que puguin prendre les accions més apropiades.

Segons [VARNES, 1984](#), el risc generalment es defineix com a la combinació entre perill i vulnerabilitat; el perill representa la probabilitat que un esdeveniment potencialment perjudicial d'unes característiques donades succeeixin en una àrea donada, per un període de temps. La vulnerabilitat és el grau de feblesa intrínseca del sistema.

L'anàlisi de risc pot ser definit com el procés d'estimar la possibilitat que un particular esdeveniment pugui ocórrer sota una sèrie de circumstàncies.

Estimar el risc no és trivial, es necessita identificar els esdeveniments que presenten perill i produeixen risc, associant-los-hi la magnitud de les seves conseqüències i la freqüència d'ocurrència d'aquest risc ([CASAL ET AL., 2008](#)). En el cas del risc ambiental, el procés estipulat per la UE en les avaluacions de risc ambiental contempla els següents passos:

- Una identificació dels perills
- Una avaluació dels efectes (relació entre dosis i resposta)
- Una avaluació de l'exposició
- Una caracterització del risc

Un altre concepte a tenir present és el de gestió del risc. Aquest procés implica la presa de decisions sobre un risc ja avaluat que requereixi ser minimitzat per tal de protegir la salut i els recursos mediambientals.

L'anàlisi de risc podria ser considerat com el pas més important en el procés de gestió de risc tal i com es pot veure en la Figura 1.1. Gestionar riscos hauria d'involucrar prendre decisions basades en la informació recollida en l'anàlisi de risc. Per a fer-ho és necessari crear un pla de risc, implementar-lo i avaluar-ne la seva viabilitat. Tot i això, és important remarcar que la decisió final de com gestionar el risc és generalment de naturalesa humana.





Figura 1.1 Continguts de la gestió de risc (DARBRA ET AL., 2008)

És, per tant, vital poder realitzar un bon anàlisi de risc per tal d'arribar a una bona gestió de risc, i és per això, que l'estudi que es realitza en aquest projecte, ha d'arribar a aspirar que posteriorment sigui integrat en un model de gestió i que sigui sòlid i alhora de fàcil comprensió per qualsevol persona.

No obstant, per un anàlisi complet de risc mediambiental es requereix d'una extensa recerca d'informació. En molts casos la informació estadística és obtinguda d'una forma senzilla i pot contribuir per entendre la freqüència i la severitat del perill, de totes maneres és molt comú que la informació mediambiental recollida sigui qualitativa, vaga o imprecisa, especialment en el cas dels contaminants emergents.

Tal com constata [URICCHIO ET AL. \(2004\)](#), la informació incompleta és notablement comú en els processos mediambientals. Aquesta imprecisió, juntament amb l'aleatorietat dels esdeveniments i el judici dels humans juga un paper molt important en la determinació del risc. Per tant, la incertesa està associada a molts estudis ambientals.

La incertesa pot ser descrita com un buit de coneixement respecte el valor cert d'un paràmetre. Essencialment hi ha dos orígens d'incertesa que afectin a l'anàlisi de risc:



- i. Aleatorietat (a través de la variabilitat d'un fenomen, o perquè tots els factors que afecten al sistema no puguin ser modelats)
- ii. Manca de dades (quan hi ha un buit d'informació dels valors dels paràmetres)

La forma ideal d'adreçar la incertesa a través de l'aleatorietat és recol·lectar dades i realitzar un anàlisi estadístic. Quan la informació és incompleta o les dades estadístiques no estan disponibles, experts en la matèria poden aportar la informació dels valors dels paràmetres.

Per tal de disminuir les incerteses associades a la modelització de risc dos de les tècniques més comunament emprades són els models estocàstics i els models difusos. Les tècniques estocàstiques són conegudes com a models de raonament científic, basades en teories probabilístiques, i les tècniques d'elements difusos són conegudes com a models de raonament humà, basades en paràmetres lingüístics i anàlisis qualitatives.

Aquesta darrera metodologia és molt útil en l'àmbit de la gestió del risc ambiental i permet comunicar resultats en un llenguatge senzill i que permet prendre decisions. Per això ha estat seleccionada per al desenvolupament del model d'avaluació de risc presentat en aquest projecte.

1.3 Normativa

A continuació, es procedeix a detallar la legislació que afecta a aquest projecte relativa al tractament d'aigües.

La primera normativa que afecta aquest projecte és la regulació 166/2006 ([COMISSIÓ EUROPEA, 2006](#)) i és la base de les normatives presents a Espanya ([REIAL DECRET, 2007](#)) i les anteriors a aquesta (91/689/EEC ([COMISSIÓ EUROPEA, 1991](#)); 96/61/EC ([COMISSIÓ EUROPEA, 1996](#))).

1.3.1 Regulació E-PRTR

La regulació 166/2006 ([COMISSIÓ EUROPEA, 2006](#)) o coneguda com E-PRTR (European Pollutant Release and Transfer Register) regula tota la política de tractament d'aigües a nivell europeu. L'E-PRTR anima a facilitar l'accés públic a la informació ambiental a través de l'establiment d'una legislació coherent i integrada, la qual finalment també contribueixi a la prevenció i reducció de la pol·lució, enviant dades per legisladors i facilitant una participació pública en la presa de decisions mediambientals. La E-PRTR ve a continuació del Registre Europeu d'Emissions Contaminants (EPER), del 2001 al 2004, ambdós inclosos.

La Regulació estableix un registre de transferència d'informació a nivell de la Comunitat Europea en forma d'una base de dades electrònica pública accessible. Això es fa per tal d'implementar el Protocol UN-ECE (Comissió Econòmica de les Nacions Unides per Europa) sobre Registres d'Alliberament i Transferència de Contaminants i facilitar la participació pública en la presa de decisions, així com per contribuir a la prevenció i a la reducció de la pol·lució del medi ambient.



1.3.2 Directiva 2008/105/CE

La directiva 2008/105/CE del Parlament Europeu i del Consell de 16 de desembre de 2008 tracta sobre els estàndards de qualitat ambiental en el camp de l'aigua. Aquesta directiva inclou el següent paràgraf: *“La contaminació química de les aigües superficials representa una amenaça pel medi aquàtic amb efectes tals com toxicitat aguda i crònica pels organismes aquàtics, acumulació al ecosistema i pèrdues d'hàbitats i de biodiversitat, així com per la salut humana. És precís identificar les causes de la contaminació i tractar les emissions preferentment a la mateixa font, de la forma més eficaç en termes econòmics i ambientals.”*

Prèviament a la directiva 2008/105/CE va haver-hi la directiva 2000/60/CE del Parlament Europeu i del Consell, de 23 de octubre de 2000, per la que s'establia un marc comunitari d'actuació a l'àmbit de la política d'aigües. Aquesta directiva establia una estratègia per lluitar contra la contaminació de l'aigua, exigia noves mesures específiques de controls de la contaminació i normes de qualitat ambiental (NQA). La directiva 2008/105/CE simplement és una millora i actualització de la directiva 2000/60/CE i per tant és de conformitat amb les disposicions i objectius de l'anterior.

Per tant, la present Directiva estableix normes de qualitat ambiental (NQA) per les substàncies prioritàries i per altres contaminants, segons el dispost a l'article 16 de la Directiva 2000/60/CE, amb objecte d'aconseguir un bon estat químic de les aigües superficials i d'acord amb les disposicions i objectius de l'article 4 de la pròpia Directiva.

Aquesta directiva doncs, dóna més importància a la regulació E-PRTR, entenent aquesta última com a norma de qualitat ambiental.

1.3.3 Reial Decret 508/2007

Tot i l'aplicabilitat directa del Reglament E-PRTR en tot el territori de la Unió Europea, es fa necessari, en el cas de l'Estat Espanyol, dictar normes que complementin l'aplicació i que especifiquin els mecanismes de subministrament d'informació de les indústries a les administracions públiques, tenint en compte que aquestes obligacions d'informació afecten tant a les activitats subjectes a la Llei 16/2002, de l'1 de juliol, com a altres noves activitats industrials. El contingut d'aquesta informació s'integrarà al Registre Estatal d'Emissions i Fonts Contaminants PRTR-Espanya de forma que sigui possible complir amb les obligacions d'informació contingudes al mencionat Reglament E-PRTR. Això s'articula a través del Decret 508/2007 del 20 d'abril del 2007.

1.4 Estructura

El següent projecte s'estructura de la forma següent:

- **Introducció:** on es comenta breument l'objectiu i abast del projecte, la normativa que intervindrà en tot l'estudi i la motivació de realitzar-lo.
- **Zona d'estudi i Dades experimentals:** aquest és l'apartat on es mostren les depuradores a estudiar i les dades rebudes per part del Consell Superior d'Investigacions Científiques de Barcelona (CSIC).
- **Mètode COMMPS:** on s'exposen els fonaments teòrics en els quals està basat el mètode COMMPS.



- **La lògica difusa:** on s'exposen els fonaments teòrics de la lògica difusa.
- **Metodologia:** apartat on es descriu la metodologia utilitzada en els dos mètodes d'anàlisi usats, exposant les diferències entre ells. També es mostra els criteris de selecció de les substàncies candidates a l'estudi i altres criteris adoptats per cada metodologia.
- **Resultats i Discussió:** apartat en el qual s'exposen els resultats referents a l'aplicació de les dues metodologies, d'acord amb les dades i els criteris establerts. També s'inclou aquí la discussió dels resultats i la comparació dels 2 mètodes.
- **Conclusions:** apartat que resumeix quins són els trets més destacables de l'estudi realitzat.

1.5 Motivació

Durant el transcurs de la carrera d'Enginyeria Química, m'ha semblat que tot i que el professorat donés importància a l'impacte ambiental en la realització de projectes o processos industrials, no s'aprofundia gaire en la temàtica i em generava una inquietud que sentia que necessitava plasmar en algun moment de la meua vida. Una de les motivacions més grans per realitzar el projecte doncs, va ser el poder profunditzar en una matèria que per a mi té un gran interès i que, al meu parer, esdevindrà clau en un futur no gaire llunyà. Alhora la meua intenció era realitzar un projecte relacionat amb la temàtica de l'aigua i més concretament depuradores, fet que va desencadenar un interès molt gran envers el projecte.

Per tant, l'oportunitat que em va brindar la directora del projecte al gener del 2011 sobre el desenvolupament d'un model per determinar el risc ambiental a les aigües efluentes de depuradores mitjançant lògica difusa em va produir una gran satisfacció. Tot i això, el concepte de lògica difusa era per a mi una idea nova i que vaig necessitar un temps per assimilar i aprofundir en ella.

Aquest projecte s'ha realitzat al CERTEC (Centre d'Estudis del Risc Tecnològic) situat al departament d'enginyeria química de la UPC (Universitat Politècnica de Catalunya). S'ha dut a terme amb l'ajuda del grup d'investigació de química ambiental del CSIC i ha permès desenvolupar un model d'avaluació de risc per les aigües efluentes de les depuradores de Catalunya mitjançant lògica difusa i comparar-lo amb un model existent com és el COMMPS.



2 ZONA D'ESTUDI I DADES EXPERIMENTALS

En aquesta secció, en primer lloc, es presenta la zona d'estudi d'aquest projecte. Després, es descriu la procedència de les dades experimentals de les substàncies necessàries per poder realitzar l'estudi de risc desenvolupat. Finalment, es mostren les dades experimentals obtingudes en els punts de mostreig.

2.1 Zona d'estudi

L'estudi es centra dins el marc de l'Estat Espanyol, més concretament a la Comunitat Autònoma de Catalunya. Inclou les estacions depuradores d'aigües residuals (EDAR) de més de 100.000 habitants equivalents (he) (veure Figura 2.1). En aquest cas es correspon a 22 depuradores de la regió a estudiar. Com es pot veure a la Taula 2.1 es compta amb dades d'una depuradora a la província de Lleida, una a la província de Girona, tres a la província de Tarragona i disset a la província de Barcelona. La seva distribució territorial es pot veure a la Figura 2.1. El detall d'algunes de les depuradores mencionades es mostra a la Figura 2.2.



Figura 2.1 Mapa de les depuradores al territori



Taula 2.1 Procedència de les depuradores a estudiar

Província	Municipi
Barcelona	Besòs
Barcelona	Gavà/ Viladecans
Girona	Girona
Barcelona	Granollers
Barcelona	La Llagosta
Lleida	Lleida
Barcelona	Manresa
Barcelona	Mataró
Barcelona	Montcada
Barcelona	Montornès
Barcelona	Prat del Llobregat
Tarragona	Reus
Barcelona	Rubí
Barcelona	Sabadell R. Ripoll
Barcelona	Sabadell R. Sec
Barcelona	Sant Feliu de Llobregat
Tarragona	Tarragona
Barcelona	Teià/ Maresme
Barcelona	Terrassa
Barcelona	Vic
Tarragona	Vilaseca/Salou
Barcelona	Vilafranca del P.

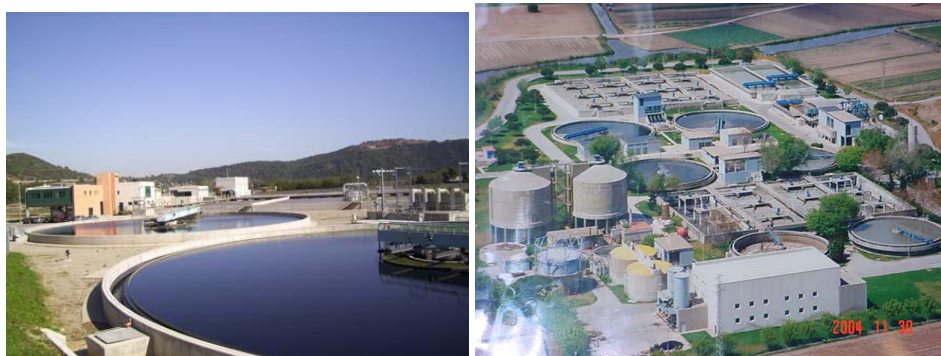


Figura 2.2 Mostra de diferents depuradores; a) Besòs; b) Girona; c) Gavà-Viladecans



2.2 Dades experimentals

Les dades experimentals d'aquest estudi han estat facilitades pel Consell Superior d'Investigacions Científiques de Barcelona (CSIC), provinents d'un projecte en col·laboració amb la Agència Catalana de l'Aigua (ACA). Per analitzar aquestes substàncies, el CSIC ha utilitzat diferents mètodes que es troben recollits a l'annex C. A continuació, es presenta la llista completa de les substàncies facilitada pel CSIC agrupades per famílies a la Taula 2.2. També es mostra, el número de CAS que s'ha emprat per poder trobar les dades necessàries per poder realitzar les anàlisis i la posterior comparativa.

L'Agència Catalana de l'Aigua és, segons el Decret Legislatiu 3/2003 ([GENERALITAT DE CATALUNYA, 2003](#)) (de 4 de novembre, pel qual s'aprova el text refós de la legislació en matèria d'aigües de Catalunya), l'organisme competent i responsable del sanejament de les aigües de Catalunya, i per tant li correspon implementar l'esmentat E-PRTR. En aquest sentit, l'Agència, mitjançant el seu Departament d'Explotació de Sistemes de Sanejament, ha desenvolupat un Protocol d'Actuació, el qual contempla, entre d'altres aspectes, la determinació analítica de dels paràmetres recollits a la corresponent "Guía para la implantación del E-PRTR" ([COMISSIÓ EUROPEA, 2006](#)).

L'objecte dels treballs del projecte del CSIC és doncs, l'anàlisi sobre mostres d'aigua dels compostos requerits a la "Guía para la implantación del E-PRTR" ([COMISSIÓ EUROPEA, 2006](#)). En aquest sentit, s'han dut a terme tres campanyes als anys 2008, 2009 i 2010, on s'han recollit les dades de concentració de les substàncies a estudiar ([BARCELÓ D. ET AL. \(2008\)](#); [BARCELÓ D. ET AL. \(2009\)](#); [BARCELÓ D. ET AL. \(2010\)](#)).

És necessari recalcar que els resultats presentats en aquest projecte han estat obtinguts a partir d'una sola mostra (integrada) per EDAR a l'any. Tenint en compte que les EDARs funcionen en continu durant les 24 hores, tots els dies de l'any (avaries i manteniment a part), és evident que la seva representativitat és limitada, i per tant, s'han d'agafar com una primera aproximació.

Cal tenir en compte que s'ha realitzat un criteri de selecció de les substàncies finals a estudiar, que es presentarà a l'apartat 5.1.1.



Taula 2.2 Llista de substàncies a estudiar

Família	Substància	Nº CAS
Metalls pesants	Arsènic i compostos (com As)	#7440-38-2
	Crom i compostos (com Cr)	#7440-47-3
	Coure i compostos (com Cu)	#7440-50-8
	Mercuri i compostos (com Hg)	#7439-97-6
	Níquel i compostos (com Ni)	#7440-02-0
	Plom i compostos (com Pb)	#7439-92-1
	Zinc i compostos (com Zn)	#7440-66-6
Anions	Cianurs (com CN total)	-
	Fluorurs (com F total)	-
	Clorurs (com Cl total)	-
Organoclorats volàtils	1,2 Dicloroetà	#107-06-2
	Diclorometà	#75-09-2
	Tetracloretilè (PER)	#127-18-4
	Tetraclorometà (TCM) tetraclorur de carboni	#56-23-5
	Tricloretilè (TRI)	#79-01-6
	Triclorometà (Cloroform)	#67-66-3
	Hexaclorbenzè	#118-74-1
Organoclorats semivolàtils	Lindà (Gamma-HCH)	#58-89-9
	Pentaclorfenol (PCP)	#87-86-5
	Policlorbifenils (PCBs)	#11097-69-1
	Benzè	#71-43-2
Hidrocarburs aromàtics volàtils	Toluè	#108-88-3
	Xilens	#1330-20-7
Hidrocarburs aromàtics policíclics (HAP)	Naftalè	#91-20-3
	Fluorantè	#206-44-0
	Benzo (g, h, i,) perilè	#191-24-2
	Suma HAP	-
Herbicides	Atrazina	#1912-24-9
	Simazina	#122-34-9
	Isoproturon	#34123-59-6
	Diuron	#330-54-1
Disruptors endocrins	Nonilfenol etoxilats (NP/NP1,2EO)	#25154-52-3
	Octilfenol etoxilats (OP/OP1,2EO)	#1322-97-0
	Ftalat de bis (2-etilhexil) (DEPH)	#117-81-7
Fenols	Índex de fenols	-
Compostos orgànics halogenats Compostos organoestànics	Compostos orgànics halogenats (AOX)	-
	Monobutil estany (MBT)	#149-30-4
	Dibutil estany (DBT)	# 1002-53-5
	Tributil estany (TBT)	#688-73-3
	Monofenil estany (MPhT)	# 2406-68-0
	Difenil estany (DPhT)	# 1011-95-6
	Trifenil estany (TPhT)	#892-20-6



3 MÈTODE COMMPS

3.1 Introducció

Tal com s'ha comentat a l'apartat 0, la legislació vinculada al tractament d'aigües s'ha de tenir en compte a l'hora de realitzar aquest projecte.

El març de 1999, el Consell Europeu va adoptar la posició comuna al Consell Directiu establint una xarxa per l'Acció de la Comunitat Europea al camp de la Política de l'Aigua. L'article 21 d'aquest Consell requereix a la Comissió establir una llista de substàncies prioritzades en funció del seu risc en el medi aquàtic i a la salut humana via el medi aquàtic ([KLEIN ET AL., 1999](#)).

Per tal de establir la llista es va elaborar el COMMPS per part de l'Institut Fraunhofer, l'acrònim COMMPS prové de COMbined Monitoring-based and Modelling-based Priority Setting que es basa en la prioritització de substàncies referides a un conjunt tancat en funció del seu risc. Es tracta d'un mètode senzill i funcional, que tot i ser anterior a la regulació E-PRTR ([COMISSIÓ EUROPEA, 2006](#)), és suficientment consistent per a utilitzar-lo i complir amb els requisits de la citada normativa. A més, aquest mètode ha estat millorat per [DAGLNNUS ET AL. \(2010\)](#). Tot seguit es descriu la metodologia.

3.2 Descripció del la metodologia del COMMPS

Tal com s'ha comentat a l'apartat anterior, la funció principal del COMMPS es prioritzar el risc d'una sèrie de substàncies en un conjunt tancat. Per tal d'establir aquesta llista de prioritats, és necessari obtenir un índex de prioritat per a cada substància que prové de la multiplicació d'un índex d'exposició per un índex d'efectes. Així doncs, la metodologia del COMMPS està basada en una aproximació de combinar una classificació automatitzada relativa del risc i un judici per part d'experts.

Per desenvolupar la metodologia de COMMPS s'han tingut present els següents passos:

3.2.1 Elaboració d'una llista de substàncies tingudes en compte per la prioritització

Les substàncies candidates són seleccionades de diverses llistes oficials de substàncies i programes de monitoreig. Les llistes oficials d'on s'han extret les 658 substàncies seleccionades, són les següents:

- List I and II of *Council Directive 76/464/EEC* ([COMISSIÓ EUROPEA, 1976](#))
- Annex 1A and 1D of the *Third North Sea Conference*
- Priority lists 1-3 identified under *Council Regulation No 793/93* ([COMISSIÓ EUROPEA, 1993](#))
- [OSPAR COMMISSION, 2003](#)
- Llistes de substàncies prioritàries HELCOM
- Pesticides prioritized under *Council Directive 91/414/EEC* (i especificada sota el *Council Regulation 3600/92*) ([COMISSIÓ EUROPEA, 91](#))



- Substàncies monitoritzades no mencionades en cap de les llistes anteriors, basat en les dades monitoritzades obtingudes dels Estats Membres

3.2.2 Càlcul de l'índex d'exposició

L'exposició ve donada principalment per la concentració de contaminant en el medi que serà la quantitat a la que poden ser exposats els organismes vius.

Pel càlcul de l'índex d'exposició, s'han d'establir llistes de classificació diferents per substàncies orgàniques en el medi aquàtic i unes altres pels contaminants absorbits en sediments i pels metalls (diferents escenaris). Per les substàncies orgàniques en el medi aquàtic, una llista de classificació es basa en la monitorització de les dades a la superfície de l'aigua i una altra es basa en la modelització de les dades, fent servir el model de distribució de Mackay I ([KLEIN ET AL., 1999](#)).

Pel cas de les substàncies metàl·liques i sediments només hi haurà una llista basada en la monitorització de les dades.

L'índex d'exposició s'escala definint un valor màxim i mínim de concentració trobat a partir de totes les concentracions de les substàncies estudiades.

3.2.3 Càlcul de l'índex d'efectes

Els efectes són les conseqüències sobre els organismes causats per les substàncies presents en l'aigua. L'índex d'efectes es subdivideix en tres efectes: directes, indirectes i humans que són explicats en detall a l'apartat 5.2.3.

Les dades necessàries per establir els efectes s'han extret de les següents fonts:

- Risk assessments for Existing Substances according to Council Regulation (EEC) No.93/793 ([COMISSIÓ EUROPEA, 1993](#))
- Risk assessments for Plant Protection Products used in agriculture according to Council Directive 91/414/EEC ([COMISSIÓ EUROPEA, 1991](#))
- Propostes ben fonamentades i documentades de les autoritats competents dels Estats Membres
- Propostes ben fonamentades i documentades de la indústria o d'altres organitzacions no governamentals (ONG's)
- Dades facilitades per l'Oficina Europea de Substàncies Químiques (extreta de la base de dades IUCLID i emprada també per EURAM)
- Dades extretes de bases de dades públiques (i.e. AQUIRE, HSDB, RTECS)

3.2.4 Computació de l'índex de prioritat

Les llistes de prioritació es calculen mitjançant la multiplicació de l'exposició i les corresponents puntuacions dels efectes de cada substància (índex d'efectes). Finalment, s'obté



una llista que classifica les substàncies en funció de la puntuació obtinguda de més a menys risc.

3.2.5 Recomanació de les substàncies prioritàries a les autoritats

La selecció de les substàncies prioritàries està feta amb la base d'aquestes llistes de prioritització de risc per una substància. Amb aquest objectiu s'aplica un mètode que consta de dos passos. En el primer pas, es representen les llistes obtingudes i un subconjunt de les substàncies prioritàries candidates a ser escollides. En el segon pas, es donen recomanacions a l'administració per a la inclusió / exclusió d'aquestes substàncies candidates a la llista de substàncies prioritàries.



4 LA Lògica Difusa

En aquesta secció s'expliquen tots aquells components i fonaments de la lògica difusa útils per la comprensió de la metodologia desenvolupada en aquest projecte. S'inicia amb una petita introducció històrica sobre el desenvolupament de la lògica difusa, es continua amb una comparativa entre la lògica tradicional i la lògica difusa i es conclou amb l'explicació de tots els components d'aquesta metodologia d'estudi:

- Conjunts clàssics i conjunts difusos.
- Funcions de pertinença (MF).
- Propietats i operacions dels conjunts difusos.
- Procediments difusos: FSE (avaluació sintètica difusa) i FIS (sistemes d'inferència difusa).

4.1 Evolució històrica de la lògica difusa

Tot i que pugui semblar un concepte molt recent, es podria fixar l'origen de la lògica difusa a Plató, el qual plantejava graus de pertinença com a regió intermèdia (tercera regió) entre allò que fos verdader o fals. Tot i això no va ser fins al segle XVIII que es van discutir conceptes de similitud, vaguetat i ambigüitat per part de George Berkeley i David Hume. Posteriorment, ja al segle XX, Bertrand Russell i Ludwig Wittgenstein varen estudiar les vaguetats del llenguatge. Al 1937, Max Black definí el primer conjunt difús ([KLIR I YUAN, 1995](#)), encara que la història no l'hagi tingut en compte.

De totes formes, s'atribueix el naixement de la lògica difusa a l'enginyer Lotfy A. Zadeh de la Universitat de Berkeley a l'any 1965 quan va publicar el seu article Fuzzy Sets ([ZADEH ET AL., 1965](#)). En aquest treball Zadeh va introduir el concepte de conjunt difús, tenint en compte que els elements sobre els que es construeix el pensament humà són etiquetes lingüístiques. Tot i això, moltes de les idees presentades per Zadeh van ser elaborades 30 anys enrere per Max Black i el filòsof polonès Jab Lukasiewicz. Els detalls d'aquesta nova lògica van ser desenvolupats per part de diversos investigadors japonesos i nord-americans als anys seixanta i setanta, i la primera aplicació important va aparèixer al 1974 a Anglaterra per part de Sito Assilian i Ebrahim Mamdani, els quals van crear el primer controlador dissenyat amb lògica difusa aplicat a una màquina de vapor. Anys més tard, al 1980, es va implementar per primer cop aquest controlador sobre una màquina de vapor.

Als anys vuitanta, va ser quan hi va haver un autèntic boom d'aplicacions de la lògica difusa al Japó, on la paraula *difús* s'entenia com a 'intel·ligent' ([MIZUMOTO, M, 1981](#)). El 1987, Hitachi va fer el primer sistema de control del metro de Sendai basat en lògica difusa. Arribats a la dècada dels noranta a part dels sistemes difusos, apareixen les xarxes neuronals i els algorismes genètics, constituint així tres grans tècniques computacionals, que poden combinar-se de múltiples maneres per aconseguir eines de treball molt potents ([SUNG-BAE CHO, 2002](#)).

A la dècada dels noranta, la lògica difusa s'introdueix a sistemes de software com la Fuzzy Toolbox de Matlab (1994) i avui en dia s'implementa a sistemes del món real com plantes



industrials, aparells elèctrics, anàlisis de risc i, recentment a l'anàlisi d'accidents en el treball ([DARBRA ET AL., 2007](#); [DARBRA ET AL., 2008](#)).

També apareixen diverses aplicacions de la lògica difusa en el camp de la gestió mediambiental: [LEHN I TEMME \(1996\)](#) van desenvolupar una eina difusa per classificar llocs potencialment contaminats a Alemanya; [VAN DER WERF I ZIMMER \(1998\)](#) van proposar un indicador per mesurar l'impacte mediambiental de pesticides emprats a l'agricultura; [MOHAMED I COTÈ \(1999\)](#) van desenvolupar un model d'anàlisi de risc de la salut humana per llocs contaminats.

Ja al segle XXI, la lògica difusa s'està transformant en una eina de predicció i avaluació molt important en la gestió i anàlisis de riscos ambientals; [HU ET AL. \(2003\)](#) desenvoluparen una eina per a la selecció de tècniques minimització d'efectes negatius per un lloc contaminat per petroli. [URICCHIO ET AL. \(2004\)](#) i [OCAMPO ET AL. \(2006\)](#), utilitzaren la lògica difusa com a detector de la contaminació i qualitat de l'aigua. [MARCHINI ET AL. \(2006\)](#) van elaborar un model per reconèixer diferents sectors ecològics al llac de Venècia. [DAHIYA ET AL. \(2007\)](#) van utilitzar la lògica difusa per analitzar la qualitat de les aigües subterrànies a l'Índia. [BORCHIELLINI ET AL. \(2009\)](#) desenvoluparen un procediment per controlar la ventilació dels túnels en cas d'incendi mitjançant la lògica difusa. I recentment, també s'ha utilitzat la lògica difusa com a eina de predicció del deteriorament d'ecosistemes aquàtics causat per la introducció d'espècies no autòctones dins d'aquests medis ([ACOSTA ET AL., 2010](#)).

Aquestes són algunes de les moltes aplicacions de la lògica difusa, la qual està tenint molt èxit en els sistemes de control i ocupa un gran camp de coneixement. En definitiva, és una metodologia d'estudi molt potent, innovadora i propera al món real.

4.2 Lògica difusa vers lògica clàssica

Des de fa segles l'home ha plantejat problemes on la solució no és única, sinó que es presenten diverses possibilitats per a poder resoldre un problema en concret. A partir de la lògica clàssica o aristotèlica doncs, no es podrien resoldre més que prenent un valor, que fos totalment oposat a un altre, com blanc o negre, limitant d'aquesta forma qualsevol valor intermedi que podria formar part del valor solució desitjat. La lògica difusa és doncs, una alternativa a la lògica clàssica o aristotèlica, ja que fa servir expressions que no són totalment certes ni completament falses, incloent un valor qualsevol de certesa en un rang donat de veritat absoluta i falsedat total.

De fet, es poden trobar innumbrables exemples que s'assimilen al concepte de lògica difusa, ja que aquesta ha estat dissenyada per poder afrontar la resolució d'aquells problemes que puguin resultar complexos, qualitius, incerts o imprecisos. Així doncs, una variable amb un grau de incertesa com pot ser el risc ambiental es pot traduir en un concepte que l'ésser humà és capaç d'aprendre fàcilment.

Per contra, la lògica clàssica o aristotèlica ve regida pels principis de no contradicció, d'identitat i del tercer valor exclòs. Per tant, una proposició necessàriament o és verdadera o



és falsa (blanc o negre), no hi ha un grau de veritat intermedi ([PEÑA ET AL., 1993](#)). Aquesta afirmació, si fos representada mitjançant lògica booleana seria 1 o 0.

Per tant, la lògica difusa és plurivalent i elimina el principi del tercer exclòs proposant un nombre infinit de graus de veritat (multivariable). Així, un fet pot ser verdader en diferents graus. Aquest llenguatge permet treballar a la vegada amb dades numèriques i termes lingüístics aportant una informació més útil pel raonament humà. L'aspecte central i l'atractiu dels sistemes basats en la lògica difusa és la seva flexibilitat, tolerància, capacitat per modelar problemes no lineals i la seva base en el llenguatge natural. Així doncs, la lògica clàssica, seria com el cas límit (*verdader o fals*) d'aquesta lògica difusa.

Tot seguit es descriuen els elements que componen aquesta metodologia difusa.

4.3 Conjunts clàssics i Conjunts Difusos

Dins la lògica es poden trobar diferents formes d'agrupar o unificar aquelles variables que pertanyen dins un mateix grup d'estudi o conjunt. En aquest apartat s'explica les variants i les seves metodologies per a crear els conjunts de la lògica clàssica (conjunts clàssics) i els relacionats amb la lògica difusa (conjunts difusos).

4.3.1 Conjunts clàssics o nítids

Els conjunts clàssics o nítids, sorgeixen de forma natural per la necessitat de l'ésser humà de classificar els objectes i els conceptes. Per exemple, si es pensa en models de marques de cotxe, es poden realitzar varis conjunts:

- Seat: León, Ibiza, Altea...
- Audi: A3, A4, TT...
- Renault: Megane, 207, 307...
- Volkswagen: Polo, Golf, Passat...

Tal i com estan definits els conjunts clàssics, es poden diferenciar els seus elements mitjançant en si pertanyen al conjunt (membres) o no (no membres). Igualment, tot conjunt està lligat a un *conjunt universal* U i al *conjunt buit*.

El terme de *conjunt universal* (U), un concepte creat per Augustus de Morgan ([PRIOR ET AL., 1976](#)), és definit com un conjunt nítid, anomenant també *Univers de Discurs*, que agrupa tots els elements que puguin pertànyer o no a un conjunt A .

Per contra el conjunt buit, és definit com aquell conjunt que no conté cap element i és designat per \emptyset .

Per tant, donat un cert univers U , els conjunts nítids o clàssics, poden ser definits de tres formes ([KLIR I YUAN, 1995](#)):

- i. Mitjançant una **enumeració** dels seus elements: Seat= { León, Ibiza, Altea, etc}. Això, només és útil per conjunts finits.



$$A = \{x_1, x_2, x_3, \dots, x_n\} \quad \text{Equació 4.1}$$

- ii. Definint un conjunt a partir d'una **propietat** $P(x)$ que han de complir tots els membres del conjunt.

$$A = \{x \mid P(x)\} \quad \text{Equació 4.2}$$

D'aquesta forma el conjunt A queda definit per aquells elements x d' A tals que compleixen la propietat $P(x)$.

- iii. I finalment, a partir d'una **funció** de pertinença $\mu_A(x)$, que estableix quins elements x de l'univers de discurs U són membres del conjunt A i quins no. D'aquesta manera, s'obté un valor d' 1 si l'element x pertany a A i un valor de 0 si no hi pertany.

$$\mu_A = \begin{cases} 0 & \text{SI } x \notin A \\ 1 & \text{SI } x \in A \end{cases} \quad \text{Equació 4.3}$$

Per aclarir aquest concepte es posa el següent exemple. Si tenim dos conjunts clàssics: "*ciutats grans*" i "*ciutats no grans*", segons la lògica clàssica el conjunt $A = "$ *ciutats grans*", és aquell al qual pertanyen totes aquelles ciutats amb una població major a un cert valor, per exemple 200.000 habitants i per tant, tots les ciutats menors a aquesta població quedarien excloses.

En la Figura 4.1, hi ha representat el conjunt "*ciutat gran*" mitjançant la concepció clàssica. Es pot veure que tots aquelles ciutats amb uns habitants superior a 200.000 se'ls assigna el valor 1 (*ciutat gran*) i aquells d'un nombre d'habitants menor el valor 0 (*ciutat petita o no gran*). Així, una ciutat de 200.001 habitants és considerat *gran* i una de 199.999 habitants és *no gran*. No obstant, no sembla molt lògic dir que una ciutat sigui gran o petita en funció d'una diferència entre 2 habitants. Amb els conjunts difusos es corregeix aquesta incoherència.

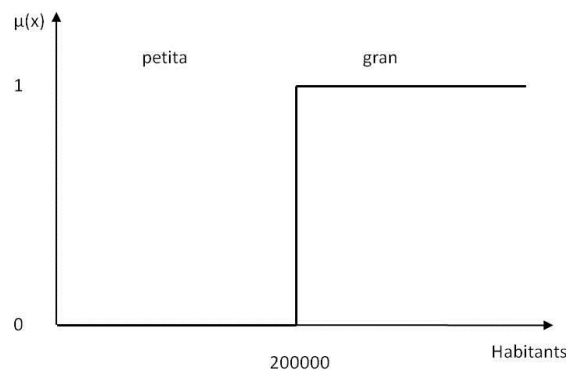


Figura 4.1 Representació del conjunt clàssic de ciutats grans.

4.3.2 Conjunts difusos

Igual que en els conjunts nítids, un conjunt difús es defineix com una col·lecció d'elements escollits dins un univers U (conjunt universal). La diferència entre ambdós és que els diferents elements d' U , en aquest cas, poden pertànyer **parcialment** al conjunt. Per conveni, el concepte



de pertinença parcial s'expressa mitjançant un número real del interval $[0,1]$, al qual es denomina **grau de pertinença** i està associat a cada element del conjunt difús.

Tot seguit es presenten unes definicions útils per aclarir aquests conceptes:

- *Univers de discurs* (conjunt universal): conjunt de tots aquells elements que poden pertànyer al conjunt A.
- *Variable lingüística*: és aquell concepte o noció que s'avaluarà de forma difusa. Per exemple: edat, altura, mida, error, etc.
- *Valor lingüístic*: totes aquelles classificacions de la variable lingüística. En l'exemple de l'altura, es pot dividir l'univers de discurs en els diferents valors lingüístics, per exemple baix, mitjà i alt.

Similarment, donat un univers U, existeixen diferents mètodes per definir un conjunt difús ([DUBOIS ET AL., 1980](#); [KLIR I YUAN, 1995](#)):

- Definició del conjunt A mitjançant una funció anomenada **funció de pertinença**, $\mu_A(x)$, la qual dona el grau de pertinença de l'element $x \in U$ al conjunt A. La funció $\mu_A(x)$ és una aplicació d' U en l' interval $[0,1]$.

$$\mu_A(x): U \rightarrow [0,1] \quad \text{Equació 4.4}$$

- Una altra manera per definir conjunts difusos, és a partir de l'enumeració de tots els seus membres juntament amb els seus graus de pertinença obtinguts a partir de la funció de pertinença. Cada parella *element-grau* s'escriu en forma de fracció, amb el nom de l'element al denominador i el grau de pertinença al numerador, unint totes les funcions amb el símbol +. Cal remarcar que ni el símbol + ni la fracció impliquen la realització de la suma o divisió. Aquest mètode va ser utilitzat per Zadeh, en el seu primer article sobre els conjunts difusos ([ZADEH ET AL., 1965](#)).

$$A = \left\{ \frac{\mu_A(x_1)}{x_1} + \frac{\mu_A(x_2)}{x_2} + \dots + \frac{\mu_A(x_n)}{x_n} \right\} = \sum_{x_i \in U} \frac{\mu_A(x_i)}{x_i} \quad \text{Equació 4.5}$$

Tornant a l'exemple anterior del tamany d'una ciutat, la visió de la lògica difusa considera que el conjunt "*ciutat petita*", és un conjunt que no té una frontera clara per pertànyer o no en ell. Per tant, mitjançant una o diverses funcions de pertinença, les quals defineixen la transició de *petita* a *no petita*, s'assigna a cada valor d'habitants els respectius graus de pertinença de cada conjunt. Aquests valors varien entre 0 i 1. Així, per exemple, una ciutat que fos de 185.000 habitants pot pertànyer al conjunt difús "*ciutat petita*" amb un grau de pertinença de 0,7 i al conjunt difús "*ciutat gran*" amb un grau de pertinença de 0,3. Com es pot veure a la Figura 4.2. aquest resultat és molt més coherent que el obtingut amb la lògica clàssica, que seria un cas límit de la lògica difusa, ja que s'assigna 1 a la distància compresa entre 0 i 200.000 habitants i 0 a la resta de valors.



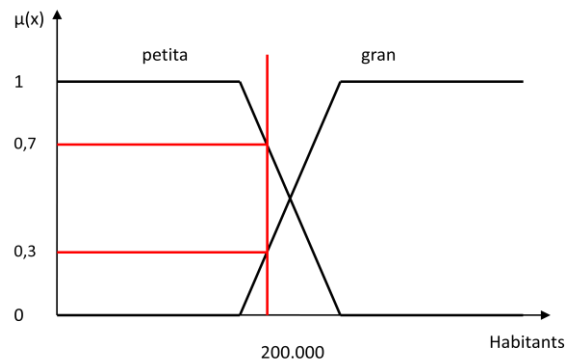


Figura 4.2 Representació dels conjunts difusos.

Resumint, la lògica difusa permet un solapament entre conjunts, donant una visió més flexible, tolerant i natural. En aquest cas, els conjunts difusos són valors lingüístics (gran, mitjà o petit) associats a unes funcions de pertinença, les quals defineixen el grau de pertinença que té un element x de l'univers U dins al conjunt difús.

4.4 Funció de pertinença (MF)

Tal i com s'ha dit anteriorment, el concepte de conjunt difús està estrictament relacionat amb el concepte de funció de pertinença. Típicament els valors que la funció de pertinença assigna als inputs recau en el rang de 0 a 1. La forma de les funcions de pertinença poden ser molt diferents. En aquest apartat es definirà el concepte de funció de pertinença i la seva variabilitat dins la lògica difusa.

4.4.1 Definició

Una *funció de pertinença* és aquella relació entre els elements x de l'univers U , que ens indica el grau en què cada element x pertany a un conjunt d'aquest univers U (MATHWORKS, 2010). Per tant, la funció de pertinença d'un conjunt A sobre un univers U és de la forma:

$$\mu_A(x): U \rightarrow [0,1] \text{ on } \mu_A(x) = \mu \quad \text{Equació 4.6}$$

Essent μ el grau en què x pertany a A , entre $[0, 1]$.

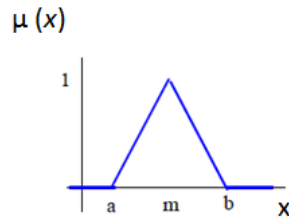
Aquestes funcions pretenen transformar un valor numèric en un grau de pertinença associat a un valor lingüístic. D'aquesta manera es facilita la comprensió de la ment humana.

4.4.2 Tipus de funcions de pertinença

En un principi qualsevol funció seria vàlida per definir conjunts difusos, però hi ha certes funcions típiques que s'utilitzen, tant per la seva facilitat computacional com per la seva estructura lògica per definir un valor lingüístic associat (MATHWORKS, 2010). Les més comuns tal com defineixen PUJOLASUS (2011) i BETRÓ (2011) són:

- i. **Funció triangular:** Definida mitjançant el límit inferior a , el superior b i el valor central m , tal que $a < m < b$. La funció no té perquè ser simètrica.

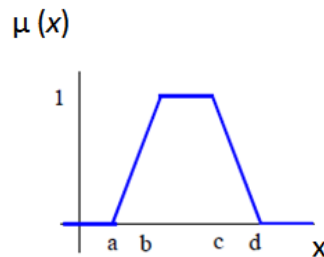




$$\mu(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq a \\ \frac{x-a}{m-a} & \text{si } a < x \leq m \\ \frac{b-x}{b-m} & \text{si } m < x \leq b \\ 0 & \text{si } x > b \end{cases} \quad \text{Equació 4.7}$$

Figura 4.3 Funció TRIANGULAR.

- ii. **Funció trapezoïdal:** Definida pels seus límits inferiors **a**, superior **d**, i els límits de suport inferior **b** i superior **c**, tal que $a < b < c < d$. Igual que en el cas anterior la funció no té perquè ser simètrica.



$$\mu(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq a \\ \frac{x-a}{b-a} & \text{si } a < x \leq b \\ 1 & \text{si } b < x \leq c \\ \frac{d-x}{d-c} & \text{si } c < x \leq d \\ 0 & \text{si } x > d \end{cases} \quad \text{Equació 4.8}$$

Figura 4.4 Funció TRAPEZOÏDAL.

Existeixen alguns casos especials per a les funcions trapezoïdals:

- Quan $c = d = +\infty$:

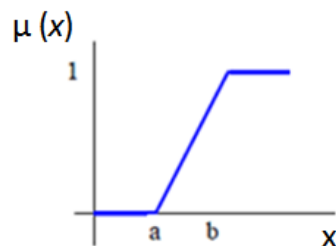


Figura 4.5 Funció TRAPEZOÏDAL.



- Quan $a = b = -\infty$:

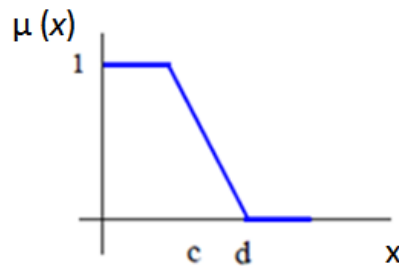
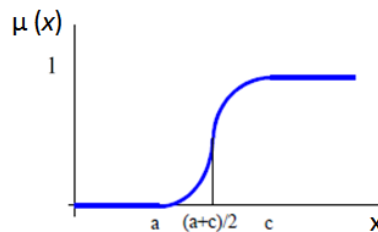


Figura 4.6 Funció TRAPEZOÏDAL.

- iii. **Funció sigmoïdal:** Definida pels seus límits inferior a , superior c i el valor m o punt d'inflexió, tals que $a < m < c$. El creixement és més lent, quan major és la distància $a - c$. El cas més típic és la funció S on $m = (a + c)/2$.



$$\mu(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq a \\ 2 \left(\frac{x-a}{c-a} \right)^2 & \text{si } a \leq x \leq \frac{a+c}{2} \\ 1 - 2 \left(\frac{x-a}{c-a} \right)^2 & \text{si } \frac{a+c}{2} \leq x \leq c \\ 1 & \text{si } x \geq c \end{cases} \quad \text{Equació 4.9}$$

Figura 4.7 Funció SIGMOÏDAL, S.

Dos casos especials de les funcions sigmoïdals són:

- **Funcions Z**, definides com la funció oposada de S. $\mu_Z(x) = 1 - \mu_S(x)$

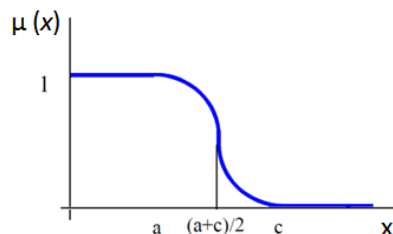


Figura 4.8 Funció Z.

- **Funció pi (Π):** s'obté a partir de la unió de la funció S i Z i està definida pels límits inferior a , superior c i punt mig b . On $a < b < c$.



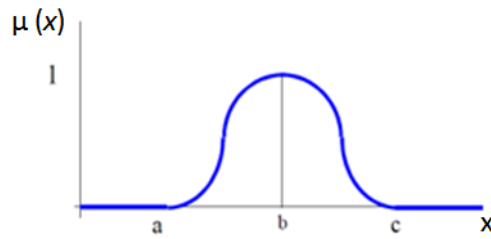
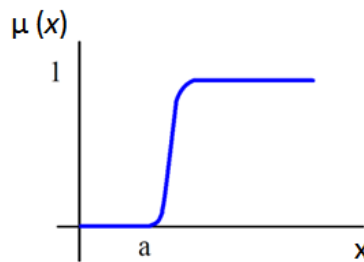


Figura 4.9 Funció Pi.

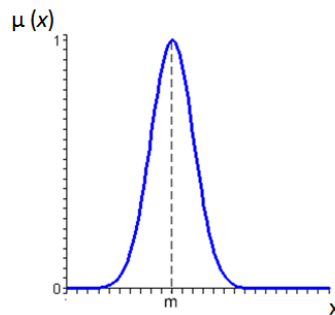
- iv. **Funció gamma (G):** Definida pel seu límit inferior **a** i el valor de creixement **k** > 0. No arriba mai a 1, tot i que té una asímptota horitzontal en aquest valor.



$$\mu(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq a \\ 1 - e^{-k(x-a)^2} & \text{si } x > a \end{cases} \quad \text{Equació 4.10}$$

Figura 4.10 Funció GAMMA.

- v. **Funció gaussiana:** Definida pel seu valor mig **m** i el paràmetre **k** > 0. És la campana de Gauss. Com es pot observar, quan més gran és k, més estreta és la campana.



$$\mu(x) = e^{-k(x-m)^2} \quad \text{Equació 4.11}$$

Figura 4.11 Funció GAUSSIANA.

Generalment, les funcions *triangulars* i *trapezoïdals* són les més utilitzades per la seva simplicitat i linealitat. En quant a la representació de valors, les funcions *pi*, *triangulars* i *gaussianes* són utilitzades per a representar valors entremetjos, mentre que les funcions *Z*, *S* i *gamma* són més utilitzades per a valors extrems.



4.5 Propietats i operacions dels conjunts difusos

Les operacions estàndard proposades per a conjunts difusos són paral·leles a les desenvolupades en els conjunts clàssics (ZADEH ET AL. 1965): operacions d'unió, d'intersecció, de complement, etc. Aleshores, considerant A i B com a dos conjunts difusos, pot dir-se que (MIZUMOTO ET AL., 1981; KLIR I YUAN, 1995; CHEN ET AL., 2001):

- A i B són iguals ($A=B$), si i només si $\mu_A(x) = \mu_B(x)$ per a totes les x de U.
- Un conjunt difús és considerat *buit*, si i només si la seva funció de pertinença és igual a zero en tot l'univers U.
- El conjunt complementari \bar{A} d'un conjunt A és aquell que té com a funció de pertinença (Figura 4.12):

$$\mu_{\bar{A}}(x) = 1 - \mu_A(x) \quad \text{Equació 4.12}$$

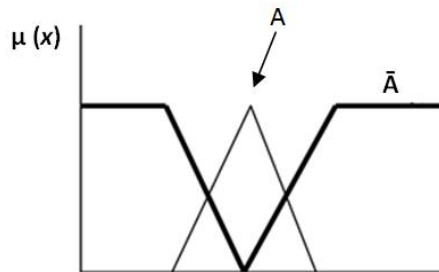


Figura 4.12 Complementari de A.

- La unió de dos conjunts difusos A i B és un conjunt difús $A \cup B$ en U, amb la següent funció de pertinença:

$$\mu_{A \cup B}(x) = \max[\mu_A(x), \mu_B(x)] \quad \text{Equació 4.13}$$

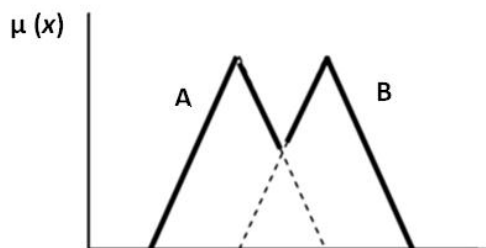


Figura 4.13 Unió A i B.

- La intersecció de dos conjunts difusos A i B és un conjunt difús $A \cap B$ en U, amb funció de pertinença:

$$\mu_{A \cap B}(x) = \min[\mu_A(x), \mu_B(x)] \quad \text{Equació 4.14}$$



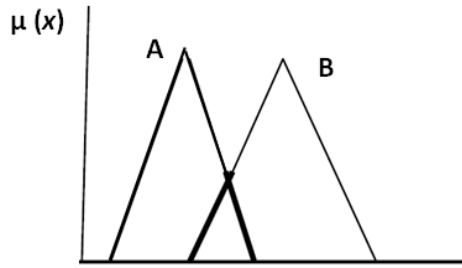


Figura 4.14 Intersecció A i B.

Aquestes tres darreres operacions definides pels conjunts difusos compleixen, igual que els conjunts clàssics, amb les lleis de Morgan i les diferents propietats dels conjunts: associativa, commutativa, distributiva, etc. (CHEN ET AL. (2001)) (veure Taula 4.1).

Taula 4.1 Propietats fonamentals dels conjunts clàssics i difusos.

Propietat	
Commutativa	$A \cup B = B \cup A$ $A \cap B = B \cap A$
Associativa	$(A \cup B) \cup C = A \cup (B \cup C)$ $(A \cap B) \cap C = A \cap (B \cap C)$
Distributiva	$(A \cup B) \cap C = (A \cap C) \cup (B \cap C)$ $(A \cap B) \cup C = (A \cup C) \cap (B \cup C)$
Idempotència	$A \cup A = A$ $A \cap A = A$
Identitat	$A \cup \emptyset = A$ $A \cap U = A$
Absorció	$A \cup U = U$ $A \cap \emptyset = \emptyset$ $A \cup (A \cap B) = A$ $A \cap (A \cup B) = A$
Lleis de Morgan	$\overline{A \cup B} = \bar{A} \cap \bar{B}$ $\overline{A \cap B} = \bar{A} \cup \bar{B}$

No obstant, cal destacar que dues lleis fonamentals de la teoria de conjunts clàssica no es compleixen en la teoria de conjunts difusos, aquestes són el *principi de contradicció*: $A \cup \bar{A} = U$ (Univers) i el *principi d'exclusió*: $A \cap \bar{A} = \emptyset$ (Buit). Aquesta és la distinció principal entre els conjunts nítids i els difusos.

4.6 Procediments difusos

Durant les últimes dècades, la lògica difusa ha experimentat un creixement molt important en el seu desenvolupament i en les seves aplicacions (apartat 4.1). Degut això, han sorgit diferents formes d'aplicar aquesta metodologia, essent els sistemes FSE (Fuzzy Synthetic Evaluation) i els FIS (Fuzzy Inference System) els més utilitzats actualment. Aquests mètodes són descrits a continuació.

4.6.1 Avaluació sintètica difusa (FSE)

Tal com citen PUJOLASUS (2011) i BETRÓ (2011) l'avaluació sintètica difusa és una metodologia que s'aplica quan es disposa d'un conjunt de dades experimentals les quals poden agrupar-se



en diferents categories d'acord a uns criteris predeterminats. Aquest procediment ha estat aplicat a diversos estudis, per exemple en l'avaluació de la qualitat de les aigües dels rius de Taiwan i Xina ([CHANG ET AL., 2001](#); [LIU ET AL., 2010](#)) o a l'avaluació de la contaminació de l'aire urbà ([HAIYAN, 2002](#); [ONKAL-ENGIN ET AL. 2004](#)). Els passos a seguir per aplicar l'avaluació sintètica difusa són:

1. Escollir els n paràmetres d'avaluació del problema que són més representatius, racionals i precisos, amb la finalitat de formar un conjunt d'avaluació U .

$$U = \{u_1, u_2, u_3, \dots, u_n\}, \text{ per exemple } U = \{PNEC; BCF; \text{etc.}\} \quad \text{Equació 4.15}$$

2. Seleccionar les m categories o valors lingüístics (nivells) dels paràmetres d'avaluació amb la finalitat de formar un conjunt de criteris d'avaluació V .

$$V = \{v_1, v_2, v_3, \dots, v_m\}, \text{ per exemple, } V = \{\text{baix, mitjà, alt}\} \quad \text{Equació 4.16}$$

3. Establir les funcions de pertinença de cada paràmetre d'avaluació per a cada nivell.
4. Introduir les dades experimentals de cada paràmetre dins les funcions de pertinença per obtenir una matriu de relacions difuses \bar{R} (graus de pertinença), expressada com:

$$\bar{R} = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \dots & r_{1m} \\ r_{21} & r_{22} & \dots & r_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ r_{n1} & r_{n2} & \dots & r_{nm} \end{bmatrix} \quad \text{Equació 4.17}$$

On cada r_{ij} ($i=1,2,\dots,n$; $j=1,2,\dots,m$) representa el grau de pertinença del paràmetre avaluat (u_i) a cada conjunt difús o valor lingüístic pertinent (v_j).

5. Aplicar un mecanisme de classificació basat en un sistema d'operadors difusos.
6. Finalment, s'assigna a cada paràmetre el conjunt difús que presenta un grau de pertinença major. Per exemple, si el resultat final d'un paràmetre és que pertany amb un 0,3 al conjunt difús *baix*, un 0,6 al conjunt *mig* i un 0,1 a *alt*, aleshores, el resultat final del paràmetre seria *mig*.

Existeix la possibilitat d'introduir pesos a cada paràmetre, assignant així la importància d'aquests dins el sistema. La matriu de pesos W , es pot representar com:

$$W = \{w_1, w_2, w_3, \dots, w_n\} \quad \text{Equació 4.18}$$

Els pesos del sistema es poden determinar mitjançant diversos mètodes, dos dels més emprats són el Procés Jeràrquic Analític (AHP) i el mètode de l'entropia. El mètode AHP estima la importància relativa de les variables d'un sistema determinat, comparant les variables per parelles a través d'una escala desenvolupada per Saaty ([SAATY ET AL., 1990](#)). Pel que fa el mètode de l'entropia, es basa en mesurar la quantitat d'informació útil que existeix a cada dada facilitada.

Si es vol tenir en compte els pesos dels paràmetres d'avaluació, caldrà realitzar la composició de les relacions difuses W i \bar{R} com $\bar{B} = W \cdot \bar{R}$. Això pot ser computat com una multiplicació de



matrius ($b_j = \sum_{i=1}^n w_i r_{ij}$) o bé mitjançant la suma o multiplicació de les operacions apropiades a la intersecció o unió de conjunts difusos, respectivament. Un cop introduïts els pesos el sistema, per obtenir el resultat final cal realitzar els punts 5 i 6 explicats anteriorment.

4.6.2 Sistema d'inferència difusa (FIS)

Tal com citen [PUJOLASUS \(2011\)](#) i [BETRÓ \(2011\)](#) els sistemes d'inferència difusa FIS són aquells processos capaços d'assignar a les variables d'entrada unes variables de sortida mitjançant la lògica difusa. Són sistemes basats en un conjunt de regles difuses, l'estructura dels quals es representa en la Figura 4.15.

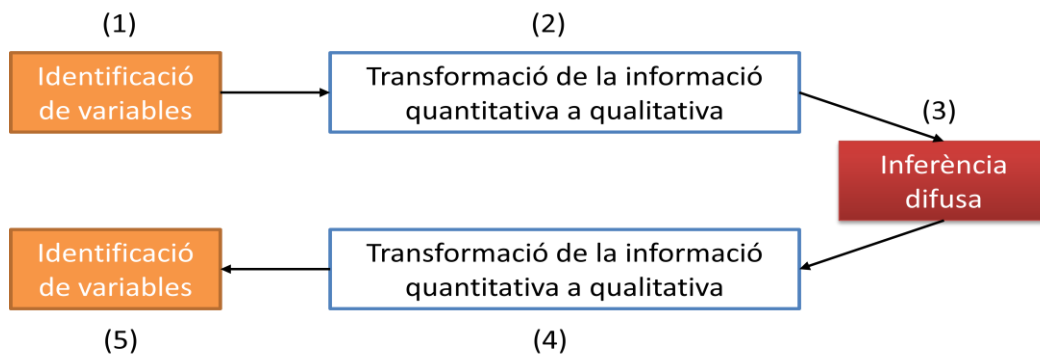


Figura 4.15 Esquema general sistema FIS.

Tal com es mostra a la figura 4.15, els passos necessaris per a construir un sistema FIS són:

1. Identificació acurada de les variables tant d'entrada com de sortida
2. Selecció dels valors lingüístics o conjunts difusos per cada variable (per exemple: baix, mitjà i alt) i assignació de les funcions de pertinença de cada conjunt, per transformar els valors quantitativs a qualitativs.
3. Aplicació del procés d'inferència difusa. Aquest procés implica la connexió de les variables d'entrada amb les variables de sortida a partir de les regles. Aquestes regles són preposicions lingüístiques que poden ser determinades:
 - a) Mitjançant l'experiència humana
 - b) A partir de xarxes neuronals
4. Transformació mitjançant mètodes matemàtics de les dades de sortida del bloc d'inferència difusa a un valor final quantitatiu.
5. Finalment, introduint el valor final quantitatiu en les gràfiques de les funcions de pertinença s'obté el valor final qualitatiu del sistema.

Actualment, molts dels estudis ambientals realitzats utilitzen els sistemes d'inferència difusa. Alguns exemples es presenten a la Taula 4.2.



Taula 4.2 Alguns dels estudis ambientals que utilitzen els sistemes FIS.

Referència	Compartiment ambiental	País de mostreig
Kampichler i Platen 2004	Camps sense cultivar	Alemanya
Ocampo et al., 2006	Aigües del riu	Espanya
Dahiya et al., 2007	Aigües subterrànies	Índia
Mistri et al., 2008	Llacs	Itàlia
Ferraro 2009	Sòls	Argentina
Roveda et al., 2010	Ciutat	Brasil

Existeixen dos tipus principals de sistemes d'inferència difusa (FIS): Mamdani i Sugeno. Aquests dos mètodes varien en la forma de determinar les sortides finals del sistema d'inferència. En el cas d'un sistema Sugeno les sortides són funcions lineals o bé constants, en canvi amb Mamdani, les sortides són conjunts difusos ([MATHWORKS, 2010](#)). Generalment degut a la seva fàcil interpretació i àmplia acceptació, Mamdani és el sistema més utilitzat, reservant el sistema Sugeno per a sistemes no lineals i més complexos. Els avantatges de cadascun dels mètodes es veuen representats en la Taula 4.3.

Taula 4.3 Avantatges sistemes Mamdani i Sugeno.

Mamdani	Sugeno
Intuïtiu	Computacionalment eficient
Àmplia acceptació	Molt adequat per a l'anàlisi matemàtica
Bona adaptació a intervenció humana	Bon funcionament per optimització i adaptació
	Bon funcionament per tècniques lineals

En aquest projecte, s'ha optat per utilitzar diversos sistemes d'inferència difusa (FIS) per a crear el model d'avaluació de risc, i específicament s'ha usat la metodologia Mamdani, degut el seu ampli ús i la seva fàcil interpretació.



5 METODOLOGIA

En aquesta secció es procedirà a explicar la metodologia aplicada en aquest projecte. Primer s'exposen quins criteris s'han establert en aquest projecte i després s'exposarà els procediments a realitzar pels dos mètodes d'anàlisi, COMMPS i lògica difusa.

5.1 Criteris establerts

Aquesta secció inclou, els criteris establerts per la selecció de substàncies, així com els criteris particulars aplicats a cada mètode de treball.

5.1.1 Criteris de selecció de les substàncies

Els criteris de selecció de les substàncies per la realització d'aquest projecte han estat:

- Quan hi hagi substàncies agrupades s'estudiaran per separat. Per exemple, en el llistat proporcionat pel CSIC hi havia la suma dels HAP (hidrocarburs aromàtics policíclics). Aquest valor no serà considerat ja que està format per la suma dels hidrocarburs aromàtics policíclics, com el naftalè, el fluorantè i altres substàncies que ja s'estudien per separat.
- Tota aquella substància que en un any en concret totes les seves mesures apareguin per sota del límit de detecció serà exclosa de l'estudi d'aquell any.
- S'exclourà tota substància de la que no es tingui una certesa sobre el seu origen, com per exemple el cas dels ions clorurs.
- Per fer un estudi més ampli, s'ha optat per fer la mitjana de la concentració de les substàncies que apareixen representades durant els tres anys. Aquestes substàncies estan exposades a la Taula 5.1

Per tant, el número de substàncies a estudiar es redueix de 42 a 30, quedant així determinades en la Taula 5.1 les substàncies que compleixen amb totes les especificacions del total de substàncies abans descrites a la Taula 2.2.

Taula 5.1 Llista final de substàncies a estudiar

Família	Substància	Nº CAS
Metalls pesants	Arsènic i compostos (com As)	#7440-38-2
	Crom i compostos (com Cr)	#7440-47-3
	Coure i compostos (com Cu)	#7440-50-8
	Mercuri i compostos (com Hg)	#7439-97-6
	Níquel i compostos (com Ni)	#7440-02-0
	Plom i compostos (com Pb)	#7439-92-1
Organoclorats volàtils	Zinc i compostos (com Zn)	#7440-66-6
	1,2 Dicloroetà	#107-06-2
	Tetracloroetilè (PER)	#127-18-4
	Tetraclorometà (TCM) tetraclorur de carboni	#56-23-5
	Tricloroetilè (TRI)	#79-01-6
	Triclorometà (Cloroform)	#67-66-3



Hidrocarburs aromàtics policíclics	Lindà (Gamma-HCH)	#58-89-9
	Pentaclorfenol (PCP)	#87-86-5
	Naftalè	#91-20-3
	Fluorantè	#206-44-0
Herbicides	Benzo (g, h, i,) perilè	#191-24-2
	Atrazina	#1912-24-9
	Simazina	#122-34-9
	Isoproturon	#34123-59-6
Disruptors endocrins	Diuron	#330-54-1
	Nonilfenol etoxilats (NP/NP1,2EO)	#25154-52-3
	Octilfenol etoxilats(OP/OP1,2EO)	#1322-97-0
Compostos organoestànics	Ftalat de bis (2-etilhexil) (DEPH)	#117-81-7
	Monobutil estany (MBT)	#149-30-4
	Dibutil estany (DBT)	# 1002-53-5
	Tributil estany (TBT)	#688-73-3
	Monofenil estany (MPhT)	# 2406-68-0
	Difenil estany (DPhT)	# 1011-95-6
	Trifenil estany (TPhT)	#892-20-6

Així doncs, el procediment seguit és el següent: un cop escollit un conjunt tancat de substàncies en una localització determinada, es tracten el conjunt de substàncies de dues formes diferents: per una banda es realitza la mitja de les substàncies que es repeteixin al llarg dels tres anys, i per l'altra, s'analitzen les substàncies presents en cada any.

Taula 5.2 Substàncies presents en tots els anys

Família	Substància
Metalls pesants	Arsènic i compostos (com As)
	Crom i compostos (com Cr)
	Coure i compostos (com Cu)
	Níquel i compostos (com Ni)
	Plom i compostos (com Pb)
	Zinc i compostos (com Zn)
Organoclorats volàtils	1,2 Dicloroetà
	Simazina
	Diuron
Herbicides	
Disruptors endocrins	Nonilfenol etoxilats (NP/NP1,2EO)
	Octilfenol etoxilats(OP/OP1,2EO)

5.1.2 Criteris relacionats amb el COMMPS

- En aquest projecte, els contaminants absorbits pels sediments no es tenen presents, ja que no són objecte d'estudi en no tenir dades disponibles per part del CSIC.
- L'índex d'exposició s'escala definint un valor màxim i mínim de concentració tal com s'ha esmentat. D'acord amb la classificació que es presenta a [KLEIN ET AL., \(1999\)](#) els límits inferior i superior s'estableixen a prop del nivell del 90 percentil de les



concentracions de les substàncies per tal d'aconseguir un valor més sòlid que reduïxi la desviació causada per punts molt allunyats de concentració. En aquest projecte, s'ha realitzat sobre el 100 percentil, ja que al tractar-se de campanyes anuals d'una sola lectura, no té sentit aplicar una correcció estadística.

- També en [KLEIN ET AL. \(1999\)](#), s'estableix el criteri d'agafar el valor màxim i mínim d'una llista establerta de substàncies al medi aquàtic en rius. En el cas d'aquest projecte, en tractar-se de les aigües efluentes de depuradores s'escolliran els valors màxim i mínim de concentracions de les substàncies a tractar a l'estudi, ja que no s'estudien les aigües de rius.
- En el cas d'aquelles substàncies, on els resultats analítics fossin per sota del límit de detecció s'ha aplicat un valor inicial igual al límit de detecció dividit per la meitat. Aquest criteri s'ha establert en base als treballs realitzats per [TEIXIDÓ ET AL. \(2010\)](#) i [KLEIN ET AL., \(1999\)](#). D'aquesta manera l'estudi és més conservador i per tant, més sòlid.

5.1.3 Criteris relacionats amb lògica difusa

- En el cas de les substàncies metàl·liques, el model desenvolupat no té en compte ni la bioconcentració ni la persistència degut a la naturalesa d'aquestes substàncies.
 - En el cas de la bioconcentració es deu a que, tal com passa en el COMMPS amb els metalls, el efectes indirectes no són contemplats. En les aigües superficials una certa fracció de la concentració total d'un metall està destinat a agents formadors de complexos, absorbit pels sediments en suspensió i pot aparèixer en forma insoluble a l'aigua. Aquesta fracció pot considerar-se com no directament biodisponible. En conseqüència, les dades de seguiment sobre la base de les concentracions totals no són directament compatibles amb les concentracions d'efectes ecotoxicològics en les proves estàndard, ja que la fracció rellevant de la toxicitat pot ser considerablement menor que la concentració total de control ([KLEIN ET AL. 1999](#)).
 - Pel que fa la persistència, s'ha pogut comprovar cercant en diverses bases de dades (IUCLD Database), que les substàncies metàl·liques no tenen contemplat un valor de temps de vida mitja, que és el paràmetre escollit per representar la persistència.
- No s'han trobat dades de vida mitja referents al monofenil estany (MPHT) i al difenil estany (DPHT). Per tant, per aquestes substàncies no es tindrà en consideració la persistència.
- Amb el model difús, per cada substància es calcula un valor de risc i després es fa el promig per obtenir el risc total per aquella depuradora.

5.2 Procediment de resolució mitjançant COMMPS

A continuació, es presenten les equacions necessàries per poder elaborar l'índex de prioritat i classificar el risc potencial d'una llista de substàncies d'acord amb la metodologia COMMPS.



5.2.1 Índex de prioritat

Per tal de poder obtenir l'índex de prioritat de cada substància s'ha de fer el producte de l'índex d'exposició per l'índex d'efectes de cada substància.

$$I_{prio_i} = I_{exp_i} * I_{eff_i} \quad \text{Equació 5.1}$$

On I_{prio_i} , és l'índex de prioritat de cada substància, I_{exp_i} és l'índex d'exposició de cada substància i I_{eff_i} és l'índex d'efectes de cada substància. Tot seguit, s'explicarà com es calculen aquests paràmetres.

5.2.2 Índex d'exposició

Per a la determinació de l'índex d'exposició s'ha de cercar el valor màxim i mínim de concentracions de les substàncies a estudiar, per tal de definir el $C_{màx}$ i $C_{mín}$ amb què es treballarà d'acord amb la següent equació:

$$I_{exp_i} = 10 \cdot \frac{\log\left(\frac{C_i}{C_{mín} \cdot 0.1}\right)}{\log\left(\frac{C_{màx}}{C_{mín} \cdot 0.1}\right)} \quad \text{Equació 5.2}$$

On C_i és la concentració de cada substància, $C_{màx}$ és la concentració màxima entre totes les substàncies i $C_{mín}$ és la concentració mínima entre totes les substàncies.

El fet que es multipliqui el $C_{mín}$ per 0,1 es deu al fet que es vol evitar el zero com a valor d'exposició d'una substància a la concentració més elevada ($C_i=C_{màx}$) ja que causaria un valor d'índex de prioritat de zero.

5.2.3 Índex d'efectes

Per tal de determinar l'índex d'efectes s'empren les següents equacions en funció de si són compostos orgànics o metàl·lics:

- Per compostos orgànics:

$$I_{eff_{org}} = EFS_d(5) + EFS_i(3) + EFS_h(2) \quad \text{Equació 5.3}$$

- Per compostos inorgànics:

$$I_{eff_{metalls}} = EFS_d(\text{màxim valor } 8) + EFS_h(\text{màxim valor } 2) \quad \text{Equació 5.4}$$

On EFS_d correspon als efectes directes, EFS_i als indirectes i EFS_h als que afecten als humans.

Com es pot observar, els pesos atorgats a cada paràmetre difereixen segons si els compostos són orgànics o metàl·lics. En tot cas, tant per metalls com per substàncies orgàniques, l'índex d'efectes tindrà un valor màxim de 10.

$$I_{eff_{màx}} = 10$$



Tot seguit s'explica cadascun d'aquest subíndexs.

5.2.3.1 Efectes directes (EFS_d)

Per a la determinació dels efectes directes s'emprarà el PNEC (Predicted No Effect Concentration). Es tracta de la concentració de la substància per a la que no s'observa efectes sobre els organismes presents. Es pot calcular com a:

$$PNEC = \left(\frac{mg \text{ contaminant}}{kg \text{ de sediment sec}} \right)$$

A partir del PNEC es pot calcular l'índex d'efectes directes:

$$EFS_d(\text{substància } i) = WF \cdot \frac{\log\left(\frac{PNEC_i}{PNEC_{m\grave{a}x} \cdot 10}\right)}{\log\left(\frac{PNEC_{m\grave{a}x}}{PNEC_{m\grave{a}x} \cdot 10}\right)} \quad \text{Equació 5.5}$$

On $PNEC_i$ correspon al valor del PNEC de cada substància, $PNEC_{m\grave{a}x}$ al valor de PNEC màxim de totes les substàncies presents al COMMPS, $PNEC_{m\grave{a}n}$ al valor de PNEC mínim (veure Taula 5.3) i WF , al pes en funció de l'origen de la substància. En cas dels compostos orgànics WF correspon a un valor de 5 i en cas de metalls correspon a 8 tal i com s'estableix a [KLEIN ET AL. \(1999\)](#). Tal com mostra l'equació 5.5, a menor $PNEC_i$, major serà la seva puntuació als efectes directes.

En cas de no trobar a la bibliografia dades de PNEC de la substància en qüestió, o que no estiguin disponibles, se li atribuirà un valor de $10 \text{ ng} \cdot \text{l}^{-1}$ tal com es descriu a [KLEIN ET AL. \(1999\)](#).

Taula 5.3 Valors de PNEC màxim i mínim segons l'origen de la substància (COMMPS).

	$PNEC_{m\grave{a}x}$	$PNEC_{m\grave{a}n}$	Unitats
Substàncies orgàniques a la fase aquàtica	1	0,000001	mg/l
Substàncies orgàniques al sediment	10	0,000001	mg/kg
Compostos metàl·lics a la fase aquàtica	0,1	0,000001	mg/l

5.2.3.2 Efectes indirectes (EFS_i)

Per la determinació dels efectes indirectes s'ha d'avaluar o bé el $\log P_{ow}$ o bé el factor de bioconcentració (BCF):

- **P_{ow} :** és la relació entre la solubilitat d'una substància en n-octanol i en aigua, a l'equilibri; també es denomina K_{ow} . El logaritme de P_{ow} indica el potencial de bioconcentració d'una substància pels organismes aquàtics, ja que a major P_{ow} , més atracció de la substància a la part lipofílica de l'organisme, és a dir, als greixos i per tant major acumulació.

$$P_{ow} = P_{octanol/aigua} = \frac{[solut]_{octanol}}{[solut]_{aigua}}$$

- **BCF (Factor de bioconcentració):** és la mesura de la capacitat d'un compost per acumular-se en un teixit després de la seva absorció del medi circumdant; el BCF dona la relació



calculada o experimentalment determinada, entre la concentració del compost a l'organisme i la del medi circumdant.

A partir doncs, del Pow o del BCF, i de les dades presents a la Taula 5.4, s'assigna un valor de 0 a 3 a l'índex d'efectes indirectes. Si hi ha dades d'un dels dos paràmetres, l'altre no es té en compte per determinar els efectes indirectes.

Taula 5.4 Determinació dels efectes indirectes a través de logPow o BCF

logP _{ow}		Pes molecular	Factor de Bioconcentració (BCF)	Puntuació
< 3	o	> 700	< 100	0
3 ≤ logPow < 4	i	< 700	100 -< 1000	1
3 ≤ logPow < 4	i	< 700	1000 -< 10000	2
>=5	i	< 700	> 10000	3
no té logPow	i	< 700	no BCF	3

5.2.3.3 Efectes sobre el humans (EFS_h)

Per últim els efectes sobre els humans s'analitzaran mitjançant les frases de risc (R-Phrases) assignant un valor entre 0 i 2 com es pot veure a la Taula 5.5. En el cas de cercar efectes sobre humans aquestes frases es fan servir per tal de mesurar la carcinogenicitat, mutació, efectes en la reproducció i efectes crònics que puguin causar les substàncies químiques analitzades.

- **Frases de risc:** Les frases R o frases de risc és un conjunt numerat de frases i combinacions de frases usades per descriure els riscos atribuïts a una substància o preparat perillós. Es descriuen a l'Annex III de la Directiva 67/548/CE (COMISSIÓ EUROPEA, 1967). Les emprades en aquest projecte es presenten a la taula 2.6. i el seu significat és a l'annex C.

A la Taula 5.5 es pot veure la distribució de punts dels efectes sobre els humans. En cas que una substància tingui una de les frases de risc que apareix a la taula se li assigna la conseqüent puntuació. En cas que la substància tingui més d'una frase de risc associada se li atribuirà la puntuació més alta. Per exemple si una substància té les frases de risc R45 i R62 tindrà un EFS_h = 2. En cas de no trobar una frase de risc per una substància el valor de EFS_h serà 0.

Taula 5.5 Determinació dels efectes sobre els humans a través de les frases de risc

Carcinogenicitat	Mutació	Efectes en la reproducció	Efectes crònics (oral)	Puntuació
R45	R46	R47, R60 ó R61	-	2
R40	R40	R62, R63 ó R64	-	1,8
-	no testat	no testat	R48 combinat amb R23 i/o R28	1,4
-	-	no testat	R48 combinat amb R20 i/o R22	1,2
-	-	-	R33	1
-	-	-	-	0



Un cop especificats tots el paràmetres d'efectes s'han de sumar per obtenir l'índex d'efectes (màxim pot sumar 10), i aquest multiplicat per l'índex d'exposició donarà l'índex de prioritat.

5.2.4 Exemple de procediment de COMMPS

Per tal de poder entendre d'una forma més gràfica tot el procediment a realitzar per la determinació de l'índex de prioritat del COMMPS, s'ha realitzat un exemple que fa més visible la metodologia emprada. S'ha agafat un conjunt de substàncies químiques de l'estudi en particular, les dades de la depuradora del Besòs, l'any 2010. Aquestes substàncies compleixen els criteris generals descrits a l'apartat 5.1.1 i els particulars referents al COMMPS descrits a l'apartat 5.1.2. A l'annex D, es mostra un exemple dels càlculs per a una substància en concret (DEPH al Besòs a l'any 2010).

A continuació, en la Taula 5.6 es mostra la llista de substàncies seleccionades que compleixen amb totes les especificacions donades. A la mateixa Taula 5.6 es pot observar en la darrera columna que ja s'ha realitzat el càlcul de l'índex d'exposició mitjançant l'equació 5.2 d'acord amb les concentracions presentades també en aquesta taula. Seguint els criteris establerts en la secció 5.1.2, s'ha agafat com a C_{\min} i C_{\max} els màxims i mínims de les substàncies analitzades.

Taula 5.6 Determinació de l'índex d'exposició de les substàncies

Tipus	Substància	C_i ($\mu\text{g}\cdot\text{l}^{-1}$)	I_{exp_i}
Metalls pesants	Arsènic i compostos (com As)	2,800	7,518
Metalls pesants	Crom i compostos (com Cr)	4,100	7,735
Metalls pesants	Coure i compostos (com Cu)	4,100	7,735
Metalls pesants	Niquel i compostos (com Ni)	20,900	8,660
Metalls pesants	Plom i compostos (com Pb)	1,300	7,082
Metalls pesants	Zinc i compostos (com Zn)	29,700	8,859
Organoclorats volàtils	1,2 Dicloroetà	0,010	4,317
Organoclorats volàtils	Tetracloretilè (PER)	0,209	6,045
Organoclorats volàtils	Tetraclorometà (TCM)	0,010	4,317
Organoclorats volàtils	Tricloretilè(TRI)	0,204	6,031
Organoclorats volàtils	Triclorometà	0,010	4,317
Organoclorats semivolàtils	Lindà (Gamma-HCH)	0,048	5,205
Hidrocarburs aromàtics policíclics	Naftalè	0,00005	1,308
Hidrocarburs aromàtics policíclics	Benzo (a) atracene	0,013	4,446
Herbicides	Simazina	0,004	3,782
Herbicides	Isoproturon	0,030	4,932
Herbicides	Diuron	0,117	5,713
Disruptors endocrins	Ftalat de bis (2-etilhexil) (DEPH)	0,00005	1,308
Disruptors endocrins	Nonilphenol	0,372	6,371
Disruptors endocrins	Nonilfenol etoxilats (NPEO2)	0,075	5,461
Disruptors endocrins	Octilfenol	0,653	6,691



Un cop es tenen les substàncies a estudiar, el següent pas és cercar les dades necessàries per a determinar l'índex d'efectes. La majoria de les propietats de les substàncies es poden cercar a l'annex 1 del COMMPS. En aquest cas com que els compostos a estudiar són orgànics es fa servir l'equació 5.3 i el valor de l'índex d'efectes de cada substància serà sobre 10.

Per a la determinació dels efectes directes s'empra l'equació 5.5, tenint en compte que en cas de no trobar a la bibliografia dades de PNEC, o que no estiguin disponibles, se li atribuirà un valor de $10 \text{ ng}\cdot\text{l}^{-1}$. A més, s'ha fet servir un valor de $\text{PNEC}_{\text{màx}}$ d' $1 \text{ mg}\cdot\text{l}^{-1}$ i un valor de $\text{PNEC}_{\text{mín}}$ de $0,000001 \text{ mg}\cdot\text{l}^{-1}$ tal com es diu a [KLEIN ET AL. \(1999\)](#).

En el cas de la determinació dels efectes indirectes es fa servir la Taula 5.4. Aquest procediment es pot visualitzar a l'annex A de [KLEIN ET AL. \(1999\)](#).

Per finalitzar la determinació de l'índex d'efectes cal trobar els efectes sobre els éssers humans mitjançant les frases de risc que apareixen a la Taula 5.5.

A la Taula 5.7, es presenten els valor d'efectes directes, indirectes i sobre humans per a cada substància analitzada, els paràmetres necessaris per calcular-los, així com l'índex d'efectes corresponent obtingut a partir d'aquestes dades.

Taula 5.7 Determinació de l'índex d'efectes a través dels efectes directes, indirectes i humans

Substància	PNEC ($\text{mg}\cdot\text{l}^{-1}$)	BCF	logPow	Frase R	EFS _d	EFS _i	EFS _h	I _{EFFi}
Arsènic i compostos	0,0001	0	0	23, 25	5,33	0	0	5,33
Crom i compostos	0,000575	0	0	0	4,32	0	0	4,32
Coure i compostos	0,00006	0	0	58	5,63	0	0	5,63
Niquel i compostos	0,0002	0	0	17, 40, 43, 49	4,93	0	1,8	6,73
Plom i compostos	0,00008	0	0	20, 22, 23, 25, 33, 39, 54	5,46	0	1	6,46
Zinc i compostos	0,0026	0	0	10, 15	3,45	0	0	3,45
1,2 Dicloroetà	0,02	0	1,48	11, 22, 36, 37, 38, 45	1,93	0	2	3,93
Tetracloretilè (PER)	0,051	50	0	37, 38, 51, 53	1,64	0	0	1,64
Tetraclorometà (TCM)	0,007	30	0	23, 24, 25, 40, 48, 52, 53, 59	2,25	0	1,8	4,05
Tricloretilè(TRI)	0,115	90	0	36, 38, 40, 52, 53	1,39	0	1,8	3,19
Triclorometà	0,0008	13	0	20, 22, 38, 40, 48, 65	2,93	0	1,2	4,13
Lindà (Gamma-HCH)	0,00029	1.400	0	23, 24, 25, 36, 38, 50, 53	3,24	2	0	5,24
Naftalè	0,0024	1.000	0	22,50,53	2,59	2	0	4,59
Benzo (a) atracene	0,00001	0	5,76	45	4,29	3	2	9,29
Simazina	0,00072	0	2,38	40	2,96	0	1,8	4,76
Isoproturon	0,0003	0	2,5	22,40,50,53	3,23	0	1,8	5,03
Diuron	0,00005	0	2,82	22, 48, 65	3,79	0	1,2	4,99
Ftalat de bis (2-etilhexil)	0,01	1.380	0	40, 60, 61, 64	2,14	2	2	6,14



Nonilphenol	0,00033	0	0	22, 34, 50 ,53	3,20	2	0	5,20
Nonilfenol etoxilats	0,00001	0	0		4,29	3	0	7,29
Octilfenol	0,00001	0	0	36, 37, 38	4,29	3	0	7,29

La metodologia de determinació de l'índex de prioritat es basa en el producte de l'índex de exposició i l'índex d'efectes tal com es mostra a l'equació 5.1. Per tal d'arribar a aquests valors aplicarem l'equació 5.2 per la determinació de l'índex d'exposició i l'equació 5.3 per a la determinació de l'índex d'efectes. En el cas de l'índex d'exposició caldrà tenir les dades de concentració de cada substància per poder determinar-lo. A la Figura 5.1 doncs, es mostra l'índex de prioritat de les substàncies estudiades per aquest exemple.

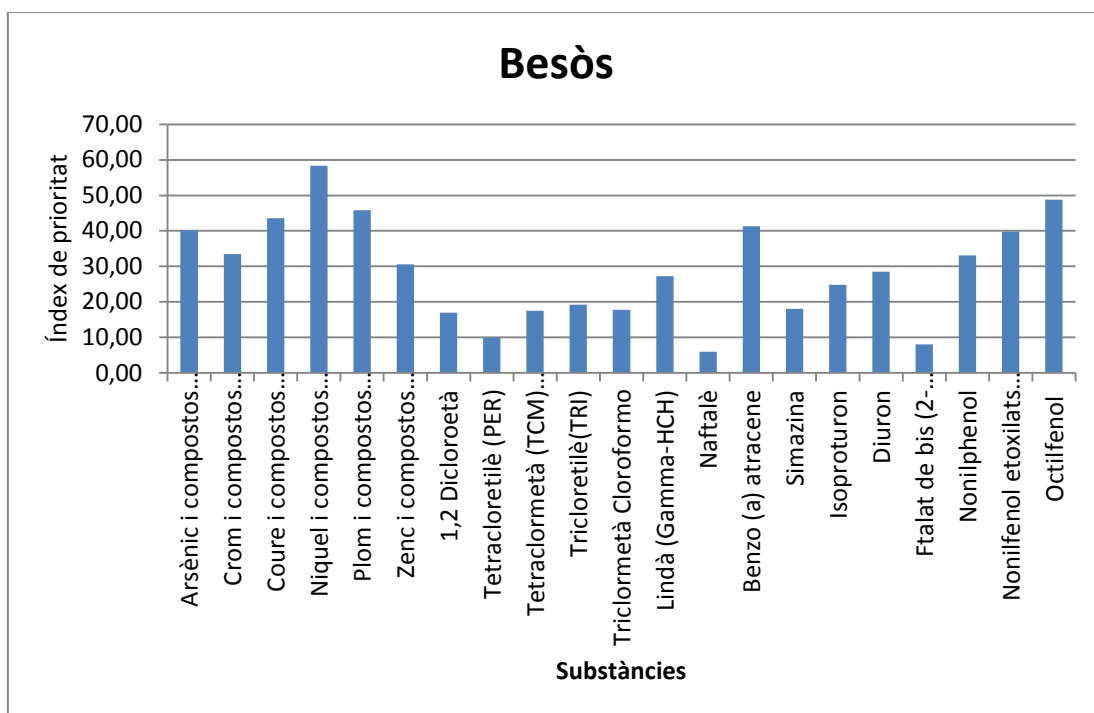


Figura 5.1 Índex de prioritat

Tal com es mostra a la Figura 5.1 la substància amb un índex de risc més elevat seria el níquel, seguit per l'octilfenol. Les que tindrien un risc més baix corresponen al naftalè i el ftalat de bis (2-etilhexil) (DEPH). Com es pot comprovar el resultat final és clar i concís i permet una interpretació molt directa dels resultats que permet fer una avaluació ràpida de quines són les substàncies amb un risc més elevat en un punt en concret, essent ordenades si es vol de més a menys risc.

Per veure-ho d'una forma més senzilla, a l'annex D es mostra un exemple d'una substància en particular (DEPH a la depuradora del Besòs l'any 2010) per tal d'entendre millor el procés de resolució. El motiu d'haver escollit DEPH és que conté tots els paràmetres actius (valor diferent de 0). Posteriorment, es farà un exemple de la metodologia basada en la lògica difusa, que s'utilitzarà la mateixa substància.



5.2.5 Índex de situació

Tal com s'ha esmentat anteriorment el procediment COMMPS es basa en la prioritització de substàncies referides a un conjunt tancat. Per tal d'aconseguir aquesta prioritització es multiplica l'índex d'exposició per l'índex d'efectes (veure apartat 5.2).

Per tal de poder estudiar amb profunditat l'índex de prioritat a diversos punts [TEIXIDO ET AL. \(2010\)](#) proposen una metodologia per realitzar una classificació mitjançant la base ja existent del COMMPS. Fan servir criteris similars per avaluar el risc potencial de les diferents substàncies presents en una localització específica, i per tant, fan servir totes aquelles substàncies existents per calcular un nou valor d'índex de prioritat, en aquest cas en un lloc concret.

L'índex de risc d'un punt es calcula com el producte de l'índex d'exposició i el corresponent índex d'efectes de totes les substàncies detectades en aquest punt dividit pel número de substàncies presents, tal com es mostra a l'equació:

$$I_{site_j} = \frac{\sum_{i=1}^n I_{exp_{ij}} \cdot I_{eff_i}}{n} \quad \text{Equació 5.6}$$

On I_{site_j} és l'índex de risc assignat a un punt j , $I_{exp_{ij}}$ és l'índex d'exposició de la substància i al punt j i I_{eff_i} és l'índex d'efectes (efectes directes i indirectes) de la substància i . Respecte a n , correspon al nombre de substàncies incloses al càlcul. L'índex d'exposició de cada substància i al punt j es calcula com:

$$I_{exp_{ij}} = 10 \cdot \left(\frac{\log\left(\frac{C_{mitjana_{ij}}}{0.1 \cdot C_{mín}}\right)}{\log\left(\frac{C_{màx_{ij}}}{0.1 \cdot C_{mín}}\right)} \right) \quad \text{Equació 5.7}$$

On $C_{mitjana_{ij}}$ és la mitjana aritmètica de les concentracions de la substància i al punt j . $C_{mín}$ i $C_{màx}$ són definits com en el cas de l'equació 3.2.

Per tal de normalitzar les dades obtingudes amb aquest índex de situació ($I_{sitenorm_j}$), entre 0 i 1, on 0 és risc baix i 1 seria el màxim risc dins el rang, es procedeix a usar la següent equació:

$$I_{sitenorm_j} = \frac{(I_{site_j} - I_{mín_j})}{(I_{màx_j} - I_{mín_j})} \quad \text{Equació 5.8}$$

Utilitzant doncs el procediment explicat a la secció 5.2, es poden fer els càlculs pertinents per a les 22 depuradores d'estudi. Els resultats es presenten en l'apartat 6.

5.3 Procediment de resolució mitjançant el model de lògica difusa

Tal i com es va veure a l'apartat 4.6.2, el primer pas per desenvolupar un model de lògica difusa és definir les variables tal com es mostra a la Figura 4.15.



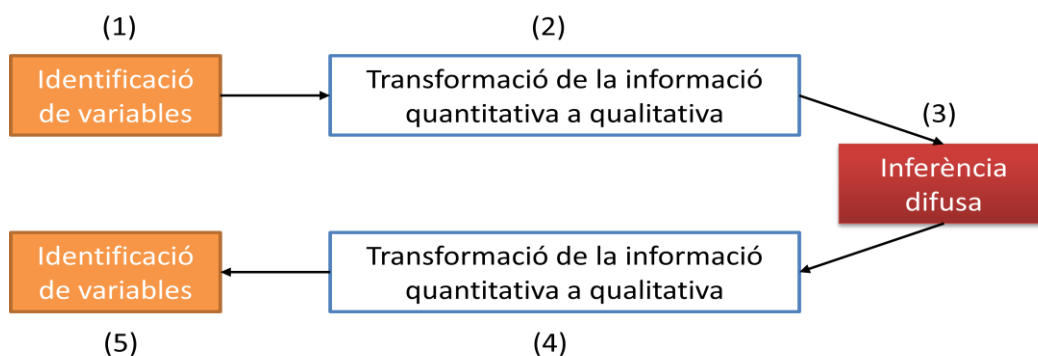


Figura 4.15 Esquema general sistema FIS.

5.3.1 Definició de les variables del sistema

A l'hora de trobar informació per cadascuna de les variables, hom s'adona que no és senzill. Per això, aquest model, tenint present les característiques de les substàncies i la informació obtinguda a partir de la revisió bibliogràfica, ha quedat definit de com es pot veure en la Figura 5.2, on es presenten les variables clau per l'avaluació de risc.

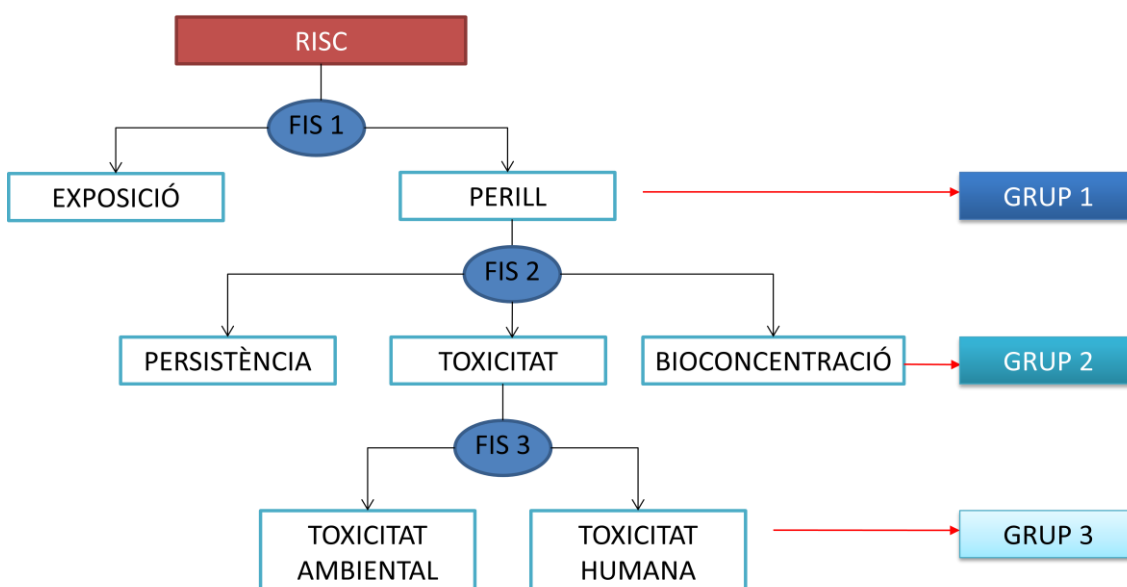


Figura 5.2 Variables finals del model.

Cada factor o variable del model és representat mitjançant un indicador. Aquests indicadors es poden veure a la Taula 5.8. A la Figura 5.2 s'observa com aquest model consta de tres grups de variables (Grups 1, 2 i 3). Tots ells, tenen diverses variables d'entrada i una de sortida. Com es pot veure, s'ha fet servir el sistema d'inferència difús (FIS) per implementar el model (veure secció 4.6). Les tres variables de sortida de cada conjunt FIS (toxicitat, perill i risc) han estat definides com a números reals compresos dins l'interval [0, 1]. La resta de variables s'han definit d'acord amb els indicadors seleccionats (veure Taula 5.8).



Taula 5.8 Indicadors de les variables del model.

VARIABLE	INDICADOR
Toxicitat Ambiental	Concentració del contaminant a la que no s'observen efectes (PNEC)
Toxicitat Humana	Frases de risc (R-Phrases)
Bioconcentració	Factor de bioconcentració (BCF) o constant octanol-aigua ($\log P_{ow}$)
Persistència	Temps de vida mitja ($T_{1/2}$)
Exposició	Concentració contaminant

Tot seguit, s'expliquen les entrades i sortides de cada grup del model en més detall (Grup1; Grup2 i Grup3):

Grup 3: consta de dos variables d'entrada (Toxicitat ambiental i Toxicitat humana), i una de sortida (Toxicitat). Tot seguit es presenten:

- **Toxicitat ambiental:** és el grau en què una substància pot ocasionar danys a un organisme. El PNEC, concentració de contaminant a l'aigua a la qual no s'observa cap efecte, ha estat escollit com a indicador.
- **Toxicitat humana:** és el grau en què una substància pot ocasionar danys a un ésser humà. S'han tingut en compte el efectes que apareixen al COMMPS i se'ls hi ha assignat un valor comprés entre 0 i 10 per normalitzar les dades. Les frases de risc de cada substància es poden trobar a l'annex B a la taula B.2. A la Taula 5.9 es pot observar el valor quantitatiu de la toxicitat humana de les substàncies a estudiar.

Taula 5.9 Valor quantitatiu de la toxicitat humana de les substàncies a estudiar

Substàncies	Valor assignat
Arsènic i compostos (com As)	0
Crom i compostos (com Cr)	0
Coure i compostos (com Cu)	0
Mercuri i compostos (com Hg)	2
Niquel i compostos (com Ni)	8
Plom i compostos (com Pb)	2
Zinc i compostos (com Zn)	0
1,2 Dicloroetà	0
Tricloretilè (TRI)	8
Lindà (Gamma-HCH)	0
Pentaclorfenol (PCP)	8
Naftalè	0
Fluorantè	0
Atrazina	8
Simazina	8
Isoproturon	8
Diuron	4
Nonilfenol etoxilats (NP/NP1,2EO)	0



Octilfenol etoxilats(OP/OP1,2EO)	0
Ftalat de bis (2-etilhexil) (DEPH)	10
Monobutil estany (MBT)	0
Dibutil estany (DBT)	0
Tributil estany (TBT)	0
Monofenil estany (MPhT)	0
Difenil estany (DPhT)	0
Trifenil estany (TPhT)	0
Tetracloretilè (PER)	0
Triclormetà	8
Benzo (g, h, i,) perilè	8
Tetraclorometà (TCM)	8
Lindà (Gamma-HCH)	0
Benzo (a) atracene	10

Grup 2: en aquest grup s'obté el perill de la substància a partir de la *Persistència*, *Acumulació* (provinent del Grup 3) i la *Toxicitat*. Tot seguit, es presenten les variables d'entrada del Grup 2.

Persistència: és el temps que resideix la substància en el medi que s'estudia, en aquest cas, els sistemes aquàtics. El temps de vida mitja ($T_{1/2}$) sota condicions aeròbiques és l'indicador escollit per la persistència de les substàncies a estudiar. El temps de vida mitja als metalls no és aplicable. Les dades s'han extret de les fonts bibliogràfiques següents:

- Registry of toxic effects of chemical substances. [NIOSH \(1998\)](#)
- Petrasol B.V. Gorinchem, Rhone Poulenc AgroChimie Lyon, Industrial Química del Nalon, BASF AG Ludwigshafen ([ECHA, 2008](#))
- [IRWIN R.J ET AL. \(1997\)](#)
- [EPA \(2010\)](#)
- [PAN PESTICIDE DATABASE \(2000\)](#)
- [NORBERG ET AL \(2007\)](#)
- [OSPAR COMMISSION \(2003\)](#)
- I altres

Taula 5.10 Temps de vida mitja de les substàncies a estudiar

Familia	$T_{1/2}$ (dies)
Arsènic i compostos (com As)	-
Crom i compostos (com Cr)	-
Coure i compostos (com Cu)	-
Mercuri i compostos (com Hg)	-
Niquel i compostos (com Ni)	-
Plom i compostos (com Pb)	-
Zinc i compostos (com Zn)	-



1,2 Dicloroetà	10
Tricloretilè(TRI)	321
Lindà (Gamma-HCH)	732
Pentaclorfenol (PCP)	0,42
Naftalè	2,96
Fluorantè	8,33
Atrazina	30
Simazina	59
Isoproturon	1.350
Diuron	64
Nonilfenol etoxilats (NP/NP1,2EO)	16
Octilfenol etoxilats(OP/OP1,2EO)	40
Ftalat de bis (2-etilhexil) (DEPH)	1.935
Monobutil estany (MBT)	0,4
Dibutil estany (DBT)	9
Tributil estany (TBT)	140
Monofenil estany (MPhT)	-
Difenil estany (DPhT)	-
Trifenil estany (TPhT)	3
Tetraclorètilè (PER)	32
Triclormetà (Cloroformo)	31
Tetraclorometà (TCM)	300
Benzo (g, h, i,) perilè	38
Benzo (a) atracene	1,32

Bioconcentració: representa el contingut de contaminant present en l'organisme aquàtic. Per tal de simplificar l'elecció entre el factor de bioconcentració o la constant de partició d'aigua-octanol en el cas d'estudi mitjançant lògica difusa, s'ha procedit a assimilar el procediment que s'empra en el COMMPS, que queda explicat a l'apartat 5.2.3.2, aplicant una escala de 0 a 10.

Taula 5.11 Valor quantitatiu de la bioconcentració de les substàncies a estudiar

Substàncies	Valor assignat
Arsènic i compostos (com As)	0
Crom i compostos (com Cr)	0
Coure i compostos (com Cu)	0
Mercuri i compostos (com Hg)	0
Niquel i compostos (com Ni)	0
Plom i compostos (com Pb)	0
Zinc i compostos (com Zn)	0
1,2 Dicloroetà	0
Tricloretilè(TRI)	0



Lindà (Gamma-HCH)	7
Pentaclorfenol (PCP)	10
Naftalè	7
Fluorantè	10
Atrazina	0
Simazina	0
Isoproturon	0
Diuron	0
Nonilfenol etoxilats (NP/NP1,2EO)	10
Octilfenol etoxilats(OP/OP1,2EO)	10
Ftalat de bis (2-etilhexil) (DEPH)	7
Monobutil estany (MBT)	0
Dibutil estany (DBT)	0
Tributil estany (TBT)	10
Monofenil estany (MPhT)	0
Difenil estany (DPhT)	0
Trifenil estany (TPhT)	10
Tetracloretile (PER)	0
Triclormetà (Cloroformo)	0
Benzo (g, h, i,) perilè	10
Tetraclorometà (TCM)	0
Lindà (Gamma-HCH)	7
Benzo (a) atracene	10

- **Toxicitat:** és el grau en què una substància pot ocasionar danys a un organisme. Pot tenir un valor comprès entre [0, 1], que com ja s'ha comentat prové del FIS 3.

Grup 1: proporciona la informació final sobre el risc de les substàncies a les aigües efluentes de les depuradores. Té dues entrades, l'*Exposició* i el *Perill* (sortida del Grup 2).

- **Exposició:** representa la concentració de contaminant que conté la matriu ambiental d'estudi, en aquest cas, les aigües efluentes de les depuradores. L'indicador seleccionat per aquesta variable és la concentració de la substància a l'aigua.
- **Perill:** prové de la sortida del Grup 2 (Persistència, Bioconcentració i Toxicitat) i pren un valor entre [0, 1].

Les raons d'utilitzar la lògica difusa com a metodologia de treball poden assignar-se a l'escassetat de dades i a la necessitat d'utilitzar variables subjectives i de diferents interpretacions com la toxicitat i el risc (DARBRA ET AL., 2008). Aquesta metodologia pot cobrir la incertesa generada per aquesta situació i permet poder avaluar el risc ambiental de les substàncies a estudiar.



5.3.2 Desenvolupament dels sistemes FIS del model de risc

Un cop definides totes les variables d'entrada i sortida del sistema, ara ja es pot implementar el sistema FIS d'aquest projecte. Una de les metodologies d'aplicació de la lògica difusa vista en la secció 4.6.2 són els sistemes d'inferència difusa (FIS) tipus Mamdani. Aquests han estat escollits com a procediment per desenvolupar el model de risc final. La Fuzzy Toolbox del Matlab ([MATHWORKS, 2010](#)), és una eina de gran utilitat alhora de construir sistemes basats en la lògica difusa. Aleshores, mitjançant aquesta eina de treball s'han elaborat els tres sistemes FIS que conformen el model (Figura 5.3).

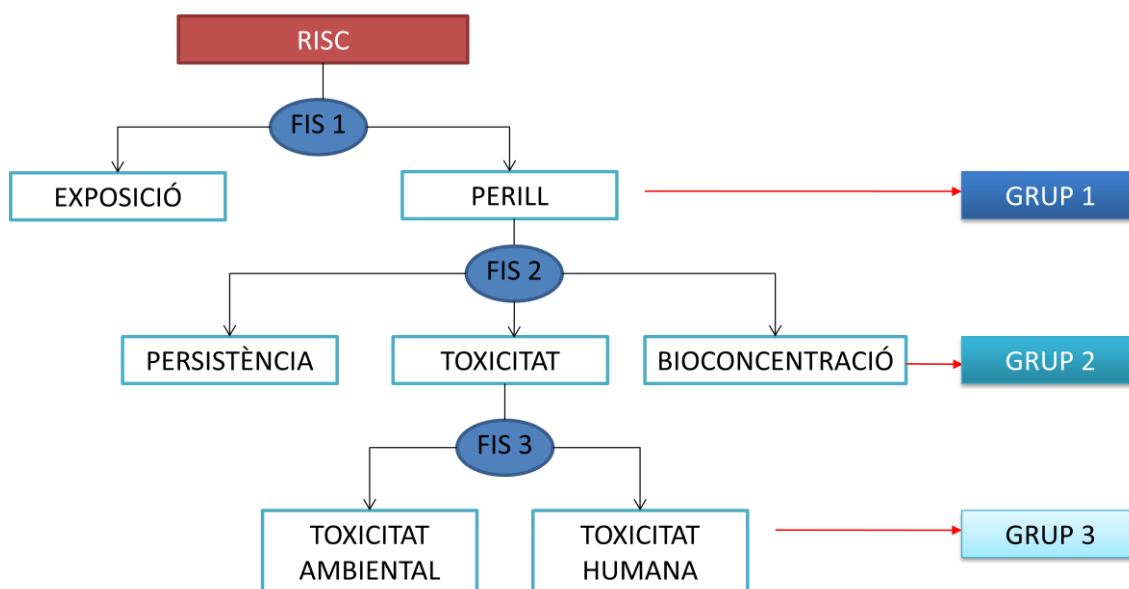


Figura 5.3 Esquema general del model de risc (3 SISTEMES FIS).

En aquesta secció es veuran tots aquells elements dels que consisteix el sistema FIS tipus Mamdani desenvolupat en aquest estudi: Fuzzification, Procés d'Inferència i Defuzzification. En la Figura 5.4 es representa l'esquema general d'aquests sistemes FIS tipus Mamdani ([BENITO ET AL., 2008](#)).

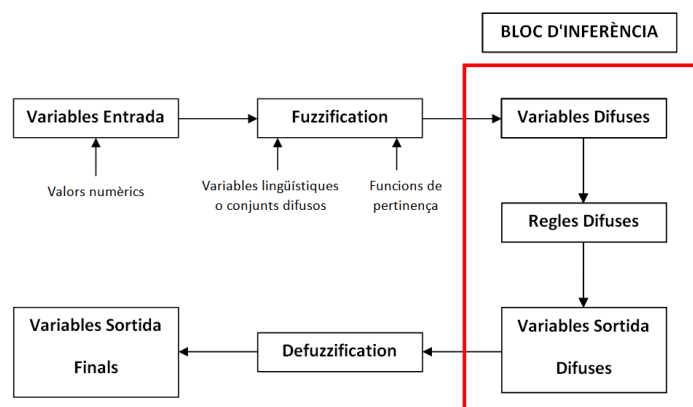


Figura 5.4 Esquema general FIS.



Tal com es descriu a [PUJOLASUS \(2011\)](#) i [BETRÓ \(2011\)](#) es poden definir les diferents parts d'un sistema FIS com:

Fuzzification: part del sistema que agafa els valors numèrics de les variables d'entrada i els converteix en valors difusos capaços de ser processats pel mecanisme d'inferència. Els valors difusos resultants són els graus de pertinença dels diferents conjunts difusos en els que s'ha dividit l'univers de discurs de les variables d'entrada del sistema.

BLOC D'INFERÈNCIA: bloc que relaciona els conjunts difusos d'entrada amb les regles difuses del sistema per obtenir els conjunts difusos de sortida o valors difusos finals mitjançant mecanismes d'inferència. Les entrades i sortides en aquest bloc són conjunts difusos (graus de pertinença).

Defuzzification: pas invers a la fuzzification. Procés capaç de, mitjançant mètodes matemàtics, transformar els valors de sortida difusos en valors de sortida nítids.

En els apartats següents, s'expliquen totes les parts d'un sistema FIS de forma més detallada. Per a una millor comprensió, s'utilitza el sistema FIS 2 com a exemple. D'aquesta manera, s'entén com es construeix un sistema FIS d'aquest model de risc. Els altres FIS, són desenvolupats mitjançant el mateix procediment. El sistema FIS 2, el formen la Persistència, la Toxicitat i la Bioconcentració com a variables d'entrada i com a variable de sortida el Perill (Figura 5.3).

5.3.2.1 Fuzzification

És el procés de transformació de totes les variables quantitatives del sistema (entrada i sortida) a variables qualitatives. Per poder realitzar aquest canvi es necessari dividir cada variable en tants conjunts difusos com es desitgi i assignar a cada conjunt difús una funció de pertinença. A la Taula 5.12, es mostra tota la informació necessària i utilitzada per la "fuzzification" de totes les variables del sistema desenvolupat.

Taula 5.12 Conjunts difusos, tipus funcions pertinença i rangs de les variables del model.

Variable	Indicador	Conjunts difusos	Valors	Rangs conjunt	Tipus MF	Paràmetres MF
Toxicitat humana	Frases de risc	BAIX	3	0 - 5	Z	(3; 5)
		MITJÀ	5;6	3 - 8	Pi	(3; 5; 6; 8)
		ALT	8	6 - 10	S	(6; 8)
Toxicitat ambiental	PNEC	BAIX	0,01	0,2 - 0,005	Z	(0,2; 0,005)
		MITJÀ	0,005	0,001 - 0,0001	Pi	(0,2; 0,005; 0,0005; 0,0000001)
		ALT	0,0001	0,0005-0,0000001	S	(0,0005; 0,0000001)
Persistència	T _{1/2}	BAIX	3	0 - 9,5	Z	(8,5; 9,5)
		MITJÀ	9	8,5 - 350	Pi	(8,5; 9,5; 250; 350)
		ALT	300	250 - 1.950	S	(250; 350)
Bioconcentració	BCF/logPow	BAIX	2	0 - 5	Z	(2; 5)
		MITJÀ	5	2 - 8	Pi	(2; 5; 5; 8)
		ALT	8	5 - 1	S	(5; 8)
Exposició	Concentració (µg/L)	BAIX	0,0005	0 - 2	Z	(0,0001; 2)
		MITJÀ	30	2 - 70	Pi	(0,0001; 2; 2; 70)
		ALT	300	70 - 1.250	S	(2; 70)



Toxicitat	-	BAIX	0,2	0 - 0,5	Z	(0,2; 0,5)
		MITJÀ	0,5	0,2 - 0,8	Pi	(0,2; 0,5; 0,5; 0,8)
		ALT	0,8	0,5 - 1	S	(0,5; 0,8)
Perill	-	BAIX	0,2	0 - 0,5	Z	(0,2; 0,5)
		MITJÀ	0,5	0,2 - 0,8	Pi	(0,2; 0,5; 0,5; 0,8)
		ALT	0,8	0,5 - 1	S	(0,5; 0,8)
RISC	-	NEGLIGIBLE	0	0 - 0,25	Z	(0,1; 0,25)
		BAIX	0,25	0 - 0,5	Pi	(0; 0,25; 0,25; 0,5)
		MITJÀ	0,5	0,25 - 0,75	Pi	(0,25; 0,5; 0,5; 0,75)
		ALT	0,75	0,5 - 1	Pi	(0,5; 0,75; 0,75; 1)
		MOLT ALT	1	0,75 - 1	S	(0,75; 0,9)

MF: Funció de pertinença

Les dades presentades en la taula anterior, s'expliquen de la següent manera:

- S'ha determinat 3 conjunts difusos per a cada indicador (*baix*, *mitjà* i *alt*), excepte pel cas del Risc que en té 5 (*negligible*, *baix*, *mitjà*, *alt* i *molt alt*). El nombre de conjunts varia segons el disseny del model.
- En el model s'ha escollit per a representar els conjunts extrems de cada variable les funcions Z i S i pels conjunts entremitjos les Pi, com s'ha explicat en la secció 4.4. L'elecció d'aquestes funcions s'ha basat en el seu comportament i la seva fàcil interpretació i manipulació.

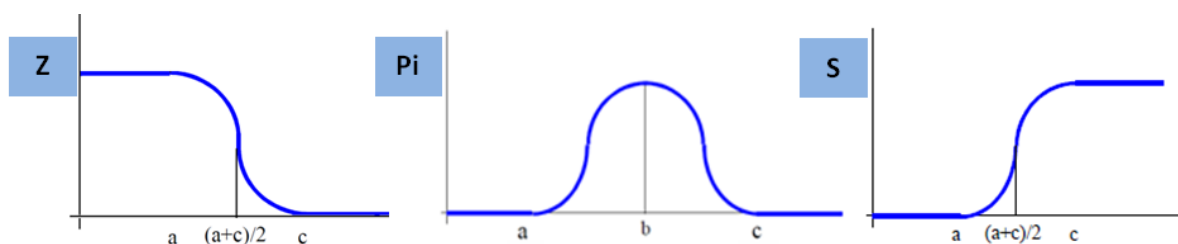


Figura 5.5 Funcions de pertinença (MF): Z; Pi; S.

- Els rangs i els valors de cada variable s'han obtingut a través de la bibliografia i a través dels qüestionaris realitzats per part de Pujolasus ([PUJOLASUS, 2011](#)) i Betró ([BETRÓ, 2011](#)). Tots els rangs s'han establert de manera que el conjunt *baix* estigui entre $[0, \text{valor mitjà}]$; el *mitjà* entre $[\text{valor baix}, \text{valor alt}]$ i l'*alt* entre $[\text{valor mitjà}, \infty \text{ o bé } 1]$. D'aquesta forma s'aconsegueix que la suma dels graus de pertinença d'un punt d'estudi sempre sumi 1 i sempre pertanyi a 2 conjunts difusos, i no a més. No obstant, segons com es dissenya el model es poden tenir més de 2 graus de pertinença que no sumin 1.
- En el cas del PNEC (indicador de la Toxicitat Ambiental), els rangs van a l'inversa que en la resta d'indicadors. Això és degut, a què el PNEC té un comportament diferent. A menor PNEC, més risc per a la biota i el medi, ja que representa la concentració de la substància màxima en la que no hi ha efectes i a partir de la qual n'hi haurà i per tant, com més petita és aquesta concentració, el compost és menys tolerant i més tòxic en el medi.
- Finalment, els paràmetres de cada funció de pertinença s'han introduït d'acord amb els rangs, i de manera que un punt qualsevol sempre pertanyi com a molt a dos



conjunts difusos. És a dir, que un punt del sistema sempre tindrà dos graus de pertinença que sumin 1.

Aplicant aquest procés de "fuzzification" al conjunt FIS 2, s'obté la transformació de variables representada en la Figura 5.6:

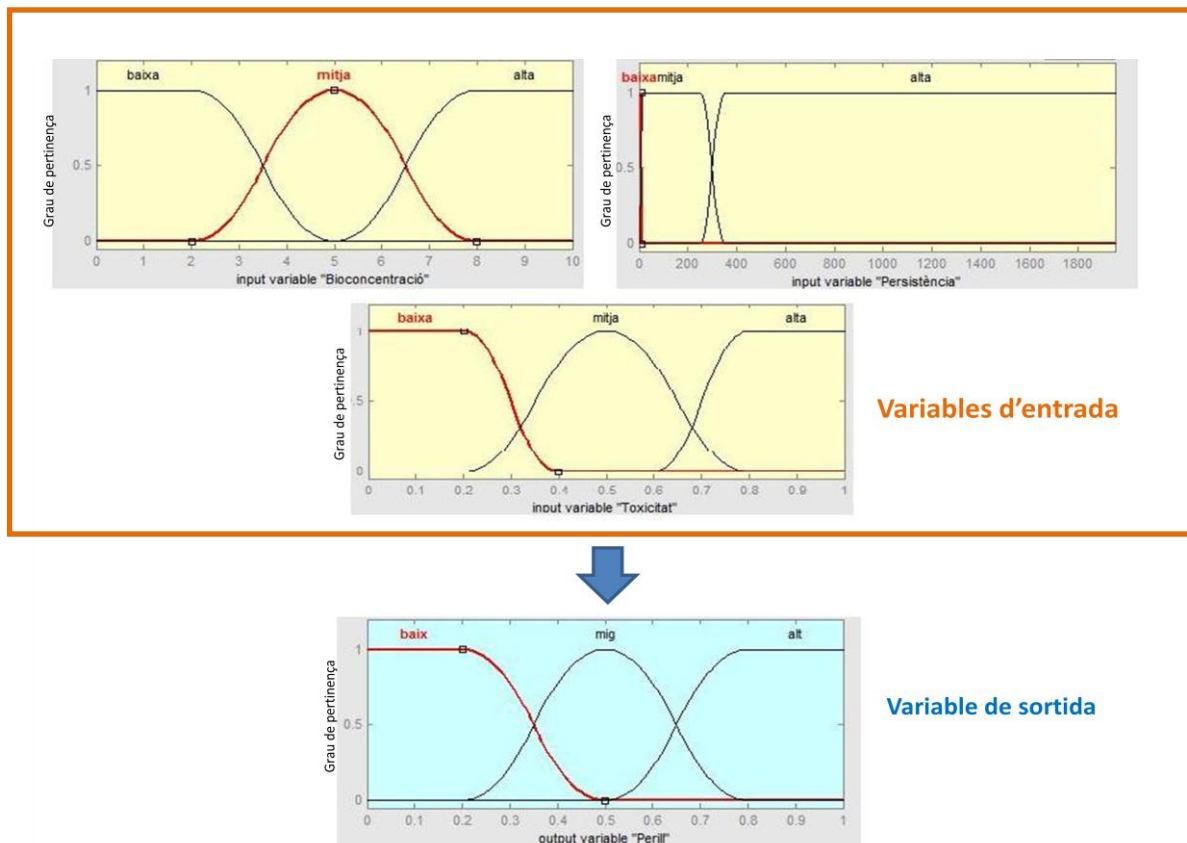


Figura 5.6 Transformació quantitativa a qualitativa variables FIS 2.

Un cop transformades les variables del sistema a variables difuses el bloc d'inferència ja és capaç d'interpretar-les i processar-les. Per tant, el següent pas és la definició de les regles difuses de cada conjunt FIS del model.

5.3.2.2 Bloc d'inferència i mecanismes d'inferència

Dins la teoria clàssica proposicional existeixen dos mètodes de regles d'inferència importants, el *Modus Tollens* i el *Modus Ponens*. La lògica difusa que és paral·lela a la lògica clàssica també està basada en aquestes:

- *Modus Ponens o raonament directe:*
Premisa 1: "x és A".
Premisa 2: "SI x és A, llavors z és B".
Conseqüència: "z és B".
- *Modus Tollens o raonament invers:*
Premisa 1: "z és No B".
Premisa 2: "SI x és A, llavors z és B".



Conseqüència: "x és NO A".

El Modus Ponens és el mètode utilitzat en aplicacions lògiques i d'enginyeria, ja que conserva la relació causa-efecte. Contràriament, el Modus Tollens s'utilitza molt poc, degut al seu raonament invers.

A partir del Modus Ponens, el bloc d'inferència és l'encarregat de relacionar els conjunts difusos de les variables d'entrada amb els conjunts difusos de les variables de sortida, mitjançant unes regles, anomenades **Regles difuses**, que tenen la funció d'obtenir un conjunt difús final de sortida per extreure el resultat definitiu del sistema. Les entrades del bloc d'inferència són conjunts difusos provinents de la fuzzificació i la sortida també. La relació d'aquestes regles difuses per obtenir el conjunt final de sortida depèn dels processos d'**Implicació** i **Agregació** que s'expliquen més endavant en aquesta secció.

5.3.2.2.1 Regles Difuses

Les regles difuses són el conjunt de proposicions *si-llavors* ("if-then rules") que modelitzen el problema a resoldre. Una regla difusa simple té la forma:

"si x és A llavors z és B"

Essent A i B dos conjunts difusos definits en l'univers de x (*antecedent*) i z (*conseqüent*) respectivament, la regla expressa la relació entre els conjunts A i B. Generalment, una regla difusa sol ser un conjunt de regles *si-llavors*, expressades com a múltiples antecedents i un sol conseqüent ([PUJOLASUS, 2011](#); [BETRÓ, 2011](#)).

L'agrupació de tots els conjunts B_i de totes les regles formen el conjunt difús final de sortida del bloc d'inferència, a partir del qual es calcula la solució final.

El nombre total de regles no conflictives per a un sistema difús es pot calcular a partir de:

$$N_{regles} = N_{cd}^{N_{ve}} \quad \text{Equació 5.9}$$

On:

- N_{regles} és el número total de regles del sistema.
- N_{cd} és el número de conjunts difusos.
- N_{ve} és el nombre de variables d'entrada.

Dins del conjunt de regles d'un sistema FIS, n'existeixen de dos tipus:

- Regles **actives** del sistema: són totes aquelles que s'activen per a donar el resultat final en un cas d'estudi.
- Regles **inactives** del sistema: són aquelles que en el mateix cas d'estudi, no s'activen per a donar el resultat final.

El model de risc desenvolupat en aquest projecte, està format per tres nivells o grups. El primer nivell (FIS 1) consta de dos entrades i una sortida (Risc). El segon grup (FIS 2), està



format per tres entrades i una sortida (Figura 5.3) i el tercer (FIS 3) està format per tres entrades i una sortida. Considerant, que el número de regles d'un sistema FIS pot calcular-se com $N_{regles} = N_{cd}^{N_{ve}}$ (Equació 4.19). El sistema té un total de $9+27+9= 45$ **regles difuses**.

- Grup 1: $3^2 = 9$ regles.
- Grup 2: $3^3 = 27$ regles.
- Grup 3: $3^2 = 9$ regles.

Per tal de relacionar tots els antecedents es necessari utilitzar diferents nexes d'unió com *i (and)*; *o (or)*; *no (not)*, anomenats també operadors lògics entre antecedents. Segons el tipus d'operador escollit, el resultat final d'una regla, pot ser diferent.

5.3.2.2.1.1 Operadors lògics entre antecedents

Els operadors lògics entre antecedents, s'utilitzen per relacionar els valors dels antecedents d'una regla amb un valor final del conseqüent d'aquella regla. Aquests valors són 0 o bé 1 en la lògica clàssica i graus de pertinença (números Reals entre [0,1]) en la lògica difusa. Les múltiples variables poden ser relacionades a través d'operadors lògics basats en operacions de lògica difusa d'acord amb les següents relacions:

- Operador lògic NO (not) → complement difús;
- Operador lògic I (and) → intersecció difusa;
- Operador lògic O (or) → unió difusa.

Tenint dos conjunts A i B, es pot comprovar una relació entre la taula d'operacions lògiques (i; o; no) de la lògica clàssica i la taula d'operacions dels valors 0 i 1 (cas límit) dels connectors difusos (i; o; no), es veu clarament una forta equivalència entre la lògica difusa (Figura 5.7) i la lògica clàssica (Figura 5.8). Aquesta última, com ja s'ha comentat, és el cas límit de la lògica difusa:

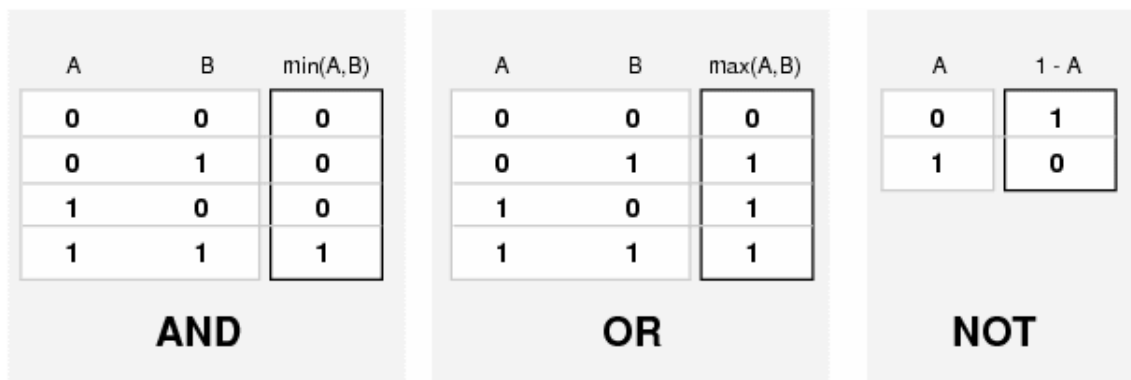


Figura 5.7 Operacions lògiques a través d'operadors difusos.



A	B	A and B
0	0	0
0	1	0
1	0	0
1	1	1

AND

A	B	A or B
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	1

OR

A	not A
0	1
1	0

NOT

Figura 5.8 Operacions lògiques a través d'operadors clàssics.

S'ha de tenir en compte que els operadors entre antecedents de la lògica difusa no només poden assignar els valors de 0 o bé 1, sinó que han de ser capaços de donar valors Reals entre 0 i 1 a les combinacions de dos o més antecedents. Perquè es pugui aconseguir, aquests connectors han de ser traduïts a funcions capaces d'assignar valors reals. Les funcions més utilitzades per a cada operador són [\(OLMO ET AL., 2008\)](#):

i. Operador "i" (*and*):

Funció producte: el mètode del producte, assigna com a grau de pertinença final de la regla, el valor del producte de tots els graus de pertinença dels antecedents.

$$\mu_{B_i}(z_i) = \text{prod}[\mu_{A_1}(x_1), \mu_{A_2}(x_2), \dots, \mu_{A_n}(x_n)] \quad \text{Equació 5.10}$$

Funció Mínim: el mètode del mínim, assigna com a grau de pertinença final de la regla, el valor mínim dels graus de pertinença dels antecedents.

$$\mu_{B_i}(z_i) = \text{min}[\mu_{A_1}(x_1), \mu_{A_2}(x_2), \dots, \mu_{A_n}(x_n)] \quad \text{Equació 5.11}$$

On:

- x_1, x_2, \dots, x_n són els antecedents
- A_1, A_2, \dots, A_n són els conjunts difusos (variables lingüístiques) dels antecedents
- z_i és el conseqüent de la regla i , essent $i: 1, 2, \dots, n^{\text{e}}$ regles del sistema
- B_i és el conjunt difús resultant de la regla avaluada, per $i=1, 2, \dots, n^{\text{e}}$ regles sistema

ii. Operador "o" (*or*):

Funció del màxim: assigna com a grau de pertinença final de la regla, el valor màxim dels graus de pertinença dels antecedents.



$$\mu_{B_i}(z_i) = \max[\mu_{A_1}(x_1), \mu_{A_2}(x_2), \dots, \mu_{A_n}(x_n)] \quad \text{Equació 5.12}$$

iii. Operador "no" (*not*):

Funció complementària: negacions estrictes, que representen el conjunt complementari.

$$\mu_{\bar{A}}(x) = 1 - \mu_A(x) \quad \text{Equació 5.13}$$

Per exemple, d'aquesta manera, si es té una regla amb un antecedent de la forma:

“Si x_1 és A_1 i x_2 és A_2 i x_3 és A_3 i ... x_n és A_n ; llavors z és B ”

Es pot calcular, el grau de pertinença final del conseqüent de la regla traduint els operadors lògics 'i' dels antecedents per les funcions del mínim o del producte.

Generalment, l'operador lògic entre antecedents més utilitzat en les aplicacions de lògica difusa mediambientals és l'operador 'i' ([KAMPICHLER I PLATEN 2004](#); [OCAMPO ET AL., 2006](#); [DAHIYA ET AL., 2007](#); [MISTRI ET AL., 2008](#); [FERRARO 2009](#)). Per tant, en aquest estudi s'ha escollit l'operador 'i' com a connector dels antecedents de les regles del model de risc desenvolupat.

Escollint aquest operador, les funcions característiques a triar per obtenir el resultat final de cada regla, són el *mínim* i el *producte*. Tal i com s'ha comentat, el mínim assigna com a grau de pertinença del conseqüent, el grau de pertinença mínim dels antecedents. En el cas del producte, calcula el grau de pertinença del conseqüent, com el producte dels graus de pertinença dels antecedents de la regla.

S'ha cregut important tenir en compte el pes de les diferents variables del sistema alhora d'obtenir un valor final de risc. Per a fer-ho s'ha utilitzat la informació provinent dels qüestionaris dels experts obtinguts per [PUJOLASUS \(2011\)](#) i [BETRÓ \(2011\)](#).

Tenint en consideració la importància de les variables del model, doncs, s'ha aconseguit calcular el grau de pertinença final de les regles (conseqüents). D'aquesta manera, el sistema ha adquirit més consistència i precisió, i de forma indirecta també s'ha introduït un pes per a cada regla del model.

Finalment, un cop calculats els graus de pertinença dels conseqüents de les regles, els següents passos són la **Implicació** i l'**Agregació** d'aquestes regles.

5.3.2.2.2 Implicació

La implicació és un procés gràfic en el que per a cada regla que participa en el sistema, el grau de pertinença de la part conseqüent (és a dir, la sortida de la part dels operadors) es transforma en una àrea. L'extensió i la forma d'aquesta àrea depenen tant dels conjunts difusos que representen la part conseqüent de la regla i el mètode d'implicació. La unió de totes aquestes àrees formen el conjunt difús final de sortida del bloc d'inferència.



Hi ha diferents procediments gràfics per obtenir l'àrea final representativa d'una regla del sistema difús. Tots aquests procediments estan lligats als operadors utilitzats per unir els antecedents de les regles. En les aplicacions de la lògica difusa en l'enginyeria, on els antecedents d'una regla solen anar units per l'operador 'i', els mètodes característics de la implicació són el *mínim* i el *producte*.

- El *mínim* talla la funció del conjunt difús del conseqüent de la regla, en el valor del grau de pertinença mínim
- El *producte* escala la funció del conjunt difús del conseqüent de la regla

A la Figura 5.9 hi ha representats aquests dos processos d'implicació. Es pot observar com el mínim talla la funció del conseqüent pel grau de pertinença mínim dels antecedents de la regla. En canvi, en el producte es multiplica la funció del conseqüent per un factor reductor obtingut dels graus de pertinença dels antecedents de la regla.

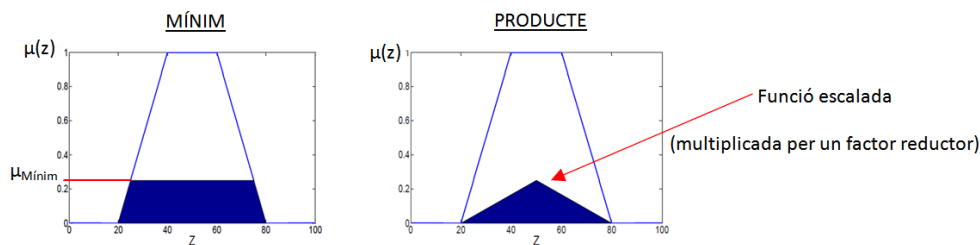


Figura 5.9 Processos d'implicació.

Abans d'aplicar el mètode d'implicació, cal assignar el pes de cada regla dins el sistema FIS que s'explicarà a l'apartat 5.3.3. A cada regla se li assignarà un pes, que dependrà de la importància d'aquella regla dins el sistema.

El mètode del mínim ha estat seleccionat per dissenyar el model d'aquest projecte ja que és un procés més comprensiu i detallat, en el qual es perd menys àrea i és el més utilitzat en la literatura ([KAMPICHLER I PLATEN \(2004\)](#); [OCAMPO ET AL. \(2006\)](#); [DAHIYA ET AL. \(2007\)](#); [FERRARO \(2009\)](#)).

Respecte les regles, a la Figura 5.10 es visualitza un cas d'estudi del conjunt FIS 2, on hi ha representat totes les regles del sistema. Aquelles que presenten una àrea de color blau pel conseqüent són les regles actives del punt d'estudi, i la resta són les inactives. Perquè una regla s'activi, en un cas concret d'estudi, ha de tenir graus de pertinença per tots els antecedents (àrees grogues). En aquest exemple, es pot veure com s'aplica el mètode del mínim per la implicació (es talla l'àrea pel valor mínim).



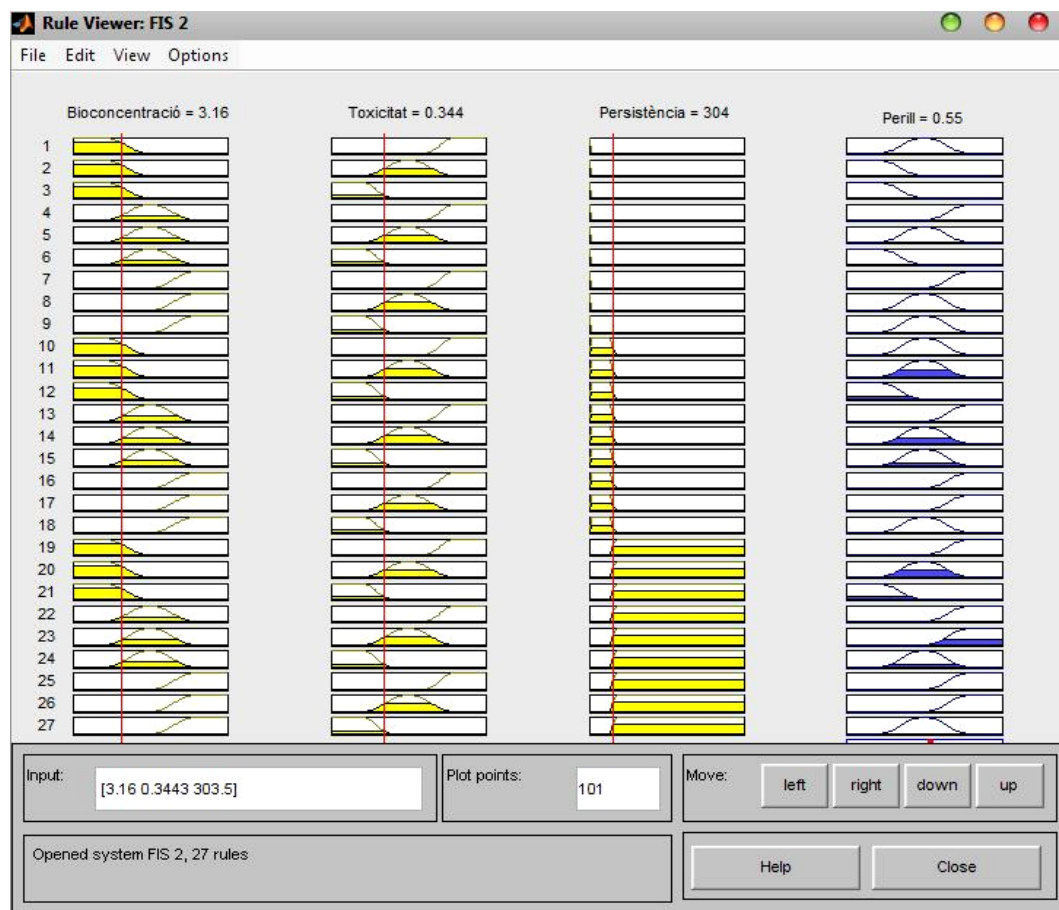


Figura 5.10 Regles actives i inactives.

Finalment, un cop s'ha aconseguit donar una àrea final a cada regla mitjançant la implicació, només queda agrupar aquestes àrees per formar el conjunt difús final de sortida (**Agregació**). Aquesta és la última fase del bloc d'inferència.

5.3.2.2.3 Agregació

Per trobar el valor de sortida, totes les regles emprades al sistema s'han de considerar. L'agregació és el procés encarregat de la unió lògica de totes les àrees obtingudes a la implicació de les regles actives del sistema, per aconseguir un resultat final únic. Aquest resultat final, és un conjunt difús on hi ha representat la participació de totes les regles actives del sistema. A partir d'aquest conjunt difús final es calcula el resultat final del sistema.

Aquesta agregació, tal com es descriu als treballs de [PUJOLASUS \(2011\)](#) i [BETRÓ \(2011\)](#) en general utilitza dos procediments per a obtenir el conjunt difús B de sortida:

- **Mètode màxim:** agrupa les àrees màximes de cada conjunt difús del conseqüent

$$\mu_B(z) = \max\{\mu_{B1}(z_1), \mu_{B2}(z_2), \dots, \mu_{Bn}(z_n)\} \quad \text{Equació 5.14}$$

- **Mètode suma algebraica:** suma totes les àrees dels conjunts difusos del conseqüent.



$$\mu_B(z) = \text{suma}\{\mu_{B_1}(z_1), \mu_{B_2}(z_2), \dots, \mu_{B_n}(z_n)\} \quad \text{Equació 5.15}$$

On:

- B, és el conjunt difús final de sortida
- B₁, B₂, ..., B_n els conjunts difusos obtinguts en la implicació per a cada regla.
- z₁, z₂, ..., z_n els elements dels conjunts difusos B

A la Figura 5.11, es representa un conjunt de regles actives d'un sistema FIS. A la part dreta d'aquestes regles, hi ha representats els dos mètodes d'agregació (màxim i suma). Tal com s'observa als conjunts difusos resultants de la part dreta de la Figura 5.11, es veu clarament com:

- El mètode del màxim, agafa l'àrea màxima activa (color blau) de cada conjunt difús del conseqüent i les agrupa per donar un resultat final.
- Contràriament, el mètode de la suma, dóna un conjunt final fruit de l'agregació de totes les àrees de les regles actives (color blau). En la representació de la Figura 5.11, la gràfica queda tallada al valor 1, però inclou l'àrea real pels càlculs (que seria superior).

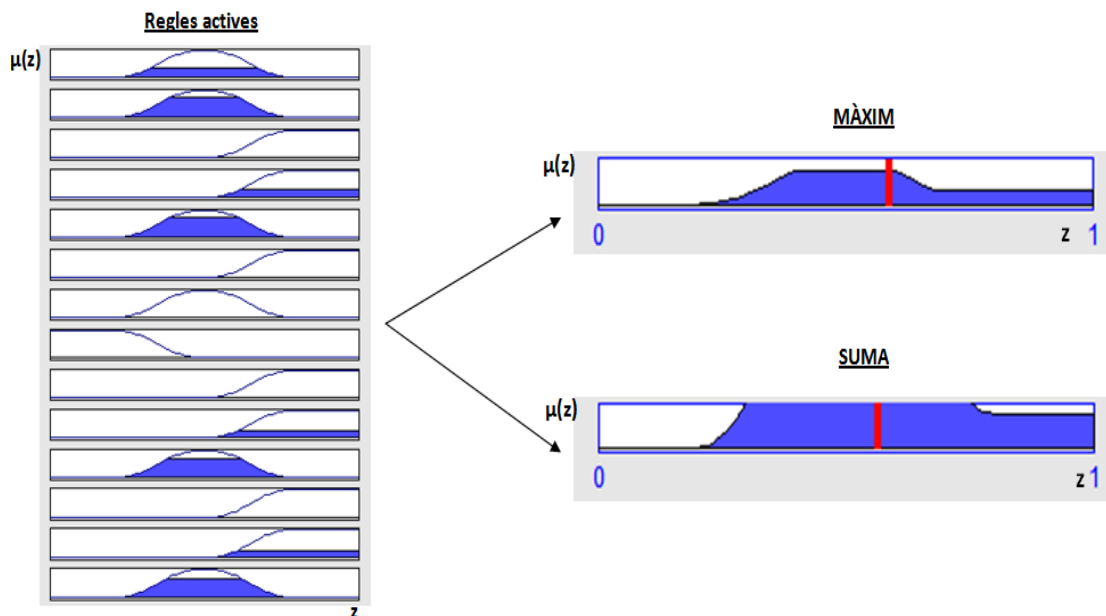


Figura 5.11 Mètodes d'agregació MÀXIM i SUMA.

En el desenvolupament dels conjunts FIS del model de risc d'aquest estudi, s'utilitza el màxim com a procés d'agregació del sistema, ja que s'ha considerat que és el més contrastat en els estudis de lògica difusa ([KAMPICHLER I PLATEN 2004](#); [OCAMPO ET AL., 2006](#); [DAHIYA ET AL., 2007](#)).

Seguidament, aquest conjunt difús resultant passa per un procés de defuzzificació per obtenir el valor de z final (Figura 5.12, color blau).



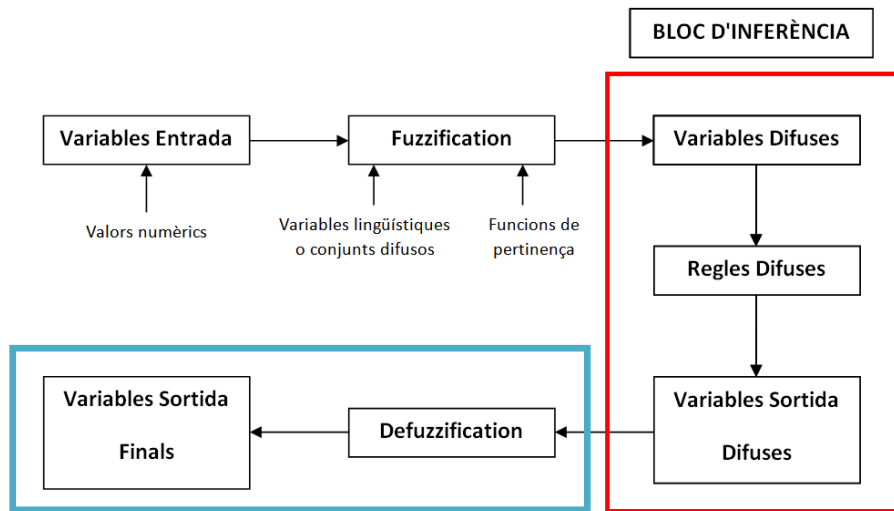


Figura 5.12 Procés defuzzification.

5.3.2.3 Defuzzification

La defuzzification actua inversament a la fuzzification. Rep com a entrada un conjunt difús provinent del bloc d'inferència i dóna com a resultat de sortida un valor concret de z. Per obtenir aquest valor final de la variable de sortida (z) s'apliquen mètodes matemàtics. Alguns dels més usats en lògica difusa per la seva simplicitat i efectivitat són:

- **Valor Gran, Mig o Petit del màxim** (Largest Of the Maximum (LOM), Middle Of the Maximum (MOM), Smallest Of the Maximum (SOM)): aquests tres mètodes fan referència al valor màxim que presenta la funció de pertinença global. En el cas del LOM s'agafaria el valor més gran del màxim, en el MOM el valor mig i en el SOM el valor mínim del màxim. Si la funció de pertinença presentés un màxim únic, MOM, SOM, i LOM tindrien el mateix valor.
- **Mètode del centroide:** utilitza com a sortida del sistema el valor corresponent al centre de gravetat de la funció de pertinença del conjunt de sortida. Matemàticament seria (KLIR I YUAN, 1995; ROSS ET AL., 2004):

$$\bar{z} = \frac{\int z\mu_B(z)dz}{\int \mu_B(z)dz} \quad \text{Equació 5.16}$$

A la figura 5.13 es poden veure representats per a un cas concret, els mètodes comentats:



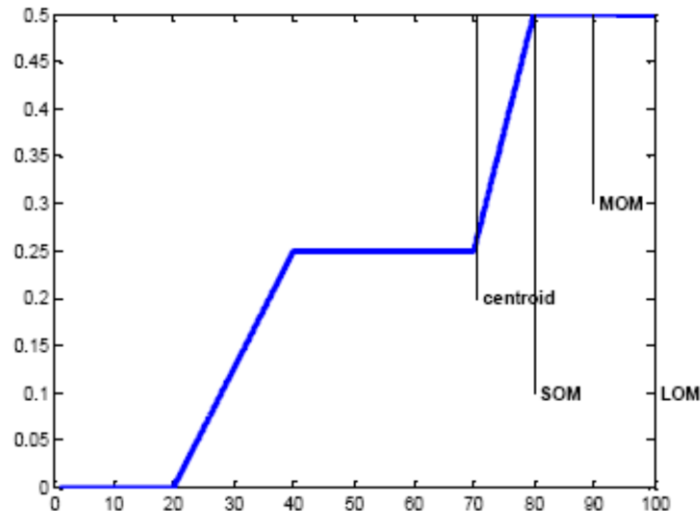


Figura 5.14 Representació gràfica dels valors finals dels quatre mètodes d'un exemple genèric.

El mètode del centroide representa una forma més gradual de discutir els resultats respecte els altres mètodes i és el procediment més utilitzat en la literatura ([KAMPICHLER I PLATEN 2004](#); [OCAMPO ET AL., 2006](#); [ROVEDA ET AL., 2010](#)). Per tant, aquest és el procés de defuzzificació utilitzat en el model de risc desenvolupat en aquest estudi.

En el cas particular de la figura 5.15, s'obtenen els següents valors de z:

- Centroide: $\bar{z}=70$
 - SOM: $z=80$
 - MOM: $z=90$
 - LOM: $z=100$
- } Efectivament, el centroide és més gradual

Un cop obtingut el valor de z final, s'agafa el valor i s'introdueix en el gràfic on hi ha representats els conjunts difusos d'aquesta variable z de sortida, per tal d'observar els graus de pertinença finals i discutir aquest valor de Z_{final} d'una forma qualitativa.

Cadascun dels tres sistemes FIS que constitueixen el model final de risc, han estat construïts de la mateixa manera i amb els mateixos paràmetres representatius de cada part del sistema FIS tipus Mamdani. A continuació, s'explica com mitjançant els qüestionaris realitzats per [PUJOLASUS \(2011\)](#) i [BETRÓ \(2011\)](#) s'ha obtingut la informació necessària dels experts i posteriorment, com s'han obtingut els pesos indirectes de les variables del sistema.

5.3.3 Els pesos de les variables

El reconeixement dels pesos o importància de les variables involucrades en un sistema, és un aspecte bastant innovador en els sistemes difusos desenvolupats per a l'avaluació del risc ambiental. Per tant, la introducció d'aquests pesos en les diferents variables de forma indirecta en aquest estudi representa un valor afegit més al projecte, gràcies a la informació provinent del qüestionari creat per [PUJOLASUS \(2011\)](#) i [BETRÓ \(2011\)](#).



Els pesos assignats segons els resultats del qüestionari són els que es veuen a la Taula 5.13. Com es pot veure la majoria d'experts consideren que les variables dels Grups 1 i 3 tenen una importància igual dins el seu grup. En canvi, en el Grup 2, la Toxicitat és més important que la Persistència i l'Acumulació, amb uns pesos de 0,5; 0,25 i 0,25 respectivament. Aquests pesos juntament amb l'avaluació de les regles fetes pels experts que han omplert el qüestionari realitzat per [PUJOLASUS \(2011\)](#) i [BETRÓ \(2011\)](#), han sigut tinguts en compte a l'hora de desenvolupar el model d'aquest projecte. D'aquesta manera, s'ha tingut present el diferent grau d'importància de cada variable a l'hora d'avaluar el risc.

Taula 5.13 Els pesos de les variables del sistema.

Grup 1	<i>Perill</i>	0,5
	<i>Exposició</i>	0,5
Grup 2	<i>Persistència</i>	0,25
	<i>Bioconcentració</i>	0,25
Grup 3	<i>Toxicitat</i>	0,5
	<i>Toxicitat humana</i>	0,5
	<i>Toxicitat biològica</i>	0,5

5.3.4 Exemple de procediment mitjançant lògica difusa

Tal com s'ha fet a l'apartat 5.2.4 per la metodologia COMMPS, s'ha realitzat un exemple de la metodologia de resolució de lògica difusa. A l'igual que en el mètode COMMPS, també es mostra un exemple d'una substància en concret a l'annex D (DEPH a la depuradora del Besòs l'any 2010). El procediment de resolució, d'acord amb la Figura 5.3, serà el següent:

- S'introdueixen els valors de toxicitat ambiental i toxicitat humana de la substància en qüestió (depuradora del Besòs) a la Fuzzy Toolbox de MATLAB™ (Sistema FIS 3). Així s'obté el valor de toxicitat.
- S'introdueixen els valors de toxicitat determinats al punt anterior, persistència i bioconcentració a la Fuzzy Toolbox de MATLAB™ (Sistema FIS 2). Així s'obté el valor de perill. En el cas de les substàncies metàl·liques, el valor obtingut de la toxicitat són directament equivalents al perill, ja que no es contempla ni la persistència ni la bioconcentració, d'acord amb els criteris establerts a la secció 5.1.3.
- Per últim, s'introdueixen els valors de perill i exposició a la Fuzzy Toolbox de MATLAB™ (Sistema FIS 3). Així s'obté el valor final de risc per aquesta substància.

Si es vol determinar el risc existent de totes les substàncies en una depuradora, s'han de realitzar tots els passos abans descrits per cada una d'elles.



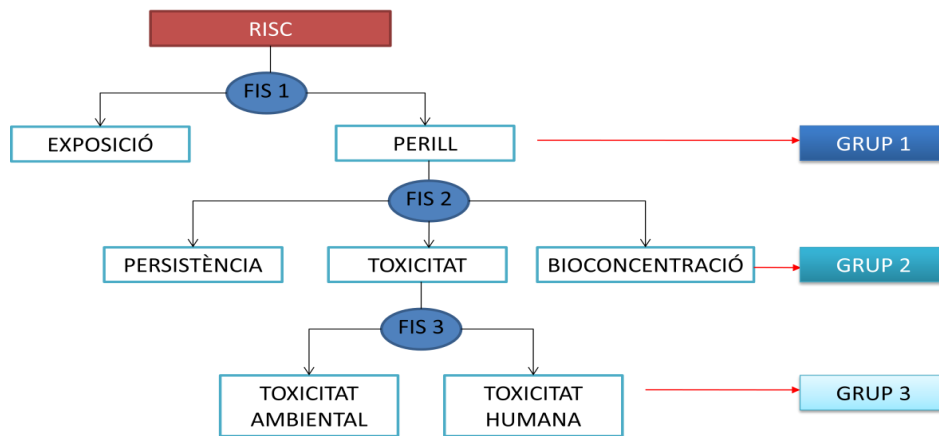


Figura 5.3 Esquema general del model de risc (3 SISTEMES FIS).

A la Taula 5.14, es mostra el pas *a*, de tal manera que es pot observar els valors de la toxicitat ambiental, els de toxicitat humana, i la puntuació que rep la toxicitat a cada substància, pel cas de la depuradora del Besòs, a l'any 2010.

Taula 5.14 Obtenció de la toxicitat (FIS 3)

Substància	Toxicitat ambiental PNEC (mg·l ⁻¹)	Toxicitat humana	Toxicitat
Arsènic i compostos (com As)	0,0001	0	0,477
Crom i compostos (com Cr)	0,000575	0	0,178
Coure i compostos (com Cu)	0,00006	0	0,492
Niquel i compostos (com Ni)	0,0002	8	0,822
Plom i compostos (com Pb)	0,00008	2	0,178
Zinc i compostos (com Zn)	0,0026	0	0,178
1,2 Dicloroetà	0,02	0	0,178
Tetracloretilè (PER)	0,051	0	0,183
Tetraclorometà (TCM)	0,007	8	0,822
Tricloroetilè (TRI)	0,115	8	0,615
Triclorometà	0,0008	8	0,822
Lindà (Gamma-HCH)	0,00029	0	0,193
Naftalè	0,0024	0	0,178
Benzo (a) atracene	0,00001	10	0,822
Simazina	0,00072	8	0,822
Isoproturon	0,0003	8	0,809
Diuron	0,00005	4	0,645
Ftalat de bis (2-etilhexil) (DEPH)	0,01	2	0,178
Nonilphenol	0,00033	0	0,188
Nonilfenol etoxilats (NPEO2)	0,00001	0	0,5
Octilfenol	0,00001	0	0,5



A la Taula 5.15 es mostra el pas *b*, de tal manera que es pot observar els valors de la bioconcentració, els de persistència i la toxicitat obtinguda en el pas *a*, i la puntuació que rep el perill a cada substància.

Taula 5.15 Obtenció del perill (FIS 2)

Substància	Bioconcentració	Persistència $T_{1/2}$ (dies)	Toxicitat	Perill
Arsènic i compostos (com As)	-	-	0,477	0,477
Crom i compostos (com Cr)	-	-	0,178	0,178
Coure i compostos (com Cu)	-	-	0,492	0,492
Niquel i compostos (com Ni)	-	-	0,822	0,822
Plom i compostos (com Pb)	-	-	0,485	0,485
Zinc i compostos (com Zn)	-	-	0,178	0,178
1,2 Dicloroetà	0	10	0,178	0,178
Tetraclorètilè (PER)	0	32	0,183	0,178
Tetraclorometà (TCM)	0	300	0,822	0,654
Triclorètilè (TRI)	0	321	0,615	0,504
Triclorometà	0	31	0,822	0,5
Lindà (Gamma-HCH)	7	732	0,193	0,5
Naftalè	7	2.96	0,178	0,433
Benzo (a) atracene	10	1.36	0,822	0,822
Simazina	0	59	0,822	0,5
Isoproturon	0	1350	0,809	0,822
Diuron	0	64	0,645	0,5
Ftalat de bis (2-etilhexil) (DEPH)	7	1935	0,178	0,5
Nonilphenol	7	16	0,188	0,5
Nonilfenol etoxilats (NPEO2)	10	16	0,5	0,822
Octilfenol	10	40	0,5	0,822

Finalment, la Taula 5.16 mostra el pas *c*, de tal manera que es pot observar els valors de la exposició, i el perill obtingut en el pas *b*, i la puntuació que rep de risc a cada substància. A la darrera columna, es mostra la categorització del risc qualitatiu per una fàcil comprensió de les dades.

Taula 5.16 Obtenció del risc al Besòs l'any 2010 (FIS 1)

Substància	Exposició C_i ($\mu\text{g}\cdot\text{l}^{-1}$)	Perill	RISC	Risc qualitatiu
Arsènic i compostos (com As)	2,800	0,477	0,496	Mitjà
Crom i compostos (com Cr)	4,100	0,178	0,251	Baix
Coure i compostos (com Cu)	4,100	0,492	0,500	Mitjà
Niquel i compostos (com Ni)	20,900	0,822	0,757	Alt
Plom i compostos (com Pb)	1,300	0,485	0,431	Mitjà



Zinc i compostos (com Zn)	29,700	0,178	0,338	Baix-Mitjà
1,2 Dicloroetà	0,010	0,178	0,0876	Negligible
Tetracloroetilè (PER)	0,209	0,178	0,096	Negligible
Tetraclorometà (TCM)	0,010	0,654	0,381	Mitjà-Baix
Tricloroetilè (TRI)	0,204	0,504	0,258	Baix
Triclorometà	0,010	0,5	0,250	Baix
Lindà (Gamma-HCH)	0,048	0,5	0,250	Baix
Naftalè	0,00005	0,433	0,246	Baix
Benzo (a) atracene	0,013	0,822	0,500	Mitjà
Simazina	0,004	0,5	0,250	Baix
Isoproturon	0,030	0,822	0,500	Mitjà
Diuron	0,117	0,5	0,252	Baix
Ftalat de bis (2-etilhexil) (DEPH)	0,00005	0,5	0,250	Baix
Nonilphenol	0,372	0,5	0,273	Baix
Nonilfenol etoxilats (NPEO2)	0,075	0,822	0,501	Mitjà
Octilfenol	0,653	0,822	0,561	Mitjà

En aquest cas, també es pot fer un índex de situació que correspondria al promig del valor de risc obtingut per cada substància en aquell punt (veure secció 5.1.3, tercer criteri).

Un cop explicada la metodologia de treball necessària per implementar el model d'avaluació de risc ambiental basat en lògica difusa, en la secció següent es presenten els resultats obtinguts i s'avalua el funcionament general del model.



6 RESULTATS I DISCUSSIÓ

En aquest apartat es presenten els principals resultats extrets d'aplicar els dos mètodes estudiats en aquest projecte, COMMPS i lògica difusa. Cal dir però, que el total de resultats d'aplicar les dues metodologies a totes les depuradores i substàncies es troba a l'annex E.3. En primer lloc, es presenta l'índex de situació de cada depuradora. Després, es presenta la categorització del risc de cada depuradora amb els 2 mètodes. Posteriorment, es presenta la diferència de risc de cada substància a totes les depuradores entre el mètode COMMPS i el de lògica difusa a l'estudi de la mitjana de les substàncies comuns. Finalment, es presenta l'índex de situació normalitzat de la mitjana de les substàncies comuns.

6.1 Índex de situació de les depuradores estudiades

A continuació, es presenten els valors de l'índex de situació obtinguts a través de les dues metodologies, COMMPS i lògica difusa. També es presenten els resultats a través de les dues formes d'estudi, estudiant cada any independentment dels altres i estudiant la mitja de les substàncies que estiguin representades durant els tres anys.

Per tal d'assimilar un model a l'altre i poder fer una comparativa qualitativa i quantitativa, es necessari emprar una equació que tingui aquesta capacitat. En aquest projecte, s'ha optat per emprar l'equació 5.6, de la metodologia del COMMPS, adaptada al model de lògica difusa.

Això implica haver de retocar lleugerament l'equació 6.6 de tal forma que quedi tal com:

$$I_{site_j} = \frac{\sum_{i=1}^n Risc_{i,j}}{n} \quad \text{Equació 6.1}$$

També s'ha dividit per 100 els valors de l'índex de prioritat del mètode COMMPS per poder treballar a la mateixa escala que amb lògica difusa, que va de 0 a 1.

D'aquesta forma doncs, l'escala de totes dos metodologies és la mateixa i hom es capaç de fer una comparativa i analitzar les diferències més notables entre un procediment i l'altre.

6.1.1 Resultats any 2008

Tal com es mostra a la Figura 6.1, el valor de risc per depuradores (índex de situació) és sempre lleugerament superior quan es fa servir el mètode de lògica difusa. De totes formes, es segueix una relació bastant similar entre un mètode i l'altre tret de Vic on la diferència és major degut a la influència de la variable introduïda al model de lògica difusa de persistència que fa augmentar notablement el seu risc ja que té substàncies com l'isoproturon i el DEPH que són molt persistents. També és degut a l'alt valor de risc del 1,2-dicloroetà al mètode de lògica difusa (al voltant de 0,25) comparat amb el de COMMPS (al voltant de 0,10).



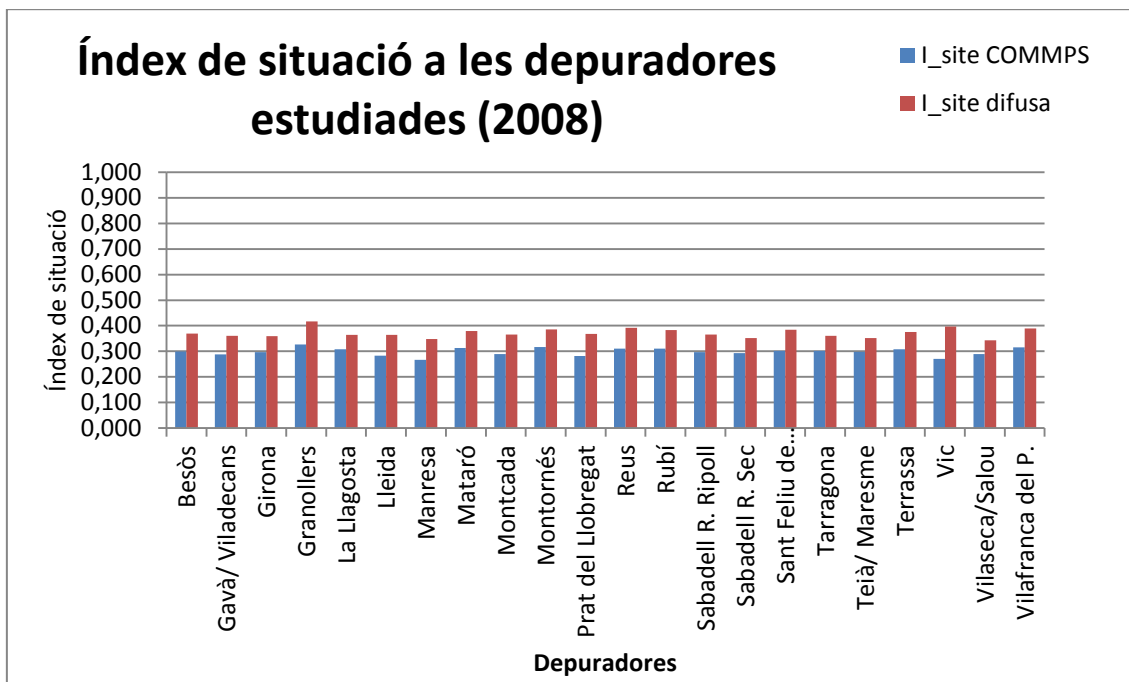


Figura 6.1 Índex de situació de les depuradores estudiades a l'any 2008

6.1.2 Resultats any 2009

Tal com es mostra a la Figura 6.2, el comportament és similar al de l'any 2008. A Teià/Maresme però, la diferència és major degut als rangs de les variables estudiades, que tenen solapament, que fa augmentar lleugerament el seu risc en relació a la resta.

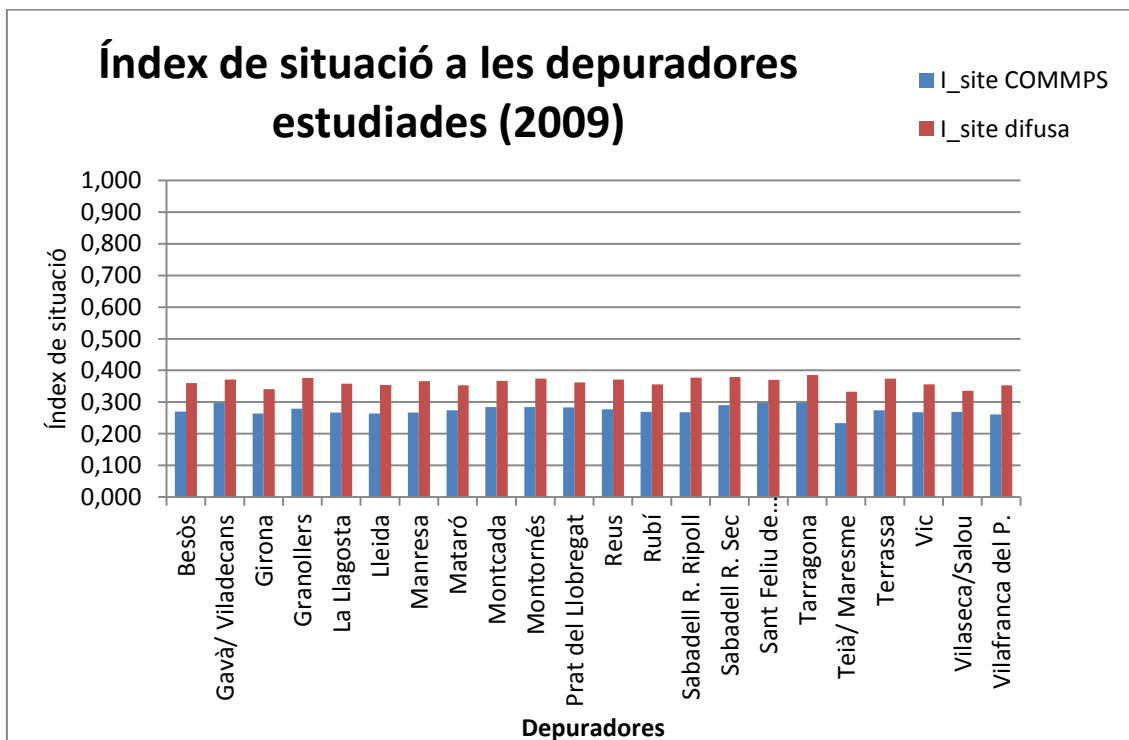


Figura 6.2 Índex de situació de les depuradores estudiades a l'any 2009



6.1.3 Any 2010

Tal com es mostra a la Figura 6.3, el comportament és similar al dels anys 2008 i 2009. A Granollers però, la diferència és major degut a la influència de la variable introduïda al model de lògica difusa de persistència que fa augmentar notablement el seu risc en relació a la resta.

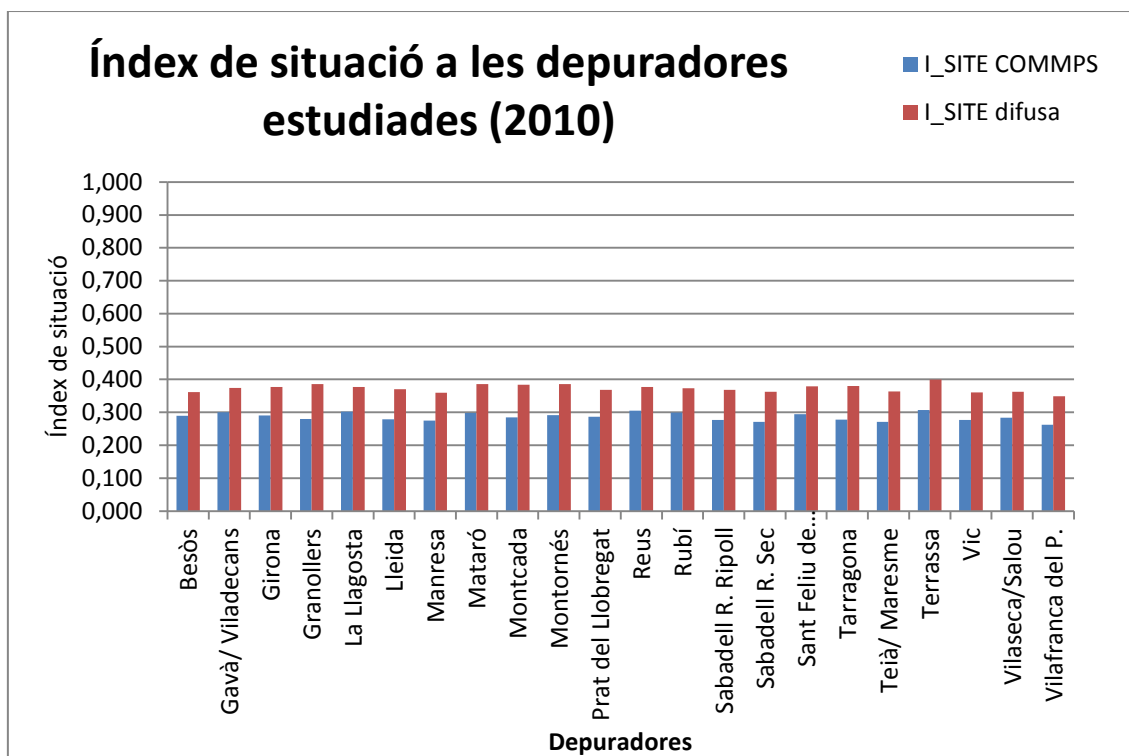


Figura 6.3 Índex de situació de les depuradores estudiades a l'any 2010

Per tal de veure les diferències més remarcables als tres anys s'han escollit 3 depuradores que representen un valor relatiu alt de risc, un mitjà i un baix. També s'inclou la categorització de risc (veure secció 6.2) de cada depuradora tant per COMMPS, com per lògica difusa. Les depuradores escollides han estat: Granollers, Prat del Llobregat i Vilaseca/Salou. Tots els valors de risc de les substàncies que s'exposen es poden trobar a l'annex E.3.

a. Granollers:

- A l'any 2008 Granollers: en el cas del COMMPS té un índex de situació de 0,327 (risc mig) i en el cas de la lògica difusa té un valor de 0,417 (73% risc mig, 27% baix). Aquest elevat índex de situació és degut a la concentració més elevada respecte a les altres depuradores de les següents substàncies: plom, níquel, zinc, lindà, simazina, diuron, nonilfenol etoxilats, octilfenol etoxilats, monofenil estany i difenil estany.
- A l'any 2009 Granollers: en el cas del COMMPS té un índex de situació de 0,279 (baix) i en el cas de la lògica difusa té un valor de 0,376 (47% risc mig, 53% baix). Respecte l'any anterior, es redueix l'índex de situació degut a que en aquest cas, les concentracions de les substàncies que estan per sobre de la mitjana són menys.



En aquest cas, les substàncies que es troben per sobre de la mitjana són: el plom i el zinc lleugerament per sobre, i el diuron i el difenil estany de forma significativa.

- A l'any 2010 Granollers: en el cas del COMMPS té un índex de situació de 0,280 i en el cas de la lògica difusa té un valor de 0,386 (52% risc mig, 48% baix). Respecte l'any anterior, s'augmenta lleugerament l'índex de situació degut a que en aquest cas, les concentracions de les substàncies que estan per sobre de la mitjana són més significatives. En aquest cas, les substàncies que es troben per sobre de la mitjana són: el diuron, el DEPH i l'octilfenol. En aquest cas però, la concentració de crom es redueix.
- b. Prat del Llobregat:
- A l'any 2008: en el cas del COMMPS té un índex de situació de 0,282 (baix) i en el cas de la lògica difusa té un valor de 0,369 (40% risc mig, 60% baix). Aquesta depuradora es troba al mig entre les que tenen un risc més alt i les que tenen el risc més baix, per tant, en general les concentracions de les substàncies es troben en la mitjana de la resta de depuradores. De totes formes cal destacar: el risc baix del plom, del monobutil estany, del monofenil estany i del difenil estany, i l'elevada concentració respecte a la resta de depuradores del nonilfenol etoxilats i del octifenol etoxilats
 - A l'any 2009: en el cas del COMMPS té un índex de situació de 0,283 (baix) i en el cas de la lògica difusa té un valor de 0,362 (36% risc mig, 64% baix). Respecte l'any anterior, l'índex de situació disminueix lleugerament en el cas de lògica difusa i augmenta sensiblement en el COMMPS. Això és degut a la diferència d'estructura entre un mètode i l'altre que fa que el valor de perill i, per tant de risc, difereixi lleugerament. Es destaquen les següents substàncies: plom i nonilfenol etoxilats que estan per sobre de la mitjana i el monobutil estany i el difenil estany que es troben clarament per sota.
 - A l'any 2010: en el cas del COMMPS té un índex de situació de 0,287 (baix) i en el cas de la lògica difusa té un valor de 0,368 (40% risc mig, 60% baix). En aquest cas els dos mètodes segueixen la mateixa tendència i s'augmenta sensiblement l'índex de situació. Les concentracions a destacar de les substàncies són: simazina i octilfenol per sobre de la mitjana i el plom per sota.
- c. Vilaseca/Salou:
- A l'any 2008: en el cas del COMMPS té un índex de situació de 0,289 (baix) i en el cas de la lògica difusa té un valor de 0,343 (22% risc mig, 78% baix). Aquesta última depuradora és de tipus risc baix, per tant tindrà valors de concentració baixos o que es trobin a la mitjana. En aquest cas es destaca: el baix valor de zinc i difenil estany.
 - A l'any 2009: en el cas del COMMPS té un índex de situació de 0,269 (baix) i en el cas de la lògica difusa té un valor de 0,353 (26% risc mig, 74% baix). Respecte l'any anterior, l'índex de situació augmenta en el cas de lògica difusa i disminueix en el COMMPS. Això és degut a la diferència d'estructura entre un mètode i l'altre que fa que el valor de perill i, per tant de risc, difereixi. Es pot destacar: l'augment de concentració del plom respecte l'any anterior i de nonilfenol etoxilats.



- A l'any 2010: en el cas del COMMPS té un índex de situació de 0,284 (baix) i en el cas de la lògica difusa té un valor de 0,362 (36% risc mig, 64% baix). En aquest cas els dos mètodes segueixen la mateixa tendència i s'augmenta sensiblement l'índex de situació. Les concentracions a destacar de les substàncies són: simazina i octilfenol que fan augmentar el risc notablement i el crom que disminueix respecte els anys anteriors.

En tots tres casos es pot comprovar, com a l'any 2010 hi ha un augment significatiu de risc degut a la presència de l'octilfenol. Aquesta substància doncs, és de vital importància poder localitzar-la a l'origen d'emissió per tal de minimitzar el risc que pugui ocasionar. També s'ha pogut extreure que a pesar de petites diferències el comportament d'ambdós mètodes és similar i, en tot cas, el risc sempre és més elevat pel mètode de lògica difusa i per tant, més conservador.

6.1.4 Mitjana de les substàncies comuns

A continuació, es mostra el risc de les substàncies comuns, és a dir, presents a les 3 campanyes. En aquest cas s'agafa el valor promig dels 3 anys. Així doncs, aquests resultats són més significatius que els anteriors en els quals només hi havia una sola mostra per any (veure Taula 5.2). Tal com es mostra a la Figura 6.4, també en aquest cas, lògicament, el valor de risc per depuradores (índex de situació) és sempre lleugerament superior quan es fa servir el mètode de lògica difusa. De totes formes, es segueix una relació bastant similar entre un mètode i l'altre tret de Granollers on la diferència és major degut a la influència de la variable introduïda al model de lògica difusa de persistència i l'estructura del mètode que fan augmentar lleugerament el seu risc.

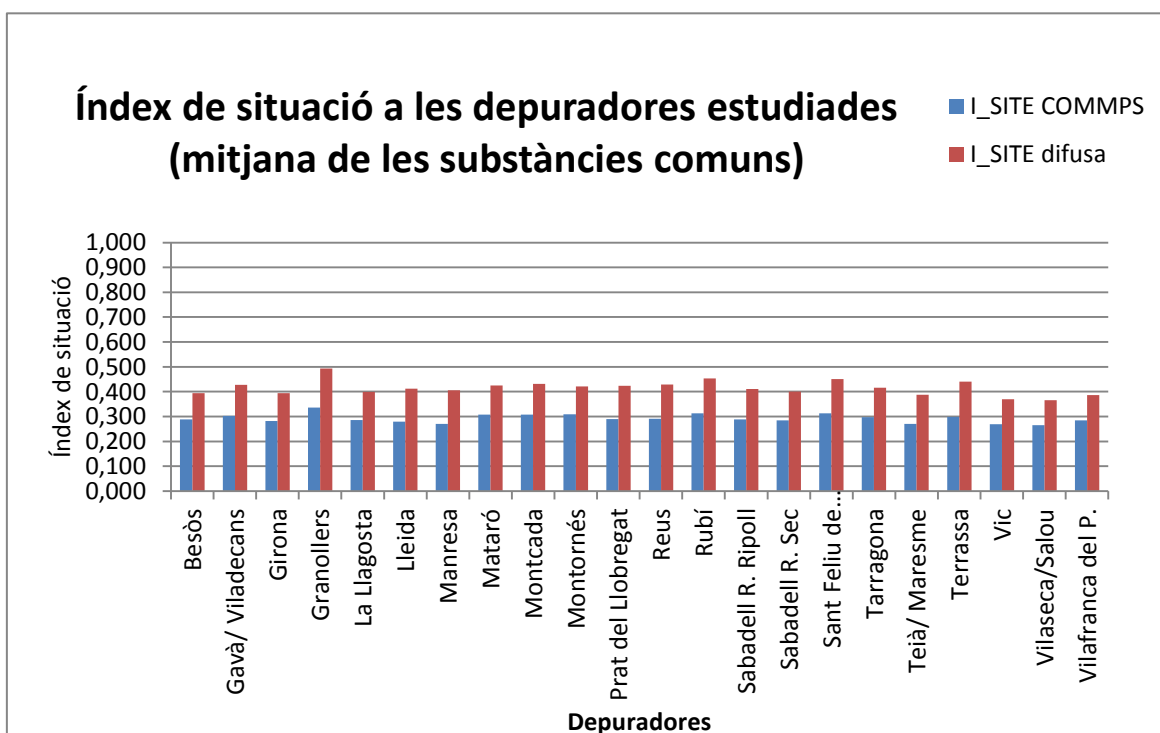


Figura 6.4 Índex de situació de les depuradores estudiades

6.2 Categorització del risc

A continuació es presenta una comparació qualitativa dels resultats obtinguts a través de l'índex de situació. Per poder realitzar aquesta comparativa és necessari assignar uns rangs qualitius al mètode COMMPS que segueixen les bases de lògica aristotèlica (veure Taula 6.1). Així doncs, s'aconsegueix categoritzar el risc a través del COMMPS com a novetat del mètode.

Taula 6.1 Rangs dels valors qualitius pel mètode COMMPS

Rang	Valor qualitatiu de risc
0-0,1	Negligible
0,1-0,3	Baix
0,3-0,5	Mig
0,5-0,8	Alt
0,8-1	Molt alt

Pel cas de la lògica difusa, aquesta categorització ve donada per la següent gràfica:

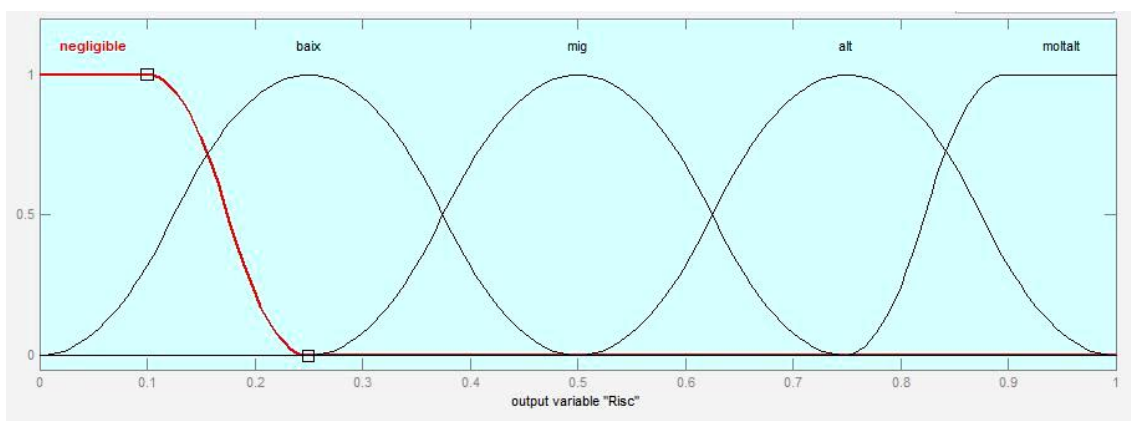


Figura 6.5 Rangs de risc per lògica difusa

En la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia.** es mostra el valor quantitatiu obtingut mb els dos mètodes acompanyat per la categorització del risc. Els resultats obtinguts per les tres campanyes es presenten a l'annex E.4.

Taula 6.2 Valors qualitius de COMMPS i de lògica difusa de les substàncies comunes

Depuradora	I_site COMMPS	I_site difusa	Valor qualitatiu COMMPS	Valor qualitatiu difús
Besòs	0,289	0,394	Baix	64% Mig, 36% Baix
Gavà/ Viladecans	0,303	0,428	Mig	90% Mig, 10% Baix
Girona	0,282	0,394	Baix	64% Mig, 36% Baix
Granollers	0,335	0,494	Mig	99% Mig, 1% Baix
La Llagosta	0,286	0,399	Baix	66% Mig, 34% Baix



Lleida	0,279	0,412	Baix	73% Mig, 27% Baix
Manresa	0,270	0,405	Baix	71% Mig, 29% Baix
Mataró	0,308	0,425	Mig	85% Mig, 15% Baix
Montcada	0,308	0,432	Mig	88% Mig, 12% Baix
Montornès	0,308	0,421	Mig	80% Mig, 20% Baix
Prat del Llobregat	0,290	0,424	Baix	84% Mig, 16% Baix
Reus	0,291	0,429	Baix	87% Mig, 13% Baix
Rubí	0,313	0,453	Mig	93% Mig, 7% Baix
Sabadell R. Ripoll	0,288	0,411	Baix	73% Mig, 27% Baix
Sabadell R. Sec	0,285	0,400	Baix	68% Mig, 32% Baix
Sant Feliu de Llobregat	0,312	0,451	Mig	92% Mig, 8% Baix
Tarragona	0,297	0,416	Baix	75% Mig, 25% Baix
Teià/ Maresme	0,271	0,388	Baix	61% Mig, 39% Baix
Terrassa	0,299	0,440	Baix	90% Mig, 10% Baix
Vic	0,269	0,370	Baix	47% Mig, 53% Baix
Vilaseca/Salou	0,265	0,365	Baix	46% Mig, 54% Baix
Vilafranca del P.	0,284	0,387	Baix	62% Mig, 38% Baix

Com es pot veure, mentre que per la metodologia COMMPS, el risc té valors clàssics i sense solapament, és a dir, una depuradora és caracteritzada per risc alt, mig o baix. En canvi, amb la lògica difusa aquesta mateixa depuradora pot pertànyer a dues categories al mateix temps. Per exemple, la depuradora de Montcada, segons el mètode COMMPS seria considerada de risc mig, i en canvi amb la metodologia difusa tindria un 12% de participació del risc baix i un 88% al mitjà. Amb aquesta interpretació més qualitativa, encara es pot observar més el valor conservador de la lògica difusa.

Les tres depuradores amb un major índex de situació, tant mitjançant el mètode COMMPS com mitjançant la lògica difusa són per ordre descendent: Granollers, Rubí i Sant Feliu de Llobregat. A Granollers, s'observa un risc mig pel COMMPS, mentre que amb el mètode de lògica difusa el valor de risc correspon a un 99% de participació de risc mig i un 1% de risc baix. A Rubí, s'observa un risc mig pel COMMPS, mentre que amb el mètode de lògica difusa el valor de risc correspon a un 93% de participació de risc mig i un 7% de risc baix. I a Sant Feliu de Llobregat, s'observa un risc mig pel COMMPS, mentre que amb el mètode de lògica difusa el valor de risc correspon a un 92% de participació de risc mig i un 8% de risc baix.

Pel que fa a les depuradores amb un índex de situació més baix es troben: Vilaseca/Salou amb un risc baix pel COMMPS i per lògica difusa un 54% de risc baix i un 46% de risc mig i Vic amb un risc baix pel mètode COMMPS i un 53% de risc baix i un 47% de risc mitjà per lògica difusa.

Tal com es pot comprovar, el valor de risc es troba entre baix i mig a totes les depuradores durant els 3 anys. No hi ha cap depuradora que assoleixi el grau d'alt risc en cap dels dos mètodes. Això es deu a les baixes concentracions obtingudes de les substàncies.



6.3 Comparació entre COMMPS i lògica difusa per substàncies comunes

A continuació, es mostra la diferència entre els dos mètodes estudiats: COMMPS i lògica difusa pels índex de situació de les substàncies comunes als 3 anys utilitzant la mitjana. Els valors en negatiu i en color verd són aquells que els valors de risc de lògica difusa estan per sobre que mitjançant el mètode COMMPS (veure Taula 6.3, Taula 6.4 i Taula 6.5). Els resultats de cada any individual es mostren a l'annex E.3.

Taula 6.3 Mitjana de les substàncies comunes. Diferència entre el risc mitjançant COMMPS i lògica difusa (I)

Substància	Besòs	Gavà/ Viladecans	Girona	Granollers	La Llagosta	Lleida	Manresa	Mataró	Montcada
Arsènic i compostos	-0,161	-0,146	-0,134	-0,139	-0,159	-0,125	-0,143	-0,154	-0,168
Crom i compostos	0,024	0,027	0,029	0,046	0,036	0,010	0,029	0,030	0,041
Coure i compostos	-0,145	-0,118	-0,114	-0,119	-0,127	-0,109	-0,113	-0,136	-0,110
Níquel i compostos	-0,258	-0,244	-0,335	-0,245	-0,245	-0,350	-0,318	-0,246	-0,343
Plom i compostos	-0,006	0,007	0,030	-0,055	0,011	0,011	-0,101	-0,001	0,007
Zinc i compostos	-0,067	-0,198	-0,051	-0,198	-0,209	-0,053	-0,207	-0,135	-0,184
1,2 Dicloroetà	-0,161	-0,161	-0,161	-0,161	-0,161	-0,161	-0,161	-0,138	-0,139
Simazina	-0,104	-0,131	-0,122	-0,212	-0,127	-0,138	-0,088	-0,075	-0,102
Diuron	-0,045	-0,044	-0,039	-0,202	-0,046	-0,077	-0,110	-0,057	-0,039
Nonilfenol etoxilats	-0,046	-0,148	-0,026	-0,160	-0,026	-0,162	-0,033	-0,080	-0,024
Octilfenol etoxilats	-0,191	-0,219	-0,308	-0,297	-0,185	-0,313	-0,243	-0,292	-0,300

Taula 6.4 Mitjana de les substàncies comunes. Diferència entre el risc mitjançant COMMPS i lògica difusa (II)

Substància	Montornès	Prat del Llobregat	Reus	Rubí	Sabadell R. Ripoll	Sabadell R. Sec	Sant Feliu de Llob.	Tarragona
Arsènic i compostos	-0,151	-0,175	-0,178	-0,151	-0,163	-0,134	-0,180	-0,143
Crom i compostos	0,040	0,020	0,003	0,038	0,026	0,025	0,025	0,020
Coure i compostos	-0,113	-0,146	-0,138	-0,269	-0,114	-0,127	-0,136	-0,126
Níquel i compostos	-0,343	-0,248	-0,304	-0,252	-0,246	-0,300	-0,307	-0,323
Plom i compostos	-0,022	-0,006	-0,057	-0,116	0,032	0,018	0,027	0,003
Zinc i compostos	-0,207	-0,209	-0,039	-0,180	-0,160	-0,208	-0,164	-0,037



1,2 Dicloroetà	-0,140	-0,161	-0,161	-0,161	-0,161	-0,161	-0,141	-0,131
Simazina	-0,048	-0,137	-0,094	-0,083	-0,174	-0,120	-0,096	-0,078
Diuron	-0,038	-0,052	-0,074	-0,052	-0,040	-0,064	-0,127	-0,062
Nonilfenol etoxilats	-0,026	-0,182	-0,179	-0,027	-0,168	-0,025	-0,155	-0,141
Octilfenol etoxilats	-0,195	-0,187	-0,297	-0,289	-0,178	-0,174	-0,265	-0,295

Taula 6.5 Mitjana de les substàncies comunes. Diferència entre el risc mitjançant COMMPS i lògica difusa (III)

Substància	Teià/ Maresme	Terrassa	Vic	Vilaseca/Salou	Vilafranca del P.
Arsènic i compostos	-0,151	-0,165	-0,089	-0,084	-0,111
Crom i compostos	0,034	0,016	0,044	0,029	0,029
Coure i compostos	-0,109	-0,171	-0,140	-0,130	-0,127
Níquel i compostos	-0,337	-0,297	-0,256	-0,339	-0,308
Plom i compostos	-0,062	-0,006	0,032	0,018	0,027
Zinc i compostos	-0,074	-0,145	-0,080	-0,027	-0,155
1,2 Dicloroetà	-0,161	-0,161	-0,145	-0,135	-0,139
Simazina	-0,156	-0,143	-0,148	-0,125	-0,062
Diuron	-0,040	-0,201	-0,095	-0,103	-0,072
Nonilfenol etoxilats	-0,050	-0,043	-0,049	-0,034	-0,024
Octilfenol etoxilats	-0,180	-0,234	-0,179	-0,175	-0,182

Es pot veure com en general, el mètode de lògica difusa dona un valor més elevat de risc per una substància que el COMMPS, per això el valor és negatiu. Els casos en que el valor de risc per COMMPS dona per sobre (crom i plom), és degut a que presenten un valor baix de toxicitat (0,178) i en ser metalls, ja que en el cas de lògica difusa no es considera la seva bioconcentració ni la seva persistència. El valor de perill prové directament de la toxicitat. De totes formes, la diferència entre els dos mètodes és suficientment petita com per acceptar el model de lògica difusa com a vàlid.

6.4 Exemple Besòs

A la Figura 6.6 i a la Figura 6.7 es presenta una comparació de l'índex de prioritat per a cada substància cada any de les tres campanyes realitzades a la depuradora del Besòs. S'ha escollit aquesta depuradora ja que en els tres anys d'estudi té un valor similar de l'índex de situació. Com ja s'ha comentat, el resultat de l'índex de prioritat s'ha dividit per 100, per poder fer una comparativa entre el mètode COMMPS i la lògica difusa.

En els casos en que només apareix 1 barra és que la substància només era present en un any.

Es pot comprovar que, tant en el cas de COMMPS com en el de lògica difusa, els valors de més risc es presenten al níquel durant els tres anys (per la seva elevada toxicitat, que es transforma



directament en perill ja que al ser una substància metàl·lica no té bioconcentració ni persistència), seguit del nonilfenol, octilfenol etoxilats i de tributil estany. Els valors inferiors corresponen al 1,2 dicloroetà i tetracloretilè pel COMMPS (l'índex d'efectes és baix i la concentració és baixa) i tetracloretilè per lògica difusa (els valors de perill són baixos i la concentració és baixa).

Els casos que més difereixen són els de pentaclorfenol, isoproturon, ftalat de bis (2-etilhexil) i el 1,2 dicloroetà. Això, és degut als rangs definits per la toxicitat ambiental, que hauria de contemplar valors més baixos d'elevat PNEC tenint en compte que el valor de PNEC és inversament proporcional al seu risc potencial (veure 5.2.3.1). De totes formes, el valors calculats mitjançant lògica difusa són superiors, i per tant més conservadors.

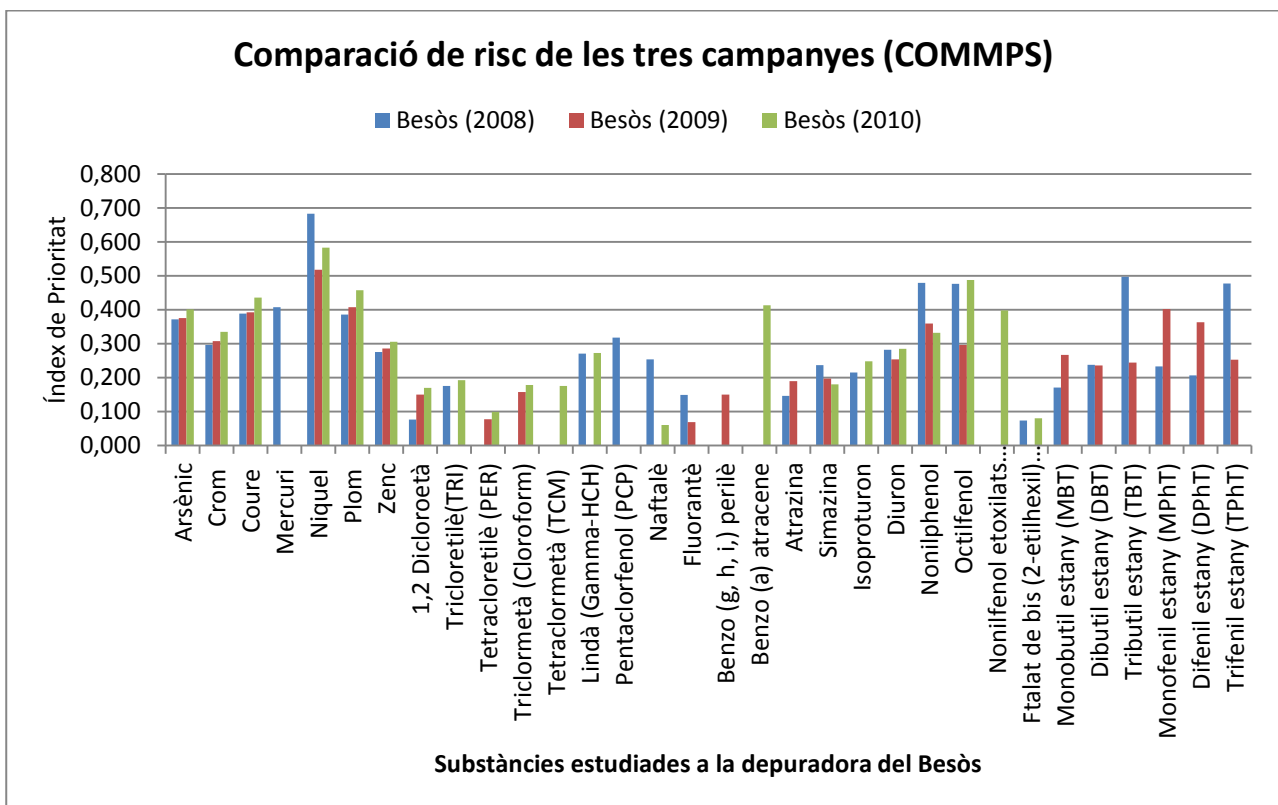


Figura 6.6 Risc de les substàncies a la depuradora del Besòs dels tres anys estudiats (COMMPS)



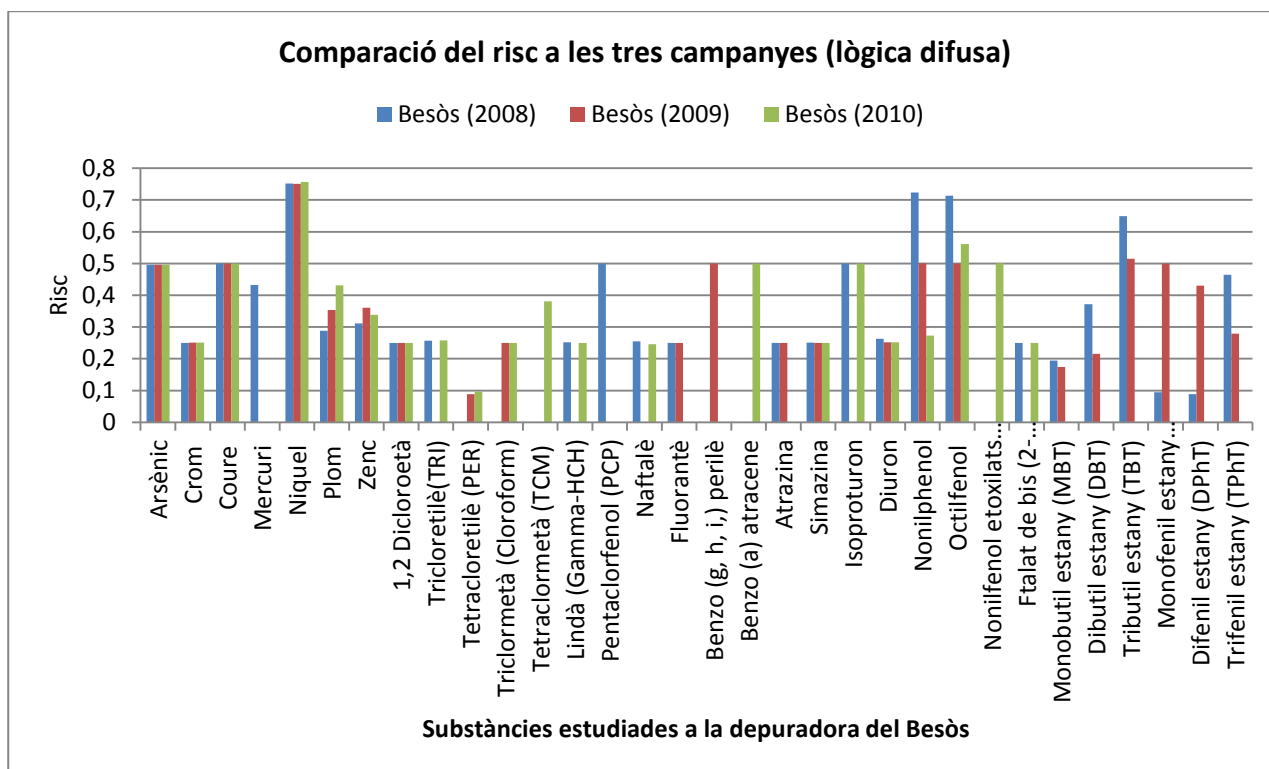


Figura 6.7 Risc de les substàncies a la depuradora del Besòs dels tres anys estudiats (lògica difusa)

6.5 Comparació de l'índex de situació normalitzat

Tal i com s'ha explicat en la secció 5.2.5, es pot normalitzar l'índex de situació d'acord amb l'equació 5.8. D'aquesta manera, es pot fer un llistat de major a menor índex de situació a l'estudi. Per tant, en aquesta secció es presenta l'índex de situació normalitzat en el cas de les substàncies comunes que apareixen a les tres campanyes (veure Taula 5.2). Es compara en les depuradores tant en el mètode COMMPS com en la lògica difusa. Els resultats es mostren en les següents taules. Aquest valor normalitzat no vol dir implícitament que el risc sigui molt alt (en el cas que valgui 1), sinó que comparat amb la resta de depuradores és la que té un valor més elevat. Per exemple, a Granollers l'índex de situació normalitzat correspon a 1 mentre que el risc és mig, tal com s'ha vist a la Taula 6.2.

L'índex de situació normalitzat es mostra només per substàncies comunes als 3 anys, ja que és més coherent perquè estadísticament corregeix les desviacions ocasionades per valors aïllats que es podrien trobar als estudis anuals. A l'annex E es presenten els índexs de situació normalitzats per les tres campanyes.



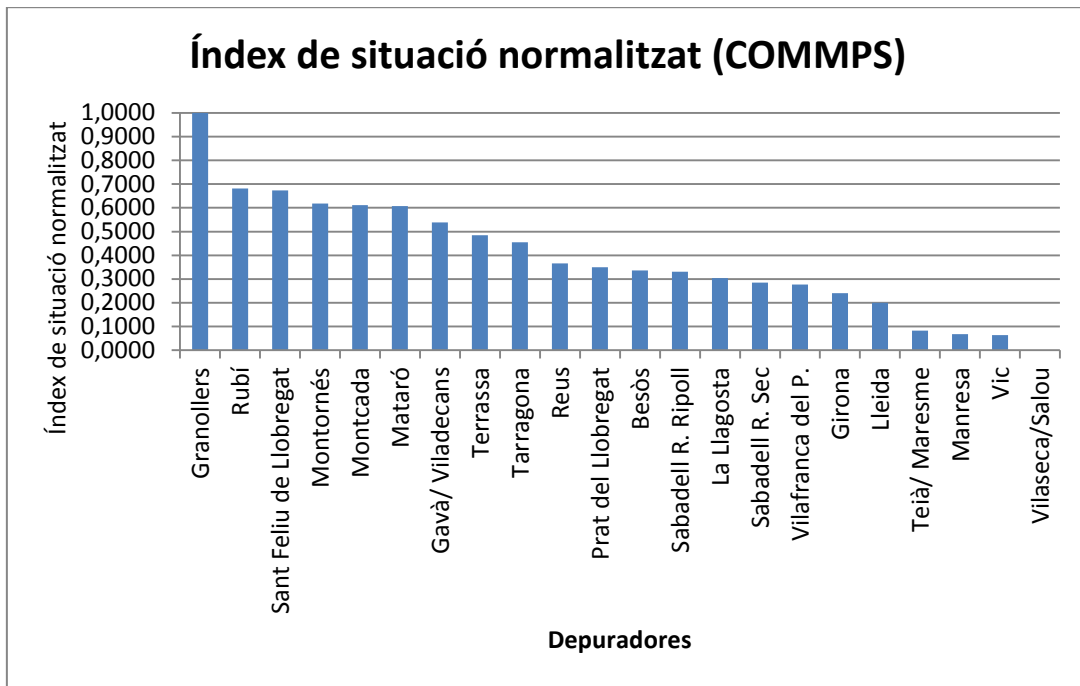


Figura 6.8 Índex de situació normalitzat COMMPS

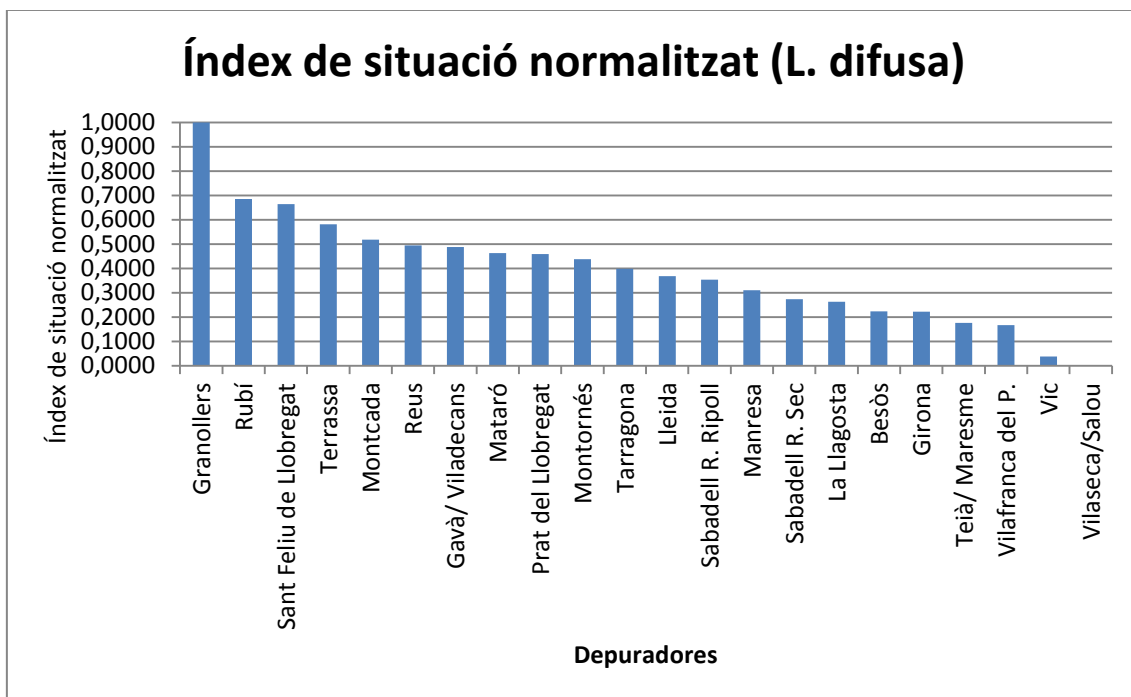


Figura 6.9 Índex de situació normalitzat lògica difusa

Es segueix una relació bastant similar entre un mètode i l'altre. Els tres primers valors d'índex de situació normalitzat són els mateixos: Granollers, Rubí i Sant Feliu de Llobregat. Vic i Vilaseca/Salou són en ambdós casos les depuradores on l'índex de situació normalitzat és més petit. En casos com Manresa o Terrassa, on es denota una diferència, és degut a la diferent



estructura entre els dos mètodes que fa augmentar lleugerament el seu risc relatiu. Això prova que els dos mètodes, tot i diferir en el seu plantejament, tenen en consideració els paràmetres claus en l'avaluació de risc ambiental.

S'ha de dir, però, que les diferències entre els índex de situació de cada depuradora, són molt petites (veure Taula 6.2), no obstant en normalitzat aquests valors les diferències es fan més grans.



7 CONCLUSIONS

En el treball realitzat en aquest estudi, s'ha desenvolupat un model basat en la lògica difusa capaç d'avaluar el risc que suposen les substàncies que pertanyen a les aigües efluentes de les depuradores de Catalunya de més de 100.000 habitants equivalents. Els resultats que s'ha obtingut en l'aplicació d'aquest model en els diferents casos d'estudi han mostrat que el sistema és fiable, sensible, fàcil d'utilitzar i que s'ajusta bé a la realitat.

La lògica difusa ha experimentat un creixement molt important en les àrees tècniques i científiques del coneixement hi ha esdevingut una eina molt útil en molts camps d'estudi. Actualment però, existeixen pocs estudis sobre les aplicacions d'aquesta metodologia en l'avaluació del risc ambiental de productes químics. Per tant, la implementació realitzada en aquest projecte d'un sistema basat en lògica difusa, concretament en sistemes FIS tipus Mamdani, és innovador i ha demostrat ser un excel·lent mètode de gestió del risc ambiental.

Els resultats obtinguts amb les dues metodologies mostren que el mètode de la lògica difusa proporciona resultats més conservadors que la metodologia COMMPS. Això es pot explicar per diferents raons.

En primer lloc, el model basat en lògica difusa té en compte un paràmetre que en el COMMPS no es considera com és la persistència dels compostos químics. Aquest paràmetre és important ja que el risc d'una substància depèn directament del temps que aquesta estigui en el medi i per tant, pugui afectar als organismes vius i a l'home.

En segon lloc, la lògica difusa també considera la incertesa i l'ambigüitat de les dades ambientals, evitant els valors esqueixats i oferint una gamma de superposició entre els diferents conjunts difusos. En aquest cas, on la informació només està disponible en tres campanyes, l'escassetat de dades es poden suplir mitjançant l'ús d'aquests amplis rangs que ofereix la lògica difusa.

En tercer lloc, l'estructura del model difereix lleugerament de l'utilitzat pel COMMPS. Aquest últim té els efectes directes i indirectes en el mateix nivell, mentre que en la lògica difusa pertanyen a diferents grups FIS.

Per últim, un altre factor important del model, ha estat la introducció dels pesos de les diferents variables del sistema de forma indirecta, ja que no totes les variables tenen la mateixa importància dins el model i això ha de quedar reflectit al sistema. Actualment, a la bibliografia no hi ha massa estudis que afrontin aquest problema. Després de considerar diverses possibilitats, ponderar les variables ha estat la millor opció. El model difús inclou doncs, els pesos de les diferents variables que conformen el sistema. Aquests pesos han sigut obtinguts a partir d'un grup d'experts que va ser consultat de treballs anteriors en l'àmbit de la lògica difusa i medi ambient. Aquests pesos van mostrar que la toxicitat té un paper molt important en l'avaluació del risc.



Pel que fa als resultats obtinguts, cal destacar que no hi ha gran variabilitat en les concentracions de contaminants i que a més aquestes són baixes, amb excepció del Níquel i Zinc. Això ha fet que en general el risc obtingut sigui classificat majoritàriament com a baix pel COMMPS i com a mig-baix pel model de lògica difusa.

La substància amb un major risc d'acord amb les dues metodologies, a l'estudi de la mitjana de les substàncies comuns, ha estat el níquel contingut en els efluent de la depuradora de Montornès del Vallès. Per contra, l'1,2 dicloroetà és la substància amb menys risc segons el COMMPS i el crom segons la lògica difusa. Això és degut als rangs definits per la toxicitat ambiental, que hauria de contemplar valors més baixos per un PNEC elevat tenint en compte que el valor de PNEC és inversament proporcional al seu risc potencial.

S'ha de tenir present el fet que només es disposa d'una lectura de cadascuna de les campanyes, fa que el resultat més significatiu sigui la mitjana. De totes maneres, es pot observar que els dos mètodes segueixen una tendència similar. Una de les substàncies que ha tingut més rellevància a l'hora de fer una comparativa entre les tres campanyes, ha estat l'octilfenol present específicament a l'any 2010, ja que ha fet augmentar el risc a totes les depuradores respecte els anys anteriors.

Com a resultat general de la situació de les diferents depuradores, tant amb la metodologia COMMPS com amb la de lògica difusa, la depuradora de Granollers és la que estaria en una situació de risc més alt, tot i que tant el COMMPS com la lògica difusa la consideren de risc mig. Per contra, la depuradora amb un valor de risc més baix és la de Vilaseca/Salou. Segons la caracterització de risc desenvolupada en aquest projecte pel COMMPS és de risc baix i pel cas de la lògica difusa és de 54% baix i 46% mig. Com es pot veure, el mètode de lògica difusa és més conservador que el del COMMPS.

Comparant els dos mètodes utilitzats, es pot veure com les depuradores amb major i menor risc coincideixen plenament, això prova que els dos mètodes, tot i diferir en el seu plantejament, tenen en consideració els paràmetres claus en l'avaluació de risc ambiental.

Pel que fa al fet de normalitzar cadascun dels índex de situació (COMMPS i lògica difusa), s'ha vist que genera confusió, ja que per valors molt similars d'aquests índexs s'obtenen valors normalitzats molt diferents. El fet normalitzar només serveix quan es vol comparar el risc relatiu en un mateix mètode, obtenint-se una llista de major a menor risc entre les depuradores estudiades.

El model proposat per a l'avaluació del risc ambiental ha funcionat correctament, ja que els seus resultats, tot i ser més conservadors que la ja provada metodologia COMMPS, no difereixen d'una forma significativa. No obstant, futures adaptacions poden fer-lo més sensible i precís. Una de les possibles adaptacions seria estudiar els rangs de toxicitat ambiental definits pel PNEC per fer el model més consistent.

Per altra banda, com ja s'ha comentat també estaria bé poder aplicar el model a altres situacions ambientals. Aquesta és una de les característiques principals del model, la seva adaptabilitat, ja posada de manifest treballant amb tres models diferents pel cas del FIS 2 (substàncies orgàniques, metàl·liques i aquelles que no es tenen dades de persistència).



A més, el model desenvolupat és de fàcil ús i interpretació per a la ment humana, una de les propietats fonamental de la lògica difusa. Pot esdevenir, doncs, una eina de gran utilitat pels organismes encarregats de gestionar i prendre decisions en l'àmbit mediambiental.





8 NOMENCLATURA

<i>MF</i>	Funció de pertinença
$\mu_A(x)$	Grau de pertinença de x al conjunt difús A
$\mu_B(z)$	Grau de pertinença de z al conjunt difús B
a, b, c, d, m	Paràmetres funcions de pertinença
<i>COMMPS</i>	COmbined Monitoring-based and Modelling-based Priority Setting
N_{regles}	Número de regles difuses
N_{cd}	Número conjunts difusos
N_{ve}	Número variables entrada
<i>FIS</i>	Fuzzy Inference System
<i>FSE</i>	Fuzzy Synthetic Evaluation
\bar{A}	Complement de A
$A \cap B$	Intersecció A i B
$A \cup B$	Unió A i B
w_1, w_2, w_3	Pesos variables
<i>SOM</i>	Smallest Of the Maximum
<i>MOM</i>	Middle Of the Maximum
<i>LOM</i>	Largest Of the Maximum
<i>AHP</i>	Analytic Hierarchy Process
<i>BCF</i>	Bio- Concentration Factor
<i>PNEC</i>	Predicted No Effect Concentration
$T_{1/2}$	Temps de vida mitjana
P_{ow}	Coeficient de partició Octanol-Aigua
<i>I_PRIO</i>	Índex de prioritat
<i>I_SITE</i>	Índex de situació
<i>I_SITENORM</i>	Índex de situació normalitzat
<i>I_EFF</i>	Índex d'efectes
<i>I_EXP</i>	Índex d'exposició
<i>EFSd</i>	Efectes directes
<i>EFSi</i>	Efectes indirectes
<i>EFSH</i>	Efectes sobre els humans





BIBLIOGRAFIA

- ACOSTA, H; WU, D; FORREST, M.B (2010). Fuzzy experts on recreational vessels, a risk modelling approach for marine invasions. *Ecological Modelling* 221, p. 850-863.
- BARCELÓ D.; GINEBRED A.; MARTÍNEZ E.; NAVARRO A. (2008) Control analític de les EDAR afectades pel Real Decreto 508/2007, de 20 d'abril, Reglament E-PRTR
- BARCELÓ D.; GINEBRED A.; MARTÍNEZ E.; NAVARRO A. (2009) Control analític de les EDAR afectades pel Real Decreto 508/2007, de 20 d'abril, Reglament E-PRTR
- BARCELÓ D.; GINEBRED A.; MARTÍNEZ E.; NAVARRO A. (2009) Control analític de les EDAR afectades pel Real Decreto 508/2007, de 20 d'abril, Reglament E-PRTR
- BENITO, T; DURÁN, M.I (2008). Lógica Borrosa. *Articulo de la Universidad Carlos III*, p. 1-11.
- BETRÓ, S. (2011). *Environmental Risk Assessment of PBDEs and HBCD in Ebro River Basin*
- BORCHIellini, R; VERDA, V (2009). A fuzzy logic procedure for ventilation control in case of fire in long tunnels. *Fire Safety Journal* 44, p. 612-621.
- CANADIAN WATER QUALITY GUIDELINES FOR THE PROTECTION OF AQUATIC LIFE (1999). Canadian Council of Ministers of the Environment. [Consultat: Agost de 2011]. Disponible a: <www.ccme.ca/publications/cegg_rcqe.html>
- CASAL J.; MONTIEL H., PLANAS E. (1996). Anàlisi del risc en instal·lacions industrials. *Edicions UPC*.
- CHAN, Z; C.W; HUANG (2003). A fuzzy expert system for site characterisation. *Experts Systems Applications*. 24, p. 123-131.
- CHANG, NB; CHEN, HW; NING, SK (2001). Identification of river water quality using the Fuzzy Synthetic Evaluation approach. *Journal of Environmental Management* 63, p. 293-305.
- CHEN, G; PHAM, T. Introduction to fuzzy sets, fuzzy logic and fuzzy control systems. CRC press LLC (USA), 2001. *Capítols 1,2,3 i 4; p. 1-187. ISBN: 0-8493-1658-8*.
- COMISSIÓ EUROPEA (1967). Directiva 67/548/CEE del consell, de 27 de juny de 1967, relativa a l'aproximació de les disposicions legals, reglamentàries i administratives en matèria de classificació, embalatge i etiquetat de les substàncies perilloses. [En línia] [Consulta: Juny 2011]. Disponible a: <http://www.unizar.es/guiar/1/Legisla/D67_548.htm>
- COMISSIÓ EUROPA (1991). Council Directive 91/689/EEC of 12 December 1991 on hazardous waste. [En línia] [Consulta: Agost 2011]. Disponible a: <<http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=CELEX:31991L0689:EN:HTML>>
- COMISSIÓ EUROPA (1996). Council Directive 96/61/EC of 24 September 1996 concerning integrated pollution prevention and control. [En línia] [Consulta: Agost 2011]. Disponible a: <<http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=CELEX:31996L0061:en:HTML>>
- COMISSIÓ EUROPA (2000). Directiva 2008/105/CE del Parlament Europeu i del Consell de 23 d'octubre de 2000 Per la que s'estableix un marc comunitari d'actuació en l'àmbit de la política d'aigües [En línia]



[Consulta: Agost 2011]. Disponible a: <<http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=CONSLEG:2000L0060:20080321:ES:PDF>>

COMISSIÓ EUROPEA (2006). Guía para la implantación del E-PRTR de la Comisión Europea de 31 de maig de 2006, apèndix IV, activitat 5(f)

COMISSIÓ EUROPEA (2006). E-PRTR Regulation: Regulation (EC) No 166/2006 of the European Parliament and of the Council concerning the establishment of a European Pollutant Release and Transfer Register and amending Council Directives 91/689/EEC and 96/61/EC . [En línia] [Consulta: Agost 2011]. Disponible a: <<http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=OJ:L:2006:033:0001:0001:EN:PDF>>

COMISSIÓ EUROPEA (2008). Directiva 2008/105/CE del Parlament Europeu i del Consell de 16 de desembre de 2008 relativa a les normes de qualitat ambiental en l'àmbit de la política d'aigües. [En línia] [Consulta: Agost 2011]. Disponible a: <<http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=OJ:L:2008:348:0084:0097:ES:PDF>>

CONNOR, M. S. (1984). Fish/sediment concentration ratios for organic compounds. *Environmental Science Technology* 18, p. 31-35.

DAGLNNUS, K; GOTTARDO, S; MOSTRAG-SZHLICHTYNG, A; WILKINSON, H; WHITEHOUSE, P; PAYA-PÉREZ, A; ZALDÍVAR, J.M (2010). A modelling approach for the prioritisation of chemicals under the water framework directive. *JRC Scientific and Technical Reports*. ISBN 978-92-79-15298-6

DAHIYA, S; SINGH, B; GAUR, S; GARG, V.K; KUSHWAHA, H.S (2007). Analysis of groundwater quality using fuzzy synthetic evaluation. *Journal of Hazardous Materials* 147, p. 938-946.

DARBRA, R.M (2011). Transparències tema 2, Química Industrial

DARBRA, R.M; ELJARRAT, E; BARCELÓ, D (2007). Application of fuzzy logic to the preliminary risk assessment of fish pollution due to lipophilic substance alliberaments in rivers. A: *Riskbase 1st Thematic Workshop*, p. 119-122.

DARBRA, R.M; DEMICHELA, M.; MURÈ, S.(2007). Preliminary risk assessment of ecotoxic substances accidental alliberaments in major installations through fuzzy logic. *Process safety and environmental protection* 86, p. 103-111

DARBRA, R.M; ELJARRAT, E; BARCELÓ, D (2008). How to measure uncertainties in environmental risk assessment. *Trends in Analytical Chemistry*. 27, p. 377-385.

DUBOIS DIDIER J (1980). Fuzzy sets and systems: Theory and applications. Academic press, inc (Londres) 1980. *Part II, Chapter 1 Fuzzy Sets*. ISBN 0-12-222750-6.

EUROPEAN CHEMICALS AGENCY (ECHA) (2008). IUCLID & OECD Chemical Data Sheets and Export Files Information. [En línia] [Consulta: Juliol 2011]. Disponible a: <http://echa.europa.eu/home_es.asp>

FERRARO, D (2009). Fuzzy knowledge-based model for soil condition assessment in Argentinean cropping systems. *Environmental Modelling and Software* 24, p. 359-370.

GENERALITAT DE CATALUNYA (2003). DECRET LEGISLATIU 3/2003, de 4 de novembre, pel qual s'aprova el Text refós de la legislació en matèria d'aigües de Catalunya. [En línia] [Consulta: Agost 2011]. Disponible a: <<http://www.gencat.cat/diari/4015/03300067.htm>>



GERMAN FEDERAL ENVIRONMENT AGENCY (2009). Stellungnahme des Umweltbundesamtes zum Vorschlag der EU-Kommission vom 3. Dezember 2008 zur Revision der Richtlinie 2002/95/EG zur "Beschränkung der Verwendung bestimmter gefährlicher Stoffe in Elektro- und Elektronikgeräten" (RoHS-RL). Umweltbundesamt (UBA). Dessau-Roßlau, p. 14.

HAIYAN W (2002) Assessment and prediction of overall environmental quality of Zhuzhou City, Hunan Province, China. *Journal of Environmental Management* 66, p. 329-340.

HU, C.; MÜLLER-KARGER F E; TAYLOR C; MYHRE D; MURCH B; ODRIOZOLA A L; GODOY G (2003), MODIS detects oil spills in Lake Maracaibo, Venezuela, *Eos Trans.* [En línia] [Consulta: Agost 2011]. Disponible a: <http://imars.marine.usf.edu/~hu/papers/oil_spill/73374_1_art_file_2_1054742214.pdf>

IRWIN R.J.; MOUWERIK M.; STEVENS L.; SEESE M.D.; BASHAM W., (1997). Environmental contaminants encyclopedia, benzo(g,h,i)perylene entry, p. 30-35.

IRWIN R.J.; MOUWERIK M.; STEVENS L.; SEESE M.D.; BASHAM W., (1997). Environmental contaminants encyclopedia, benzo(a)anthracene entry, p. -35.

KAMPICHLER, C; PLATEN, R (2004). Ground beetle and moor degradation: modeling a bioindication system by automated decision-tree induction and fuzzy logic. *Ecological Indicators* 4, p. 99-109.

KLEIN,W; DENZER, S; HERRCHEN, M; LEPPER P; MÜLLER, M; SEHRT, R; STORM, A; VOLMER, J (1999). Revised Proposal for a List of Priority Substances in the context of the Water Framework Directive (COMMPS Procedure). *Fraunhofer-Institut Umweltchemie und Ökotoxilogie*. 98/788/3040/DEB/E1

KLIR, G.J; YUAN, B (1995). FUZZY SETS AND FUZZY LOGIC: Theory and Applications. Pani Guerrieri (USA). PART I: THEORY, p. 1-278. ISBN: 0-13-101171-5.

LEHN, K.; AND TEMME, K. H. 1996, Fuzzy classification of sites suspected of being contaminated. *Ecological Modelling*, 85: 51–58.

LIU, L; ZHOU, J; AN, X; ZHANG, Y; YANG, L (2010). Using fuzzy theory and information entropy for water quality assessment in the Three Gorges region, China. *Expert Systems with Applications* 37, p. 2517-2521.

MARCHINI, A; MARCHINI, C (2005). A fuzzy logic model to recognise ecological sectors in the lagoon of Venice based on the benthic community. *Ecological Modelling* 193, p. 105-118.

MARCHINI, A; FACCHINETTI, T; MISTRI, M (2009). F-IND: A framework to design fuzzy indices of environmental conditions. *Ecological Indicators* 9, p. 485-496.

MATHWORKS (2010). FUZZY LOGIC TOOLBOX. [En línia] [Consultat: Juny 2011]. Disponible a: <http://www.mathworks.com/help/toolbox/fuzzy/fuzzy_product_page.html>.

MISTRI, M; MUNARI, C; MARCHINI, A (2008). The fuzzy index of ecosystem integrity (FINE): a new index of environmental integrity for transitional ecosystems. *Hydrobiologia* 611, p. 81-90

MIZUMOTO, M (1981). Fuzzy Sets and their operations II. *Information and control* 50, 2.

MOHAMED; C (1999). Decision analysis of polluted sites—a fuzzy approach. *Waste Management* 19, p. 519–533.

NATIONAL INSTITUTE FOR OCCUPATIONAL SAFETY AND HEALTH (NIOSH) (1998). Registry of toxic effects of chemical substances (RTECS), edition January 1998 [En línia] [Consultat: Abril 2011]. Disponible a: <<http://www.toxnet.nlm.nih.gov>>



NORDBERG G. F.; FOWLER B. A.; NORDBERG M.; FRIBERG L. (2007). Handbook on the toxicology of metals.

OCAMPO, W; FERRÉ, N; DOMINGO, J.L; SCHUHMACHER, M (2006). Assessing water quality in rivers with fuzzy inference systems: A case study. *Environment International* 32, p. 733-742.

OLMO CASTILLO, M.A (2008). Tutorial de Introducción de Lógica Borrosa. Departamento de matemática aplicada. Facultad de informática. Universidad Politécnica Madrid. [En línea] [Consulta: Maig 2011]. Disponible a: <<http://www.dma.fi.upm.es/java/fuzzy/tutfuzzy/contenido7ie.html>>.

ONKAL-ENGIN, G; DEMIR, I; HIZ, H (2004). Assessment of urban air quality in Istanbul using fuzzy synthetic evaluation. *Atmospheric Environment* 38, p. 3809-3815.

OSPAR Commission, 2003. OSPAR background document on octylphenol. [En línea] [Consulta: Agost 2011]. Disponible a: <<http://www.ospar.org/>>

PAN PESTICIDE DATABASE (2000) Water pollution potential and criteria for atrazine. [En línea] [Consultat: Juliol 2011]. Disponible a: <http://www.pesticideinfo.org/Detail_Chemical.jsp?Rec_Id=PC35042#Water>

PEÑA LORENZO (1993). Introducción a las lógicas no clásicas. p. 1-154.

PRIOR, A.N. (1976). Historia de la lógica. *Editorial Tecnos S.A. (Madrid)*.

PUJOLASUS, E. (2011) Desenvolupament d'un model basat en la lògica difusa per a l'avaluació del risc dels BFRs en ecosistemes d'Amèrica Llatina

Real Decreto 508/2007. [En línea] [Consultat: Abril 2011]. Disponible a: <http://www.boe.es/aeboe/consultas/bases_datos/doc.php?id=BOE-A-2007-8351>

ROSS, T.J (2004). Fuzzy Logic with engineering applications. John Wiley & Sons (UK). *Chapter 4, p. 101-105. ISBN: 0-470-86075-8.*

ROVEDA, J; MOTA, M; ROVEDA, S; LOURENÇO, R; MARTINS, A (2010). Fuzzy environmental quality index. A: *IEEE International Conference on Fuzzy Systems, Barcelona*.

SAATY, T.L (1990). How to make a decision: The analytic hierarchy process. *European Journal of Operational Research* 48, p. 9-26.

SHEN, G; LU, Y; WANG, M; SUN, Y (2005). Status and fuzzy comprehensive assessment of combined heavy metal and organo-chlorine pesticide pollution in the Taihu Lake region of China. *Journal of Environmental Management* 76, p. 355-362.

SUNG-BAE, C (2002). Fusion of neural networks with fuzzy logic and genetic algorithm. *Integrated Computer-Aided Engineering* 9, p. 363-372.

TEIXIDÓ, E; TERRADO, M; GINEBREDÀ, A; TAULER, R (2010). Quality assessment of river waters using risk indexes for substances and sites, based on the COMMPS procedure. *Journal of Environmental Monitoring*, p. 2120-2127

URICCHIO, V.F; GIORDANO, R; LOPEZ, N (2004). A fuzzy knowledge-based decision support system for ground water pollution risk evaluation. *Journal Environmental Management* 73, p. 189-197.



US Environmental Protection Agency (EPA) (2010) Chemical Fact Sheet. [En línia] [Consulta: Juliol 2011]. Disponible a: <<http://www.epa.gov/chemfact/>>

VAN DER WERF, H.M; ZIMMER, C (1998). An indicator of pesticide environmental impact based on a fuzzy expert system. *Chemosphere* 36, p. 2225–2249.

WANG, J.H; LU, X.G; JIANG, M; LI, X.Y; TIAN, J.H (2009). Fuzzy synthetic evaluation of wetland soil quality degradation: A case study on the Sanjiang Plain, Northeast China. *Pedosphere* 19, p. 756-764.

ZADEH, L. A (1965). Fuzzy Sets. *Information and control*. 8, p. 338-353.

ZADEH, L. A (1983). The role of fuzzy logic in the management of uncertainty in expert systems. *Fuzzy Sets and Systems* 11, p. 199-227

ZOU Z.H; YUN, Y; SUN J.N (2006). Entropy method for determination of weight of evaluating indicators in fuzzy synthetic evaluation for water quality assessment. *Journal of Environmental Sciences* 18, p. 1020-1023.

