1.1.5 Obtención de parámetros cinéticos en la modelación de un biorreactor para depurar aguas de papelera mediante el método experimental dinámico

Alicia Román-Martínez, Fabiola Aguiñaga-Morales, Pastor F. Lanuza-Pérez, Margarito Cepeda-Rodríguez, Melina A. F. Iwamura Obtención de parámetros cinéticos en la modelación de un biorreactor para depurar aguas de papelera mediante el método experimental dinámico

A. ROMÁN-MARTÍNEZ¹, F. AGUIÑAGA-MORALES¹, P. F. LANUZA-PÉREZ¹, M. CEPEDA-RODRÍGUEZ², M.A.F. IWAMURA³

¹ Profesor en la Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Dr. Manuel Nava 6, San Luis Potosí, S.L.P., 78210, MÉXICO. E-mail: alicia.roman@uaslp.mx

² Papelera Industrial Potosina, S.A. de C.V., Eje 114 230, San Luis Potosí, S.L.P., 78900, MÉXICO.

³ Docente no Centro Universitário Ítalo Brasileiro, Av João Dias, Santo Amaro, São Paulo, Brasil

ROMÁN-MARTÍNEZ ,A., AGUIÑAGA-MORALES ,F., LANUZA-PÉREZ, P. F., CEPEDA-RODRÍGUEZ, M., IWAMURA, M.A.F. Obtención de parámetros cinéticos en la modelación de un biorreactor para depurar aguas de papelera mediante el método experimental dinâmico. URL: www.italo.com.br/portal/cepep/revista eletrônica.html. São Paulo, SP

RESUMEN

En este trabajo se llevó a cabo la estimación de parámetros cinéticos de un biorreactor aerobio de tratamiento de aguas residuales de lodos activados de una planta papelera. Se aplicó el método dinámico para la obtención experimental de datos de oxígeno disuelto medidos en planta. Estos datos se ajustaron a dos modelos cinéticos de consumo de oxígeno, el primero como función de la velocidad de crecimiento de biomasa durante la respiración celular y el segundo como función del consumo de oxígeno en todos los procesos biológicos que ocurren en el biorreactor. La estimación numérica de los parámetros cinéticos se realizó mediante el principio de máxima verosimilitud empleando una función de distribución de probabilidad normal para los datos obtenidos por el método dinámico. El ajuste se realizó partiendo de una concentración inicial de oxígeno disuelto de 1.8E-3 kg m⁻³. Las condiciones de operación del biorreactor aerobio de fangos activos fueron: tiempo promedio de retención celular (TMRC) de 9.38 días; tiempo de retención hidráulica (TRH) de 1.71 días; sólidos suspendidos en el licor mezclado (MLSS) de 4686.64 mg/L a un caudal de alimentación de 14.125 lps. Se estimaron 15 parámetros cinéticos de los cuales K_{NT} y K_s tuvieron un incremento en su porcentaje de error en la tercera iteración entre -10.48% a 45.51% y 2.42% a 3.89% respectivamente. Se obtuvieron coeficientes de correlación de 0.9965 y 0.9957 para los dos modelos cinéticos contra los datos experimentales, respectivamente. Con los valores de los parámetros se obtuvieron dos modelos matemáticos propios que describen la dinámica del sistema de tratamiento de aguas residuales en estudio.

Palabras-clave: aguas de papelera, biorreactor, modelación, máxima verosimilitud.

RESUMO

Neste trabalho foi realizada a estimativa dos parâmetros cinéticos de um biorreator aeróbio para tratamento de efluentes de lodo ativado de uma fábrica de papel. O método dinâmico foi aplicado para obter experimentalmente dados de oxigênio dissolvido medidos na planta. Esses dados foram ajustados a dois modelos cinéticos de consumo de oxigênio: o primeiro em função da taxa de crescimento da biomassa durante a respiração celular e o segundo em função do consumo de oxigênio em todos os processos biológicos que ocorrem no biorreator. A estimativa numérica dos parâmetros cinéticos foi realizada utilizando o princípio da máxima verossimilhança utilizando uma função de distribuição de probabilidade normal para os dados obtidos pelo método dinâmico. O ajuste foi realizado a partir de uma concentração inicial de oxigênio dissolvido de 1,8E-3 kg.m⁻³. As condições de operação do biorreator aeróbio de lodo ativado foram: tempo médio de retenção celular (TMRC) de 9,38 dias; tempo de retenção hidráulica (TRH) de 1,71 dias; sólidos suspensos em licor misto (MLSS) de 4.686,64 mg/L a uma taxa de alimentação de 14,125 lps. Foram estimados 15 parâmetros cinéticos, dos quais KNT e Ks tiveram um aumento no seu erro percentual na terceira iteração entre -10,48% a 45,51% e 2,42% a 3,89% respectivamente. Para os dois modelos cinéticos, em relação aos dados experimentais, foram obtidos coeficientes de correlação de 0,9965 e 0,9957, respectivamente. Com os valores dos parâmetros foram obtidos dois modelos matemáticos que descrevem a dinâmica do sistema de tratamento de águas residuais em estudo.

Palavras-chave: águas residuárias, biorreator, modelagem, máxima verossimilhança

1 INTRODUCCIÓN

Los sistemas aerobios de fangos activos son ampliamente empleados para la remoción de contaminantes de efluentes provenientes de la industria y de los sistemas municipales de alcantarillado. El empleo de estas tecnologías se encuentra en pleno desarrollo con el objetivo de mejorar la calidad de agua tratada con el menor consumo de recursos humanos y financieros, en el menor tiempo posible (Fang y *col.*, 2010).

Debido a que las actividades antropogénicas son tan diversas, los efluentes provenientes de éstas en cuanto a su composición química son muy variados, es aquí donde los fangos activos aparecen como alternativa en la gran mayoría de los tratamientos secundarios de aguas residuales. El desarrollo de modelos que describen la dinámica de estos procesos ha evolucionado en los últimos veinticinco años. Citando algunos, el ASM1 (activated sludge model 1) (Henze y *col.*, 1987) hace una descripción de la remoción de carbono orgánico y nitrógeno amoniacal, siendo el oxígeno el principal aceptor de electrones. Posterior al ASM1, fue desarrollado el modelo ASM2 (Henze y *col.*, 1995) que añade la descripción de la remoción de la remoción biológica de fósforo. Finalmente, el ASM3 (Henze y *col.*, 2000) añade la descripción del proceso de almacenamiento de sustrato dentro de la biomasa e introduce el concepto de respiración endógena.

La modelación de plantas tratadoras de aguas residuales (PTARs) tiene como uno de sus objetivos el desarrollo de modelos que adopten una estructura analítica para cada una de las velocidades de reacción y para la calibración interna de parámetros bajo un diseño experimental. Sin embargo, la estimación de parámetros puede ser errónea debido a tres principales factores (Bastin y Dochain, 1990): 1) un mal planteamiento de suposiciones para el desarrollo del modelo; 2) la descripción analítica errónea de los términos cinéticos para la identificabilidad de los parámetros y 3) la falta de reproducibilidad y significancia de los datos.

El oxígeno disuelto es una de las variables principales en los sistemas aerobios de fangos activos. El oxígeno es consumido por la biomasa para la remoción de los agentes contaminantes. En las PTARs, la eficiencia en la remoción de carga contaminante en el agua residual se ve limitada por no mantener niveles adecuados de oxígeno disuelto (OD) en el biorreactor (Kandare y *col.*, 2011). Los niveles de OD se ven afectados por la transferencia de oxígeno al sistema y por la velocidad de consumo de oxígeno (VCO) (Cristea y *col.*, 2011).

La VCO, puede ser determinada experimentalmente por varios métodos, tales como: (a) técnicas basadas en el coeficiente de rendimiento, que se basan en el balance estequiométrico de consumo de oxígeno por la biomasa con un modelo que describe el crecimiento de la misma (Heijnen, 2006); (b) el método dinámico, que está basado en la capacidad de respiración de los microorganismos que crecen en el biorreactor (García y *col.*, 2010); y (3) la medición de la VCO a partir de un perfil de concentración de oxígeno, que está basado en el conocimiento a priori del coeficiente global de transferencia de oxígeno k_{La} , usando una ecuación empírica o un modelo predictivo para la estimación de la VCO a través de un perfil de concentración de oxígeno disuelto medido durante el curso de la operación de oxidación (Santos y *col.*, 2006). Específicamente, el método dinámico se caracteriza por la simplicidad en su aplicación práctica. Éste consiste en la interrupción

del suministro de oxígeno al biorreactor, durante este tiempo se monitorea la concentración de OD con un medidor en línea, y la VCO se determina por la caída de la concentración de OD inmediatamente después de la interrupción.

La estimación de parámetros se puede realizar de las siguientes tres maneras: 1) método Bayesian, que considera tanto las mediciones como los parámetros del modelo como variables aleatorias para la estimación de los parámetros (Hug y *col.*, 2013); 2) método de máxima verosimilitud, que considera que las mediciones no están correlacionadas y son descritas por una función de distribución de probabilidad, y emplea la función de verosimilitud para la estimación de los parámetros (Karimi y *col.*, 2014); y 3) ajuste de mínimos cuadrados, minimizando la suma de los cuadrados de las diferencias entre una función y los correspondientes valores en los datos.

El método de máxima verosimilitud para la estimación de parámetros (MLE por sus siglas en inglés), es una buena alternativa para el ajuste de los parámetros, en donde, se hace la suposición de que el error de las mediciones tiene una distribución normal y una desviación estándar. La estimación más adecuada de los parámetros se encuentra en la maximización de la función de verosimilitud.

El objetivo del presente estudio fue aplicar el método experimental dinámico y el ajuste de los datos obtenidos a dos cinéticas de consumo de oxígeno, para obtener los parámetros cinéticos en un biorreactor aerobio de fangos activos de una PTAR perteneciente a una planta productora de papel.

El presente trabajo está estructurado de la siguiente manera: en el segundo apartado se explica la metodología empleada para el

cumplimiento del objetivo. En la tercera sección, se describe la aplicación de la metodología a un caso de estudio del biorreactor aerobio de una PTAR de una planta productora de papel, junto con los resultados obtenidos. Subsecuentemente, se hace la discusión de los resultados obtenidos para finalizar con las conclusiones generales de la investigación.

2 METODOLOGÍA

Las condiciones de operación del biorreactor fueron tiempo de retención hidráulica (TRH) de 1.71 días, tiempo promedio de retención celular (TMRC) de 9.38 días, sólidos suspendidos en el licor mezclado (MLSS) de 4686.64 mg/l a un caudal de alimentación de 14.125 lps. La "identificación permitirá mejorar el desempeño de la PTAR obteniendo un efluente de mejor calidad. El ajuste de parámetros se llevó a cabo mediante el método de máxima verosimilitud aplicado a dos modelos cinéticos de la VCO de un biorreactor. El primero de ellos considera el parámetro de consumo de oxígeno para mantenimiento de la biomasa (m_{O2}) , el parámetro de rendimiento biomasa/oxígeno (Y_{XO}) y la velocidad de crecimiento de biomasa ($\frac{dX}{dt}$). A su vez, el segundo modelo corresponde a la cinética de consumo de oxígeno de una modificación del modelo ASM2 (Mannina y col., 2012). Se trabajó con el modelo ASM2 pues éste es más específico a nuestro caso de estudio ya que el ASM1 no contempla la remoción de fosfatos. En contraste con el ASM3 que explica el proceso de respiración endógena, en nuestro proceso, los nutrientes como la materia orgánica carbonosa, el nitrógeno y el fósforo son continuamente alimentados por lo que no se lleva a cabo la respiración endógena.

La Fig. 1 muestra el diagrama de flujo de la metodología empleada. Después se da una descripción de cada una de las etapas que la conforman.

Figura 1 - Metodología empleada para la obtención de cinéticas de consumo de oxígeno del biorreactor.



Fuente: propia autoría, 2021.

Etapa 1. Descripción del proceso. Consiste en identificar las principales características del proceso; factores físico-químicos y biológicos, tipo de sustratos disueltos, variables e identificación del tipo de cinéticas (relacionadas con las características identificadas).

Etapa 2. Obtención de las cinéticas de VCO. Para ello se hace uso de la matriz de cinéticas de un modelo de fangos activos (por ejemplo, el ASM2). La matriz está conformada por las variables involucradas en el proceso, los coeficientes estequiométricos de los procesos y de las cinéticas que se llevan a cabo. La cinética total se determina como la suma de todos los procesos involucrados en el consumo y/o generación de una variable específica por su correspondiente coeficiente estequiométrico. Además, se hace una búsqueda bibliográfica sobre los posibles valores y rangos numéricos de los parámetros que caracterizan a nuestro sistema para realizar una primera simulación de las cinéticas.

Etapa 3. Medición de variables. Consiste en realizar la medición de las variables de estado identificadas que describen la cinética, como la concentración de sustrato (*S*), nitrógeno total (*NT*), fosfatos (PO_4^{2-}), biomasa (*X*) y oxígeno (O_2) disuelto (OD). Es necesario emplear técnicas analíticas o equipos de medición de precisión con el objetivo de disminuir el error en las mediciones.

Etapa 4. Método dinámico. Consiste en: Paso 1.- monitorear la concentración de OD en el biorreactor durante la etapa de aireación para determinar la concentración inicial de OD. Paso 2.- Suspender el suministro de aire al biorreactor. Paso 3. Durante la suspensión se continúa monitoreando la concentración de OD hasta el punto más bajo de concentración. La caída en la concentración de OD inmediatamente después de la suspensión de aire al biorreactor corresponde a la VCO.

Etapa 5. Estimación de Parámetros. Método de máxima verosimilitud. Este método requiere la definición del modelo del proceso que consiste en la ecuación diferencial o el sistema de ecuaciones

diferenciales que son función de la(s) variable(s) de salida, variables de entrada, tiempo, condiciones iniciales y los parámetros a estimar:

$$\frac{dx}{dt} = f(x,\theta,u,t); \quad x(0) = x_0 \qquad (1)$$

Donde x es la variable de salida, θ es un vector de parámetros, u es un vector de entradas, t es el tiempo.

Definido el modelo del proceso (Ec. (1)), se define la función de verosimilitud empleando una función de distribución de probabilidad normal *L*:

$$L(y_m, \theta) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} exp\left(-\frac{(y_m - y(\theta))^2}{2\sigma^2}\right)$$
(2)

Donde y_m corresponde al dato experimental medido, $y(\theta)$ es el valor predicho por el modelo (Ec. (1)) y σ es la desviación estándar de los datos obtenidos experimentalmente. Los parámetros estimados serán los que maximicen la función de verosimilitud (Ec. (2)).

Para obtener el parámetro estimado, la función de verosimilitud se debe derivar con respecto a cada uno de los parámetros, igualarla a cero y resolver el sistema de ecuaciones para determinar un valor crítico de θ . Para saber si se trata de un máximo se utiliza el criterio de la segunda derivada. Si la segunda derivada es negativa en el valor crítico θ se trata de un máximo.

Casos especiales del método de la máxima verosimilitud se presentan cuando el error de las mediciones se considera independiente. La función de verosimilitud se vuelve equivalente a minimizar la siguiente función:

$$J(y_m, \theta) = \sum \frac{(y_m - y(\theta))^2}{2\sigma^2}$$
(3)

Etapa 6. Evaluación de los parámetros estimados. Se deben cumplir tres criterios para la evaluación: 1) coeficiente de correlación mayor a 0.95; 2) minimización de la función objetivo (Ec. (4)) y 3) minimización del error entre cada iteración (Ec. (5)). En el problema de la estimación, que básicamente se define como un problema de optimización, es necesario realizar iteraciones en caso de no cumplir con los criterios de evaluación, tomando como nuevos valores iniciales de estimación los obtenidos en la estimación anterior.

$$y_m - y(\theta) = 0 \quad (4)$$
$$\left(\frac{\theta_{i+1} - \theta_i}{\theta_i}\right) \cdot 100 = error(\%) \quad (5)$$

Donde θ_i es el parámetro estimado en la primera iteración, θ_{i+1} es el parámetro estimado en la siguiente iteración.

Los valores finales de los parámetros correctos se obtienen hasta cumplir los tres criterios descritos.

3 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La metodología previamente descrita fue aplicada en la planta tratadora de aguas residuales de Papelera Industrial Potosina, S. A. de C. V., localizada en la zona industrial de San Luis Potosí, México. La metodología y resultados aquí obtenidos serán de utilidad para mejorar el desempeño de la PTAR con un efluente de mejor calidad.

Etapa 1. Descripción del proceso. El sistema estudiado está representado por la Fig. 2. El estudio se centró en el reactor biológico aerobio. Previo al tratamiento secundario (reactor aerobio únicamente), se realiza una breve descripción del pretratamiento. La corriente de agua residual procedente de la planta de papel recibe un tratamiento

primario que consiste en una precipitación del exceso de fibra de papel mediante una floculación-coagulación en un sedimentador primario. Del agua clarificada en el tratamiento primario, únicamente el 30% del total de agua residual continúa con un tratamiento secundario en un reactor aerobio y un sedimentador secundario. Es en el reactor biológico donde se llevan a cabo las reacciones de degradación de sustrato, nitrógeno, fosfatos y consumo de oxígeno mediante la presencia de biomasa $(C_5H_7NO_2)$. Estas reacciones son autocalíticas debido al crecimiento de la biomasa. La ecuación general de la reacción llevada en el biorreactor está expresada por:

 $C_{18}H_{19}O_9N + 0.74NH_4^+ + 8.8O_2 \rightarrow 1.74C_5H_7NO_2 + 9.3CO_2 + 4.52H_2O + H^+$ (6)

La corriente de salida del biorreactor pasa a un sedimentador secundario que tiene por objetivo separar la biomasa activa del agua residual tratada. La biomasa se recupera en el fondo del mismo y es recirculada al biorreactor para continuar con la remoción de los contaminantes. Una pequeña fracción es considerada desecho y es enviada a un digestor aerobio. Finalmente, el agua residual tratada es recuperada por la parte superior del sedimentador secundario y es enviada a un tanque de desinfección con hipoclorito de sodio al 13%.

En el biorreactor se identifican como variables la concentración de sustrato (*S*), nitrógeno total (*NT*), fosfatos (PO_4^{2-}), biomasa (*X*) y oxígeno disuelto (O_2); todas ellas medidas en el biorreactor.



Figura 2 - Planta tratadora de agua residual de papelera.

Fuente: propia autoría.

Las cinéticas llevadas a cabo en el biorreactor son de tipo Monod pues describen el crecimiento de la biomasa responsable de la degradación de los agentes contaminantes en función de sus concentraciones de acuerdo a tres parámetros: velocidad máxima de crecimiento (μ), constante de saturación (K) y un coeficiente de rendimiento (Y) (Strigul y *col.*, 2009; Wang y *col.*, 2009).

Etapa 2. Obtención de las cinéticas de VCO. Las cinéticas que predicen la VCO se obtuvieron empleando la cinética descrita por García y *col.* (2010) VCO_1 (Ec. (7)) y por la cinética de consumo de oxígeno VCO_2 , de una reducción del modelo de fangos activos No. 2 (Ec. (10)) propuesta por Mannina y *col.* (2010).

$$VCO_1 = m_{O2}X + \frac{1}{Y_{XO}}\frac{dX}{dt}$$
 (7)

Donde m_{O2} es el coeficiente de consumo de oxígeno para mantenimiento en kgO₂·kgX⁻¹·h⁻¹, *X* es la concentración de biomasa en el biorreactor en kgX·m⁻³, Y_{XO} es el coeficiente de rendimiento biomasa/oxígeno en kgX·kgO₂⁻¹ y $\frac{dX}{dt}$ es la velocidad de crecimiento de biomasa en el biorreactor en kgX·m⁻³·h⁻¹ (Ec. (8)).

La Tabla 1 describe los términos cinéticos de siete procesos que se llevan a cabo en el biorreactor: crecimiento aeróbico y anóxico a partir del consumo de sustrato S (proceso 1 y 2), crecimiento aeróbico y anóxico de biomasa acumuladora de fosfatos (proceso 3 y 4), lisis de heterótrofos (proceso 5), lisis de autótrofos (proceso 6) y crecimiento de autótrofos (proceso 7).

De las columnas segunda a la séptima se identifican las variables de estado (*x*): oxígeno (O_2), sustrato (*S*), nitrógeno total (*NT*), fosfatos (PO_4^{2-}), biomasa heterotrófica (X_H) y autotrófica (X_A).

La octava columna identifica la cinética de cada proceso y el interior de la matriz identifica los coeficientes estequiométricos de los procesos para cada variable de estado.

Estos proporcionan el valor del factor de conversión entre la velocidad del proceso y la velocidad de variación de la variable de estado por el proceso. La convención de signos empleada en esta matriz es la siguiente; positivo es producción y negativo es consumo.

Proceso	02	S	NT	PO_{4}^{2-}	X _H	X _A	Cinética
1- Crecimiento aeróbico (a partir de sustrato S)	$-\left(\frac{1-Y_H}{Y_H}\right)$	$-\frac{1}{Y_H}$	−i _{NBM}		1		$\Gamma = \mu_{H} \cdot \theta_{H}^{-(T1-T2)} \cdot \frac{S}{K_{s} + S} \cdot \frac{NT}{K_{NT} + NT} \cdot \frac{PO_{4}^{2-}}{K_{PO_{4}^{2-}} + PO_{4}^{2-}} \\ \cdot \frac{O_{2}}{K_{O_{2}} + O_{2}} \cdot \frac{1}{1 + 10^{(pHmin-pH)} + 10^{(pH-pHmax)}} \cdot \alpha \cdot X$
2- Crecimiento anóxico (a partir de sustrato S)		$-\frac{1}{Y_H}$	-i _{NBM}		1		$I = \mu_{H} \cdot \eta_{NTH} \cdot \theta_{H}^{-(T1-T2)} \cdot \frac{S}{K_{s} + S} \cdot \frac{NT}{K_{NT} + NT} \cdot \frac{PO_{4}^{2-}}{K_{PO_{4}^{2-}} + PO_{4}^{2-}}$ $\cdot \frac{K_{O_{2}}}{K_{O_{2}} + O_{2}} \cdot \frac{1}{1 + 10^{(pHmin-pH)} + 10^{(pH-pHmax)}} \cdot \alpha$ $\cdot X$
3- Crecimiento aeróbico de biomasa acumuladora de fósforo	$-\left(\frac{1-Y_H}{Y_H}\right)$			—i _{PBM}			$\Lambda = \mu_{H} \cdot \theta_{H}^{-(T1-T2)} \cdot \frac{PO_{4}^{2-}}{K_{PO_{4}^{2-}} + PO_{4}^{2-}} \cdot \frac{O_{2}}{K_{O_{2}} + O_{2}} \cdot \frac{NT}{K_{NT} + NT} \cdot \frac{1}{1 + 10^{(pHmin-pH)} + 10^{(pH-pHmax)}} \cdot \alpha \cdot X$
4- Crecimiento anóxico de biomasa acumuladora de fósforo				— <i>і_{РВМ}</i>			$ \mu_{H} \cdot \eta_{NTH} \cdot \theta_{H}^{-(T1-T2)} \cdot \frac{NT}{K_{NT} + NT} \cdot \frac{PO_{4}^{2-}}{K_{PO_{4}^{2-}} + PO_{4}^{2-}} \cdot \frac{K_{O_{2}}}{K_{O_{2}} + O_{2}} \cdot \frac{1}{1 + 10^{(pHmin-pH)} + 10^{(pH-pHmax)}} \cdot \alpha \cdot X $

Tabla 1 - Notación matricial de los términos cinéticos en el biorreactor.

Continua

Continuación

Proceso	02	S	NT	PO_{4}^{2-}	X _H	X _A	Cinética
5 - Lisis de Heterótrofos X _H					-1		$\mathbf{T} = b_H \cdot \boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{X}$
6 - Lisis de autótrofos X _A						-1	$\Upsilon = b_A \cdot \beta \cdot X$
7- Crecimiento de autótrofos X _A	$-\frac{4.75-Y_A}{Y_A}$		$i_{NBM} - rac{1}{Y_A}$			1	$\Pi = \mu_A \cdot \theta_A^{-(T1-T2)} \cdot \frac{NT}{K_{NT} + NT} \cdot \frac{PO_4^{2-}}{K_{PO_4^{2-}} + PO_4^{2-}} \cdot \frac{O_2}{K_{O_2} + O_2}$ $\cdot \frac{1}{1 + 10^{(pHmin-pH)} + 10^{(pH-pHmax)}} \cdot \beta \cdot X$

Fuente: propia autoría.

La velocidad de crecimiento de biomasa $\left(\frac{dX}{dt}\right)$, está representada por:

$$\frac{dX}{dt} = (1 \cdot (\Gamma)) + (1 \cdot (I)) + (1 \cdot (\Pi)) + (-1 \cdot (T)) + (-1 \cdot (\Upsilon))$$
(8)

Haciendo una sustitución de la Ec. (8) en la Ec. (7), obtenemos:

$$VCO_1 = m_{O2}X + \frac{1}{Y_{XO}}[(1 \cdot (\Gamma)) + (1 \cdot (I)) + (1 \cdot (\Pi)) + (-1 \cdot (T)) + (-1 \cdot (\Gamma))] + (-1 \cdot (\Gamma))]$$
(9)

La segunda cinética de consumo de oxígeno (VCO_2) se obtiene de la matriz de términos cinéticos del caso de estudio (Tabla No. 1):

$$VCO_2 = \left(\left(-\frac{1-Y_H}{Y_H} \right) * (\Gamma) \right) + \left(\left(-\frac{1-Y_H}{Y_H} \right) * (\Lambda) \right) + \left(\left(-\frac{4.75-Y_A}{Y_A} \right) * (\Pi) \right)$$
(10)

La Tabla 2 muestra los valores iniciales de los parámetros a estimar de las ecs. (7) y (10).

Tabla 2 - Valor inicial de los parámetros (N.A.- No aplica)

Parámetro	Unidades	<i>VCO</i> ₁ Ec. (7)	<i>VCO</i> ₂ Ec.(10)	Rango	Significado
					Constante de
K_{NT}	kgNT m⁻³	1.0E-3	1.0E-3	(0.2-1.5)E-3	saturación media
					para nitrógeno total
					Constante de
<i>K</i> ₀₂	kgO₂∙m⁻³	2.0E-4	2.0E-4	(0.1-2.0)E-4	saturación media de
					oxígeno.
					Constante de
$K_{PO_{4}^{2-}}$	kgPO ₄ 2-m-3	1.5E-5	1.5E-5	(0.5-1.5)E-5	saturación media
					para fosfatos
					Constante de
K_S	kgS·m⁻³	2.0E-2	2.0E-2	(0.4-3.0)E-2	saturación media
					para sustrato
					Continua

Continuación

Parámetro	Unidades	<i>VCO</i> ₁ Ec. (7)	<i>VCO</i> ₂ Ec.(10)	Rango	Significado
Y _A	kgX _A ·kgNT⁻ ₁	N.A	0.24	(0.07-0.28)	Coeficiente de rendimiento de autótrofos
Y _H	kX⊦·kgS⁻¹	N.A	0.6496	(0.38-0.75)	Coeficiente de rendimiento de heterótrofos
<i>m</i> ₀₂	kgO₂ [.] kgXн ⁻ ^{1.} h ⁻¹	0.28	N.A	(0.07-0.28)	Coeficiente de consumo de oxígeno para mantenimiento
Y _{XO}	kX∙kgO₂ ⁻¹	0.6496	N.A	(0.38-0.75)	Coeficiente de rendimiento biomasa/oxígeno
$ heta_A$	adimension al	1.05	1.05	(0.4-1.20)	Coeficiente de temperatura para biomasa autotrófica
$ heta_{H}$	adimension al	1.04	1.04	(0.4-1.05)	Coeficiente de temperatura para biomasa heterotrófica
μ_A	d ⁻¹	1.09	1.09	(0.8-1.92)	Máxima velocidad de crecimiento de autótrofos
μ_H	d ⁻¹	6.0	6.0	(1.0-13.2)	Máxima velocidad de crecimiento de heterótrofos
α	adimension al	0.5	0.5	(0.45-0.55)	Fracción que corresponde a biomasa heterotrófica del total de X _b Continua

Continuación

Darámetro	Unidades	VCO	VCO	Pango	Significado
Falamellu	Univaves	$V \cup U_1$	$V \cup U_2$	Rango	Signincauo
		EC. (7)	EC.(10)		
					Fracción que
ß	adimension	05	0.5	(0.45-0.55)	corresponde a
Ρ	al	0.5	0.5	(0.45-0.55)	biomasa autotrófica
					del total de X_b
b_A		0.10	0.10		Constante de
	d-1			(0.05-0.2)	velocidad de
					decaimiento de
					autótrofos
					Constante de
b	d ⁻¹	0.264	0.264	(0.02-1.44)	velocidad de
D_H					decaimiento de
					heterótrofos
	adimension	0.72	0.72		Factor de reducción
η_{NTH}	al	0.72	0.72	(0.55-0.90)	de hidrólisis anóxica
Fuente: propia	autoría				

Fuente: propia autoria.

Etapa 3. Medición de las variables. Las mediciones de las variables señaladas en la Fig. 2 se realizaron de la siguiente manera. La medición de OD se realizó empleando un medidor portátil de OD modelo Hanna Instruments 9146. La medición de biomasa se realizó de acuerdo a la NOM-034-SCFI-2001(CONAGUA). Las concentraciones de sustrato (S), nitrógeno total (NT) y fósforo (PO_4^{2-}) se determinaron empleando un colorímetro DR/980 marca HACH.

Etapa 4. Método dinámico. La medición de oxígeno disuelto (OD) por el método dinámico se realizó durante 240 segundos a intervalos de 10 segundos, empleando una sonda portátil de medición de OD Hanna Instruments 9146. Debido al gran consumo de energía eléctrica durante los arrangues de los equipos de suministro de aire, éstos no fueron apagados y encendidos como se explicó en la metodología. Para ello, se extrajo una muestra del biorreactor en un frasco Winkler y se tapó con la sonda de medición evitando el intercambio gaseoso entre la muestra y el ambiente, de tal manera que simulará el efecto de falta de suministro de oxígeno.

Etapa 5 y 6. Estimación de los parámetros (máxima verosimilitud) y evaluación de los parámetros. En esta sección se obtienen los valores de los parámetros por el método de máxima verosimilitud aplicado a las cinéticas descritas por las ecs. (7) y (10). En ambas cinéticas se hace la estimación de 15 parámetros (previamente identificados en la Tabla 2). Las ecuaciones involucradas en la estimación se implementaron en MatLab R2009b.

La Tabla 3 muestra el resultado de la estimación de los parámetros de la Ec. (7). La primera columna corresponde al parámetro estimado, la segunda a las unidades del parámetro, de la tercer a la quinta columna se tienen los valores numéricos obtenidos en la primera, segunda y tercera iteración respectivamente. Finalmente, la columna seis y siete muestran el error obtenido entre cada iteración. Se requirió de tres iteraciones para encontrar los valores adecuados, donde el mínimo valor de la función objetivo se encontró en la iteración número 3, el error entre la iteración 2 a 3 se redujo con respecto de la iteración 1 a 2. La correlación obtenida entre los datos experimentales y la predicción permaneció constante con un valor de 0.9965 entre cada iteración. La Fig. 3(a) muestra la gráfica obtenida entre los datos experimentales y la cinética descrita por la Ec. (7).

				erro	r (%)	
Parámetro	Unidades	Iteración 1	Iteración 2	Iteración 3	Iteración 1 a 2	lteración 2 a 3
K _{NT}	kgNT m⁻³	8.84E-4	7.92E-4	1.15E-3	-10.48	45.51
K_{O2}	kgO₂ [.] m⁻³	1.12E-4	1.05E-4	1.07E-4	-6.00	1.67
$K_{PO_{4}^{2}}$ -	kgPO ₄ ² m ⁻³	1.25E-5	1.22E-5	1.23E-5	-2.43	0.75
K_S	kgS m⁻³	1.13E-1	1.16E-1	1.21E-1	2.42	3.89
m_{02}	kgO2 [.] kgXH ^{-1.} h ⁻	2.75E-2	2.80E-2	2.80E-2	1.57	0.19
	1					
Y_{XO}	kX∙kgO₂⁻¹	6.38E-1	6.40E-1	6.40E-1	0.30	0.08
$ heta_A$	adimensional	0.595	0.622	0.614	4.40	-1.17
$ heta_{H}$	adimensional	0.560	0.580	0.574	3.53	-1.02
μ_A	d ⁻¹	1.02	1.11	1.10	9.32	-0.91
μ_{H}	d ⁻¹	7.31	7.99	8.06	9.38	0.80
α	adimensional	0.525	0.524	0.523	-0.24	-0.07
β	adimensional	0.525	0.523	0.523	-0.42	0.11
b_A	d ⁻¹	0.162	0.160	0.160	-1.49	-0.01
b_H	d ⁻¹	0.749	0.770	0.773	2.72	0.34
η_{NTH}	adimensional	0.211	0.197	0.0233	-6.20	-88.2
Función		1.9622E-	1.9631E-	1.9602E-		
objetivo		05	05	05		

Tabla 3. Valores obtenidos de la estimación de parámetros de la Ec. (7).

Fuente: própia autoría.

La Tabla 4 tiene el mismo formato que la Tabla 3 y muestra los parámetros estimados de la Ec. (10). Se requirió de tres iteraciones, de la misma manera al caso anterior, el mínimo valor de la función objetivo se obtuvo en la iteración 3. Entre la iteración 2 a 3 se encontró el menor porcentaje de error. La correlación obtenida varió entre cada iteración, encontrándose valores de 0.9957, 0.9963 y 0.9965 para la primera, segunda y tercera iteración respectivamente. La Fig. 3(b) muestra la gráfica obtenida entre los datos experimentales y la cinética descrita por la Ec. (10) en la tercera iteración.

					error (%)	
Parámetro	Unidades	Iteración	Iteración	Iteración 3	Iteración	Iteración
		1	2		<u>1a2</u>	<u>2 a 3</u>
K_{NT}	kgNT·m⁻³	2.90E-4	7.10E-4	7.13E-4	145.29	0.39
<i>K</i> ₀₂	kgO₂∙m⁻³	1.27E-4	4.08E-5	1.91E-5	-67.77	-53.08
$K_{PO_{4}^{2}}$	kgPO4 ² m ⁻³	7.83E-6	7.61E-6	7.76E-6	-2.78	1.93
K_S	kgS m⁻³	5.00E-3	1.15E-1	2.87E-2	2199.97	-75.0
Y_A	kgX _A ·kgNT ⁻¹	1.72E-1	1.72E-1	1.72E-1	0.03	-0.24
Y_H	kX _H ·kgS⁻¹	6.75E-1	6.75E-1	6.75E-1	0.00	0.00
$ heta_A$	adimensional	0.873	0.872	0.872	-0.10	-0.05
$ heta_{H}$	adimensional	0.725	0.725	0.725	0.00	0.02
μ_A	d ⁻¹	1.36	1.36	1.36	0.00	0.03
μ_H	d ⁻¹	9.6	9.6	9.6	0.00	0.00
α	adimensional	0.5	0.5	0.5	0.00	0.00
β	adimensional	0.5	0.5	0.501	0.00	0.02
b_A	d ⁻¹	0.125	0.125	0.125	0.00	0.00
b_H	d ⁻¹	6.60E-2	7.30E-1	1.83E-1	1006.06	-75.0
η_{NTH}	adimensional	0.180	4.50E-2	1.13E-2	-75.00	-75.0
Función		1.391E-	7.76439E-	4.94169E-		
objetivo		05	06	06		

Tabla 4. Valores obtenidos de la estimación de parámetros de la Ec. (10).

Fuente: propria autoría

Figura 3 - Comparación de datos experimentales vs cinéticas de VCO; Fig. (a) Ec. (7) y Fig. (b) Ec. (10).





Fuente: propria autoría

La Tabla 5 muestra un comparativo entre los parámetros estimados correspondientes a las cinéticas VCO_1 y VCO_2 .

Parámetro	Unidades	Valor inicial	<i>VCO</i> ₁ Ec. (7)	<i>VCO</i> ₂ Ec. (10)
K _{NT}	kgNT m⁻³	1.0E-3	1.15E-3	7.13E-4
K_{O2}	kgO₂∙m⁻³	2.0E-4	1.07E-4	1.91E-5
$K_{PO_{4}^{2}}$ -	kgPO4 ² m ⁻³	1.5E-5	1.23E-5	7.76E-6
K_S	kgS⋅m⁻³	2.0E-2	1.21E-1	2.87E-2
Y_A	kgX _A ·kgNT ⁻¹	0.24	N.A	1.72E-1
Y_H	kX _H ∙kgS⁻¹	0.6496	N.A	6.75E-1
m_{02}	kgO ₂ ·kgX _H -1.h-1	0.28	2.80E-2	N.A
Y_{XO}	kX∙kgO₂ ⁻¹	0.6496	6.40E-1	N.A
$ heta_A$	adimensional	1.05	0.614	0.872
$ heta_{H}$	adimensional	1.04	0.574	0.725
μ_A	d ⁻¹	1.09	1.10	1.36
μ_{H}	d ⁻¹	6.0	8.06	9.6
α	adimensional	0.5	0.523	0.5
β	adimensional	0.5	0.523	0.501
b_A	d ⁻¹	0.10	0.160	0.125
b_H	d ⁻¹	0.264	0.773	0.183
η_{NTH}	adimensional	0.72	0.0233	0.0113

Tabla 5 - Comparación entre los valores obtenidos de la estimación de parámetros de las ecs (7) y (10).

Fuente: propria autoría

La estimación de los parámetros con mediciones experimentales obtenidas por el método dinámico y los modelos cinéticos de la VCO permitió estimar quince parámetros para cada una de las cinéticas. En la primera cinética, el coeficiente de consumo de oxígeno para mantenimiento m_{02} corresponde a la cantidad de oxígeno necesaria para mantener la biomasa a un nivel de baja actividad metabólica, que significa la mínima concentración de oxígeno requerida por kg de biomasa total que debe suministrarse por hora al biorreactor. En la misma cinética, el coeficiente de rendimiento biomasa/oxígeno Y_{XO} corresponde al rendimiento de biomasa generada por kg de oxígeno suministrado al sistema y puede servir como parámetro de operación para el cálculo neto de producción de biomasa. En la segunda cinética, Y_H representa la cantidad de biomasa heterotrófica generada por kg de oxígeno en el sistema y Y_A representa la cantidad de biomasa autotrófica generada por kg de oxígeno en el sistema, estos parámetros aportan información sobre el tipo de biomasa que prevalece en el sistema.

El error obtenido entre las iteraciones obtenidas empleando la VCO_1 muestra una disminución para todos los parámetros a excepción del K_{NT} y K_S , donde se obtuvo un incremento en el error. Esto puede estar asociado a las técnicas de medición de concentración de sustrato y nitrógeno, ya que se emplearon métodos colorimétricos, que tienen baja precisión en las mediciones. El coeficiente de correlación obtenido en cada una de las iteraciones permanece constante desde la primera iteración lo ⁻¹que sugiere que la VCO_1 puede ser una cinética adecuada para la estimación de los parámetros. Sin embargo, quedan fuera de la estimación otros parámetros de importancia, como Y_H y Y_A , considerados en un modelo global de tratamiento de aguas residuales.

La estimación de los parámetros obtenidos empleando la cinética de consumo de oxígeno VCO_2 , permitió obtener valores más bajos de la función objetivo desde la primera iteración, encontrándose que en la tercera iteración se obtiene el mayor de ellos. Sin embargo, los errores entre cada una de las iteraciones comparadas con las obtenidas por el empleo de la VCO_1 , son mayores para K_{NT} y K_S , igualmente asociamos estos errores a las técnicas de medición. Los errores reportados como 0.00 corresponden a que no existe variación entre los parámetros después de cada iteración. No obstante, el proceso de iteración converge hasta que se cumplen los criterios establecidos en la evaluación de los parámetros. El uso de la *VCO*₂ permitió estimar todos los parámetros descritos por la modificación del ASM2.

Los parámetros obtenidos mediante el método de máxima verosimilitud con las ecuaciones (7) y (10) son similares a los obtenidos en el trabajo realizado por Keskitalo y Leiviskä (2010), en el que se utilizó el protocolo de calibración de BIOMATH, por el cual ajustaron 4 parametros del modelo ASM2 de los cuales 2 coinciden con los estimados en este trabajo y son μ_H y Y_H . Los valores obtenidos por estos autores fueron de 10.2 d⁻¹ y 0.72 gCOD/gCOD respectivamente comparados con los obtenidos en este trabajo que fueron de, y 9.6 d⁻¹ y 0.675 gCOD/gCOD para VCO₂ y 9.8 d⁻¹ para VCO₁. A su vez Cadet et al. (2007) obtuvieron valores de μ_A y Y_H de 2.6 d⁻¹ y 0.62 gCOD/gCOD respectivamente, al realizar la validación de un modelo simplificado de ASM1 que también son similares a los aquí obtenidos que son de 1.36 d⁻¹ y 0.675 gCOD/gCOD para VCO_{2 y} 1.1 d⁻¹ para VCO₁. En los 3 estudios se utilizó la información de plantas de tratamiento de industrias papeleras por lo que se puede decir que el método de máxima verosimilitud arroja buenos resultados para la predicción de los parámetros del modelo ASM2.

Existen otros trabajos referidos a la calibración de modelos ASM por diferentes metodos (Mannina et al. 2012; Rieger 2009) en el agua residual a tratar es municipal. Si se comparan los datos obtenidos en este tipo de sistemas con los referidos a tratamiento de agua de industria papelera se puede observar que existe una variación importante en el calculo del parámetro μ_H en el que para agua municipal presenta valores de entre 0.8 y 1.8 d⁻¹ en comparación con los obtenidos para agua residual de industria papelera que son cercanos a 10 d⁻¹. Lo anterior puede

deberse a que en el agua residual municipal existe una carga considerablemente mayor de nutrientes, en comparación con el agua residual de la industria papelera a la que incluso es necesario añadirle nitrógeno y fosforo como nutrientes para que se lleve a cabo el tratamiento por el sistema de lodos activados (Cadet et al. 2007). Esta también es una razón para que la mayoría de los trabajos de calibración realizados para estos sistemas no consideren la eliminación de fosforo como parte del proceso obtando por utilizar el modelo ASM1 y no el ASM2, sin embargo, en la planta de tratamiento perteneciente a la Papelera Industrial Potosina S.A. de C.V. existe presencia de nutrientes en el agua residual motivo por el cual el modelo ASM2 es adecuado para la simulación aunque por lo que se observa en los resultados comparados anteriormente no varía significativamente con los obtenidos por el modelo ASM1.

4 CONCLUSIONES

La estimación de parámetros por medio del método experimental dinámico y el ajuste usando el principio de máxima verosimilitud, permitió obtener un modelo particular para la predicción de la velocidad de consumo de oxígeno en el biorreactor aerobio de fangos activos de la PTAR perteneciente a la planta productora de papel Papelera Industrial Potosina S.A. de C.V. La estimación por máxima verosimilitud con el empleo de una función de distribución de probabilidad normal mostró resultados satisfactorios en su aplicación a cinéticas de VCO de un biorreactor aerobio de una PTAR.

El empleo del método experimental dinámico mostró ser una herramienta que permitió obtener datos de significancia para la propia caracterización de los parámetros. Las técnicas de medición son un factor clave, pues en nuestro caso de estudio se concluyó que estas afectaron particularmente a dos parámetros (K_{NT} y K_S) de ambas cinéticas de la VCO.

Se obtuvo un menor valor de la función objetivo con el empleo de la VCO_2 , además de estimar en la totalidad los parámetros que se describen en la reducción del modelo ASM2. Por lo tanto, se concluye que la VCO_2 la mejor cinética para describir al biorreactor en cuestión.

Finalmente, estos parámetros serán de utilidad para el desarrollo de trabajos futuros como un análisis de sensibilidad e incertidumbre, así como para la implementación de estrategias de control en el biorreactor aerobio de fangos activos de la PTAR de la Papelera Industrial Potosina S.A. de C.V.

REFERENCIAS

BASTIN, G., DOCHAIN, D. **On-line Estimation and Adaptative Control of Bioreactors**. Elsevier Science Publishers: Netherlands, 1990.

CRISTEA, S. *et al.* Aeration control of wastewater treatment plant using hybrid NMPC. **Computers and Chemical Engineering,** v.35, pp. 638-650, 2011.

FANG, F. *et al.* An integrated dynamic municipal for simulating a fullscale municipal wastewater treatment plant under fluctuating conditions. **Chem. Eng. J.** v.160, pp. 522-529, 2010.

GARCIA-OCHOA, F *et al.* Oxygen uptake rate in microbial processes: An overview. **Biochem Eng J.**, v.49, pp. 289-307, 2010.

HEIJNEN J.J. Stoichiometry and kinetics microbial growth from a thermodynamic perspective. In: RATLEDE, C., KRISTIANSEN, B. (Eds). **Basic Biotechnology**, Cambridge University Press: London, 2006.

HENZE M., Grady C., Gujer W., Marais G. and Matsuo T. (1987). Activated sludge model No. 1. *IAWPRC Scientific and Technical Report No. 1*. London: IAWPRC HENZE M. *et al.* Activated sludge model No. 2. *IAWQ Scientific and Technical Report No. 3.* London: IAWQ.1995.

HENZE M. *et al.* Activated Sludge Models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3. *IWA Scientific and technical Report no. 9.* IWA publishing, London UK, 2000.

HUG, S. *et al.* High-dimensional Bayesian parameter estimation: Case study for a model of JAK2/STAT5 signaling. **Mathematical Biosciences**, v.246, pp. 293-304, 2013.

KANDARE, G. and NEVADO, R. An Adaptive predictive expert control of dissolved oxygen concentration in a waste water treatment plant. **Water Science & Technology**, v.64, pp.1130-1136, 2011.

KARIMI, H. and McAULEY, K. A maximum-likelihood method for estimating parameters, stochastic disturbance intensities and measurements noise variances in nonlinear dynamic models with process disturbances. **Computers and Chemical Engineering**, v.67, pp. 178-198, 2014.

MANNINA, G., COSENZA, A., VIVIANI, G. Uncertainty assessment of a model for biological nitrogen and phosphorus removal: Application to a large wastewater treatment plant. **Physics and Chemistry of the Earth,** v.42-44, pp.61-69, 2012.

OSTACE, G., CRISTEA, V., AGACHI, P. Evaluation of different control strategies of the waste water treatment plant based on a modified activated sludge model No.3. **Env. Eng. Manag. J.,** v.11, pp.147-164, 2012.

RICHARDS, F.S.G. A method of Maximum-Likelihood Estimation. Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological). v.2, pp. 469-475, 1961.

SANTOS, V.E., *et al.* Oxygen uptake rate measurements both by the dynamic method and during the process growth of *Rhodococcus erythropolis IGTS8*: modeling and difference in results. **Biochem. Eng. J.**, v.32, pp.198-204, 2006.

STRIGUL, N., DETTE, H., MELAS, V. A practical guide for optimal designs of experiments in the Monod model. **Environmental Modelling & Software**. v.24, pp.1019-1026, 2009.

WANG, L., PEREIRA, N., HUNG, Y. **Biological Treatment Processes**. Human Press: USA, 1996. ANEXO 1 – Agradecimientos, nomenclaturas y símbolos griegos

Agradecimientos

El primer autor agradece el apoyo al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología de México (CONACYT) por la beca escolar No. 275127, otorgada para cursar la Maestría en Ciencias en Bioprocesos dentro del programa de maestría de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí.

El autor de correspondecia agradece el financiamiento para la adquisición de reactivos y equipos de medición al Apoyo Exbecarios PROMEP con número de convenio UASLP-EXB-217.

Los autores agradecen el apoyo a Papelera Industrial Potosina S.A. de C.V. por haber permitido el parte del desarrollo de esta investigación en sus instalaciones.

Nomenclatura

NT	concentración de nitrógeno total en el biorreactor, kg·m	-3
----	--	----

- O_2 concentración de oxígeno disuelto en el biorreactor, kg·m⁻³
- X concentración de biomasa en el biorreactor, kg·m⁻³
- X_H concentración de biomasa heterotrófica, kg·m⁻³
- X_A concentración de biomasa autotrófica, kg·m⁻³
- PO_4^{2-} concentración de fosfatos en el biorreactor, kg·m⁻³
 - *S* concentración de sustrato en el biorreactor, kg·m⁻³
- *SST* concentración de sólidos suspendidos totales en el biorreactor, kg·m⁻³
- *V* volumen del biorreactor, m³
- *V_{ss}* volumen total del sedimentador, m³
- K_{NT} constante de saturación media para nitrógeno total, kgNT·m⁻³

 K_{O2} constante de saturación madia de oxígeno, kgO₂·m⁻³

$$K_{PO_4^{2-}}$$
 constante de saturación media para fosfatos, kgPO_4^{2-}m^{-3}

- $K_{\rm S}$ constante de saturación media para S, kgCOD m⁻³
- Y_A coeficiente de rendimiento de autótrofos, kgX_A·kgNT⁻¹
- Y_H coeficiente de rendimiento de heterótrofos, kgX_H·K_S⁻¹
- b_A constante de velocidad de decaimiento de autótrofos, d⁻¹

- b_H constante de velocidad de decaimiento de heterótrofos, d⁻¹
- m_{02} coeficiente de consumo de oxígeno para mantenimiento, kgO₂·kgX_H⁻¹·h⁻¹
- Y_{XO} coeficiente de rendimiento biomasa/oxígeno, kX kgO₂-1
- VCO velocidad de consumo de oxígeno, kgO2^{·h-1}
- T1 temperatura de referencia, K
- pHmax valor de pH máximo del proceso, unidades de pH
- *pHmin* valor de pH mínimo del proceso, unidades de pH
 - pH pH en el biorreactor, unidades de pH
 - T2 temperatura en el biorreactor, K

Símbolos griegos

- η_{NTH} factor de reducción de hidrólisis anóxica, adimensional
 - θ_A coeficiente de temperatura para biomasa autotrófica, adimensional
 - $\theta_{\rm H}$ coeficiente de temperatura para biomasa heterotrófica, adimensional
 - μ_A máxima velocidad de crecimiento de nitrificantes, d⁻¹
 - μ_H máxima velocidad de crecimiento por sustrato, d⁻¹
 - α fracción que corresponde a biomasa heterotrófica del total de X_b , adimensional
 - β fracción que corresponde a biomasa autotrófica del total de X_b , adimensional
 - Γ cinética de crecimiento aeróbico (a partir de sustrato S)
 - I cinética de crecimiento anóxico (a partir de sustrato S)
 - Λ cinética de crecimiento aeróbico de biomasa acumuladora de fósfatos
 - T cinética de lisis de Heterótrofos X_H
 - Υ cinética de lisis de autótrofos X_A
 - Π cinética de crecimiento de autótrofos X_A