

**INVESTIGACIÓN
EN MARCHA. Evaluación de la actividad
investigadora.
TESIS DOCTORAL
CURSO 2025-26**

**DOCTORADO EN
MEDIO AMBIENTE Y SOSTENIBILIDAD**

UNIVERSIDAD MIGUEL HERNÁNDEZ DE ELCHE



**PROGRAMA DE DOCTORADO EN
MEDIO AMBIENTE Y SOSTENIBILIDAD**



Título provisional:

Modelos predictivos de formación de Trihalometanos en
agua de consumo

Doctorando: Lourdes María López Roldán

Directora o director (es): Maria Belén Almendro Candel

Codirectora o codirector: Arturo Albadalejo Ruiz, José Fernando Pérez Serrano

Tutora o tutor: José Navarro Pedreño

Modelos predictivos de formación de Trihalometanos en agua de consumo

Lourdes María López Roldán

ÍNDICE

I. Objetivos

I. Estado del Arte

II. Materiales y métodos

III. Resultados

IV. Planificación y futuros trabajos

V. Bibliografía de interés

I. Objetivos



Depuración, limpieza y tratamiento del dataframe: outliers, imputación, estandarización, subconjuntos y transformación



Análisis exploratorio: búsqueda de relaciones y patrones entre Trihalometanos y variables predictoras



Inferencia estadística para el estudio de fluctuaciones mensuales y anuales en la concentración de las variables de estudio



Selección y validación de modelos de predicción basados en aprendizaje automático (Machine Learning)



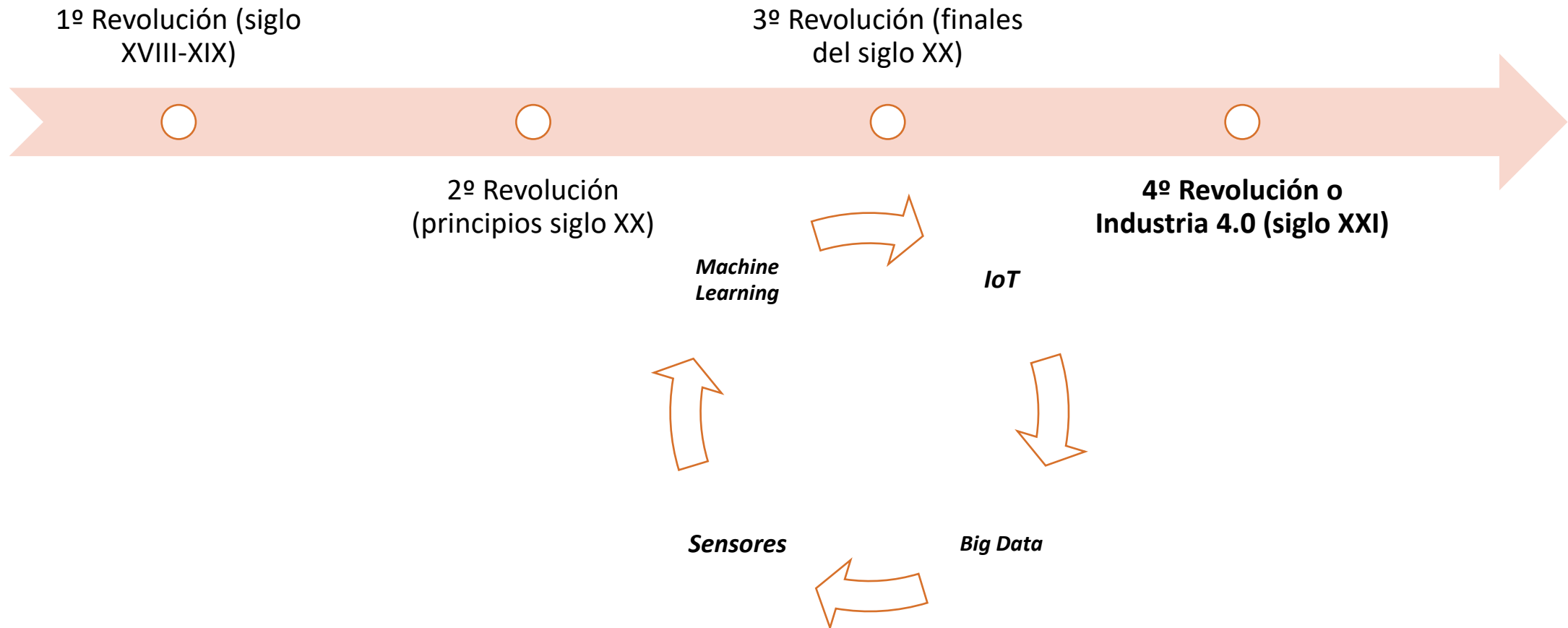
Elaboración de **series temporales** para predicciones a largo plazo



Explorar el **aprendizaje profundo** (Deep Learning)

II. Estado del Arte

La **inteligencia artificial (IA)** ha permitido simular el aprendizaje humano, el razonamiento y la toma de decisiones



II. Estado del Arte

Aprendizaje Supervisado

Modelos de regresión lineal simples y multivariable

Modelos de regresión logísticos

Modelos de regresión polinomial

Random Forest y árboles de regresión

Árboles de decisión

Redes neuronales

Aprendizaje No Supervisado

Algoritmo K-means

Reglas de asociación

RFM (Recency, Frequency, Monetary)

Redes neuronales

II. Estado del Arte

- **17 ODS** establecidos por la ONU en 2015
- **ODS 6:** Agua limpia y Saneamiento
- **Real Decreto 3/2023**, 10 de enero, establece el límite paramétrico de 100 µg/L de THMs totales
- **Normativa EPA (EE.UU):** 80 µg/L



Agencia Estatal Boletín Oficial del Estado

Castellano Buscar Mi BOE Menú

Está Vd. en Inicio Buscar Documento consolidado BOE-A-2023-628

Legislación consolidada Ayuda

Real Decreto 3/2023, de 10 de enero, por el que se establecen los criterios técnico-sanitarios de la calidad del agua de consumo, su control y suministro.

Publicado en: «BOE» núm. 9, de 11/01/2023.
Entrada en vigor: 12/01/2023
Departamento: Ministerio de la Presidencia, Relaciones con las Cortes y Memoria Democrática
Referencia: [BOE-A-2023-628](#)
Permalink ELI: <https://www.boe.es/eli/es/rd/2023/01/10/3/con>

Seleccionar redacción: Texto inicial publicado el 11/01/2023 PDF ePUB

Diccionario Panhispánico del Español Jurídico

Completo Solo Texto Índice Análisis Recibir alerta

$\Sigma 4$ Trihalometanos (THM) < 100 µg/L

- Bromodiclorometano
- Bromoformo
- Cloroformo
- Dibromoclorometano

II. Estado del Arte

Los **THMs** se generan por reacción de la materia orgánica con el cloro libre residual del desinfectante

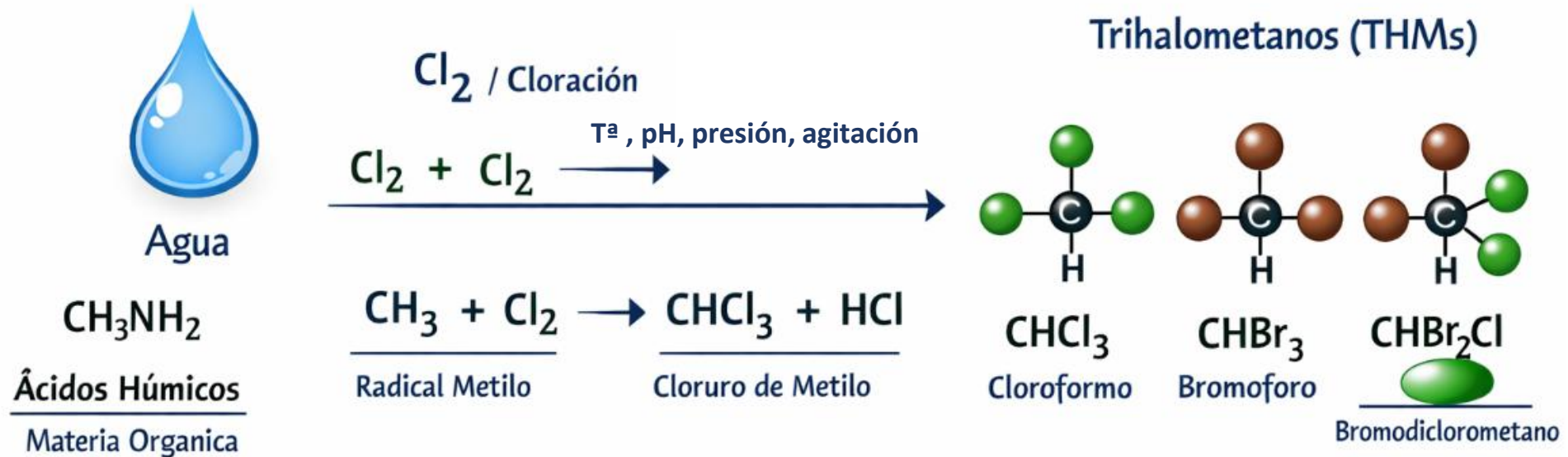


Figura 1. Reacción química en la formación de THMs

II. Estado del Arte

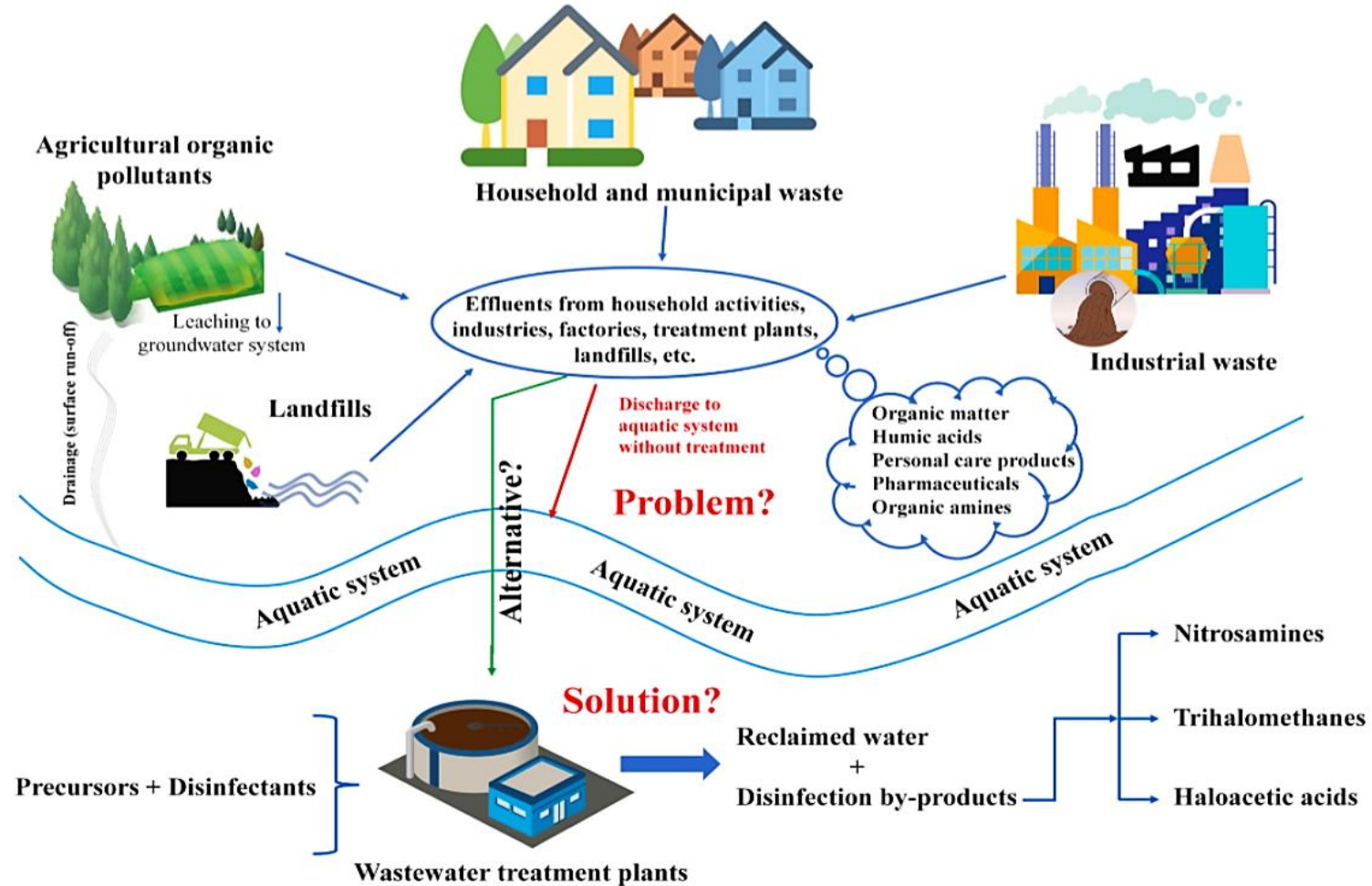


Figura 2. Fuentes primarias de carbono (Kumar et al., 2023)

III. Materiales y métodos



Figura 3. Depósito La Anchosa (Lorquí)

3 barridos analíticos: en situaciones meteorológicas extremas

- ✓ $\Sigma 4$ Trihalometanos
- ✓ Compuestos Orgánicos Volátiles (COVs)
- ✓ Compuestos halogenados y aromáticos

100 analíticas: frecuencia quincenal

- ✓ $\Sigma 4$ Trihalometanos
- ✓ pH
- ✓ Temperatura
- ✓ Conductividad
- ✓ Cloro Libre Residual
- ✓ Turbidez
- ✓ Coliformes totales

III. Materiales y métodos

Sensores

- **Cloro + pH:** LXV45A.98.22022 Cloro + pH CLF10 sc
- **Turbidez:** LXV445.99.11112 Turbidez TU5300 sc
- **Temperatura:** La sonda de Cloro + pH
- **MS2000 Multisensor System:** nariz electrónica de THMs



Figura 4. Sensor MS2000 Multisensor System

III. Materiales y métodos

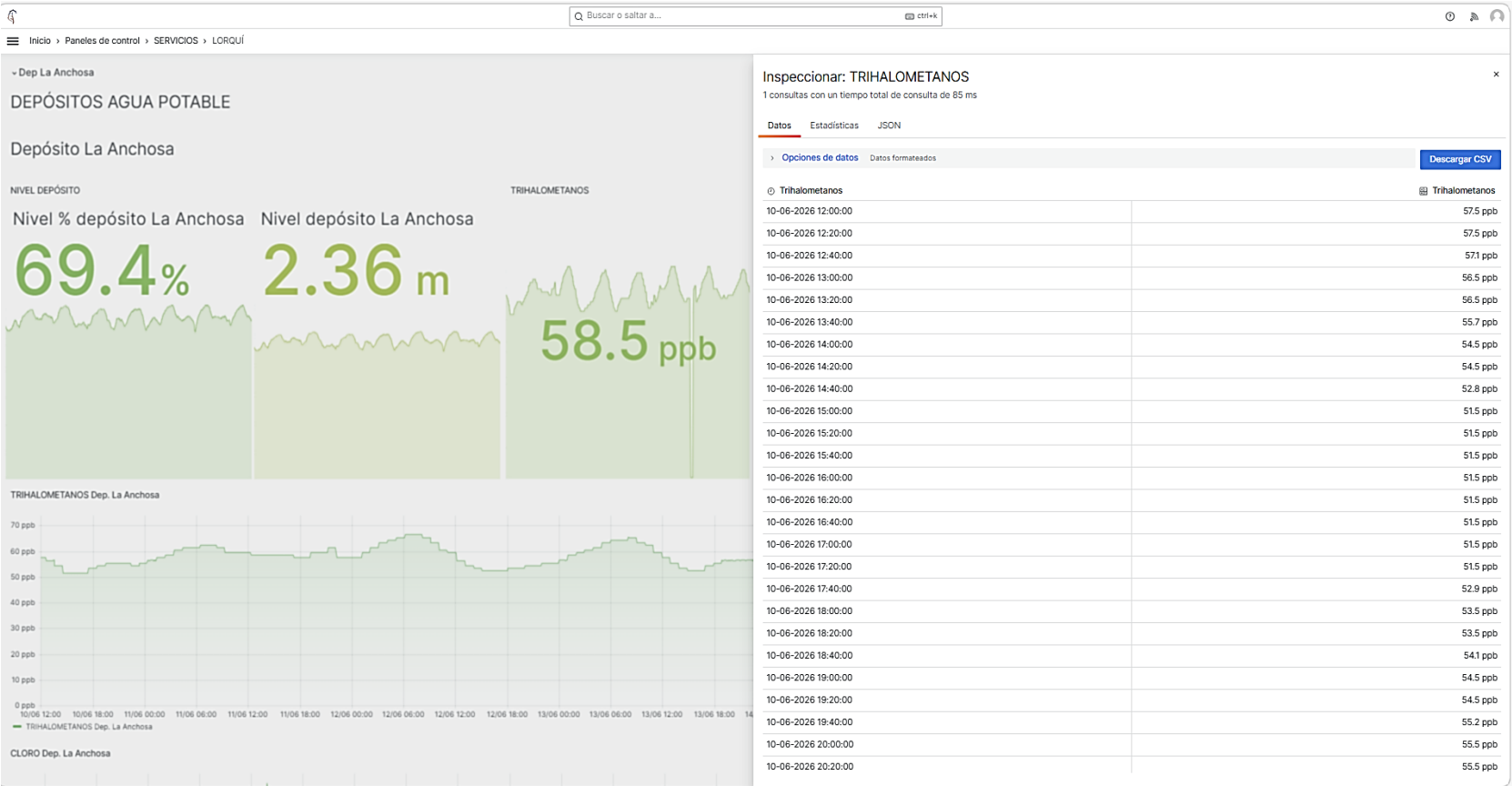
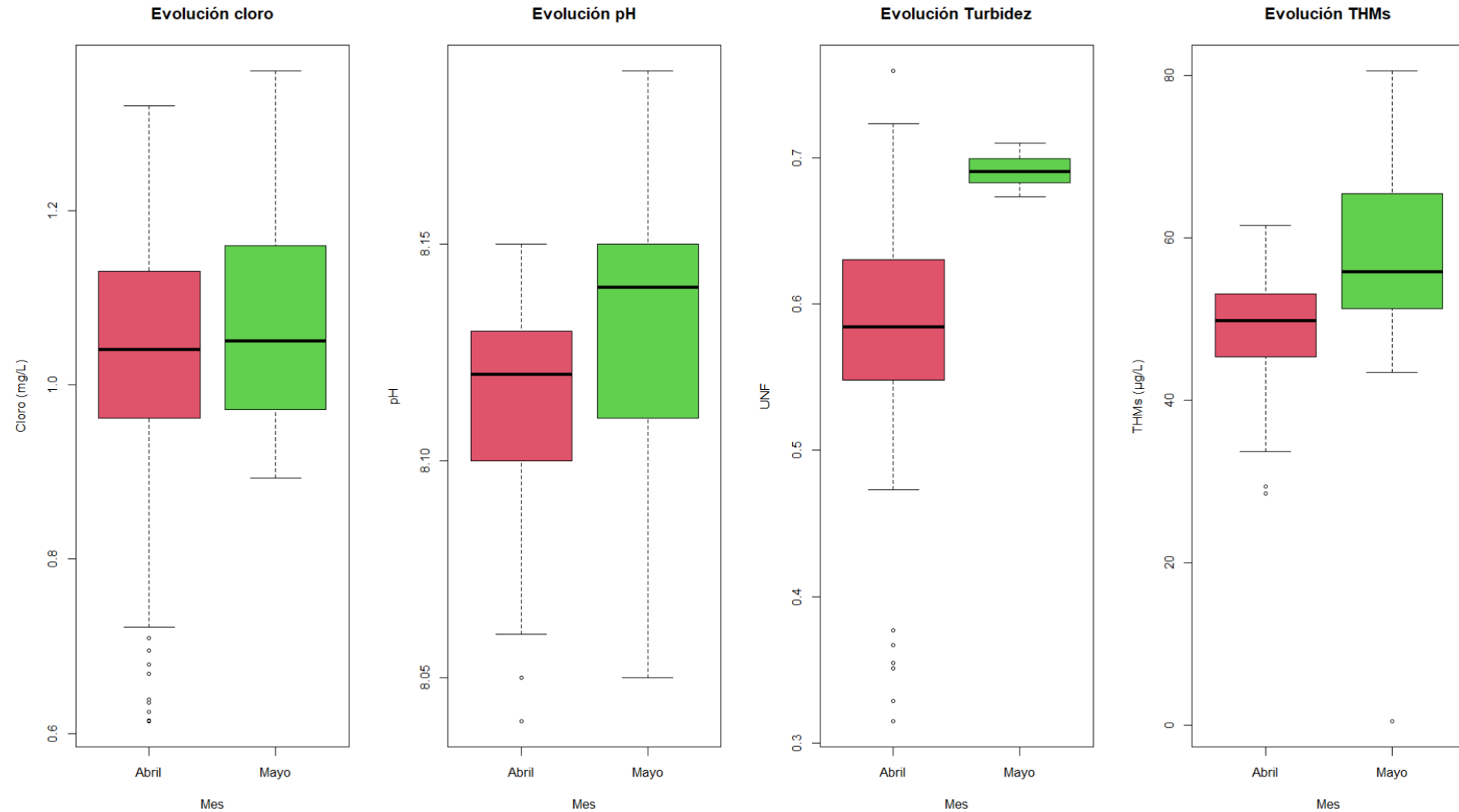


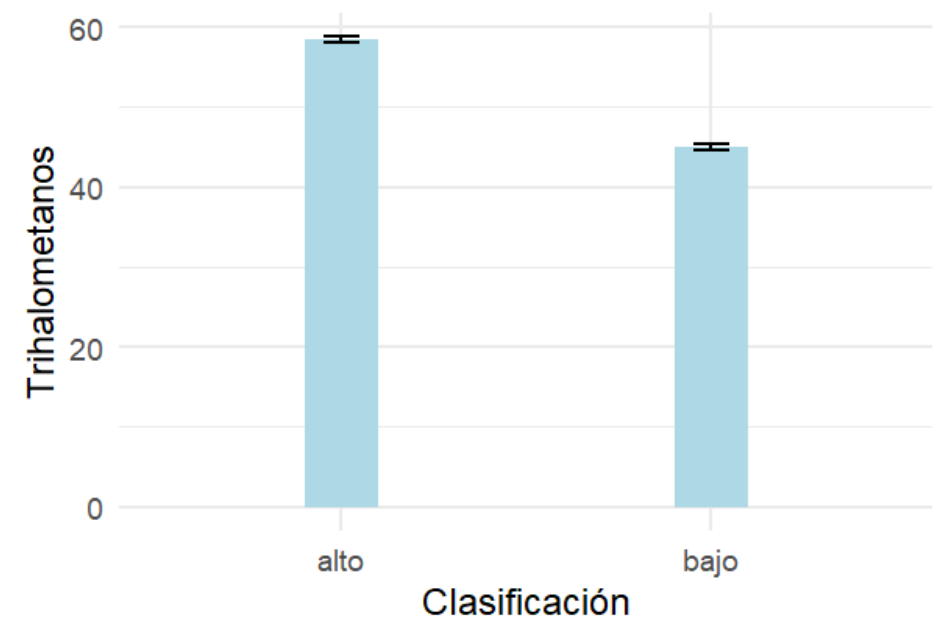
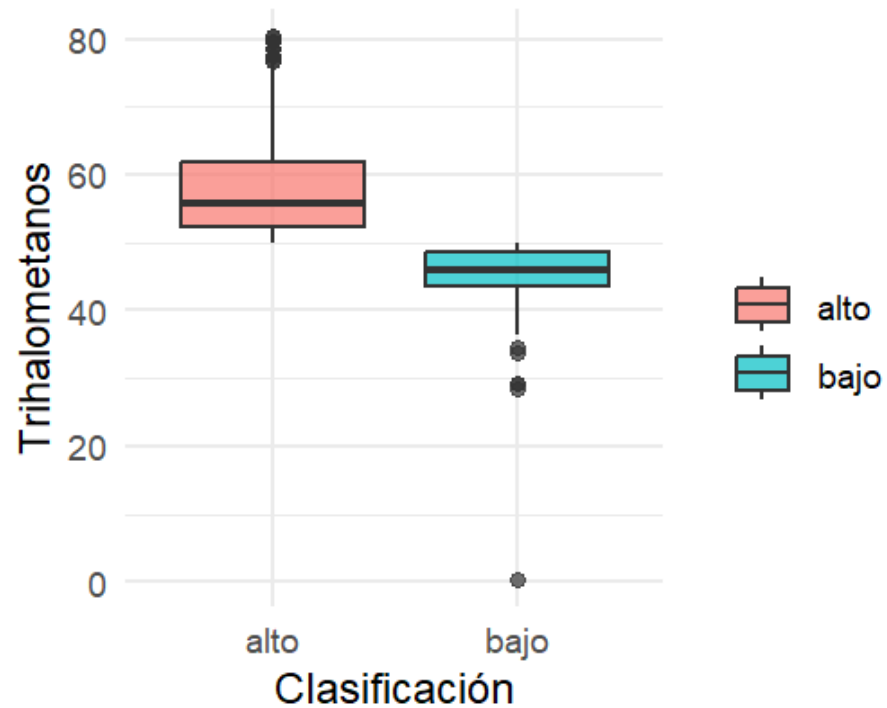
Figura 5. Dashboard Grafana

IV. Resultados

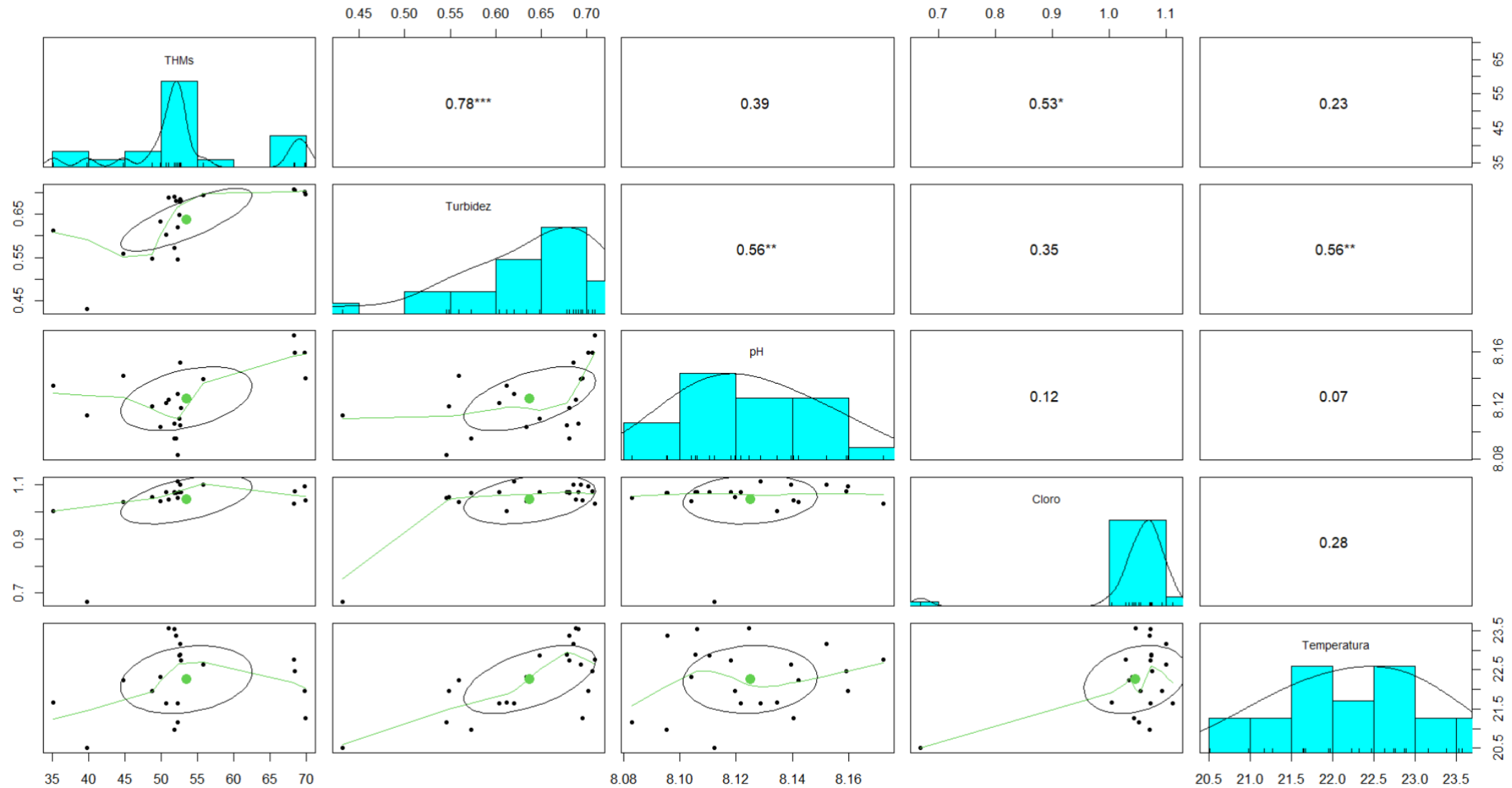


IV. Resultados

- **THMs alto:** $\geq 50 \mu\text{g/L}$
- **THMs bajo:** $< 50 \mu\text{g/L}$



IV. Resultados



IV. Resultados

```
lm(formula = THMs ~ Turbidez + Cloro + pH + Temperatura, data = train_data)
```

Residuals:

Min	1Q	Median	3Q	Max
-13.3748	-1.3973	0.5663	2.7697	8.1077

- **Training_data= 80%**
- **Test_data= 20%**

Coefficients:

	Estimate	Std. Error	t value	Pr(> t)
(Intercept)	-1077.047	723.202	-1.489	0.16452
Turbidez	131.340	38.825	3.383	0.00611 **
Cloro	69.057	60.010	1.151	0.27423
pH	131.615	84.814	1.552	0.14898
Temperatura	-4.370	2.736	-1.597	0.13854

Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1

Residual standard error: 6.129 on 11 degrees of freedom

Multiple R-squared: 0.7074, Adjusted R-squared: 0.601

F-statistic: 6.648 on 4 and 11 DF, p-value: 0.005674

	predicted	actual	SE
7	62.441171	55.73696	8.989297
12	3.972179	39.76923	256.285778
16	38.618197	52.30000	37.438345
17	45.931777	51.74583	6.760651
20	47.182058	49.89583	1.472915

IV. Resultados

13/03/2026

SCREENING DE VOLATILES

Anexo al Boletín: 26-03-2917-0

Matriz: Agua de consumo

PM: PM-LA ANCHOSA

ANALITOS	RESULTADO (µg/L)
Comp. Org. volátiles halogenados	
1,1,1-Tricloroetano	< 5
1,1,2,2-Tetracloroetano	< 3
1,1,2-Tricloroetano	< 5
1,1-Dicloroetano	< 5
1,1-Dicloroetano	< 5
1,2,3-Triclorobenceno	< 5
1,2,4-Triclorobenceno	< 5
1,2,4-Trimetilbenceno	< 5
1,3,5-Trimetilbenceno	< 5
1,2-dibromo-3-cloropropano	< 5
1,2-Diclorobenceno	< 5
1,2-Dicloroetano	< 0.5
1,2-Dicloroetileno	< 3
1,2-Dicloroetano-trans	< 5
1,2-Dicloropropano	< 5
1,3-Diclorobenceno	< 5
1,3-Dicloropropano	< 1
1,3-Dicloropropeno-cis	< 0.03
1,3-Dicloropropeno-trans	< 0.03
1,4-Diclorobenceno	< 5
2,2-Dicloropropano	< 5
2-Clorotolueno	< 5
Bromobenceno	< 5
Bromodichlorometano	21
Bromoformo	27
Clorobenceno	< 5
Cloroformo	17
Dibromoclorometano	27
Dibromometano	< 5
Diclorometano	< 5
Tetracloroetano	< 2
Tetracloruro de carbono	< 5
Tetracloroetano	< 2
Tricloroetano	< 2
Comp. Org. volátiles no halogenados	
Benceno	< 0.3
Isopropilbenceno	< 5

Pag 1 de 2

CARBONO ORGANICO TOTAL (TOC) Determinación por Combustión-IR (PE/MUNLAB/06 83)	1.6	mg C/l	Hasta 7	VNA RD 3/2023
OXIDABILIDAD Método volumétrico (PE/MUNLAB/06 12).	1.8	mg O/l	Hasta 7	VNA RD 3/2023
CLORUROS Determinación por I.C. (PE/MUNLAB/06 120)	56	mg Cl/l	Hasta 250	R.D. 3/2023
BROMUROS Determinación por I.C. (PE/MUNLAB/06 120)	< 500	µg/l		
DUREZA TOTAL Cálculo numérico (PE/MUNLAB/06 309)	36	°f		
DUREZA TOTAL Cálculo numérico (PE/MUNLAB/06 309)	363	mg CaCO ₃ /l		Parámetro Referencia R.D. 3/2023
CLOROFORMO Determinación por GC-MS (PE/MUNLAB/06 47)	18	µg/l	Hasta 100	R.D. 3/2023
BROMODICHLOROMETANO Determinación por GC-MS (PE/MUNLAB/06 47)	21	µg/l	Hasta 100	R.D. 3/2023
DIBROMOCLOROMETANO Determinación por GC-MS (PE/MUNLAB/06 47)	27	µg/l	Hasta 100	R.D. 3/2023
BROMOFORMO Determinación por GC-MS (PE/MUNLAB/06 47)	25	µg/l	Hasta 100	R.D. 3/2023
SUMA MÍNIMA TRIHALOMETANOS Cálculo numérico (PE/MUNLAB/06 47). Suma Cloroformo, bromodichlorometano, dibromoclorometano y bromoformo.	91	µg/l	Hasta 100	R.D. 3/2023
Recuento de coliformes Recuento por filtración de membrana. UNE-EN ISO 9308-1:2014/ A1:2017	0	ufc/100 ml	Hasta 100	VNA RD 3/2023

IV. Resultados

CARBONO ORGANICO TOTAL (TOC) Determinación por Combustión-IR (PE/MUNLAB/06 83)	1.4	mg C/l	Hasta 7	VNA RD 3/2023
OXIDABILIDAD Método volumétrico (PE/MUNLAB/06 12).	1.5	mg O/l	Hasta 7	VNA RD 3/2023
CLORUROS Determinación por I.C. (PE/MUNLAB/06 120)	75	mg Cl/l	Hasta 250	R.D. 3/2023
BROMUROS Determinación por I.C. (PE/MUNLAB/06 120)	< 500	µg/l		
DUREZA TOTAL Cálculo numérico (PE/MUNLAB/06 309)	40	°f		
DUREZA TOTAL Cálculo numérico (PE/MUNLAB/06 309)	400	mg CaCO ₃ /l		Parámetro Referencia R.D. 3/2023
CLOROFORMO Determinación por GC-MS (PE/MUNLAB/06 47)	14	µg/l	Hasta 100	R.D. 3/2023
BROMODICLOROMETANO Determinación por GC-MS (PE/MUNLAB/06 47)	17	µg/l	Hasta 100	R.D. 3/2023
DIBROMOCLOROMETANO Determinación por GC-MS (PE/MUNLAB/06 47)	27	µg/l	Hasta 100	R.D. 3/2023
BROMOFORMO Determinación por GC-MS (PE/MUNLAB/06 47)	11	µg/l	Hasta 100	R.D. 3/2023
SUMA MÍNIMA TRIHALOMETANOS Cálculo numérico (PE/MUNLAB/06 47). Suma Cloroformo, bromodichlorometano, dibromoclorometano y bromoformo.	69	µg/l	Hasta 100	R.D. 3/2023
Recuento de coliformes Recuento por filtración de membrana. UNE-EN ISO 9308-1:2014/ A1:2017	0	ufc/100 ml	Hasta 100	VNA RD 3/2023

11/05/2026

#17089	11/05/2026	PM-LA ANCHOSA	ACH_0964	Agua de consumo	11/05/2026 12:59
61. Sppb de trihalometanos					
Parámetros (In situ)	Método	Resultado	Unidad	Anal.	Fecha Equipo
pH	In situ (PE/MUNLAB/06 338). Sonda individual	8.27	Unidad de pH	YCM	11/05/2026 17:19:23 P120 PHMETRO Agua Res./Cont./Cons.
Temperatura de la medida 22.4 YCM	11/05/2026				
TEMPERATURA	In situ (PE/MUNLAB/06 338). Sonda aguas continentales/consumo	22.4	°C	YCM	11/05/2026 17:19:27 P120 PHMETRO Agua Res./Cont./Cons.
CONDUCTIVIDAD a 20 ° C Temperatura de la medida 22.4 YCM	In situ (PE/MUNLAB/06 338). Sonda Individual	808.6	µS/cm	YCM	11/05/2026 17:19:45 P77 CONDUCTIMETRO
CLORO LIBRE RESIDUAL	In situ (PE/MUNLAB/06 338). Método espectrofotométrico	1.22	mg/l	YCM	11/05/2026 17:19:51 P118 CLORIMETRO Aguas Resid./Consum./Contl.
TURBIDEZ	In situ (PE/MUNLAB/06 338). Método nefelométrico	0.05	UNF	YCM	11/05/2026 17:20:09 P92 TURBIDIMETRO

V. Planificación y Trabajos futuros

- *Elaboración de **modelos aditivos generalizados** (GAM) ante la **falta de cumplimientos de supuestos estadísticos** de los modelos de regresión multivariante y/o **modelos polinómicos** para mejorar el ajuste y evitar colinealidad*
- *Generación de **bases de datos relacionales SQL** para almacenamiento en línea de datos del sensor*
- *Reducción del **overfitting** del modelo aumentando el tamaño muestral para mejorar la exactitud en la predicción*
- ***Verificación** y calibración de sensores para obtener **datos de calidad***
- ***Seguimiento analítico** de las variables de estudio para comprobación de valores*
- *Diseño de **series temporales** y otros **modelos de aprendizaje** supervisado y no supervisado*

VI. Bibliografía de interés

Aragón-Barroso, A. J., Ribes, D., & Osorio, F. (2025). Enhancing drinking water safety: Real-time prediction of trihalomethanes in a water distribution system using machine learning and multisensory technology. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 297, 118243. <https://doi.org/10.1016/j.ecoenv.2025.118243>

Chowdhury, S., Sattar, K. A., & Rahman, S. M. (2025). Predicting few disinfection byproducts in the water distribution systems using machine learning models. *Environmental Science and Pollution Research*, 32(7), 3776–3794. <https://doi.org/10.1007/s11356-025-35933-3>

Dong, F., Zhu, J., Li, J., Fu, C., He, G., Lin, Q., Li, C., & Song, S. (2023). The occurrence, formation and transformation of disinfection byproducts in the water distribution system: A review. *Science of The Total Environment*, 867, 161497. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2023.161497>

Dyck, R., Cool, G., Rodriguez, M., & Sadiq, R. (2015). Treatment, residual chlorine and season as factors affecting variability of trihalomethanes in small drinking water systems. *Frontiers of Environmental Science & Engineering*, 9(1), 171–179. <https://doi.org/10.1007/s11783-014-0750-1>

Jin, M., Wen, Z., Liu, Y., Qian, M., Zhou, Y., Bian, Y., Zhang, Y., & Feng, X. (2023). Trihalomethanes in water samples: Recent update on pretreatment and detection methods. *Chemosphere*, 341, 140005. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2023.140005>