



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA

VALIDACIÓN DEL MODELO CINÉTICO
MULTINUTRIENTE DE MONOD PARA MICROALGAS
EN UN SISTEMA DE TRATAMIENTO DE AGUA
RESIDUAL EN PLANTA PILOTO

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE
Ingeniero Químico

PRESENTA

Sebastián de los Santos Aguillón



Ciudad Universitaria, CDMX, 2021



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

JURADO ASIGNADO:

PRESIDENTE: **Profesor: ALFONSO DURÁN MORENO**
VOCAL: **Profesor: LUZ MARÍA LAZCANO ARRIOLA**
SECRETARIO: **Profesor: MARÍA TERESA ORTA LEDESMA**
1er. SUPLENTE: **Profesor: CARMINA MONTIEL PACHECO**
2do. SUPLENTE: **Profesor: FÉLIX MORALES FLORES**

SITIO DONDE SE DESARROLLÓ EL TEMA:

LABORATORIO DE INGENIERÍA AMBIENTAL, INSTITUTO DE INGENIERÍA, UNAM

ASESOR DEL TEMA:

DRA. MARÍA TERESA ORTA LEDESMA

SUSTENTANTE:

SEBASTIÁN DE LOS SANTOS AGUILLÓN



El trabajo experimental fue realizado en el Laboratorio de Ingeniería Ambiental del Instituto de Ingeniería de la UNAM que cuenta con certificado de conformidad otorgado por el organismo acreditado Certificación Mexicana, S.C., por haber implementado y mantener un Sistema de Gestión de la Calidad de conformidad con los requisitos de la norma internacional ISO 9001:2015

**No. de Certificado CMX C SGC 209 2020, válido en el período del
12 de noviembre de 2020 al 11 de noviembre de 2023**

Agradecimientos

La presente Tesis fue realizada gracias al Programa UNAM-PAPIME PE102220: "*Modelo didáctico escala piloto para el tratamiento de aguas residuales con microalgas y captura de CO₂ y flotación con ozono - Atzintli*". Se agradece su apoyo y recursos otorgados por el desarrollo de este trabajo.

A la Universidad Nacional Autónoma de México, por darme la oportunidad de llevar mi formación académica.

A la Facultad de Química, por abrirme las puertas a sus aulas y laboratorios para poder realizar mi carrera de Ingeniero Químico.

Al Instituto de Ingeniería de la UNAM y en conjunto al Laboratorio de Ingeniería Ambiental por brindarme el préstamo de sus instalaciones.

A mi asesora, la Dra. María Teresa Orta Ledesma, por aceptarme en su equipo de investigación y darme todo el apoyo, tutorado y orientación a lo largo de todos estos años.

Al Dr. Ignacio Monje Ramírez y a la Mtra. Isaura Yáñez Noguez por su increíble ayuda, consejo y orientación durante toda mi estancia en el Instituto.

A la M. en C. Andrea Hernández García, por enseñarme y orientarme dentro del laboratorio durante mi trabajo experimental.

Dedicatorias

A Dios, porque me dio la gran oportunidad de concluir mi carrera y de iniciar mi formación profesional.

A mi papá, Luis Martín, quien ha sido mi principal pilar y apoyo; sin él no hubiera podido llegar hasta donde estoy.

A mi mamá Gloria Lucía y mi hermano Gabriel, quienes también estuvieron conmigo en mi formación universitaria.

A mis abuelos José Luis y Delia, gracias por su increíble esfuerzo, sacrificio y amor por sus nietos.

A mis padrinos Miguel y Yoli, y la familia Aguillón Escobar; gracias por sus infinitas invitaciones a sus hogares y el apoyo familiar.

A mis compañeros del Instituto de Ingeniería y todos mis amigos de la Facultad de Química, con quien trabajé y me divertí con ellos; muy en especial a Alexis, Erick, Hillary, María y *Lazu*.

A mis amigos de La Salle, Yadira, Carolina y Raúl; que aún conservo su valiosa amistad a través de los años.

ÍNDICE GENERAL

ÍNDICE GENERAL	6
ÍNDICE DE FIGURAS	7
ÍNDICE DE TABLAS	9
RESUMEN	10
1. INTRODUCCIÓN	11
2. JUSTIFICACIÓN.....	13
3. OBJETIVOS.....	13
3.1 Objetivo general	13
3.2 Objetivos particulares.....	13
4. HIPÓTESIS.....	13
5. MARCO TEÓRICO	14
5.1 Generalidades sobre las microalgas	14
5.2 Tratamientos de aguas residuales	14
5.3 Tratamientos de agua residual con microalgas.....	17
5.4 Planta Piloto “ <i>Atzintli</i> ”	20
5.5 Modelos de crecimiento celular.....	22
5.6 Modelo Cinético Multinutriente de Eze et al, 2018	24
5.7 Validación de modelos	29
6. METODOLOGÍA	30
6.1 Definición de condiciones	30
6.2 Muestreo	30
6.3 Simulación con MATLAB y reajuste	32
6.4 Análisis estadístico y validación de modelo	33
7. RESULTADOS Y ANÁLISIS	34
7.1 Condiciones iniciales.....	34
7.2 Reajuste de constantes y simulación con MATLAB	35
7.3 Validación del modelo	49
7.4 Remoción y Productividad	62
7.5 Comparación de remociones con valores reportados en literatura	65
7.6 Comparación de productividades con valores reportados en literatura.....	67
7.7 Consideraciones del escalamiento a Planta Piloto.....	68

8. CONCLUSIONES	69
8.1 Recomendaciones	69
9. BIBLIOGRAFÍA Y REFERENCIAS	71
ANEXO.....	76

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1. Plantas Piloto en marcha en España. [1] El Torno. [2] Carrión de los Céspedes. [3] Guillarey. [4] Carraixet.....	19
Figura 2. Proceso de un tratamiento de agua residual con microalgas y sus principales productos (Behari, 2019).....	20
Figura 3. Proceso de tratamiento con microalgas en Planta Piloto. (Barlandas-Calderón, 2018)	20
Figura 4. Consorcio microalgal-bacteriano presente en muestra de reactor (Hernández-García, 2019).	22
Figura 5. Fases del crecimiento microalgal (línea continua) y concentración de nutrientes (línea discontinua).	22
Figura 6. Fracciones molares de nitrógeno amoniacal, fósforo y carbono inorgánico en función del pH del sistema (Skoog et al, 2005).	28
Figura 7. Izquierda: Reactor Tipo Herradura (Raceway) de la Planta Piloto Atzintli (Vielma-Hernández, 2018). Derecha: Muestra en envase de PET (Elaboración propia).....	31
Figura 8. Técnicas experimentales determinadas en laboratorio	32
Figura 9. Lote puesto en marcha en Planta Piloto Atzintli. (Fotos de autor). [1] Sedimentación. [2] Inoculación de biomasa concentrada. [3] Puesta en marcha.	34
Figura 10. Simulaciones antes y después de recalibración para Biomasa en lote 1	37
Figura 11. Simulaciones antes y después de recalibración para Ortofosfatos en lote 1	37
Figura 12. Simulaciones antes y después de recalibración para Alcalinidad en lote 1.	38
Figura 13. Simulaciones antes y después de recalibración para N. Amoniacal en lote 1....	38
Figura 14. Simulaciones antes y después de recalibración para Nitratos en lote 1.	38
Figura 15. Simulaciones antes y después de recalibración para pH en lote 1.	39
Figura 16. Simulaciones antes y después de recalibración para Biomasa en lote 2.....	40
Figura 17. Simulaciones antes y después de recalibración para Ortofosfatos en lote 2.	40
Figura 18. Simulaciones antes y después de recalibración para Alcalinidad en lote 2.	40
Figura 19. Simulaciones antes y después de recalibración para Nitratos en lote 2.	41
Figura 20. Simulaciones antes y después de recalibración para pH en lote 2.	41
Figura 21. Simulaciones antes y después de recalibración para Biomasa en lote 3.....	42
Figura 22. Simulaciones antes y después de recalibración para Ortofosfatos en lote 3.	42
Figura 23. Simulaciones antes y después de recalibración para Alcalinidad en lote 3.	42
Figura 24. Simulaciones antes y después de recalibración para N. Amoniacal en lote 3....	43
Figura 25. Simulaciones antes y después de recalibración para Nitratos en lote 3.	43
Figura 26. Simulaciones antes y después de recalibración para pH en lote 3.	43
Figura 27. Simulaciones antes y después de recalibración para Biomasa en lote 4.....	44

Figura 28. Simulaciones antes y después de recalibración para Ortofosfatos en lote 4.	45
Figura 29. Simulaciones antes y después de recalibración para Alcalinidad en lote 4.	45
Figura 30. Simulaciones antes y después de recalibración para Nitratos en lote 4.	45
Figura 31. Simulaciones antes y después de recalibración para pH en lote 4.	46
Figura 32. Simulaciones antes y después de recalibración para Biomasa en lote 5.	47
Figura 33. Simulaciones antes y después de recalibración para Ortofosfatos en lote 5.	47
Figura 34. Simulaciones antes y después de recalibración para Alcalinidad en lote 5.	47
Figura 35. Simulaciones antes y después de recalibración para N. Amoniacal en lote 5.	48
Figura 36. Simulaciones antes y después de recalibración para Nitratos en lote 5.	48
Figura 37. Simulaciones antes y después de recalibración para pH en lote 5.	48
Figura 38. Comparación entre valores experimentales y teóricos antes y después de reajuste de constantes cinéticas para Biomasa de Lote 1.	49
Figura 39. Valores experimentales y valores predichos para Biomasa en lote 1.	50
Figura 40. Valores experimentales y valores predichos para Ortofosfatos en lote 1.	50
Figura 41. Valores experimentales y valores predichos para Alcalinidad en lote 1.	50
Figura 42. Valores experimentales y valores predichos para Nitrógeno Amoniacal en lote 1.	51
Figura 43. Valores experimentales y valores predichos para Nitratos en lote 1.	51
Figura 44. Valores experimentales y valores predichos para pH en lote 1.	51
Figura 45. Valores experimentales y valores predichos para Biomasa en lote 2,	52
Figura 46. Valores experimentales y valores predichos para Ortofosfatos en lote 2.	52
Figura 47. Valores experimentales y valores predichos para Alcalinidad en lote 2.	52
Figura 48. Valores experimentales y valores predichos para Nitratos en lote 2.	53
Figura 49. Valores experimentales y valores predichos para pH en lote 2.	53
Figura 50. Valores experimentales y valores predichos para Biomasa en lote 3.	53
Figura 51. Valores experimentales y valores predichos para Ortofosfatos en lote 3.	54
Figura 52. Valores experimentales y valores predichos para Alcalinidad en lote 3.	54
Figura 53. Valores experimentales y valores predichos para Nitrógeno Amoniacal en lote 3.	54
Figura 54. Valores experimentales y valores predichos para Nitratos en lote 3.	55
Figura 55. Valores experimentales y valores predichos para pH en lote 3.	55
Figura 56. Valores experimentales y valores predichos para Biomasa en lote 4.	55
Figura 57. Valores experimentales y valores predichos para Ortofosfatos en lote 4.	56
Figura 58. Valores experimentales y valores predichos para Alcalinidad en lote 4.	56
Figura 59. Valores experimentales y valores predichos para Nitratos en lote 4.	56
Figura 60. Valores experimentales y valores predichos para pH en lote 4.	57
Figura 61. Valores experimentales y valores predichos para Biomasa en lote 5.	57
Figura 62. Valores experimentales y valores predichos para Ortofosfatos en lote 5.	57
Figura 63. Valores experimentales y valores predichos para Alcalinidad en lote 5.	58
Figura 64. Valores experimentales y valores predichos para Nitrógeno Amoniacal en lote 5.	58
Figura 65. Valores experimentales y valores predichos para Nitratos en lote 5.	58
Figura 66. Valores experimentales y valores predichos para pH en lote 5.	59

Figura 67. Relación entre porcentajes de precisión del modelo para los diferentes parámetros.	61
Figura 68. Variación de especies de nitrógeno en función del tiempo para un lote de cultivo de microalgas en agua residual.	64
Figura 69. Comparativa entre las remociones experimentales de este trabajo y de otros experimentos.....	66
Figura 70. Comparativa entre las productividades experimentales de este estudio y otros experimentos.....	67

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1. Tratamientos biológicos y fisicoquímicos para aguas residuales en México (CONAGUA, 2019).....	15
Tabla 2. Descripción de los tratamientos biológicos más utilizados.....	16
Tabla 3. Plantas Piloto con tratamientos biológicos microalgales alrededor del mundo.	18
Tabla 4. Parámetros cinéticos usados en el modelo de Eze et al, 2018.	26
Tabla 5. Técnicas experimentales de cada parámetro fisicoquímicos.	31
Tabla 6. Características de las condiciones de cultivo de cada lote.	34
Tabla 7. Condiciones promedio iniciales.	35
Tabla 8. Valores de constantes cinéticas reajustadas.....	35
Tabla 9. Condiciones iniciales para lote 1.	37
Tabla 10. Condiciones iniciales para lote 2.	39
Tabla 11. Condiciones iniciales para lote 3.	41
Tabla 12. Condiciones iniciales para lote 4.	44
Tabla 13. Condiciones iniciales para lote 5.	46
Tabla 14. Precisión de predicciones del modelo después de recalibración.	59
Tabla 15. Media de la raíz de errores cuadráticos (RMSE) antes y después de recalibración para cada parámetro de cada lote.	62
Tabla 16. Remoción y Productividad.....	63
Tabla 17. Comparativo de trabajos de modelos de crecimiento y remoción de nutrientes en microalgas cultivadas en agua residual.....	65
Tabla 18. Comparativo de productividades experimentales para trabajos con condiciones de operación por lote (Batch) y especies de microalgas anteriormente trabajadas.	67
Tabla 19. Resultados experimentales de los parámetros fisicoquímicos de los 5 lotes montados en Planta Piloto Aztintli.	76
Tabla 20. Resultados teóricos de las simulaciones de los parámetros fisicoquímicos de los 5 lotes montados en Planta Piloto Aztintli para antes y después de recalibración.	77

RESUMEN

El Instituto de Ingeniería en colaboración con la Universidad de Newcastle UK, implementan nuevas tecnologías para el tratamiento de aguas residuales con microalgas. Las aguas residuales sin tratamiento adecuado se descargan en cuerpos de agua dulce promoviendo la eutrofización. Por otra parte, algunos de los tratamientos convencionales liberan en mayor o menor medida dióxido de carbono y metano, que son gases de efecto invernadero y promotores del cambio climático. Sin embargo, el tratamiento con microalgas aprovecha los contaminantes como nutrientes, capturan el dióxido de carbono y liberan oxígeno en su lugar. Por otra parte, se produce biomasa con potencial valorizable y agua limpia que puede ser destinada para actividades de reúso en servicios públicos. Para ello, se ha construido una Planta Piloto “*Atzintli*” que usa un consorcio predominantemente microalgal para tratar agua proveniente del efluente de la Planta de Tratamiento de Agua Residual de la Facultad de Ciencias Políticas y Sociales de Ciudad Universitaria.

Este trabajo se centra en la validación del modelo multinutriente de Monod desarrollado por Eze *et al*, (2018) para el reactor ubicado en la Planta Piloto. Esta validación consta de la generación de datos experimentales, mismas cifras que alimentarán al modelo para su resolución. Estos datos experimentales son obtenidos mediante la caracterización en laboratorio de los parámetros fisicoquímicos de muestras obtenidas a lo largo de todo el tiempo de inoculación de cada lote montado, con tiempos de retención de 15 días y con un sistema de mezclado continuo. Los parámetros fisicoquímicos que se caracterizaron fueron: nitratos (NO_3^-), ortofosfatos (HPO_4^{2-}), alcalinidad (HCO_3^-), nitrógeno amoniacal ($\text{NH}_4^+/\text{NH}_3$), pH (H^+) y Sólidos Suspendidos Totales (SST). Con las condiciones iniciales de cada lote, las ecuaciones del modelo multinutriente son resueltas mediante una rutina de programación determinada a través del software MATLAB.

Posteriormente, se comparan los resultados experimentales y resultados teóricos que el software proporciona mediante la aplicación de pruebas estadísticas; además de observar el comportamiento del reactor a lo largo del transcurso del cultivo. Finalmente, se reajustan las constantes cinéticas del modelo para una mejor predicción del comportamiento de los parámetros fisicoquímicos en el reactor.

1. INTRODUCCIÓN

En el mundo, los tratamientos convencionales de agua residual se van transformando para ser menos costosos y más sustentables, proponiendo procesos con menos gastos de energía y una disminución de subproductos.

Debido a que la mayoría de las aguas residuales no reciben un proceso adecuado, éstas se descargan en cuerpos de agua dulce, promoviendo el proceso de eutrofización del cuerpo de agua receptor y por consiguiente una toxicidad para la vida acuática y todo el ecosistema circundante. Sólo en México, en 2019, se trata alrededor del 65.7% de las aguas residuales municipales y 32% de las aguas no municipales (CONAGUA, 2019), por lo que es necesario, investigar y proponer nuevos procesos para el tratamiento de agua residual urbana.

El Instituto de Ingeniería en conjunto con la Universidad de Newcastle, UK han diseñado y construido la Planta Piloto llamada *Atzintli*, ubicado a un costado de la Planta de Tratamiento de Agua Residual de la Facultad de Ciencias Políticas y Sociales en Ciudad Universitaria. Esta Planta Piloto es capaz de capturar el dióxido de carbono atmosférico (CO₂) y transformarlo en biomasa de alto valor comercial produciendo agua más limpia que puede ser destinada para actividades de reúso en servicios públicos.

En los tratamientos biológicos de aguas residuales regularmente se usan microorganismos que consumen oxígeno y liberan dióxido de carbono como residuo, pero en este caso se utilizan microalgas que fijan este residuo y lo transforman químicamente en oxígeno. Este tipo de nueva tecnología ayuda a la reducción de emisiones netas de dióxido de carbono, considerado como gas de efecto invernadero y promotor del cambio climático. Cabe destacar que la aplicación de esta tecnología también ayuda notablemente en la mejora del medio ambiente y que, de ser implementada en otros sitios, ayudaría a tener agua disponible para riego de zonas verdes urbanas y agrícolas, al mismo tiempo que, ayuda a la problemática medioambiental de las emisiones que hoy en día se vive alrededor del mundo.

Ya que las microalgas contribuyen en un 50% en la producción de oxígeno fotosintético (Garibay, 2009); durante los últimos años, han surgido cierto interés en ellas debido a que tienen la capacidad de crecer en aguas con altas cantidades de contaminantes y que pueden aprovecharlas para su crecimiento y la consiguiente remoción de éstos. Esta biomasa microalgal pueden variar dependiendo de las concentraciones de los nutrientes que existen

en su entorno, así como estímulos físicos y químicos, como temperatura, luz y pH, primordialmente. Al mismo tiempo, esta biomasa microalgal intrínsecamente posee bio-componentes como son: lípidos, carbohidratos y proteínas que le confiere de un valor potencial ya que pueden ser transformados a productos valorizables.

Uno de los retos que las microalgas enfrentan es la disponibilidad de nutrientes, es decir, que la limitación de nutrientes de fósforo y nitrógeno influyen en su metabolismo. En este aspecto Hernández-García *et al* (2019) publicaron que una escasez de elementos esenciales o un cambio en las condiciones de su entorno, las microalgas sufren de estrés fisiológico y alteran su crecimiento celular. Dadas estas circunstancias, la modelación de su crecimiento celular en función de un solo nutriente no es tan precisa como la de un modelo multinutriente.

Este trabajo se centra en el interés de desarrollar un modelo para poder predecir el comportamiento de los diferentes parámetros relevantes; es decir, poder estimar la productividad de biomasa que se va a lograr, así como la cantidad de contaminantes removidos, en función de las condiciones iniciales. Con base a esto; se podrá predecir el proceso, determinando las condiciones que mejor resultados genere y se evitará aquellas que no sean productivas o que crean irregularidades y entornos no aptos. Esto con el fin de ser una tecnología más atractiva y sustentable.

2. JUSTIFICACIÓN

La validación de este modelo cinético permitirá tener un mejor control sobre el comportamiento de los diferentes parámetros involucrados; en otras palabras, que partiendo de las condiciones iniciales se pueda simular el comportamiento de futuros lotes y esto ayudará en mejorar los rendimientos en la remoción de contaminantes para producir agua más limpia y mantener la productividad de biomasa de alto valor agregado.

3. OBJETIVOS

3.1 Objetivo general

Validar el modelo cinético multinutriente de Monod, para un sistema de tratamiento de agua residual con microalgas en un reactor de Planta Piloto.

3.2 Objetivos particulares

- Determinar los parámetros fisicoquímicos de muestras del reactor para la generación de una base experimental de datos.
- Reproducir los datos teóricos del modelo mediante simulaciones usando las condiciones experimentales iniciales con ayuda de una rutina programada en MATLAB.
- Reajustar los valores de los parámetros cinéticos del modelo para el consorcio microalgal-bacteriano presente en reactor que reflejen el comportamiento de los parámetros fisicoquímicos.
- Comparar resultados experimentales y resultados teóricos mediante pruebas estadísticas, gráficos y valores reportados en la literatura, distinguiendo las mejores condiciones del proceso que reflejan y ajustan el modelo cinético.

4. HIPÓTESIS

Mediante el reajuste de los parámetros cinéticos para un consorcio microalgal-bacteriano, el modelo multinutriente entonces se validará cuando los datos experimentales se aproximen y sean consistentemente ajustables con los datos teóricos simulados por MATLAB a partir de las condiciones iniciales experimentales.

5. MARCO TEÓRICO

5.1 Generalidades sobre las microalgas

Las microalgas son organismos fotosintéticos microscópicos que pueden encontrarse en muchos hábitats y ecosistemas, tanto en agua dulce como en agua salada (Gouveia, 2011). Su mecanismo fotosintético es similar a las plantas terrestres y gracias a su estructura celular, fácilmente tiene acceso al agua, dióxido de carbono y otros nutrientes.

Estos organismos presentan altas tasas de crecimiento, creciendo hasta 400 veces más rápido que las plantas terrestres; además, son cultivables todo el año y pueden crecer en diferentes calidades de agua como agua dulce, agua de mar y agua residual (Valeriano-González, 2018). Dado a esto, las microalgas poseen un potencial biotecnológico para producir sustancias de alto valor para alimentos, biocombustibles e industrias (Spolaore et al., 2006). Para la producción de microalgas bajo condiciones fototróficas, es necesario el uso de biorreactores que debe ser diseñado para satisfacer las necesidades de la(s) especie(s) de microalga(s) seleccionada(s), tal como la disponibilidad de luz como factor principal y de nutrientes (carbono, nitrógeno, fósforo, etc.) (González-Fernández & Muñoz, 2017).

5.2 Tratamientos de aguas residuales

El agua residual es aquel tipo de agua que no tiene valor inmediato para el fin que se utilizó y cuya calidad se ha visto alterada por contaminantes. No obstante, las aguas residuales pueden servir de suministro para otros usuarios en otro lugar (FAO, 2019). Un agua residual proviene de actividades antropogénicas y son clasificadas en municipales (ó domésticas) e industriales.

La composición de un agua residual típicamente está compuesta por material orgánico (biomoléculas principalmente) y material inorgánico (iones disueltos), representando hasta un 1% del peso total del agua residual.

En México, les corresponde a los municipios manejar, tratar y disponer este tipo de agua proveniente de una Planta de Tratamiento de Agua Residual (PTAR), mediante un tren de tratamiento con procesos definidos (CONAGUA, 2019).

Este tren de tratamiento comúnmente se compone de tratamientos convencionales, dividido en tratamientos primarios, secundarios y terciarios. Los primarios funcionan para remover

material sólido suspendido como tanques *Imhoff*. Los secundarios constan de la eliminación de materia orgánica e inorgánica disuelta mediante el empleo de coagulación, floculación y tratamiento biológico como lagunas de estabilización o lodos activados, entre otros. Y los terciarios consisten en remover materia orgánica (disuelta y/o suspendida), remanentes y otras sustancias a niveles más estrictos como la oxidación avanzada (Fuentes Díaz, 2002). En los tratamientos biológicos, los microorganismos transforman los compuestos orgánicos en biomasa (Riveros-Olivares, 2013). En la Tabla 1 se menciona los tratamientos biológicos convencionales presentes en México:

Tabla 1. Tratamientos biológicos y fisicoquímicos para aguas residuales en México (CONAGUA, 2019)

Tipo de tratamiento	Nombre de proceso	No. Plantas	(%)	Caudal (m ³ /s)	Caudal (%)
Primario	Primario	14	0.5	0.035	>0.1
	Primario avanzado	8	0.3	4.431	3.2
	Tanque <i>Imhoff</i>	50	1.9	0.318	0.2
Secundario	Aerobio	21	0.8	1.835	1.3
	Anaerobio	158	6.0	0.843	0.6
	Biodiscos	23	0.9	0.847	0.6
	Biológico	23	0.9	0.537	0.4
	Dual	23	0.9	32.073	22.7
	Filtros biológicos	39	1.5	4.9071	3.5
	Fosa séptica	100	3.8	0.145	0.1
	Fosa séptica + filtro biológico	37	1.4	0.035	>0.1
	Fosa séptica + <i>Wetland</i>	117	4.4	0.210	0.2
	Humedales (<i>Wetland</i>)	77	2.9	0.978	0.7
	Lagunas aireadas	30	1.1	6.811	4.8
	Lagunas de estabilización	792	30.0	14.060	9.9
	Lodos activados	761	28.8	69.377	49.0
	RAFA + Filtro biológico	63	2.4	0.544	0.4
	RAFA + Humedal	40	1.5	0.389	0.3
	Reactor anaerobio de flujo ascendente (RAFA)	140	5.3	1.201	0.9
	Reactor enzimático	39	1.5	0.090	0.1
Sedimentación + <i>Wetland</i>	23	0.9	0.040	>0.1	
Tanque <i>Imhoff</i> + Filtro biológico	17	0.6	0.152	0.1	
Tanque <i>Imhoff</i> + <i>Wetland</i>	11	0.4	0.058	>0.1	
Zanjas de oxidación	14	0.5	1.020	0.7	
Terciario	Terciario	4	0.2	0.043	>0.1
Inespecífico	Otros	18	0.7	0.266	0.2
Total		2,642	100	141.479	100

En México, los principales tratamientos son los lodos activados y lagunas de estabilización, la cual representa el 58.8% de todas las PTAR; es decir que usan alguno de estas dos operaciones unitarias. Además, ambos procesos tratan el 59% de toda el agua residual generada a nivel nacional, un aproximado de casi 83.4 metros cúbicos por segundo (CONAGUA, 2019). Existen otros tratamientos que procesan una considerable parte de las aguas residuales e incluso, existen procesos combinados de dos procesos, como los procesos duales. En México, como se muestra en la tabla 1, sólo se tienen 4 plantas con tratamiento terciario, donde el agua tratada se destina a riego agrícola y áreas verdes. En la Tabla 2, se explica una descripción básica de los tratamientos biológicos más utilizados en el país.

Tabla 2. Descripción de los tratamientos biológicos más utilizados.

Tratamiento biológico	Descripción	Eficiencia en remoción de DBO₅
Lodos activados	Cultivo de microorganismos mayoritariamente bacterianos floculados en tanques agitados y aireados.	85 – 95 % ¹
Lagunas de estabilización	Almacenamiento del agua por medio de la actividad bacteriana con acciones simbióticas de las algas y otros organismos.	80 – 95% ²
Fosa Séptica	Tanque hermético donde se sedimentan y digieren anaeróticamente los contaminantes orgánicos.	30 – 40% ³
Reactor Anaerobio de Flujo Ascendente	Tratamiento por vía anaerobia, donde el agua forma un flujo ascendente a través de un manto de lodos, y la cuál forma biogás.	70 – 90% ²
Filtros biológicos	Estructuras de concreto cuyo interior se colocan medios filtrantes y el agua se depura al contacto por contacto con la biopelícula.	80 – 95 % ²
Wetland / Humedales	Tratamiento dónde se logra la depuración mediante la vegetación existente.	80 – 95% ²
Duales	Tratamiento que combina dos procesos del mismo nivel y en secuencia.	90 – 95% ²

¹RAS, 2000; ²CONAGUA, 2019; ³TILLEY et al. 2018. DBO₅: Demanda Biológica de Oxígeno 5 días

Las aguas tratadas en una PTAR se destinan normalmente a cuerpos de agua dulce, como ríos, arroyos, lagos y lagunas, e inclusive a vasos reguladores (CONAGUA, 2015). Por otra parte, la biomasa generada por estos tratamientos biológicos se tiene que disponer; ya que, si a éstos no se les da una disposición adecuada, contribuyen de manera importante a la contaminación atmosférica, al de las aguas nacionales subterráneas, a los suelos y a los ecosistemas presentes dentro del área dónde se depositen (SEMARNAT, 2015)

Las Normas Oficiales Mexicanas (NOM) NOM-001-SEMARNAT-1996, la NOM-002-SEMARNAT-1996 y la NOM-003-SEMARNAT-1997 establecen los límites máximos permisibles de contaminantes para descargas en aguas nacionales, alcantarillado urbano y para reúso en servicios público, respectivamente (SEMARNAT, 2015).

5.3 Tratamientos de agua residual con microalgas

De acuerdo con las Naciones Unidas, más de 2 millones de toneladas métricas de agua residual son descargados en cuerpos de aguas dulces, contaminando el ecosistema circundante provocando la eutrofización, la pérdida de biodiversidad y el incremento de la toxicidad del agua. (United Nations World Water Development Report, 2021; Hernández-García, 2017).

Esto se debe a que las aguas residuales no reciben el tratamiento correspondiente o que las aguas tratadas del efluente de tratamientos secundarios contienen aún concentraciones de nitrógeno y fósforo mayores al límite permisible por la NOM-001-SEMARNAT-1996 (60 y 30 mg/L, respectivamente) y que es necesario el empleo de tratamientos terciarios al agua para remover estos contaminantes como intercambio iónico, ozonización o tratamientos biológicos avanzados; las cuáles algunas de ellas son operaciones muy costosas, llegando a disminuir su uso (Salazar, 2006; Aslan & Kapdan, 2006; Cai et al. 2013). Por consecuencia, se han abiertos numerosas líneas de investigación que estudian la remoción de nitrógeno y fósforo con el uso de microalgas, ya que durante su actividad fotosintética el pH aumenta, favoreciendo la gasificación del nitrógeno amoniacal y la precipitación de ortofosfatos, con la producción consecuente de oxígeno viniendo de la fijación de dióxido de carbono atmosférico (Kojima & Lee, 2001; Pittman et al. 2011; Lee et al. 2013). Adicionalmente, las microalgas pueden eliminar sustancias tóxicas, metales, pesticidas y herbicidas debido a su resistencia

y capacidad de acumular importantes concentraciones de compuestos tóxicos, sin afectar su actividad biológica (Vacca-Jimeno *et al*, 2017).

Algunas especies de microalgas presentes en aguas contaminadas son ampliamente utilizadas en estos tratamientos, gracias a su elevada tolerancia al agua residual y que varias de éstas, han despertado un interés comercial por su potencial biotecnológico (Hernández-Pérez & Labbé, 2014)

En el mundo, existen Plantas Piloto que usa algún tratamiento biológico a base de microalgas. Muchas son operadas por compañías y son desarrolladas a partir de proyectos financiados por asociaciones gubernamentales en conjunto con universidades o empresas privadas de D+I¹. Tan sólo en Europa, se ha visto mucha presencia de estos tipos de tratamiento en España. Su ubicación geográfica permite la viabilidad de estos proyectos porque existen las temperaturas más cálidas del continente. En la Tabla 3 se describe información sobre Plantas Piloto ubicados alrededor del mundo y en la figura 1 la evidencia fotográfica de algunas de ellas:

Tabla 3. Plantas Piloto con tratamientos biológicos microalgales alrededor del mundo.

Compañía o Proyecto	Características de diseño	Lugar	Referencia
FCC Aqualia (Proyecto AllGas)	<ul style="list-style-type: none"> • 6 FBR • Inyección y Captura de CO₂ • 57.6 m³ 	El Torno, Andalucía, España. [1]	Ignacio de Godos, 2014
IMAR / CENTA (Proyecto IDIAQUA)	<ul style="list-style-type: none"> • Reactor Raceway de 116.2 m³ • Consorcio microalgas-bacteria 	Carrión de los Céspedes, Andalucía, España. [2]	Domínguez-Gómez, 2018
Proyecto EnerBioAlgae	<ul style="list-style-type: none"> • Reactor Raceway de 160 m³ • <i>Chlorella vulgaris</i> 	Guillarey, Galicia, España. [3]	Torres & González-Romero, 2016

¹ D+I Desarrollo e Investigación

Tabla 3 (Continuación).

Compañía o Proyecto	Características de diseño	Lugar	Referencia
<i>Kuehnle AgroSystems</i>	<ul style="list-style-type: none"> • Agua residual de refinería • PBR horizontal de 5000 Litros • Inyección discontinua (aire/CO₂) 	Chevron Oil Refinery Plant en Kapolei, Hawaii, EEUU.	Pérez et al, 2015
<i>Proyecto CALAGUA</i>	<ul style="list-style-type: none"> • Fotobiorreactor de 550 Litros • Efluente postratamiento anaerobio 	Carraixet, Valencia, España [4].	González-Caramejo et al, 2018
<i>Varicon Aqua y Swansea University</i>	<ul style="list-style-type: none"> • 2 PBR de 400 y 600 L • 1 PBR vertical de 2000 L • Agua residual doméstica 	Swansea, Reino Unido	EnAlgae, 2015
<i>Wageningen UR/ACRRES</i>	<ul style="list-style-type: none"> • Open-pond con 1000 m³ • Agua residual postratamiento anaerobio 	Lelystad, Países Bajos	
<i>MaB-floc SBR Ghent University</i>	<ul style="list-style-type: none"> • Reactor Raceway 10 m³ • Consorcio bacteria-microalgas • Agua residual agroindustrial 	Kortrijk, Bélgica	



Figura 1. Plantas Piloto en marcha en España. [1] El Torno. [2] Carrión de los Céspedes. [3] Guillarey. [4] Carraixet.

La producción de biomasa microalgal tiene múltiples beneficios y aplicaciones, como en la generación de biocombustibles de tercera generación, dónde presenta ventajas sobre los de primera y segunda generación. Además, la producción de biomasa crece con gran rapidez, no compromete la generación alimenticia y ni los suministros de agua dulce. Los lípidos que sintetizan se pueden potencialmente usar para la producción de biodiesel, bioaceite, bioetanol y biogás (Rojas-Romero, 2019; Romero-Frasca, 2019; Valeriano-González; 2018; González-Gálvez, 2018).

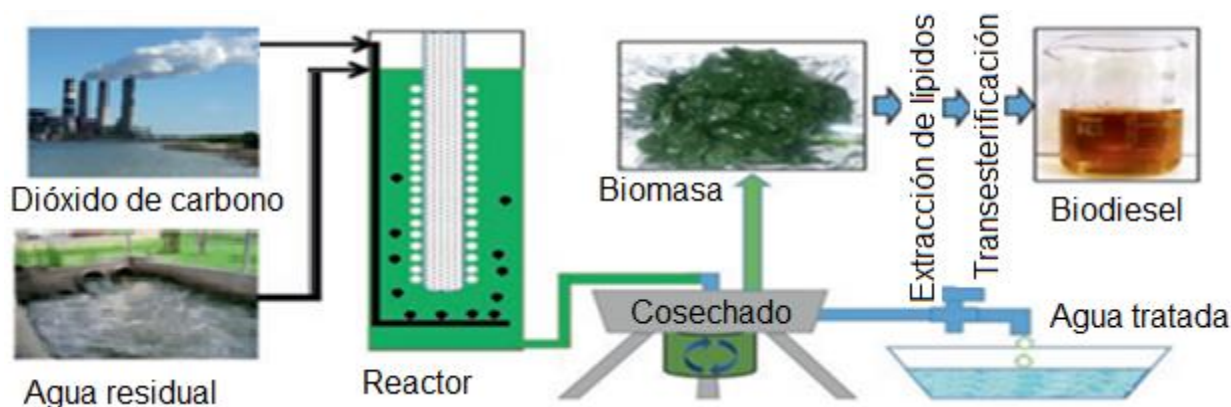


Figura 2. Proceso de un tratamiento de agua residual con microalgas y sus principales productos (Behari, 2019).

5.4 Planta Piloto “Atzintli”

La planta piloto de microalgas “Atzintli” se encuentra ubicada en la PTAR de la Facultad de Ciencias Políticas y Sociales, Ciudad Universitaria, UNAM. Esta Planta, como antes mencionada, transforma el dióxido de carbono y libera oxígeno en su lugar (Gaceta UNAM, 2018). En la figura 3 se describe el proceso de tratamiento terciario de microalgas en esta Planta Piloto conformado de la siguiente manera:

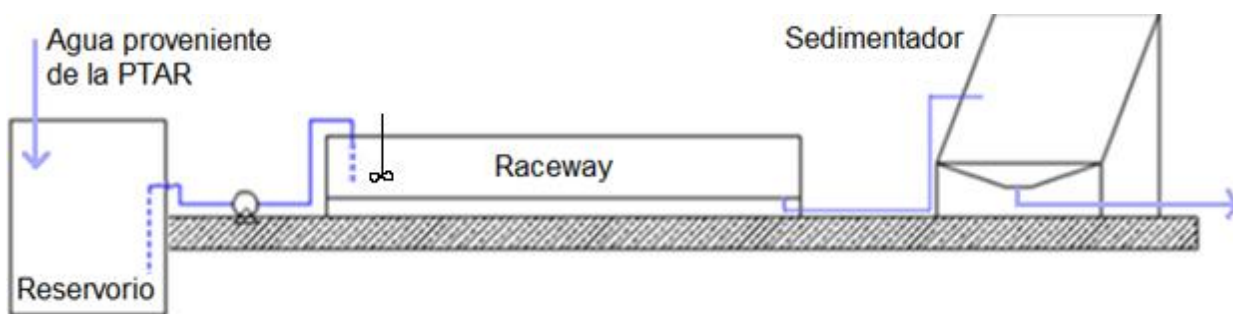


Figura 3. Proceso de tratamiento con microalgas en Planta Piloto. (Barlandas-Calderón, 2018)

1. Reservorio: Es un tanque de almacenamiento que es alimentado por el efluente de la PTAR.
2. Reactor tipo Herradura (Raceway): Reactor abierto de canales de circuito cerrado, de operación Batch. Contiene un sistema de mezclado para evitar la sedimentación de las microalgas y la formación de gradientes.
3. Sedimentador: Sirve para la concentrar la biomasa producida y construido con placas paralelas inclinadas para favorecer la separación de las microalgas del agua tratada.

El reactor tipo Herradura (Raceway), cuenta con un dimensionamiento de 6.6 metros de largo por 0.8 metros de altura y 0.6 metros de ancho, con un volumen operativo de 1.2 metros cúbicos. Este reactor está compuesto por un canal cerrado con un radio de 0.3 metros. Para un óptimo desempeño, se recomienda que el tirante del cuerpo de agua no rebase los 30 centímetros, para permitir el paso de la luz solar. El esqueleto metálico del reactor está cubierto por una geomembrana de PVC de 1.2 mm de grosor. Contiene un sistema de mezclado de hélices de acero inoxidable aunado a una caja de engranes y un motor eléctrico, con velocidad de agitación de 30 rpm. (Barlandas-Calderón, 2018). Cuando un lote de inóculo es montado, dependiendo de la composición del agua que alimenta al reactor, los tiempos de retención son de 15 días con agitación continua.

Las especies mayoritarias del consorcio son procedentes del lago Nabor Carrillo ubicado en el exlago de Texcoco, Estado de México (López-Rocha, 2019). Estos consorcios son inoculados en el reactor tipo Herradura (Raceway), alimentados con el agua tratada del efluente de la PTAR aledaña y montados por operación Batch. Los consorcios microalgales están formados mayoritariamente por los géneros *Scenedesmus* y *Desmodesmus*; aunque también es posible encontrar especies de *Chlorella*, *Nannochloropsis* y así como especies de cianobacterias y diatomeas, que son bacterias con actividad fotosintética y llamados comúnmente como algas verdeazuladas. Estos últimos microorganismos están presentes dentro del consorcio, ya que el reactor y la Planta Piloto en general, se encuentra en condiciones ambientales y expuestos a los diferentes tipos de microalgas y otros organismos que habitan naturalmente en el entorno. En términos reales, la población dentro del reactor se acerca más a un consorcio microalga-bacteriano con predominancia microalgal, esto porque el agua que alimenta al reactor contiene bacterias, pudiendo participar en simbiosis con las microalgas y formar parte de la biomasa, observado como en la figura 4:

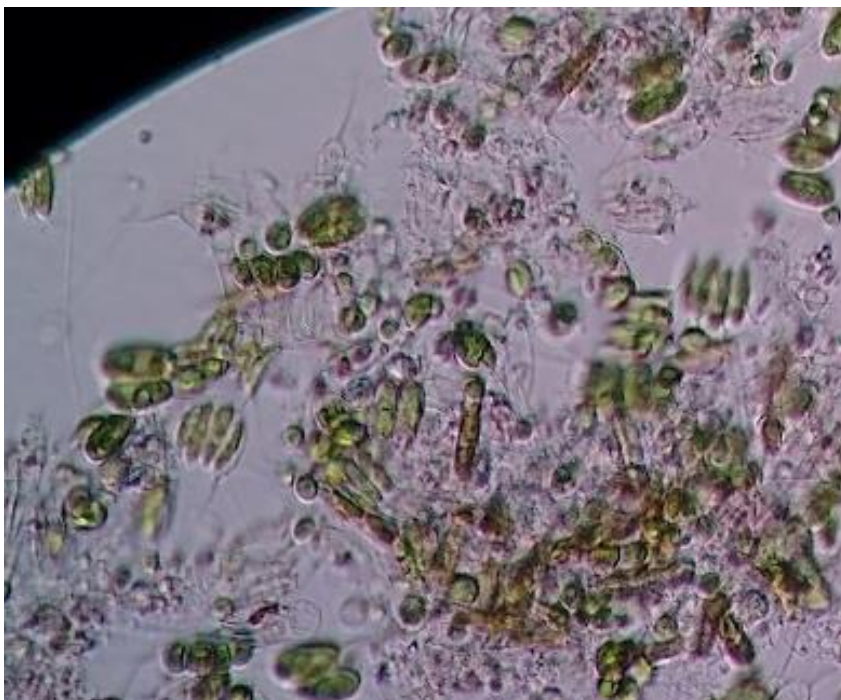


Figura 4. Consorcio microalgal-bacteriano presente en muestra de reactor (Hernández-García, 2019).

5.5 Modelos de crecimiento celular

En la Figura 5 se describe las diferentes fases de crecimiento microalgal para un cultivo por lote (batch), muy similar al de otros microorganismos (Chisti, 2007):

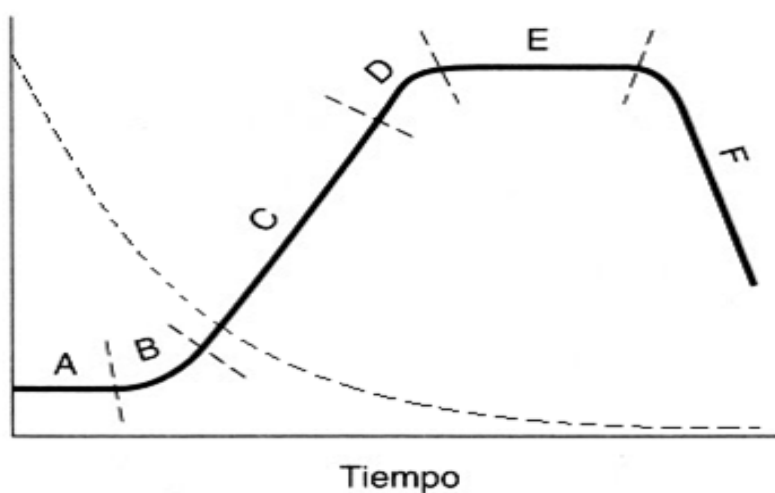


Figura 5. Fases del crecimiento microalgal (línea continua) y concentración de nutrientes (línea discontinua).

Las fases del crecimiento microalgal son:

- A – Fase latente,
- B – Fase exponencial,
- C – Fase linear,
- D – Fase desaceleración,
- E – Fase estacionaria y
- F – Fase de muerte.

Los principales factores que determinan la rapidez de crecimiento de las microalgas son: la temperatura, pH y la luz (Solimeno, 2017).

El clima en dónde las microalgas estén inoculadas tendrá un efecto directamente en la temperatura del sistema. Es decir; en verano, dónde en el territorio nacional las temperaturas máximas oscilan entre los 25°C y 40°C, se observa una esperada alta productividad si comparamos con la época de invierno, dónde las temperaturas descienden e inhiben el crecimiento microalgal.

Las microalgas también son afectadas por el efecto del pH, ya que se ha demostrado que en un rango de pH entre 7.0 a 9.0, la productividad de biomasa es óptimo (Difusa, 2015). Cuando el pH está fuera de ese rango, la productividad decrece, esto porque limita la disponibilidad de nutrientes, es decir que las especies iónicas que mejor asimilan las microalgas, como los iones bicarbonato, amonio y ortofosfato se transforman en otras especies químicas que son menos asimilables (Qiu, 2017). Esto sucede por los equilibrios ácido-base (pKas) de las especies inorgánicas del carbono, nitrógeno y fósforo.

La luz es un factor muy importante, ya que con ella los mecanismos fotosintéticos funcionan convirtiendo el dióxido de carbono en oxígeno. Sin embargo, la alteración de los ciclos de oscuridad, las microalgas entran en estrés fisiológico e inhiben su crecimiento (Hernández-García, 2017). De igual manera, la variación de la intensidad de luz afecta la producción de biomasa, en dónde existe un rango óptimo en el que las microalgas tienen mejor productividad (Difusa, 2015). Un valor superior a los 200 $\mu\text{mol}/\text{m}^2\cdot\text{s}$ el crecimiento de la mayoría de las especies de microalgas es fotoinhibido y debajo de 15 $\mu\text{mol}/\text{m}^2\cdot\text{s}$ es fotolimitado (Park et al, 2011).

Bajo condiciones favorables de luz, las microalgas crecen en función de la disponibilidad de carbono, nitrógeno y fósforo, principalmente. Para representar este crecimiento se utiliza los modelos de Droop y Monod. El modelo de Monod está expresado como:

$$(1) \quad \mu = \mu_{max} \frac{S}{K_S + S}$$

Donde:

μ - es la tasa de crecimiento efectiva

μ_{max} - es la tasa máxima de crecimiento

S - es la concentración del sustrato limitado

K_S - es la constante de media velocidad cuando $\mu / \mu_{max} = 0.5$.

Esta expresión sólo está limitada a un solo nutriente y no considera la disponibilidad de los otros nutrientes, por lo que la ecuación de Monod podría ser extendido para explicar la limitación de los demás sustratos:

$$(2) \quad \mu = \mu_{max} \frac{A}{K_A + A} * \frac{B}{K_B + B} * \frac{C}{K_C + C} \quad \rightarrow \quad \mu = \mu_{max} \frac{N}{K_N + N} * \frac{P}{K_P + P} * \frac{C}{K_C + C}$$

5.6 Modelo Cinético Multinutriente de Eze et al, 2018

Eze, *et al.* 2018 desarrollaron un modelo multinutriente de tipo Monod, dónde se simula el crecimiento de las microalgas en agua residual que incorpora los efectos de la volatilización del amoníaco, los procesos de oxidación del amoníaco a nitratos por bacterias y los cambios inherentes del pH en el medio.

El modelo está constituido por:

(3)

$$\frac{d[M_b]}{dt} = \mu_{max} * [M_b] * \frac{[P]}{K_P + [P]} * \frac{[C]}{K_C + [C]} * \left(\frac{[NH_4^+]}{K_N + [NH_4^+]} + \left(\frac{\mu_{max} NO_3^-}{\mu_{max}} \right) * \frac{[NO_3^-]}{K_N + [NO_3^-]} \right) - \mu_d * [M_b]$$

(4)

$$\frac{d[P]}{dt} = -Y_P * \mu_{max} * [M_b] * \frac{[P]}{K_P + [P]} * \frac{[C]}{K_C + [C]} * \left(\frac{[NH_4^+]}{K_N + [NH_4^+]} + \left(\frac{\mu_{max} NO_3^-}{\mu_{max}} \right) * \frac{[NO_3^-]}{K_N + [NO_3^-]} \right) - \mu_m * [P]$$

(5)

$$\frac{d[C]}{dt} = -Y_C * \mu_{max} * [M_b] * \frac{[P]}{K_P + [P]} * \frac{[C]}{K_C + [C]} * \left(\frac{[NH_4^+]}{K_N + [NH_4^+]} + \left(\frac{\mu_{max} NO_3^-}{\mu_{max}} \right) * \frac{[NO_3^-]}{K_N + [NO_3^-]} \right) - K_a * \frac{P_o * y_o * M_w}{K_H}$$

(6)

$$\frac{d[NH_4^+]}{dt} = -\mu B * e^{\mu B * t} * [NH_4^+] - Y_{N,a} * \mu_{max} * [M_b] * \frac{[P]}{K_P + [P]} * \frac{[C]}{K_C + [C]} * \frac{[NH_4^+]}{K_N + [NH_4^+]} - K_{des} * \frac{1}{1 + \frac{[H^+]}{K_b}} * [NH_4^+]$$

(7)

$$\frac{d[NO_3^-]}{dt} = \mu B * e^{\mu B * t} * [NH_4^+] - Y_{N,n} * \mu_{max} NO_3 * [M_b] * \frac{[P]}{K_P + [P]} * \frac{[C]}{K_C + [C]} * \frac{[NO_3^-]}{K_N + [NO_3^-]} - \mu_m * [NO_3^-]$$

$$(8) \quad \frac{d[NH_3]_{gas}}{dt} = K_{des} * [NH_3]_{aq} = K_{des} * \frac{1}{1 + \frac{[H^+]}{K_b}} * [NH_4^+]$$

$$(9) \quad [H^+] = \sqrt{\frac{-K_1 * \left(\frac{[C]}{R} - 1 \right) - \sqrt{\left(K_1 * \left(\frac{[C]}{R} - 1 \right) \right)^2 - 4 * K_1 * K_2 * \frac{[C]}{R}}}{2 * \frac{[C]}{R}}}$$

$$(10) \quad Y \quad R = [C]_0 + K_a * \frac{P_o * y_o * M_w}{K_H}$$

La tasa de crecimiento específico cuando el nitrógeno amoniacal es usado como fuente de nitrógeno inorgánico es μ_{max} , mientras que $\mu_{max} NO_3$ es la tasa de crecimiento específico cuando la fuente de nitrógeno inorgánico son nitratos. Las bacterias autotróficas oxidan el

nitrógeno amoniacal a nitrato y es representado por μ_B . También es esperado que algunas microalgas mueran durante el cultivo y esto es representado por la tasa de mortalidad específica, μ_d . La tasa de absorción de nutrientes para el mantenimiento sin crecimiento es representada por μ_m .

La biomasa microalgal es representado por $[M_b]$, la concentración de ortofosfatos por $[P]$, la concentración de carbono inorgánico es $[C]$, mientras que $[NH_4^+]$ es la concentración de nitrógeno amoniacal, $[NH_3]$ es la concentración de amoniaco en equilibrio con el amonio y $[NO_3^-]$ es la concentración de nitratos.

Las constantes de saturación media para las especies inorgánicas son: K_N para NH_4^+ y NO_3^- , K_C para HCO_3^- y K_P para HPO_4^{2-} . Los coeficientes de remoción para cada uno de los nutrientes son representados como Y_C para el carbono inorgánico, $Y_{N,n}$ para nitratos, $Y_{N,a}$ para nitrógeno amoniacal y Y_P para ortofosfatos. Cada coeficiente fue obtenidos basados en el peso molecular de $C_{106}H_{263}O_{110}N_{16}P$ para microalgas (Dalrymple, 2013). K_{des} y K_a representan los coeficientes de transferencia de masa del amoniaco y del dióxido de carbono, respectivamente; mientras que K_H representa la constante de la ley de Henry para el CO_2 . La presión parcial del CO_2 atmosférico esta denotado por la presión atmosférica P_o y la fracción mol por y_0 . La constante de equilibrio K_b denota el equilibrio del amonio con el amoniaco; mientras que las constantes de equilibrio K_1 y K_2 , representan el equilibrio entre el dióxido de carbono, bicarbonato y carbonato. El peso molecular del CO_2 está mostrado como M_w .

En la Tabla 4 se enlista las constantes y parámetros cinéticos (crecimiento, nitrificación, mortalidad, constantes de remoción, saturación media y de disociación) que en este modelo multinutriente fueron usadas y calibradas a escala laboratorio con reactores de 10 L y con datos experimentales obtenidos publicados en la literatura:

Tabla 4. Parámetros cinéticos usados en el modelo de Eze et al, 2018.

Parámetro	Valores	Referencia
Tasa de crecimiento específico, μ_{max}	0.17 día ⁻¹	Eze et al, 2018
Tasa de crecimiento específico con NO_3^-, μ_{maxNO3}	0.1 día ⁻¹	
Tasa de oxidación del NH_4^+, μ_B	0.14 día ⁻¹	
Tasa de mortalidad, μ_d	0.004 día ⁻¹	

Tabla 4. (Continuación)

Parámetro	Valores	Referencia
Tasa de absorción de nutrientes sin crecimiento, μ_m	0.00385 h ⁻¹	Van Bodegom, 2007
Constante de saturación media NH ₄ ⁺ y NO ₃ ⁻ , K _N	31.5 mg/L	Aslan & Kapdan, 2006
Constante de saturación media HPO ₄ ²⁻ , K _P	10.5 mg/L	
Constante de saturación media HCO ₃ ⁻ , K _C	124.9 mg/L	Zhang et al, 2010
Coeficiente de remoción de NH ₄ ⁺ , Y _{N,a}	0.081 g/g. alga	Eze et al, 2018
Coeficiente de remoción de NO ₃ ⁻ , Y _{N,n}	0.279 g/g. alga	
Coeficiente de remoción de HPO ₄ ²⁻ , Y _P	0.027 g/g. alga	
Coeficiente de remoción de HCO ₃ ⁻ , Y _C	1.821 g/g. alga	
Coeficiente de transferencia de masa para NH ₃ , K _d	0.14 h ⁻¹	Solimeno et al, 2017
Coeficiente de transferencia de masa para CO ₂ , K _a	0.14 h ⁻¹	
Presión atmosférica, P _o	1 bar	-
Fracción mol de CO ₂ en el aire, y _o	0.0003 mol/mol	-
Constante de Ley de Henry para CO ₂ , K _H	29.4 bar/mol	Levy et al, 1987
Constante de disociación NH ₄ ⁺ ↔ NH ₃ + H ⁺ , K _b	4.95 x10 ⁻¹⁰	Martinelle, 1997
Constante de disociación H ₂ CO ₃ ↔ HCO ₃ ⁻ + H ⁺ , K ₁	4.375 x10 ⁻⁷	Millero et al, 2002
Constante de disociación HCO ₃ ⁻ ↔ CO ₃ ²⁻ + H ⁺ , K ₂	1.358 x10 ⁻¹⁰	

Las reacciones de formación de biomasa microalgal explican los cambios en la composición de los nutrientes, así como los cambios del pH en el medio (Eze *et al*, 2018):



En la ecuación 11, se explica la formación de biomasa cuando la fuente de nitrógeno es el nitrógeno amoniacal; mientras tanto, que en la ecuación 12 cuando la fuente es de nitratos. En ambos casos se liberan iones hidroxilo, lo que explica el aumento del pH del sistema (Dalrymple, 2013). Por lo que, el control del pH es un importante paso para que la producción de biomasa sea el óptimo.

En la figura 6, dentro del rango óptimo de pH, la predominancia de las especies inorgánicas de fósforo, carbono y nitrógeno son ortofosfato (entre el 70% y 90% del fósforo inorgánico total),

bicarbonato (>90% del carbono inorgánico total) y amonio (>80% del nitrógeno amoniacal total), respectivamente. Los nitratos son la base conjugada de un ácido fuerte y se encuentra de forma libre en todo el intervalo de pH.

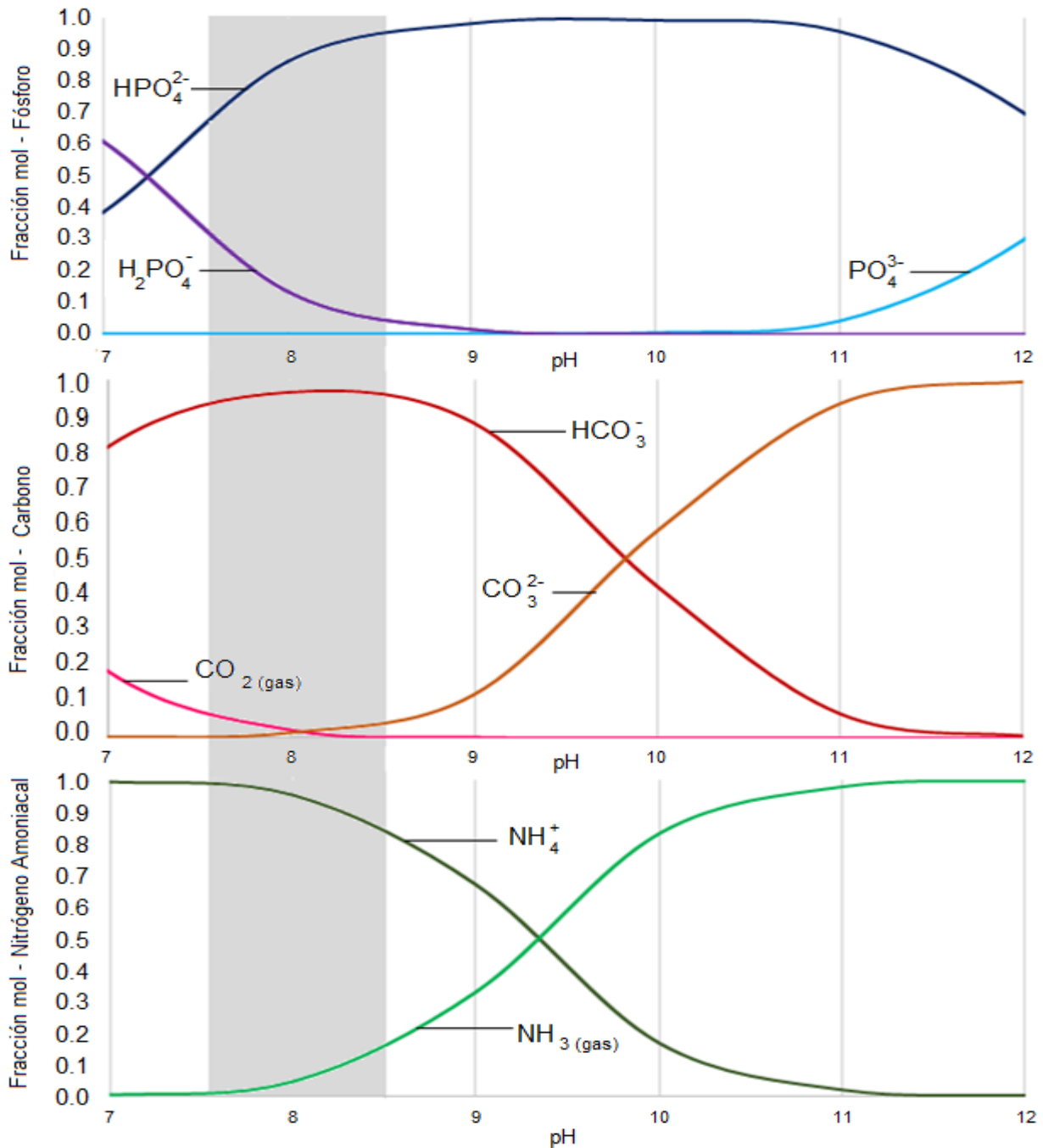


Figura 6. Fracciones molares de nitrógeno amoniacal, fósforo y carbono inorgánico en función del pH del sistema (Skoog et al, 2005).

5.7 Validación de modelos

En este trabajo, se quiere lograr que el modelo multinutriente pueda simular y predecir los comportamientos de los sustratos en el reactor tipo Herradura (Raceway) de la Planta Piloto. Cabe mencionar, alguno de los problemas que pueden llegar a presentarse son la contaminación por otros organismos no benignos, la evaporación del agua, temperatura ambiental y el mantenimiento de la instalación (Demirbas & Demirbas, 2010); estos parámetros no son considerados en el modelo, por lo que pueden ser causa de que no se prediga con precisión el comportamiento del reactor.

Para que los datos experimentales se ajusten con los datos teóricos debe de haber consistencia interna; en otras palabras, se deben de descartar aquellos datos atípicos o *outliers*, que influyen en la precisión del modelo.

Para soportar lo anterior, en este estudio se usa el coeficiente de correlación de Pearson (R^2) y la raíz del error cuadrático medio (RMSE); que relaciona tanto los datos experimentales y los datos predichos; y que determina que tanto está alejado o cercano el modelo de la realidad.

Un valor R^2 cercano a 1, significa que los datos experimentales están lo suficientemente cerca de los datos teóricos, y es apropiadamente validable el modelo. Un valor R^2 cercano a 0 significa que posee menos precisión para interpretar la realidad y posee una alta variabilidad. Asimismo, entre más pequeño sea el valor del RMSE, significa que el modelo posee menor incertidumbre y es más preciso para predecir datos experimentales.

Para una mejor simulación en este trabajo, es crucial un reajuste o recalibración de los parámetros y/o constantes cinéticas involucradas en el modelo, para que se puedan interpretar los resultados. Esto para incluir aquellas consideraciones que afectan en gran proporción a la desviación de los resultados debido al escalamiento (escala laboratorio a escala piloto) del tamaño del reactor (Russell-Rhinehart, 2016).

6. METODOLOGÍA

La metodología empleada se llevó a cabo en cuatro fases:

1. **DEFINICION DE CONDICIONES:** A partir de la consulta bibliográfica del modelo multinutriente desarrollado por Eze, *et al* (2018), se definió la frecuencia en que se debe llevar a cabo el monitoreo del conjunto de parámetros relevantes para aplicar el modelo, así como las condiciones iniciales y el tiempo de retención que cada lote debe de operar por separado.
2. **MUESTREO:** Determinación de los parámetros fisicoquímicos en las instalaciones del Laboratorio de Ingeniería Ambiental, mediante métodos descritos por manuales y normas correspondientes.
3. **SIMULACIÓN CON MATLAB Y REAJUSTE:** Con las condiciones iniciales experimentales, se hicieron las correspondientes simulaciones representados en gráficas, mediante una rutina ODE45 de la versión R2015a de MATLAB previamente programada y revisada con la sintaxis correcta. Posteriormente, se recalibraron las constantes cinéticas de interés en el modelo que permitieran representar el comportamiento de los parámetros fisicoquímicos con más consistencia.
4. **ANÁLISIS ESTADÍSTICO Y VALIDACIÓN DE MODELO:** Re-ejecución de simulaciones con los nuevos valores reajustados de las constantes cinéticas. Y comparación de resultados simulados con resultados experimentales.

6.1 Definición de condiciones

Las condiciones iniciales para cada parámetro deben de encontrarse dentro de rangos que permitiera el crecimiento de la biomasa. Los tiempos de retención se definieron en 14 días. El sistema de mezclado está programado para funcionar a una velocidad de mezclado de 30 RPM con velocidad promedio dentro del reactor de hasta 0.2 m/s. Se tomará muestra tres veces por semana en todo el tiempo de cultivo.

6.2 Muestreo

Para la determinación de cada parámetro se determinó hacerlo por triplicado para tener una desviación estándar representativa. Estas muestras obtenidas del reactor tipo Herradura

fueron colectadas en envases de HDPE² o PET³, mostrados en la figura 7. Estos envases son lavados exclusivamente con agua destilada, esto con el fin de evitar interferencias en las mediciones. No se lavó con algún otro agente químico como detergentes y cloro, ya que el detergente interfiere con las mediciones de ortofosfatos, nitrógeno amoniacal y pH, mientras que el cloro interfiere con las mediciones de nitratos y ortofosfatos.

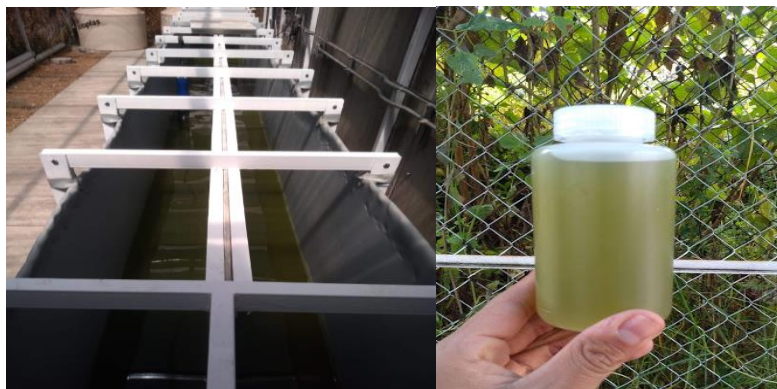


Figura 7. Izquierda: Reactor Tipo Herradura (Raceway) de la Planta Piloto Atzintli (Vielma-Hernández, 2018). Derecha: Muestra en envase de PET (Elaboración propia).

Los métodos analíticos usados son descritos en la Tabla 5 con sus ejemplos ilustrativos:

Tabla 5. Técnicas experimentales de cada parámetro fisicoquímicos.

Parámetro fisicoquímico	Técnica	Tipo
Sólidos Suspendidos Totales	Método 2540 D APHA ^[1]	Gravimétrico
Ortofosfatos	Método 8178 HACH ^[2]	Espectrofotométrico
Alcalinidad	NMX-AA-036-SCFI-2001 ^[3] y ^[6]	Titulométrico
Nitrógeno Amoniacal	Método 4500-NH3-E APHA ^[4]	Titulométrico
Nitratos	Método 8039 HACH ^[5]	Espectrofotométrico
pH	Método 4500 HB APHA	Potenciométrico

² HDPE High Density Polyethylene (Polietileno de alta densidad)

³ PET Polietilentereftalato

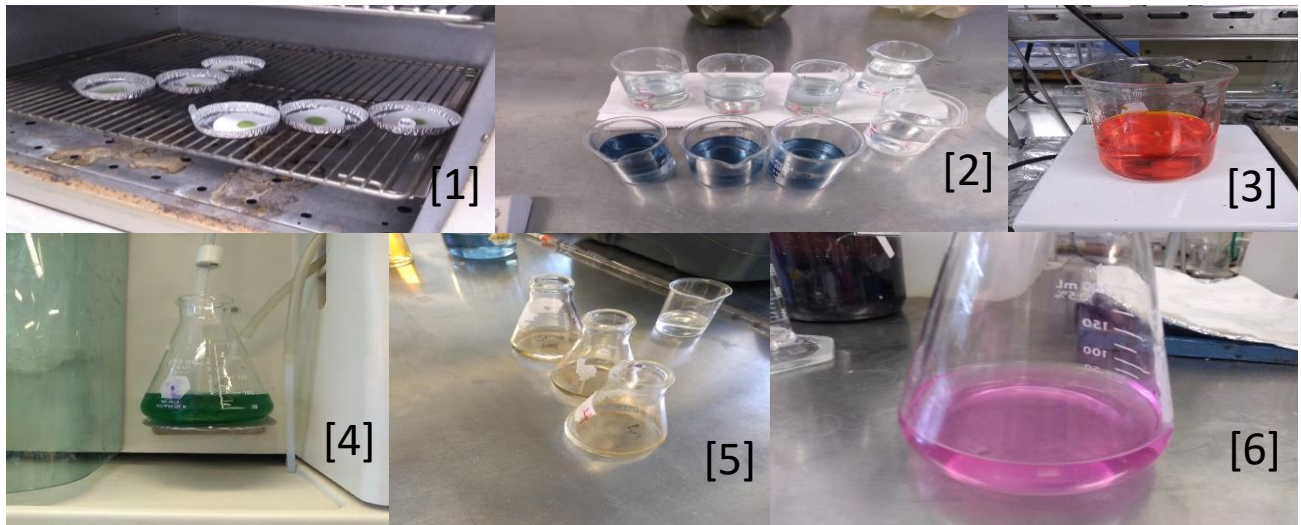


Figura 8. Técnicas experimentales determinadas en laboratorio

Además, se monitoreará la altura del nivel de agua del sistema, esto con la finalidad de corregir los resultados experimentales, ya que el modelo no considera las pérdidas de agua por evaporación.

6.3 Simulación con MATLAB y reajuste

A partir de la rutina de resolución de sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias no rígidas ode45 de la versión R2016a:

$$(13) \quad [t,y] = \text{ode45}(\text{odefun}, \text{tspan}, y_0)$$

Dónde:

odefun es la matriz de ecuaciones diferenciales

tspan es el intervalo de integración

y_0 son las condiciones iniciales.

Las condiciones iniciales son extraídas de la matriz de datos experimentales. Estos datos experimentales se ingresan como una matriz A_{ij} , donde i son el número de parámetros con su error experimental asociado (12 filas) y j son los días de operación (j columnas). Después, se grafican las funciones resueltas, observándose cómo van variando la composición de las diferentes especies químicas a través del tiempo, junto con los datos experimentales con sus respectivas barras de error.

Posteriormente, en las diferentes ecuaciones involucradas en el modelo se identificarán que términos matemáticos y constantes cinéticas son de mayor relevancia, numéricamente hablando (valores o cifras más grandes) en la resolución de la ecuación diferencial. Una vez identificados, los valores de las constantes son recalculados mediante regresiones lineales de los datos experimentales.

Finalmente, ya una vez obtenidos los nuevos valores, se hacen nuevamente las simulaciones en la rutina de MATLAB obteniendo las nuevas gráficas con las nuevas soluciones.

6.4 Análisis estadístico y validación de modelo

Se determinan los valores de los datos teóricos de las soluciones con la ayuda del software MATLAB mediante argumentos de salida de ode45.

Después, se crean las gráficas de concordancia, en otras palabras, se comparan los datos teóricos obtenidos con los argumentos de salida de ode45 en el eje de las abscisas y los datos experimentales en el eje de las ordenadas. Y finalmente se determina el coeficiente de correlación de Pearson (R^2) y las raíces medias de los errores cuadráticos (RMSE) antes y después de la recalibración. Para el caso del coeficiente de correlación de Pearson (R^2) se calculará mediante las opciones de formato en gráficas en la sección de 'Extrapolación' dentro del programa Excel. Para el caso de las raíces medias de los errores cuadráticos (RMSE), se calculará a través de la siguiente fórmula:

$$(14) \quad RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_0^n (X_{i,teórico} - X_{i,experimental})^2}$$

Dónde:

RMSE es la raíz media del error cuadrático

n es el número de mediciones totales

i es el día i

$X_{i,teórico}$ es el valor teórico del día i

$X_{i,experimental}$ es el valor experimental del día i

7. RESULTADOS Y ANÁLISIS

7.1 Condiciones iniciales

En la tabla 6 se describe cada uno de los lotes conforme fue inoculado y la relación entre agua residual del efluente de la PTAR y agua residual sintética preparada con medio de cultivo (BG-11 modificado). Todos los lotes fueron operados por lote (Batch), y al final de cada lote la biomasa se concentraba en el sedimentador y era reinoculada una parte o en su totalidad, pero con agua residual fresca y sin usar el agua del lote anterior.

Tabla 6. Características de las condiciones de cultivo de cada lote.

LOTE	VOLUMEN BIOMASA* CONCENTRADA (L)	ARE** (L)	ARS** (L)	FRACCIÓN VOLUMEN ARE**	FRACCIÓN VOLUMEN ARS**
1	30	18	1200	0.015	0.985
2	30	880	280	0.750	0.250
3	58	800	400	0.667	0.333
4	60	-	1200	0.000	1.000
5	62	-	1200	0.000	1.000

*Biomasa concentrada a 10 g/L aproximadamente obtenido de sedimentador de lote anterior.

**ARE = Agua residual efluente de la PTAR; ARS = Agua residual sintética (BG-11 mod.).

En la figura 9 se ilustra el ciclo de una puesta en marcha de un lote.

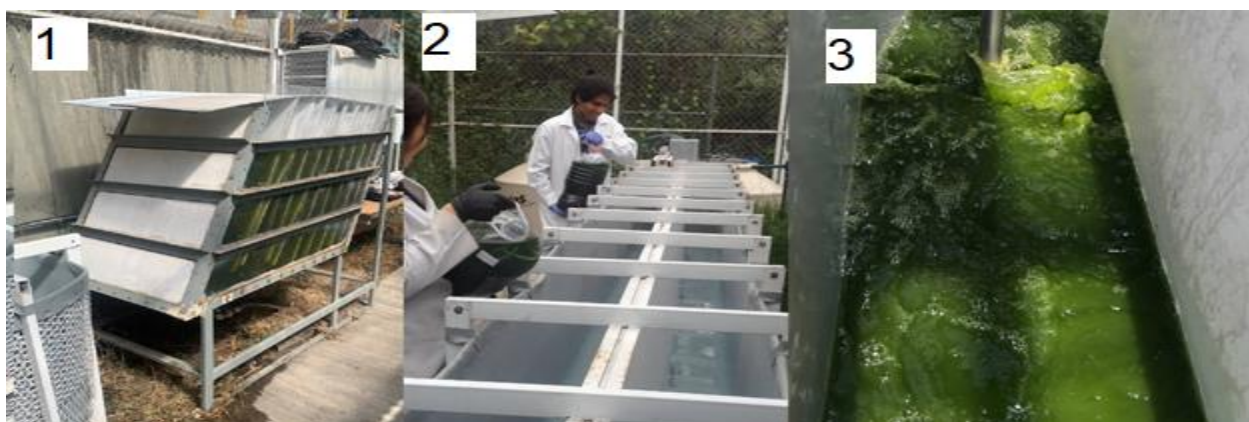


Figura 9. Lote puesto en marcha en Planta Piloto Atzintli. (Fotos de autor). [1] Sedimentación. [2] Inoculación de biomasa concentrada. [3] Puesta en marcha.

En la Tabla 7 se muestran las condiciones iniciales, es decir, los valores de las concentraciones de los parámetros para cada lote que se trabajó.

Tabla 7. Condiciones promedio iniciales.

Lote	Biomasa [mg/L]	HPO ₄ ²⁻ [mg/L]	C [mg/L]	NH ₄ ⁺ [mg/L]	NO ₃ ⁻ [mg/L]	pH
1	325.0	48.9	278.3	79.8	142.7	8.23
2	410.0	66.4	165.4	0.0	182.7	9.51
3	495.0	52.8	545.0	56.9	113.0	8.42
4	510.0	30.9	338.3	0.0	127.7	8.53
5	551.7	25.8	259.7	5.6	66.0	8.90

Los datos de la Tabla 7, fueron los datos que alimentaron al simulador MATLAB, posteriormente generaron las soluciones al sistema de ecuaciones diferenciales para después, recalcular los valores de las constantes y nuevamente generaron las nuevas soluciones.

7.2 Reajuste de constantes y simulación con MATLAB

Para la siguiente fase, se recalcularon los valores de las constantes cinéticas presentes en el modelo multinutriente. En la tabla 8 se muestran los valores que se modificaron y sus valores correspondientes:

Tabla 8. Valores de constantes cinéticas reajustadas.

Parámetro	Valor original	Nuevo valor
Tasa de crecimiento específico con NO ₃ ⁻ , μ_{maxNO3}	0.1 d ⁻¹	0.088 d ⁻¹
Tasa de mortalidad, μ_d	0.004 d ⁻¹	0.001 d ⁻¹
Tasa de absorción de nutrientes sin crecimiento, μ_m	0.0924 d ⁻¹	0.0430 d ⁻¹
Coefficiente de transferencia de masa para NH ₃ , K _{des}	3.36 d ⁻¹	0.72 d ⁻¹
Coefficiente de remoción de HCO ₃ ⁻ , Y _C	1.821 g/g. alga	1.132 g/g. alga

Estos valores modificados estaban sobrestimados para la escala piloto del reactor, por lo que, en futuros escalamientos a tamaños más industriales, es muy probable que los datos se necesiten recalcular y serían de valor aún menores. Los demás valores de tasas de crecimiento, de saturación media, coeficientes de remoción y de transferencia de masa, se mantuvieron constantes, ya que su valor si correspondió para predecir el comportamiento del fenómeno que describe y siguieron prediciendo aún después del reajuste.

La Tasa de crecimiento específico con NO_3^- (μ_{maxNO_3}) disminuyó de 0.1 a 0.088 d^{-1} ; esto porque se observa que la biomasa crece a un ritmo más lento cuando los nitratos son la única fuente de nitrógeno. La tasa de mortalidad (μ_d) disminuyó de 0.004 a 0.001 d^{-1} porque la biomasa tarda más en llegar a la fase de muerte, es decir que es más prolongado la fase estacionaria del crecimiento unicelular. Ambos cambios reajustan a los Sólidos Suspendidos Totales. La tasa de absorción de nutrientes sin crecimiento (μ_m) disminuyó de 0.0924 a 0.0430 d^{-1} puesto que la biomasa consume menos nutrientes, ya que ya no es totalitariamente microalgas, sino que hay otros organismos presentes en el consorcio; entonces, el cambio de esta constante ajusta los valores para los Nitratos y Ortofosfatos. El coeficiente de transferencia de masa para NH_3 (K_{des}) cambió de 3.36 a 0.72 d^{-1} debido a que el área de transferencia del reactor de la planta piloto es considerablemente mayor que los reactores de escala laboratorio. Recordemos que el coeficiente de transferencia de masa depende inversamente proporcional del área de transferencia entre las dos fases, por otro lado, el reajuste de este valor corrige los datos de Nitrógeno Amoniacal. Y, por último, el coeficiente de remoción de HCO_3^- (Y_c) disminuyó de 1.821 a 1.132 g/g. alga; esto es porque como anteriormente se mencionó, el consorcio ya no está formado exclusivamente por microalgas, por lo que no absorbe la misma cantidad de carbono inorgánico, los organismos diferentes a las microalgas absorben carbono orgánico proveniente muy probablemente de las biomoléculas que las microalgas sintetizan.

Posteriormente de haber hecho la recalibración de los parámetros de la Tabla 9, se volvieron a generar las nuevas soluciones del sistema de ecuaciones a través del programa MATLAB, esta vez con los nuevos valores recalibrados.

A continuación, se presentarán las gráficas generadas por MATLAB antes de recalibración (línea punteada) y después de recalibración (línea continua) para lote 1:

Tabla 9. Condiciones iniciales para lote 1.

Fecha: 30 agosto – 13 septiembre 2019	Volumen agua residual: 18 L
SST: 325 mg/L NH₄⁺: 79.8 mg/L	Volumen agua residual sintética: 1200 L
HPO₄²⁻: 48.9 mg/L NO₃⁻: 142.7 mg/L	Volumen Biomasa Inoculada: 30 L
C: 278 mg/L pH: 8.23	

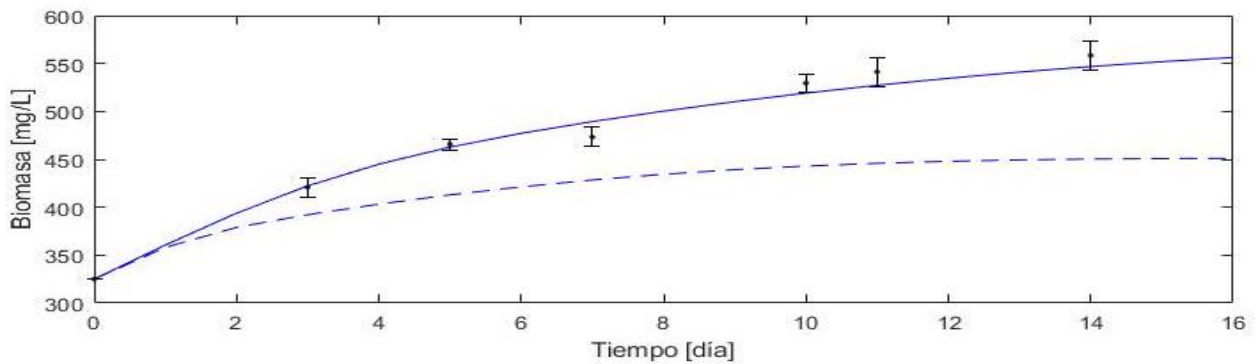


Figura 10. Simulaciones antes y después de recalibración para Biomasa en lote 1

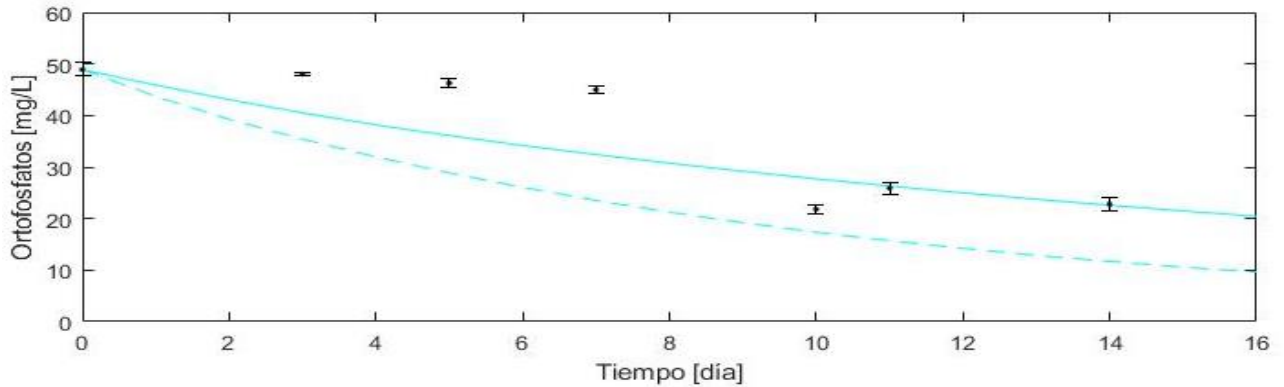


Figura 11. Simulaciones antes y después de recalibración para Ortofosfatos en lote 1

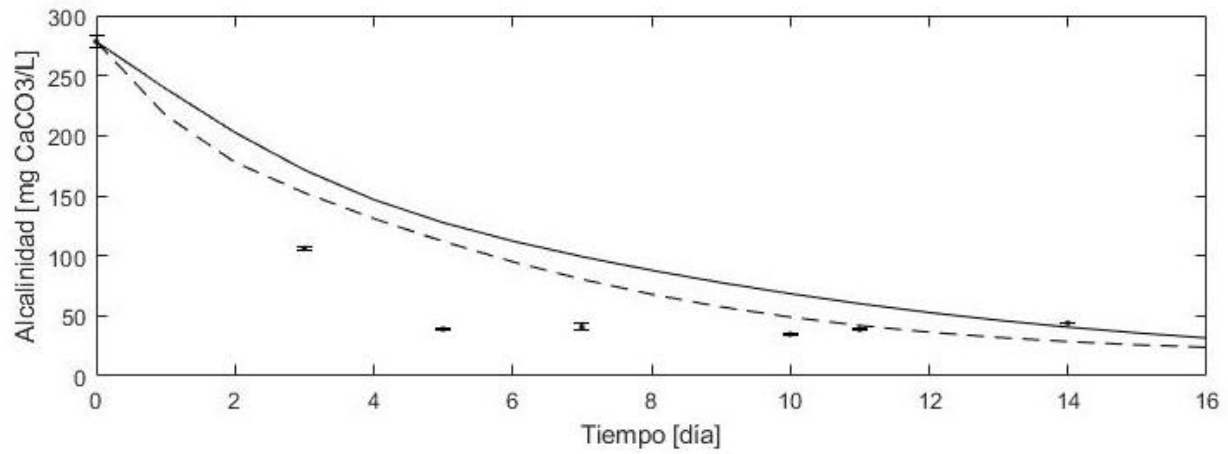


Figura 12. Simulaciones antes y después de recalibración para Alcalinidad en lote 1.

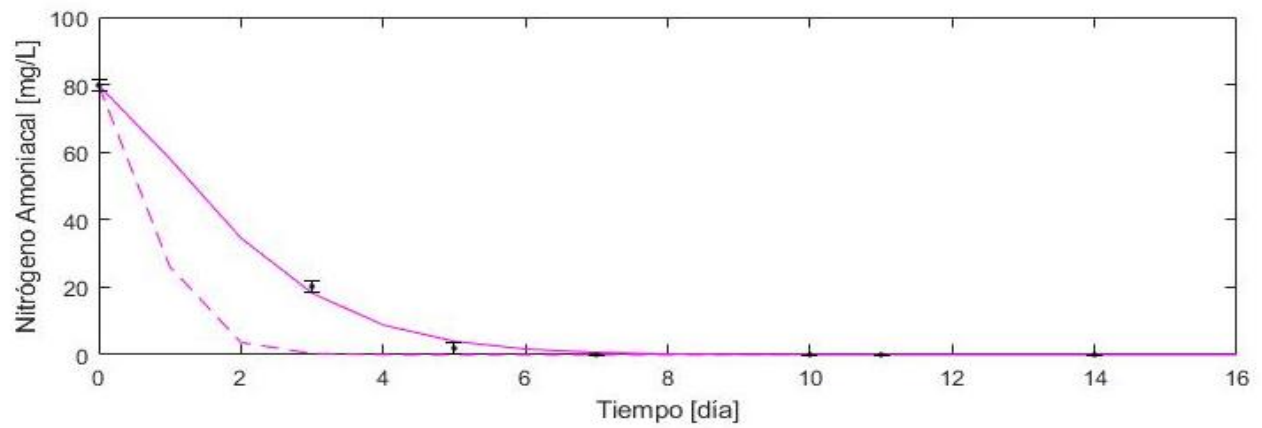


Figura 13. Simulaciones antes y después de recalibración para N. Amoniacaal en lote 1.

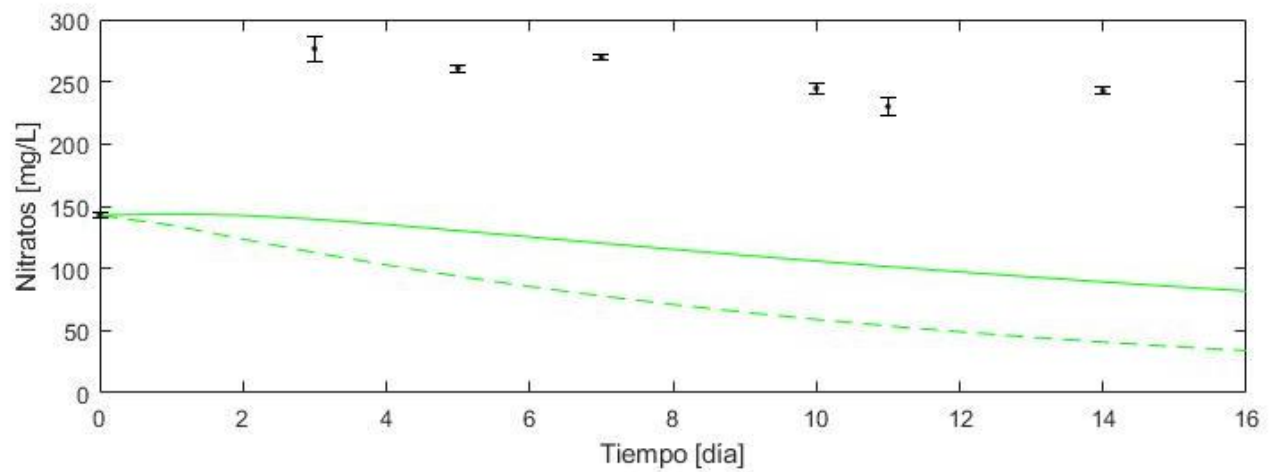


Figura 14. Simulaciones antes y después de recalibración para Nitratos en lote 1.

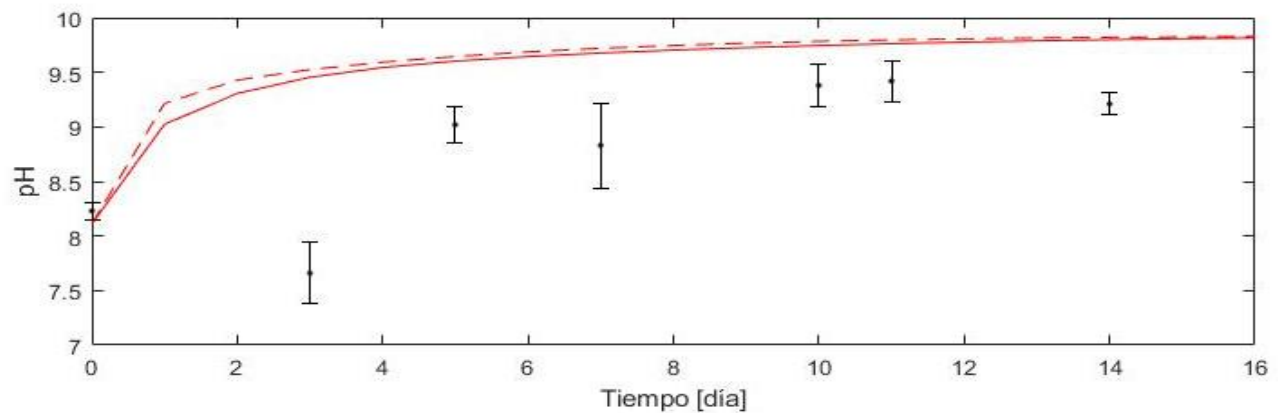


Figura 15. Simulaciones antes y después de recalibración para pH en lote 1.

En caso del lote 1, se pudo notar un mejor ajuste para los datos de Sólidos Suspendidos Totales, Ortofosfatos, N. Amoniacal y Alcalinidad. Sin embargo, para nitratos difícilmente se pudo hacerse un mejor ajuste, ya que hay un aumento muy pronunciado de su concentración, donde se cree que hubo otra fuente de nitrógeno que se oxidaba hasta nitratos, muy probablemente nitritos; y, por otro lado, tampoco el pH no tuvo un mejor ajuste.

Descripción del lote 2:

Tabla 10. Condiciones iniciales para lote 2.

Fecha: 17 – 31 octubre 2019	Volumen agua residual: 880 L
SST: 410.0 mg/L NH₄⁺: 0.0 mg/L	Volumen agua residual sintética: 280 L
HPO₄²⁻: 66.4 mg/L NO₃⁻: 182.7 mg/L	Volumen Biomasa Inoculada: 30 L
C: 165.4 mg/L pH: 9.51	

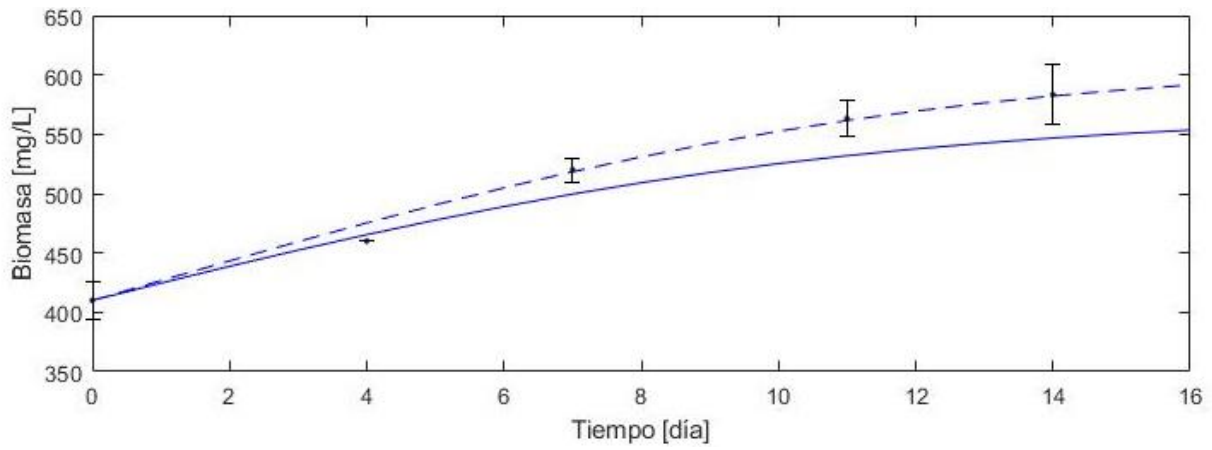


Figura 16. Simulaciones antes y después de recalibración para Biomasa en lote 2.

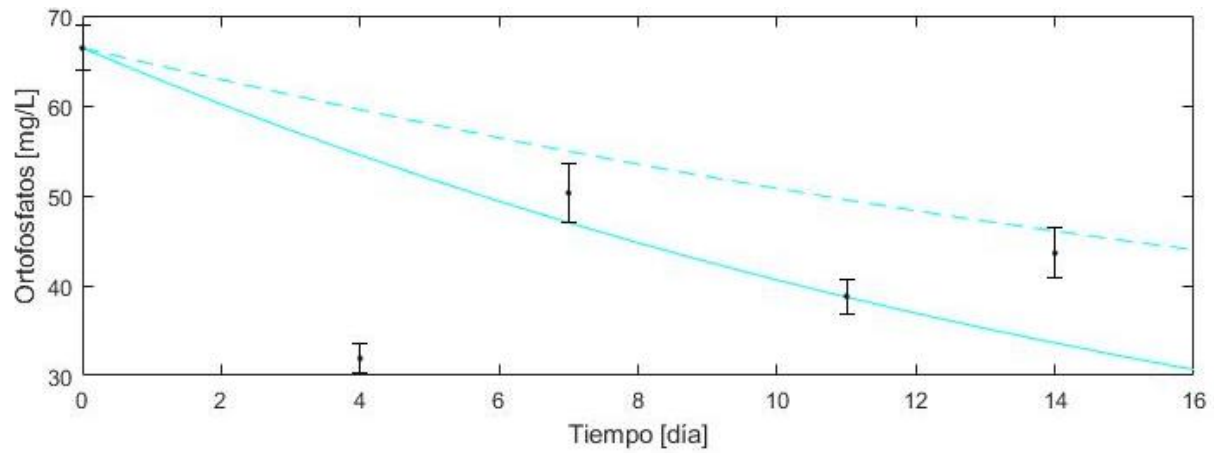


Figura 17. Simulaciones antes y después de recalibración para Ortofosfatos en lote 2.

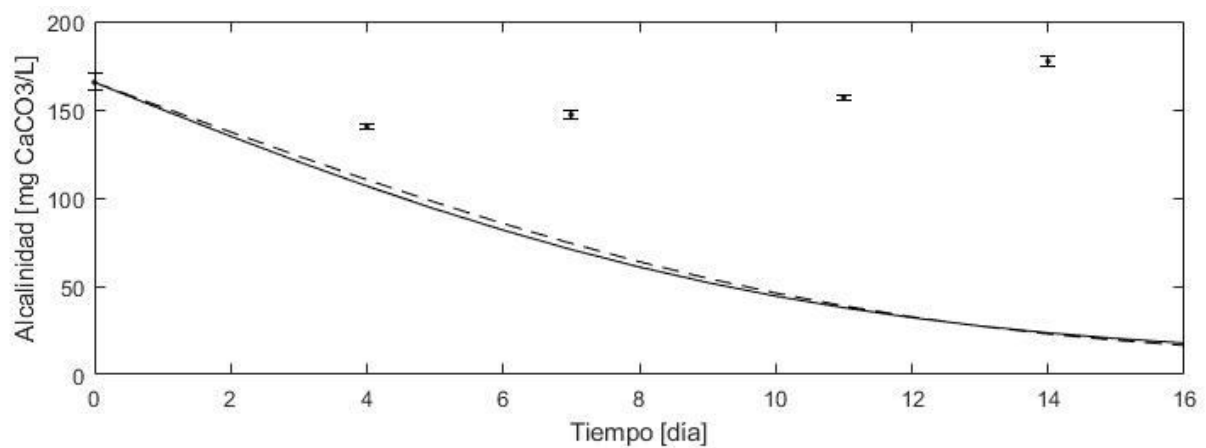


Figura 18. Simulaciones antes y después de recalibración para Alcalinidad en lote 2.

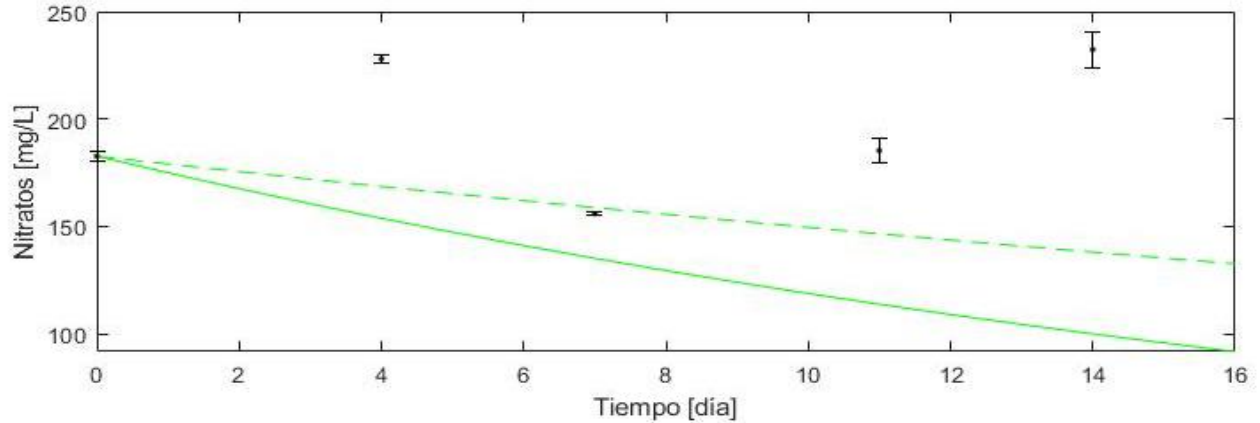


Figura 19. Simulaciones antes y después de recalibración para Nitratos en lote 2.

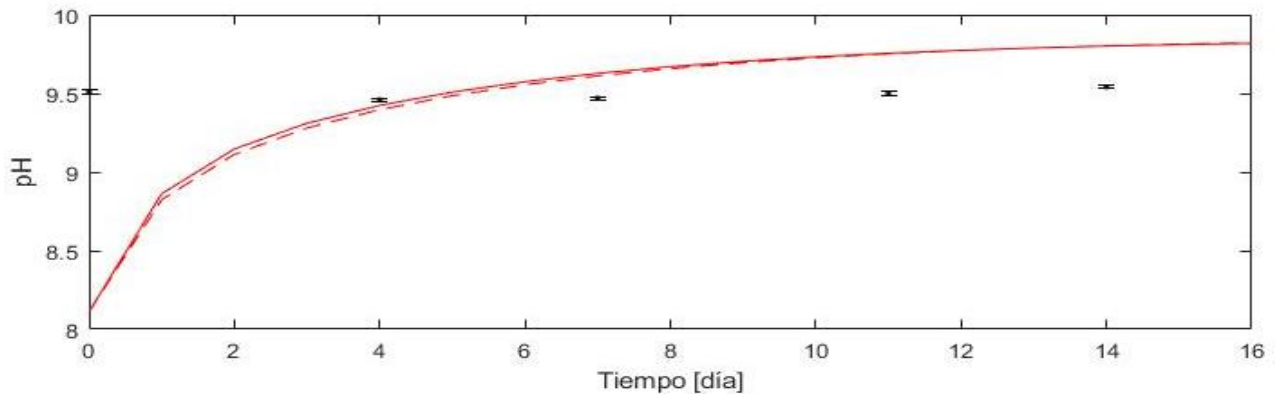


Figura 20. Simulaciones antes y después de recalibración para pH en lote 2.

Para el lote 2, la recalibración de constantes ajustó mejor para Ortofosfatos, mientras que para los demás parámetros no ocurrió como Alcalinidad, Nitratos y pH. En el caso de Sólidos Suspendidos Totales, la recalibración no desvió considerablemente. En este lote, ya que no hubo presencia de Nitrógeno Amoniacal, no participó en la solución siendo de 0 mg/L la concentración en todo el lote.

Descripción del lote 3:

Tabla 11. Condiciones iniciales para lote 3.

Fecha: 26 febrero – 11 marzo 2020	Volumen agua residual: 800 L
SST: 495.0 mg/L NH₄⁺: 56.9 mg/L	Volumen agua residual sintética: 400 L
HPO₄²⁻: 52.8 mg/L NO₃⁻: 113.0 mg/L	Volumen Biomasa Inoculada: 58 L
C: 545.0 mg/L pH: 8.42	

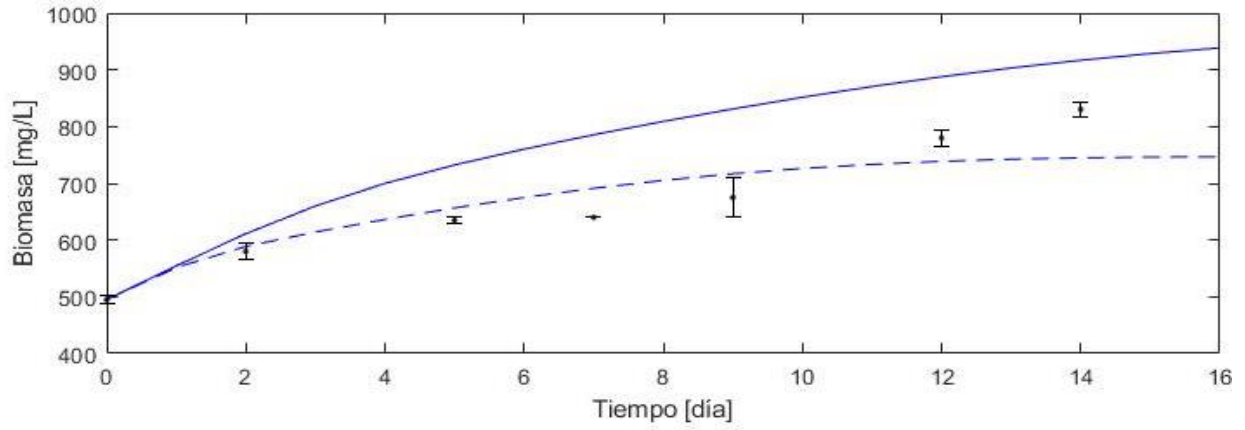


Figura 21. Simulaciones antes y después de recalibración para Biomasa en lote 3.

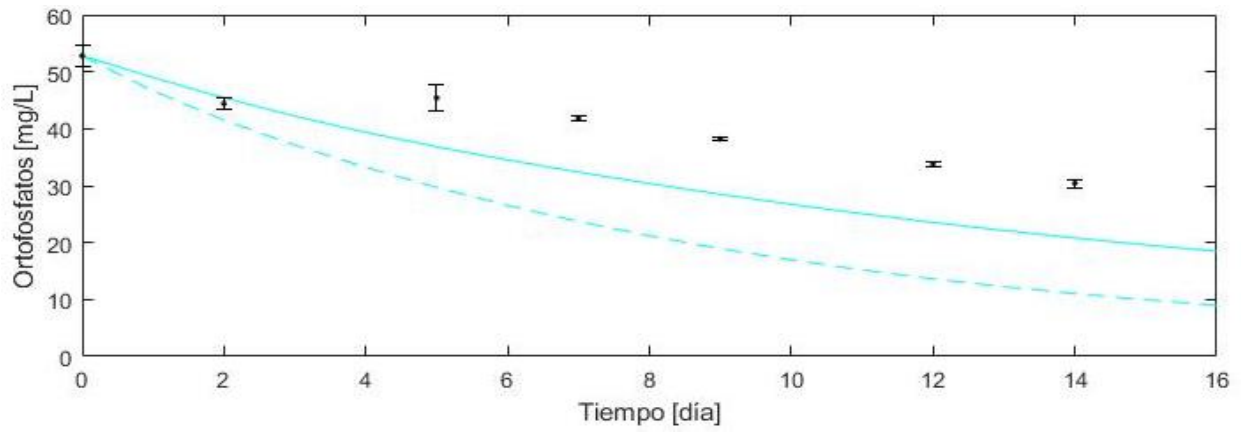


Figura 22. Simulaciones antes y después de recalibración para Ortofosfatos en lote 3.

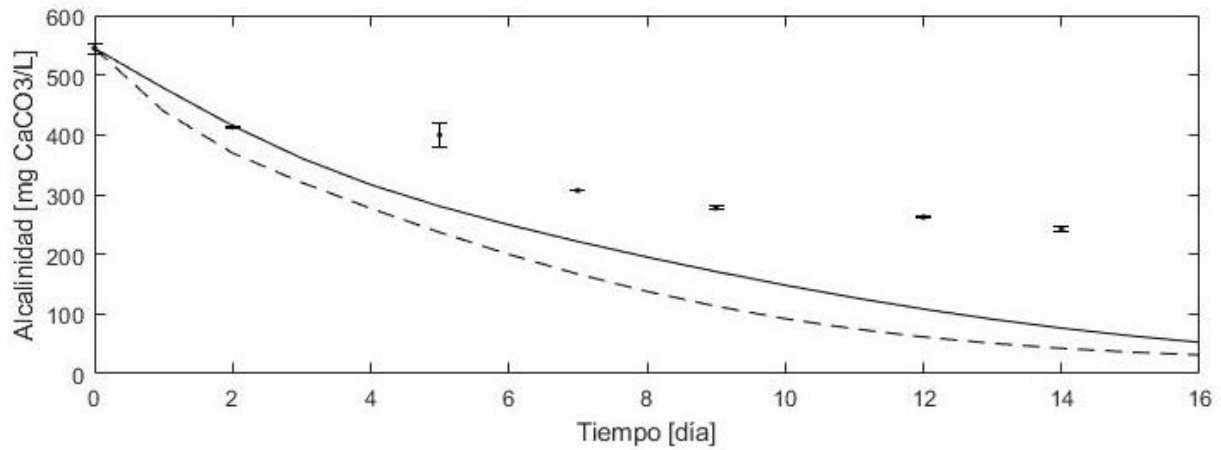


Figura 23. Simulaciones antes y después de recalibración para Alcalinidad en lote 3.

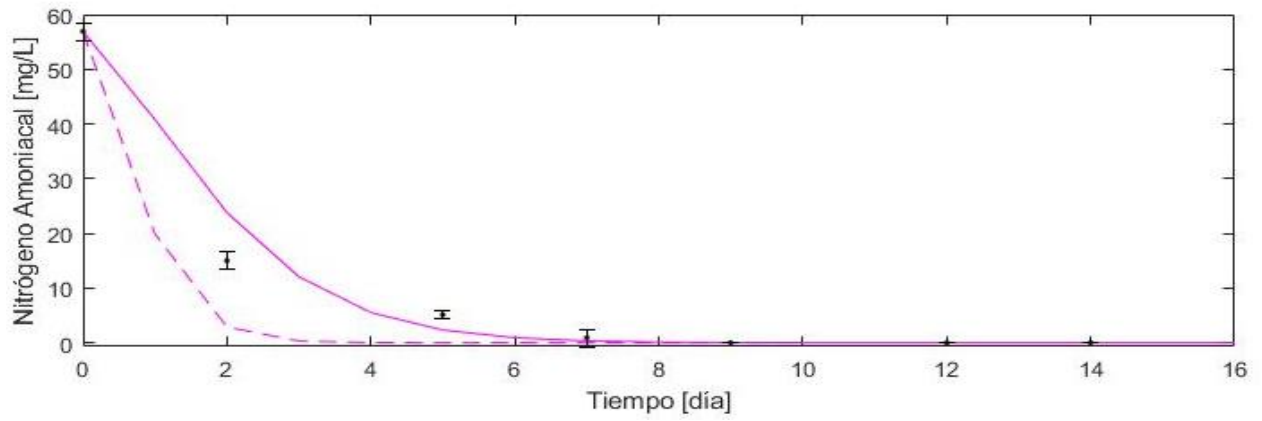


Figura 24. Simulaciones antes y después de recalibración para N. Amoniacoal en lote 3.

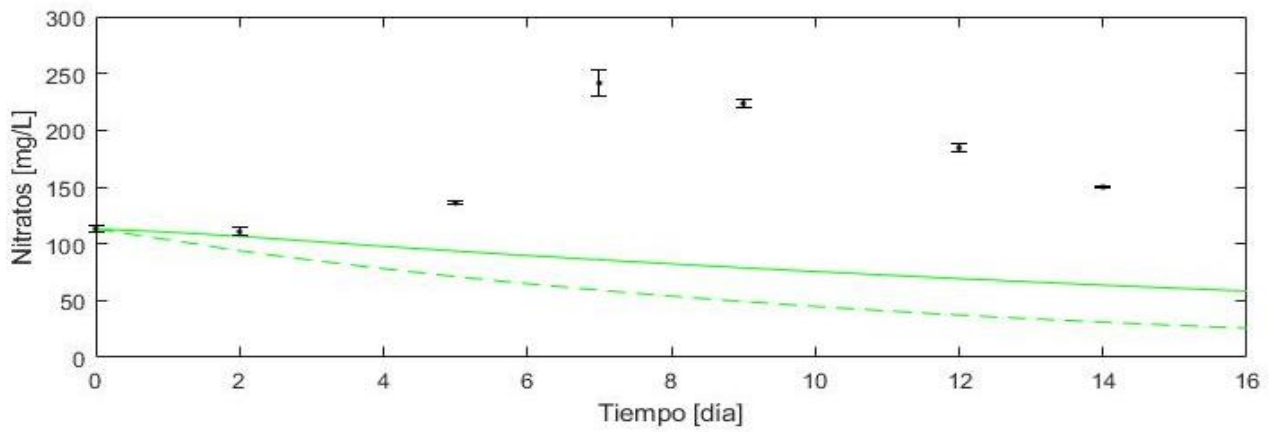


Figura 25. Simulaciones antes y después de recalibración para Nitratos en lote 3.

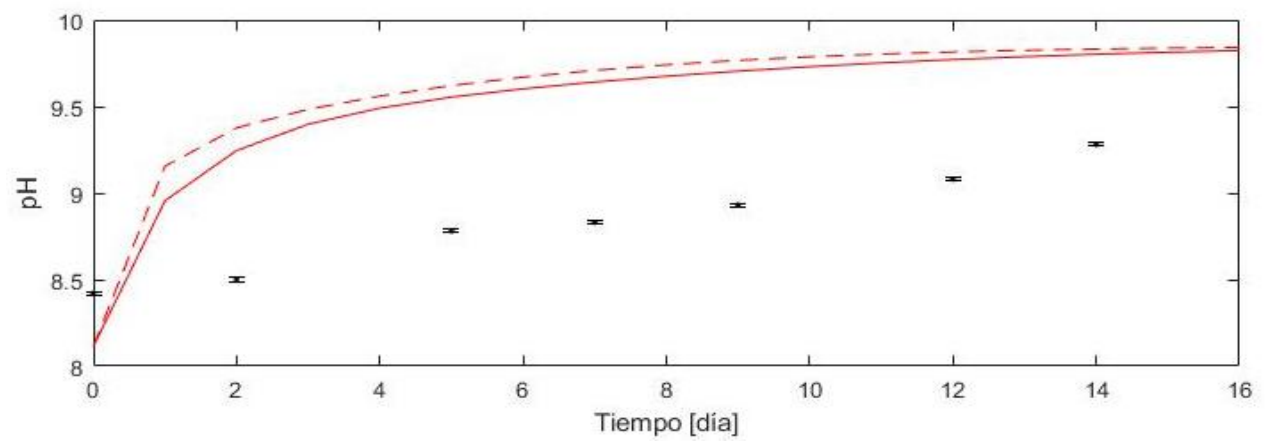


Figura 26. Simulaciones antes y después de recalibración para pH en lote 3.

Ahora en el caso del lote 3, los Ortofosfatos y el Nitrógeno Amoniacal fueron los que se mejor se ajustaron después de la recalibración. Para los Sólidos Suspendidos Totales, como en el lote anterior, la recalibración desvió ligeramente el ajuste. Para Alcalinidad y Nitratos, ajuste solo para los datos determinados de los primeros días del lote, posteriormente los datos experimentales presentan desviaciones que el modelo no predice. Para el pH, el reajuste no pudo mejorar su tendencia con los datos experimentales.

Descripción del lote 4:

Tabla 12. Condiciones iniciales para lote 4.

Fecha: 11 – 25 septiembre 2020				Volumen agua residual:	0 L
SST:	510.0 mg/L	NH₄⁺:	0.0 mg/L	Volumen agua residual sintética:	1200 L
HPO₄²⁻:	30.9 mg/L	NO₃⁻:	127.7 mg/L	Volumen Biomasa Inoculada:	60 L
C:	338.3 mg/L	pH:	8.53		

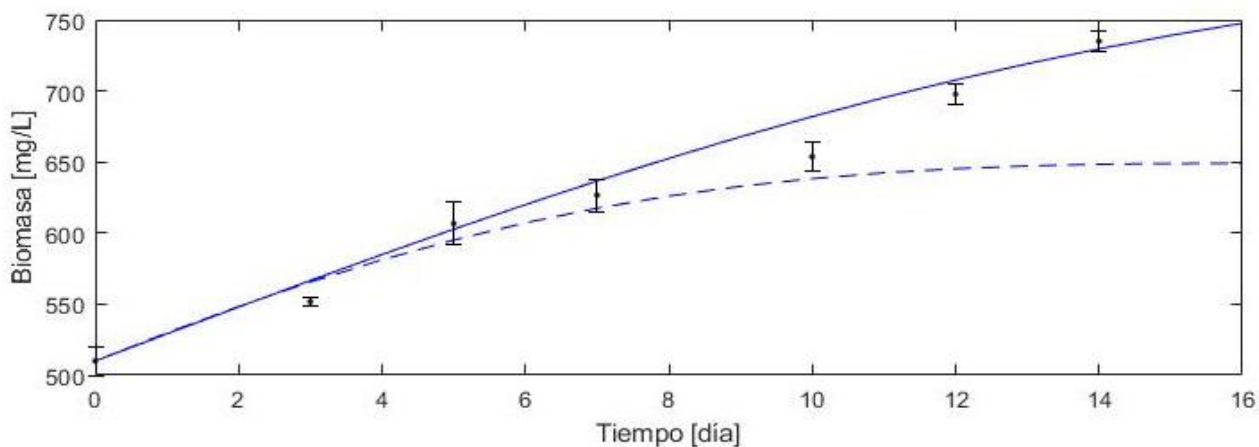


Figura 27. Simulaciones antes y después de recalibración para Biomasa en lote 4.

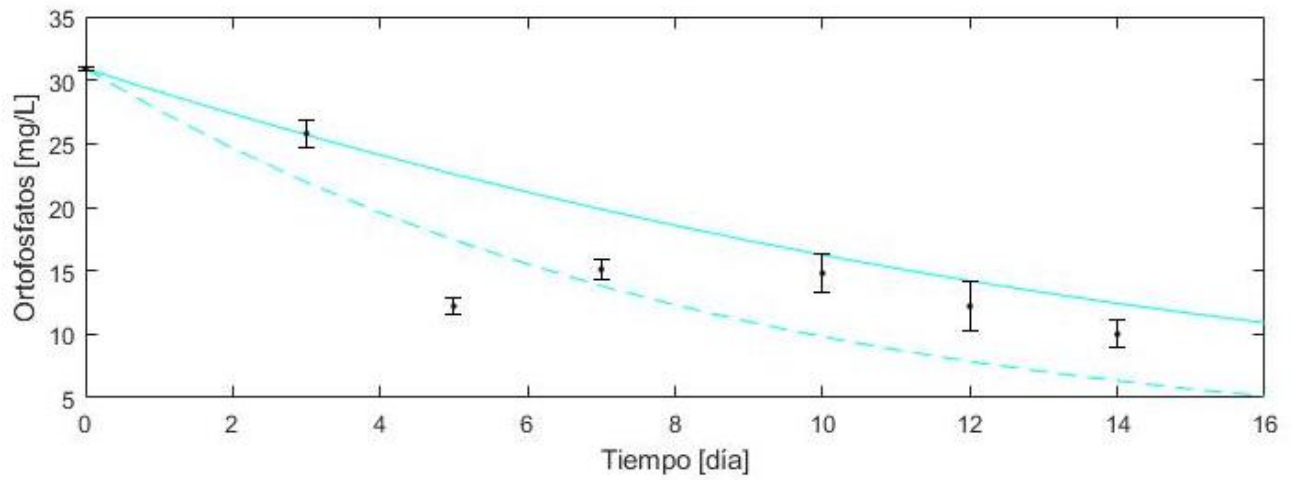


Figura 28. Simulaciones antes y después de recalibración para Ortofosfatos en lote 4.

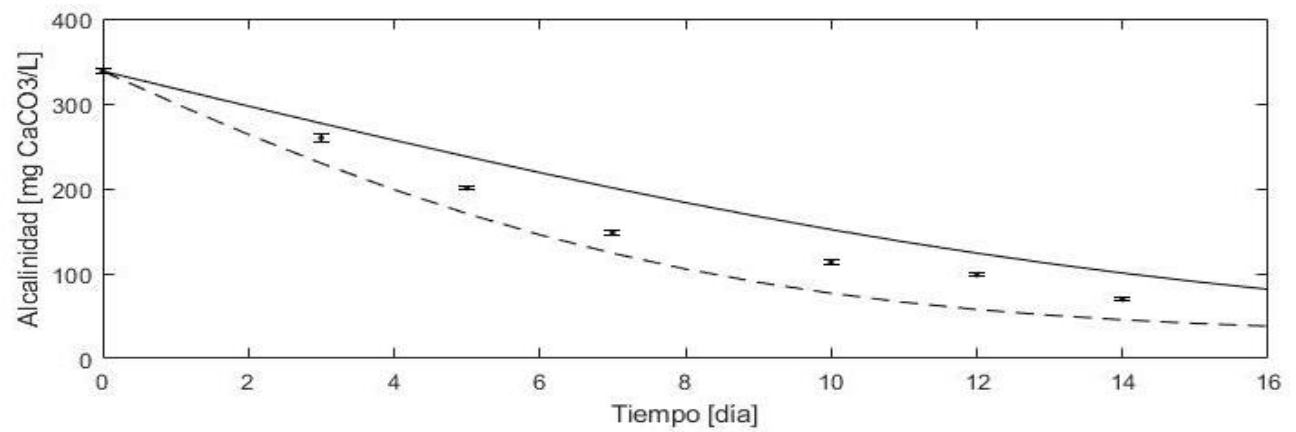


Figura 29. Simulaciones antes y después de recalibración para Alcalinidad en lote 4.

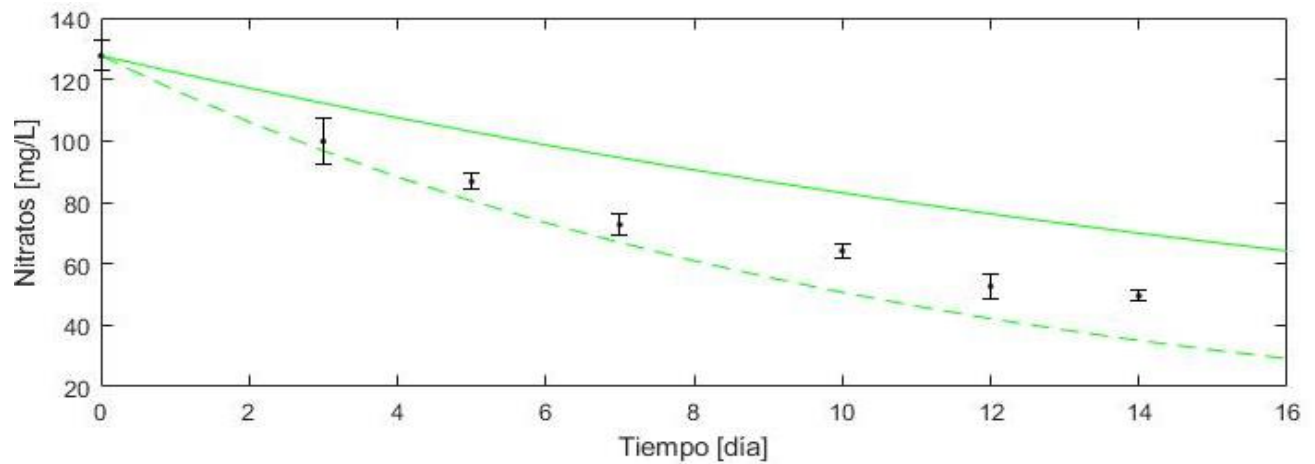


Figura 30. Simulaciones antes y después de recalibración para Nitratos en lote 4.

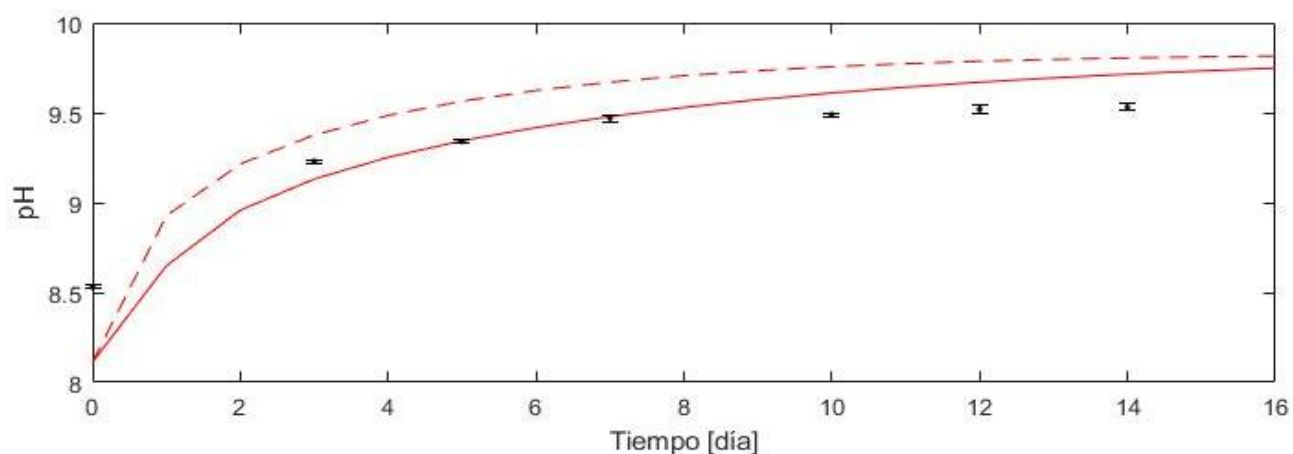


Figura 31. Simulaciones antes y después de recalibración para pH en lote 4.

Respecto al lote 4, la Biomasa, Ortofosfatos y el pH son los parámetros que ajustaron mejor después de la recalibración. Mientras que Nitratos y Alcalinidad sus ajustes están todavía ligeramente alejados de los datos experimentales, pero interpretan el comportamiento de ambos. Igual que el lote 2, este lote no hubo presencia de Nitrógeno Amoniacal, por lo que fue omitida su gráfica.

Por último, descripción del lote 5:

Tabla 13. Condiciones iniciales para lote 5.

Fecha: 25 septiembre – 9 octubre 2020	Volumen agua residual: 0 L
SST: 551.7 mg/L NH₄⁺: 5.6 mg/L	Volumen agua residual sintética: 1200 L
HPO₄²⁻: 25.8 mg/L NO₃⁻: 66.0 mg/L	Volumen Biomasa Inoculada: 62 L
C: 259.7 mg/L pH: 8.90	

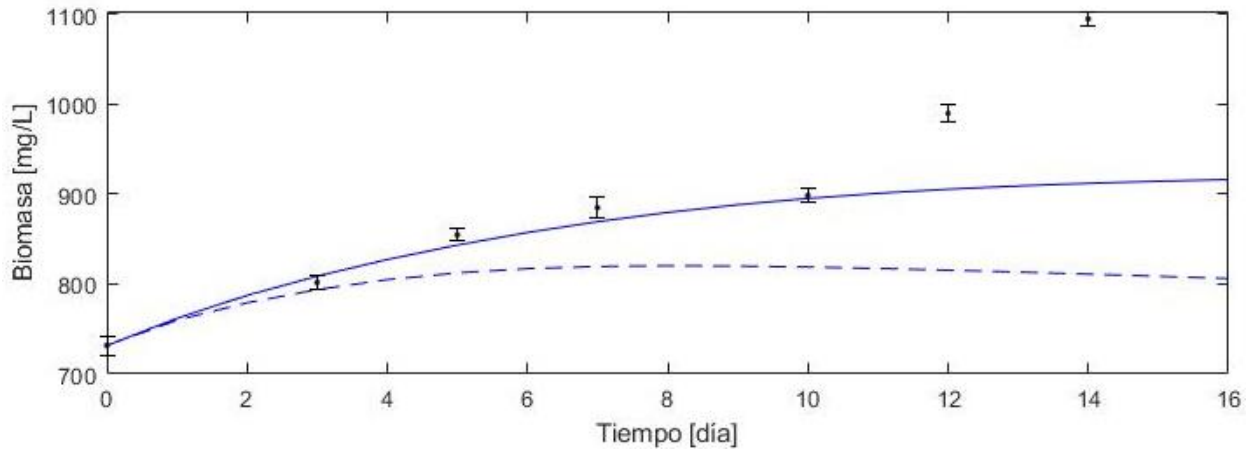


Figura 32. Simulaciones antes y después de recalibración para Biomasa en lote 5.

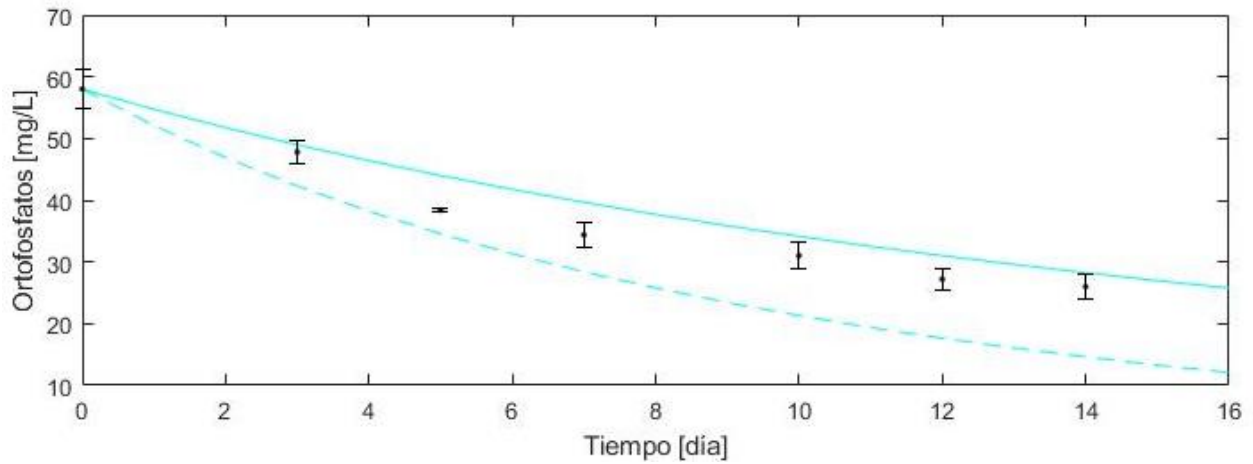


Figura 33. Simulaciones antes y después de recalibración para Ortofosfatos en lote 5.

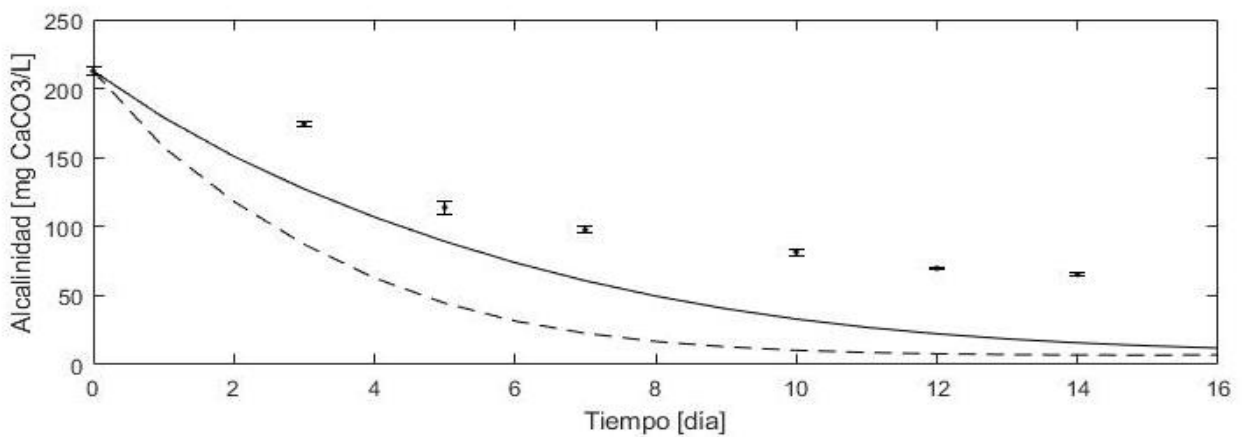


Figura 34. Simulaciones antes y después de recalibración para Alcalinidad en lote 5.

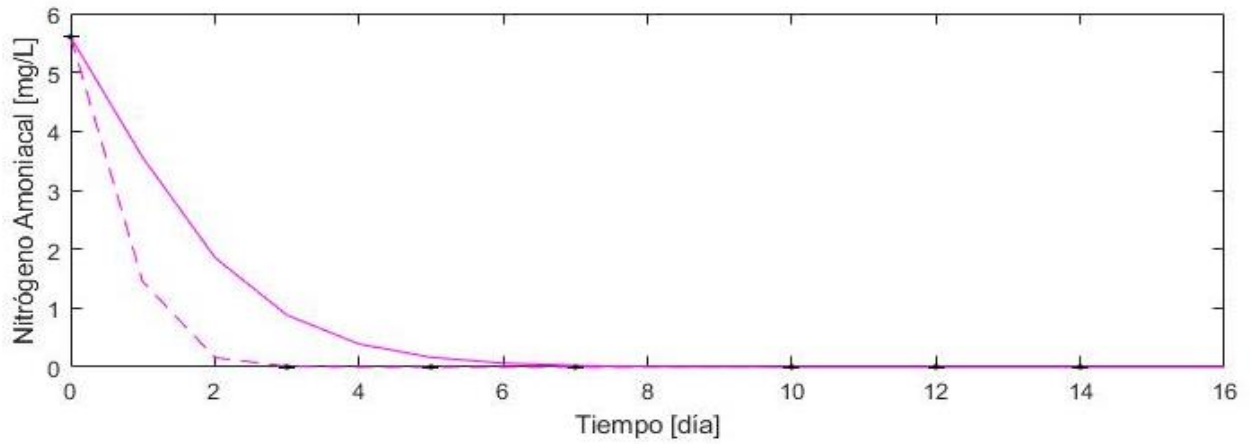


Figura 35. Simulaciones antes y después de recalibración para N. Amoniacoal en lote 5.

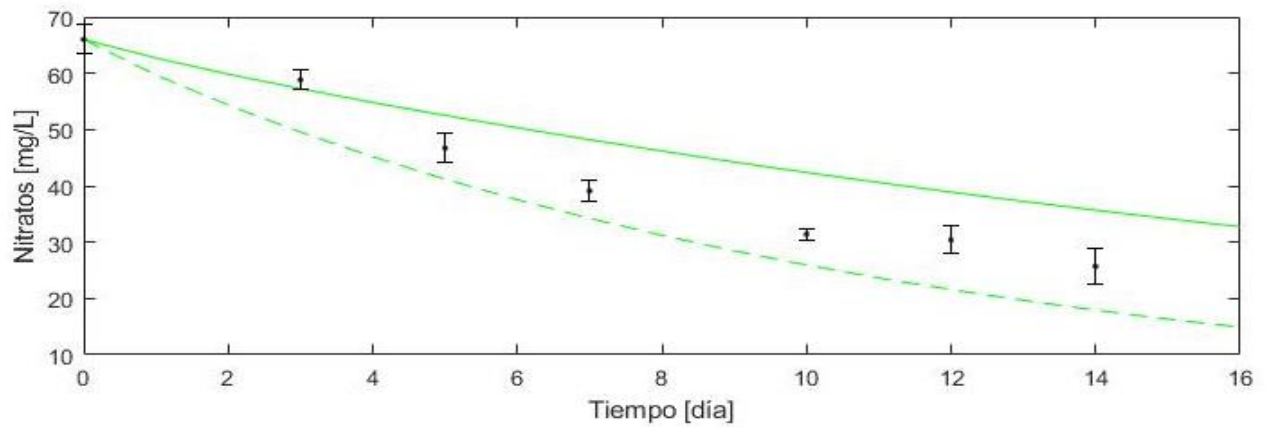


Figura 36. Simulaciones antes y después de recalibración para Nitratos en lote 5.

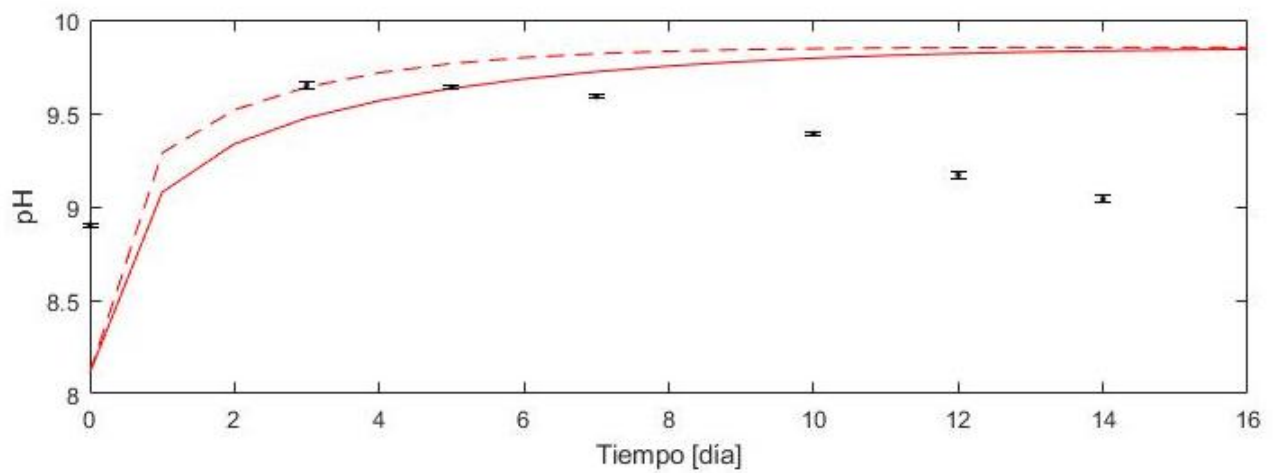


Figura 37. Simulaciones antes y después de recalibración para pH en lote 5.

Por último, del lote 5, la Biomasa ajustó muy bien los datos, a excepción de los últimos dos datos, este aumento es probablemente debido al crecimiento de organismos ajenos a microalgas. Por otro lado, tanto Ortofosfatos, Nitrógeno Amoniacal, Nitratos y Alcalinidad, si ajustaron mejor sus datos experimentales después de la recalibración. Por último, el pH, al igual que la biomasa, no ajustó bien para los últimos tres datos y quizá este comportamiento de disminución de pH favoreció el crecimiento de otros organismos y es por eso el crecimiento inusual de la Biomasa en los dos últimos datos.

7.3 Validación del modelo

Para la validación se construyeron gráficas de concordancia, donde se comparan los datos experimentales con los teóricos determinados de las soluciones por MATLAB

En las gráficas siguientes de la figura 38 se puede ver como es el cambio en la tendencia de los valores antes y después del reajuste de las constantes involucradas para Sólidos Suspendidos Totales del lote 1. La primera gráfica corresponde antes del reajuste, y podemos ver que entre muchos valores teóricos no coinciden con los experimentales, los subestima. Mientras que la segunda gráfica corresponde después del reajuste, y se observa que tanto valores experimentales y valores teóricos ajustan. Además, el coeficiente de correlación de Pearson aumenta cuando se aplicó el reajuste, afirmando que la correlación entre datos experimentales y predichos es alta ($R^2 = 0.9866$)

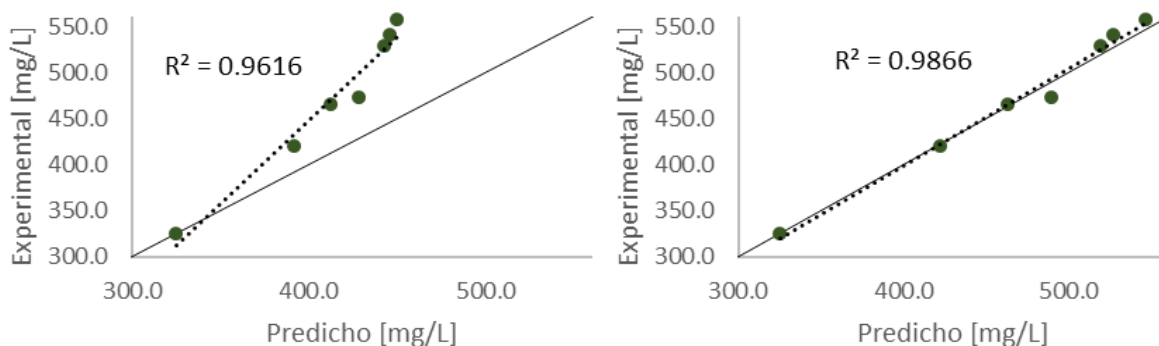


Figura 38. Comparación entre valores experimentales y teóricos antes y después de reajuste de constantes cinéticas para Biomasa de Lote 1.

A continuación, las gráficas de concordancia de los parámetros de cada lote.

Lote 1:

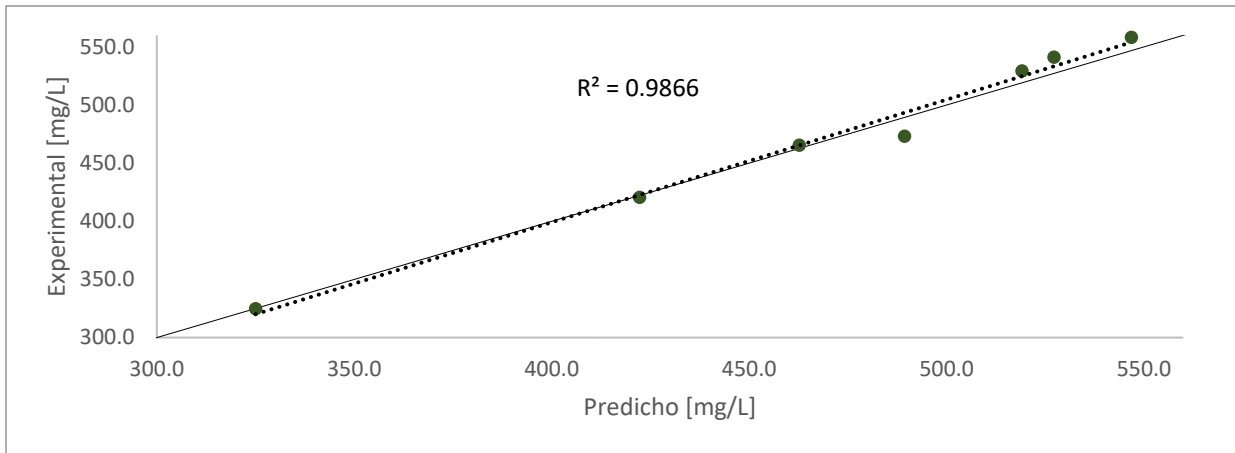


Figura 39. Valores experimentales y valores predichos para Biomasa en lote 1.

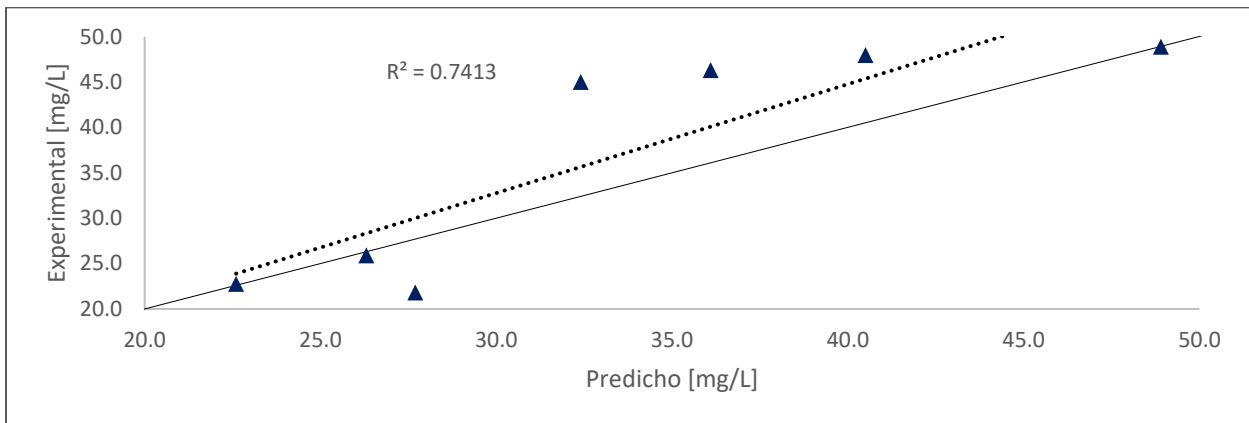


Figura 40. Valores experimentales y valores predichos para Ortofosfatos en lote 1.

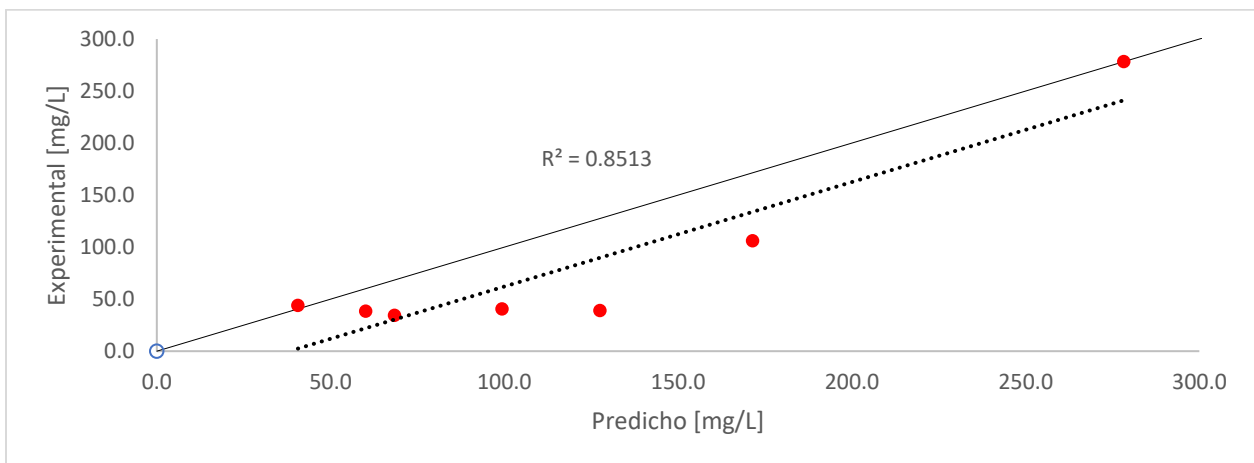


Figura 41. Valores experimentales y valores predichos para Alcalinidad en lote 1.

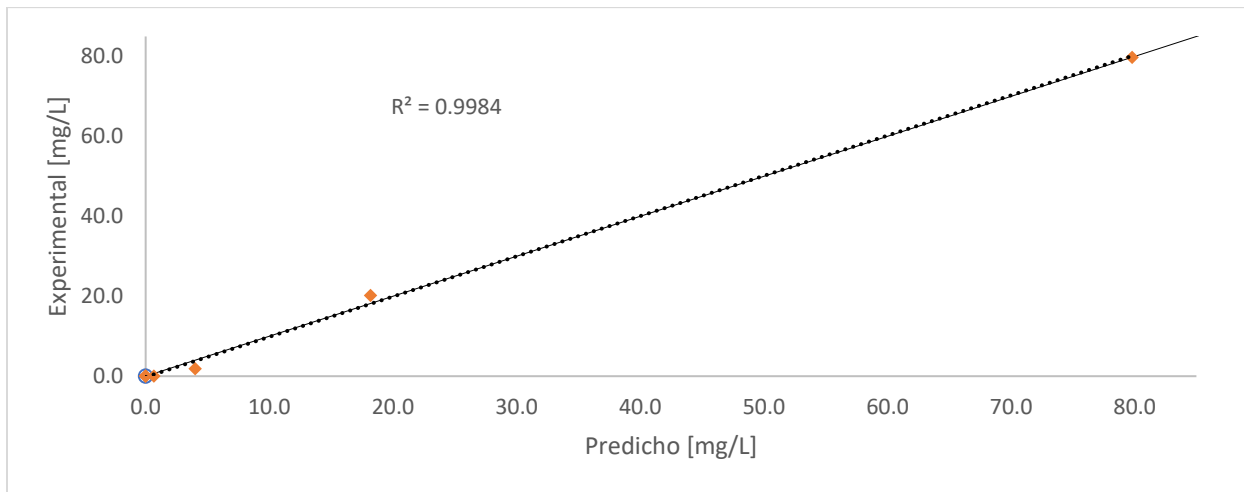


Figura 42. Valores experimentales y valores predichos para Nitrógeno Amoniacal en lote 1.

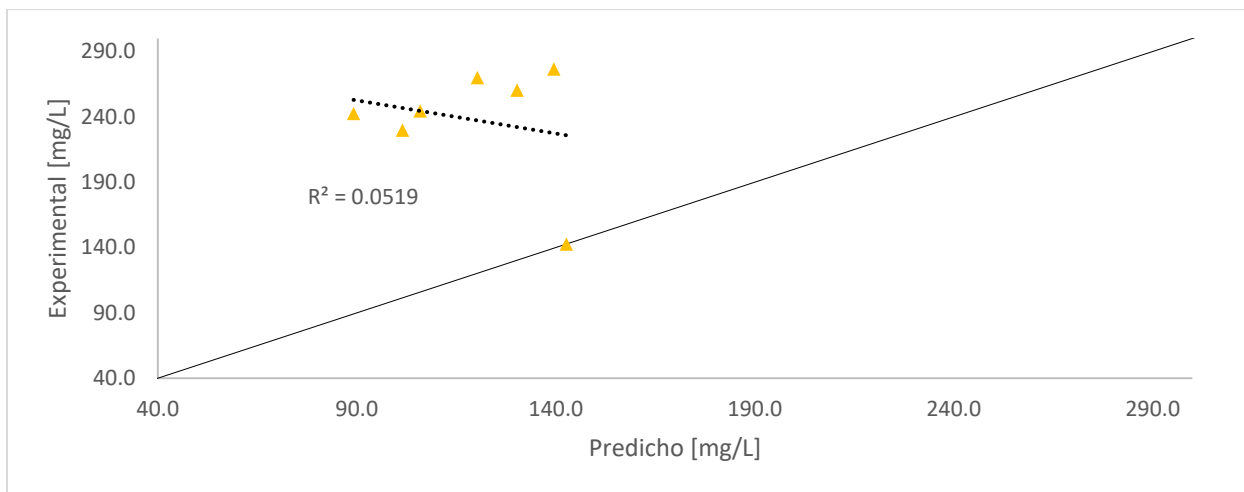


Figura 43. Valores experimentales y valores predichos para Nitratos en lote 1.

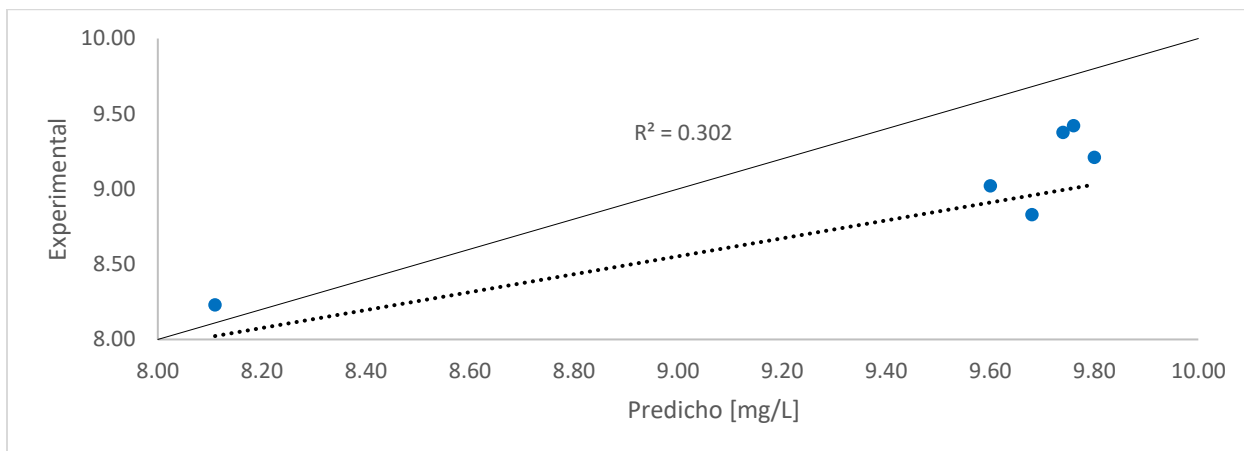


Figura 44. Valores experimentales y valores predichos para pH en lote 1.

Lote 2:

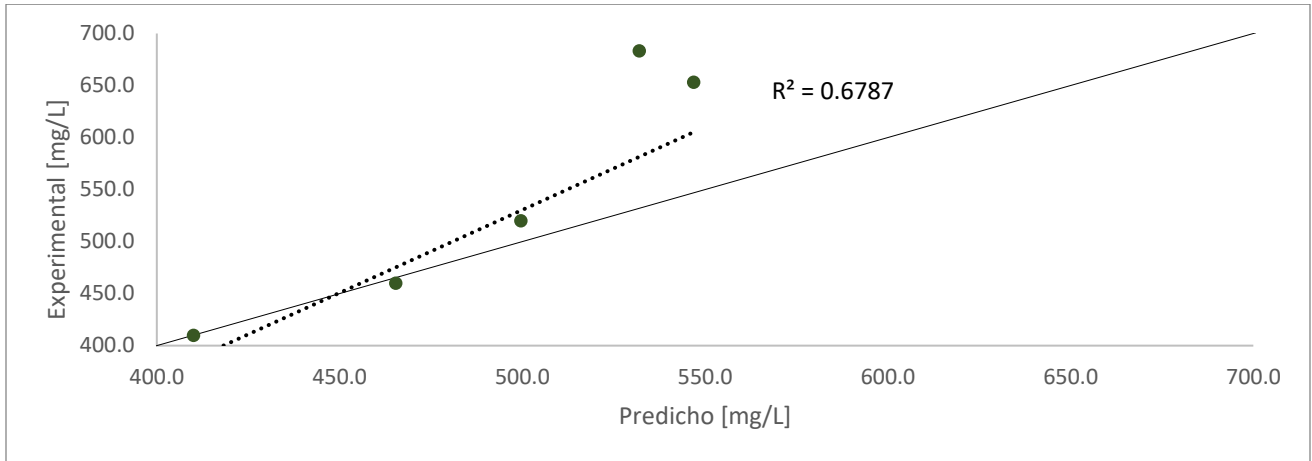


Figura 45. Valores experimentales y valores predichos para Biomasa en lote 2,

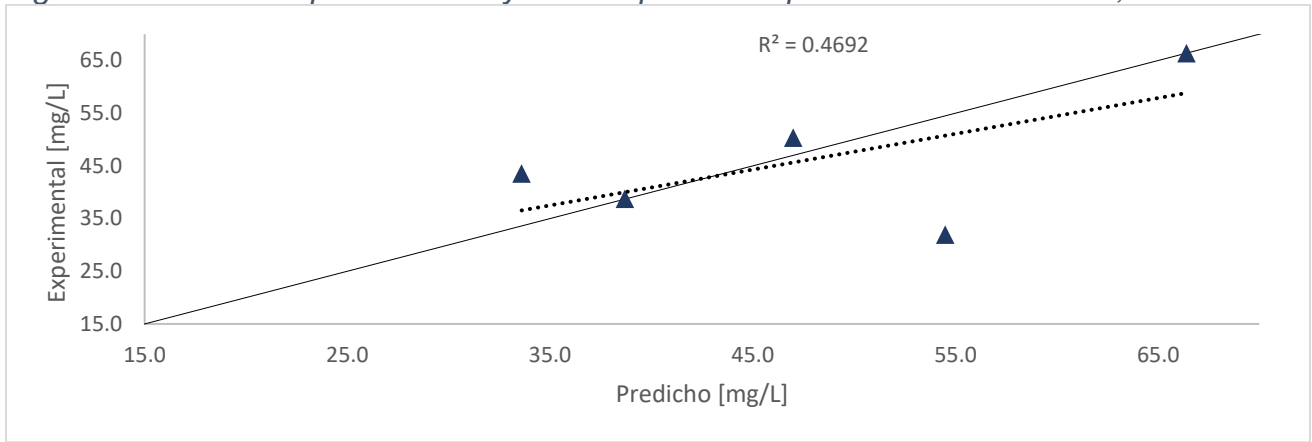


Figura 46. Valores experimentales y valores predichos para Ortofosfatos en lote 2.

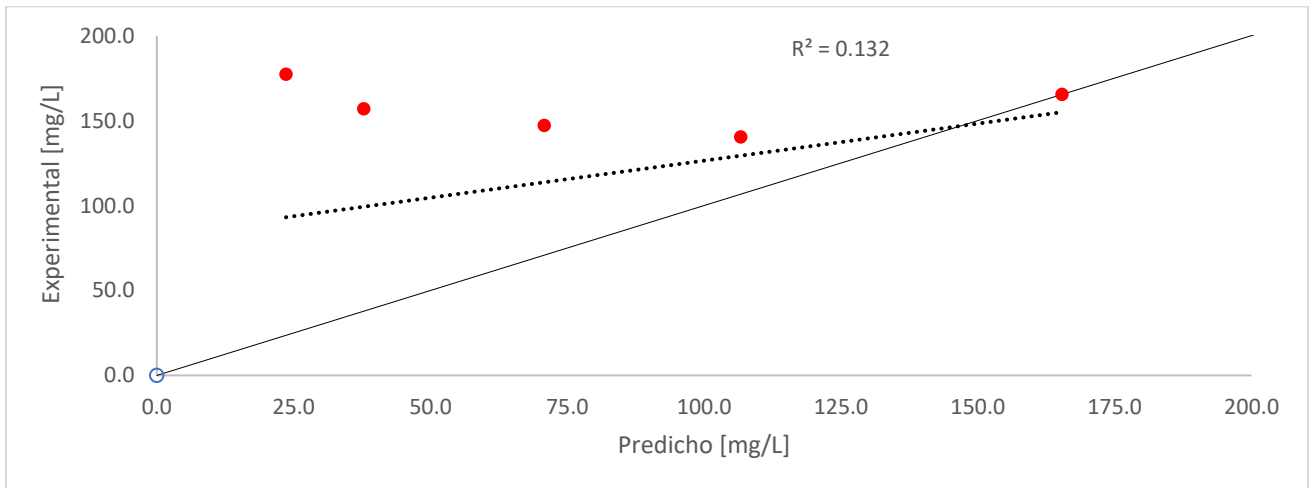


Figura 47. Valores experimentales y valores predichos para Alcalinidad en lote 2.

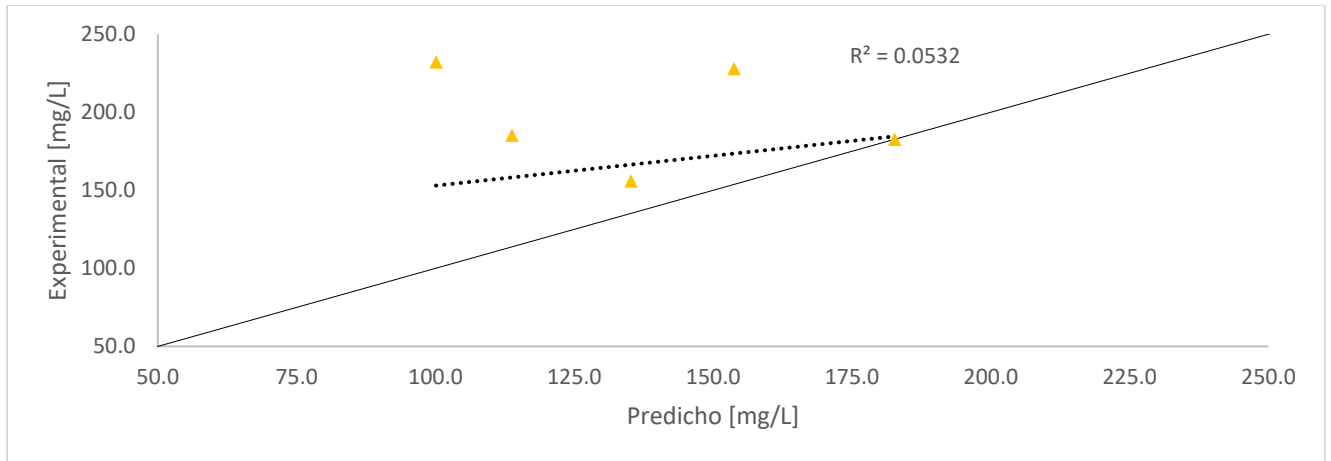


Figura 48. Valores experimentales y valores predichos para Nitratos en lote 2.

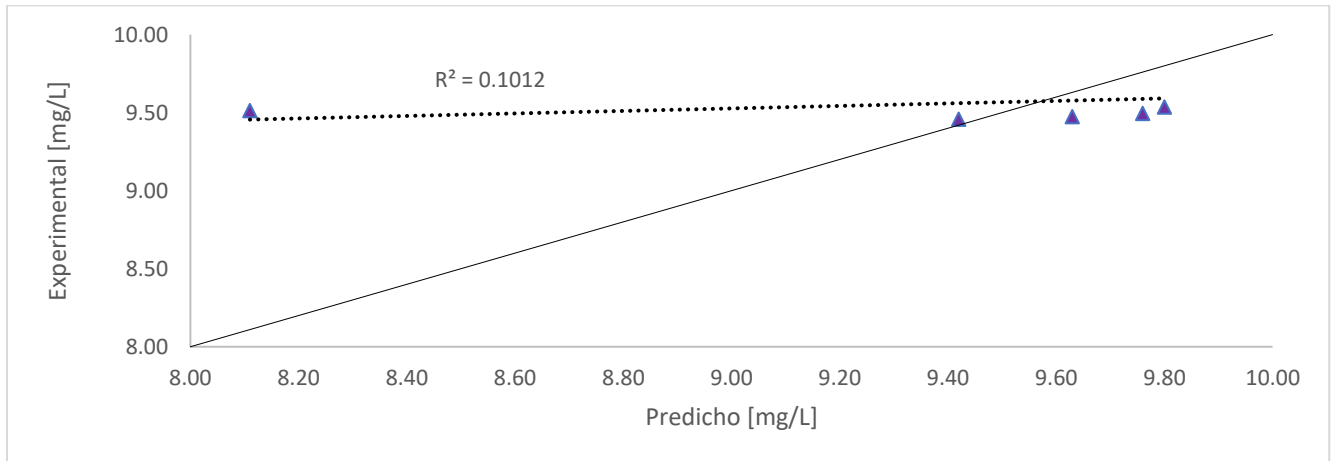


Figura 49. Valores experimentales y valores predichos para pH en lote 2.

Lote 3:

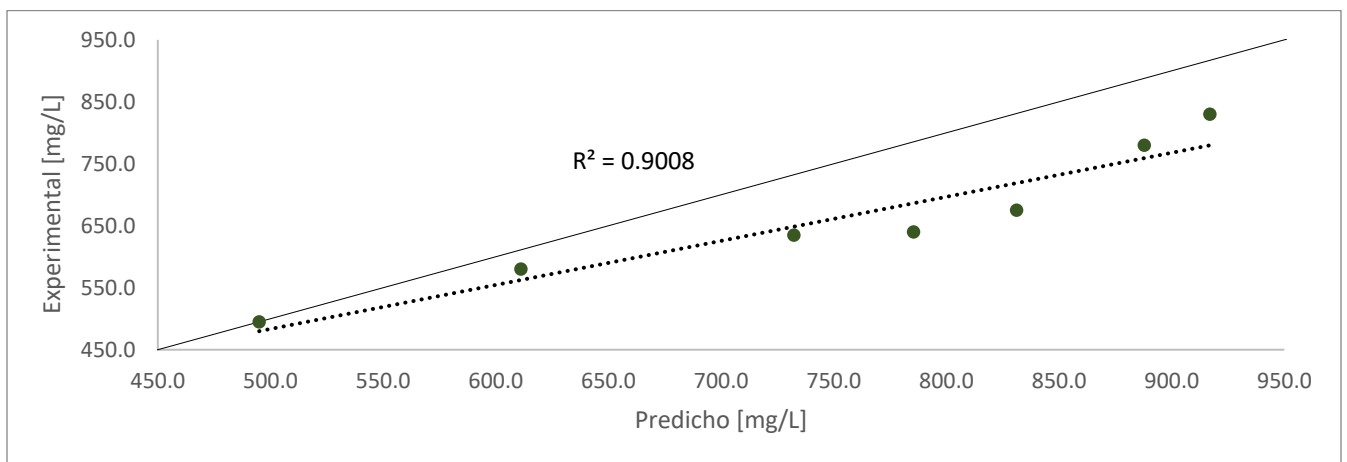


Figura 50. Valores experimentales y valores predichos para Biomasa en lote 3.

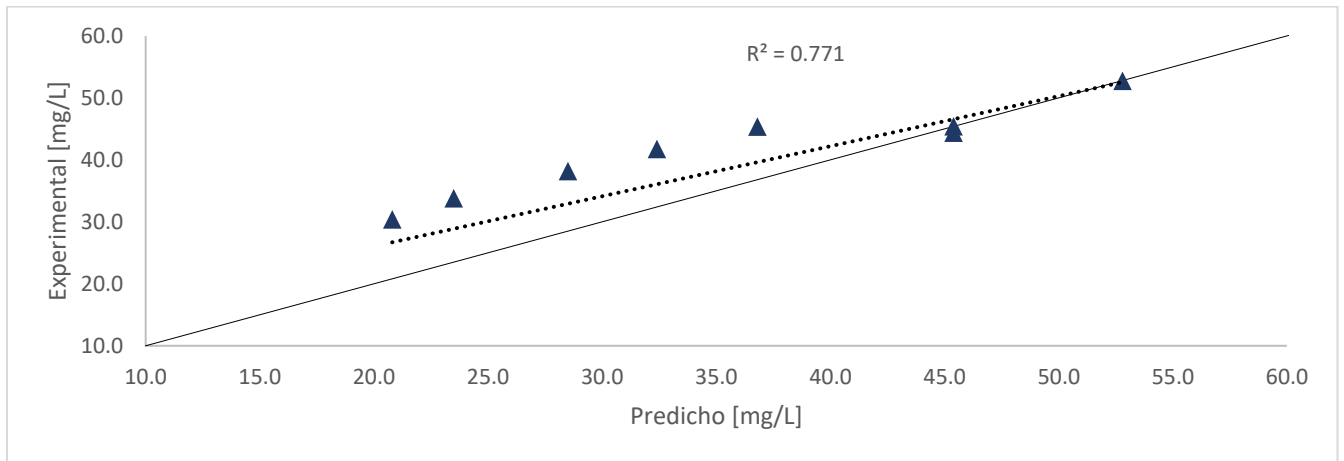


Figura 51. Valores experimentales y valores predichos para Ortofosfatos en lote 3.

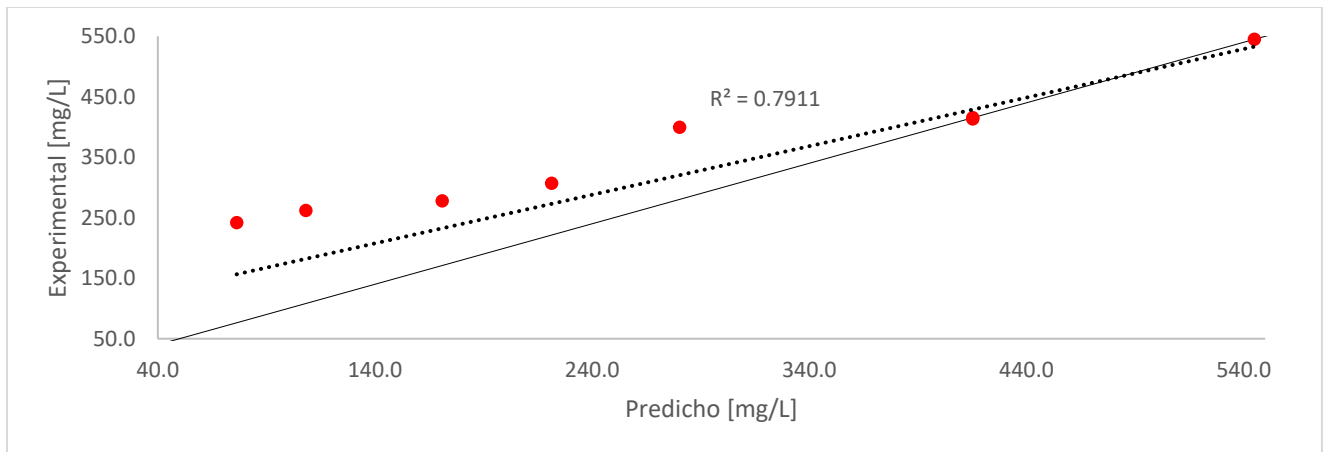


Figura 52. Valores experimentales y valores predichos para Alcalinidad en lote 3.

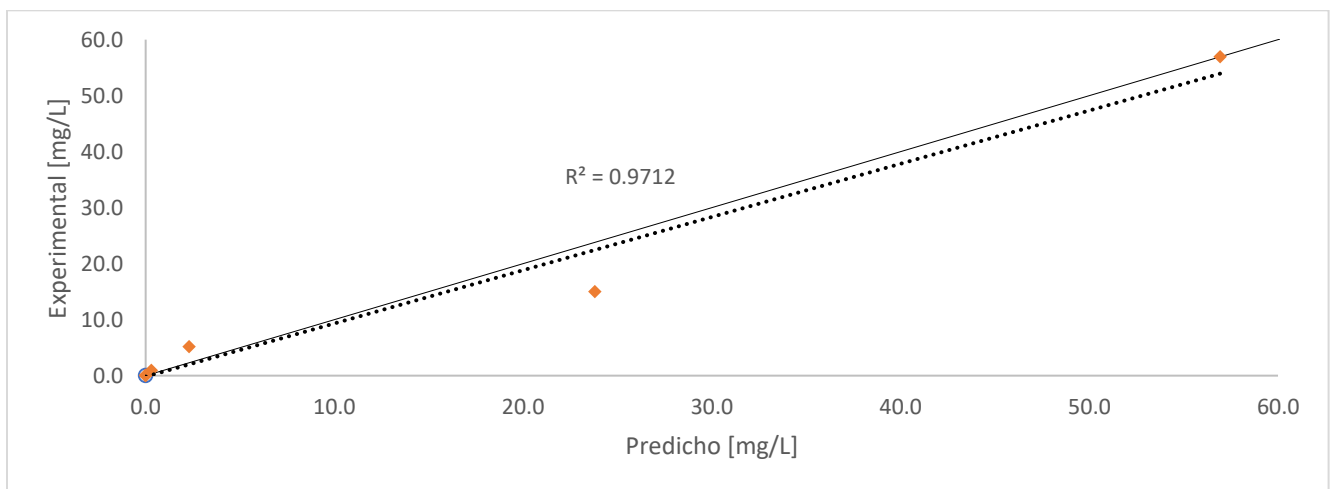


Figura 53. Valores experimentales y valores predichos para Nitrógeno Amoniacal en lote 3.

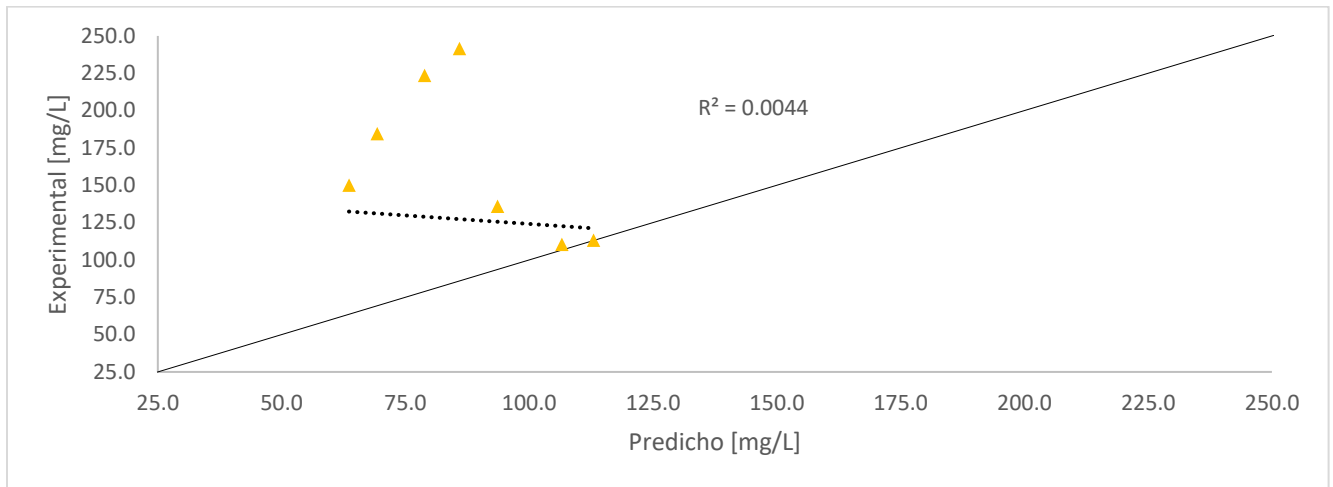


Figura 54. Valores experimentales y valores predichos para Nitratos en lote 3.

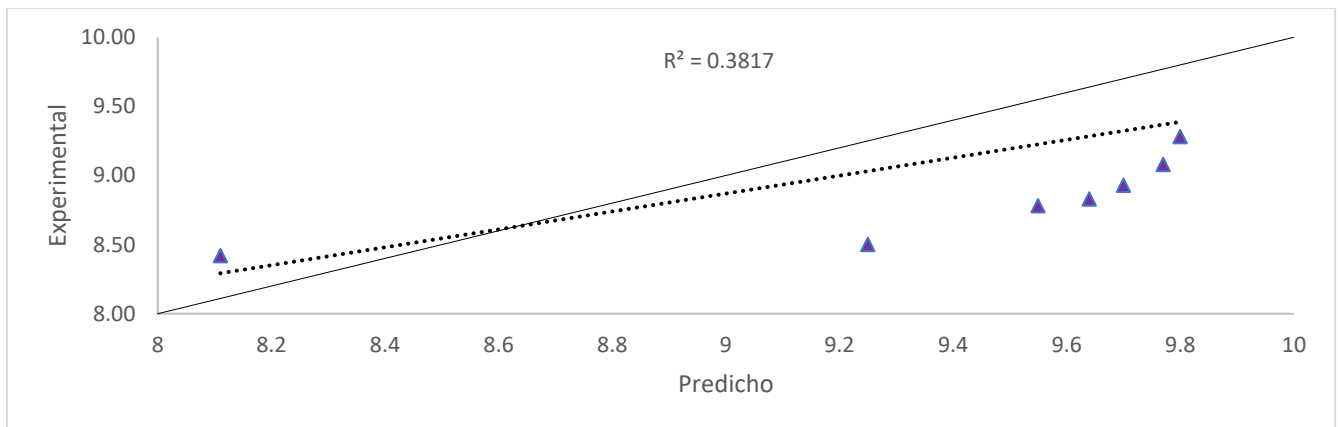


Figura 55. Valores experimentales y valores predichos para pH en lote 3.

Lote 4:

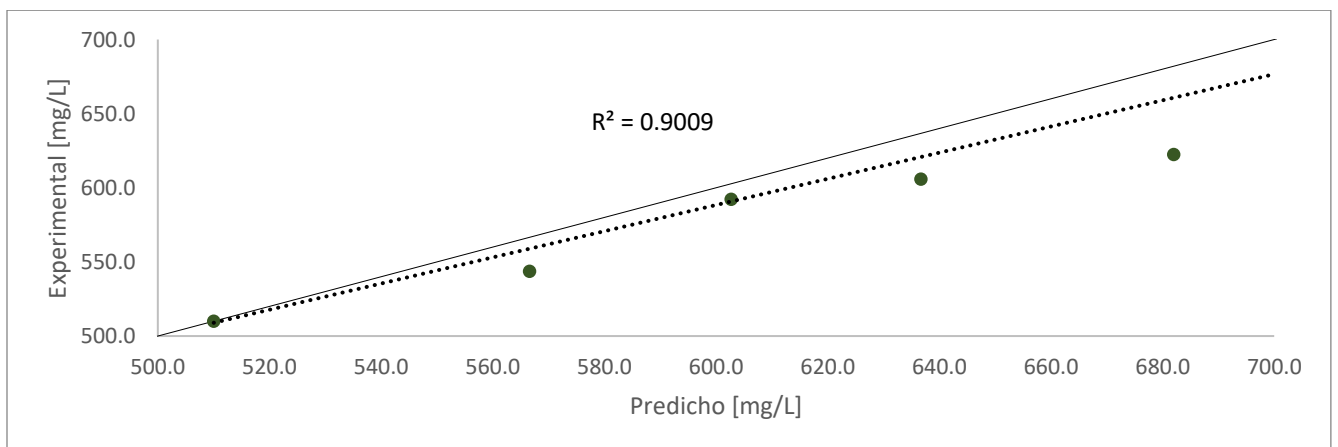


Figura 56. Valores experimentales y valores predichos para Biomasa en lote 4.

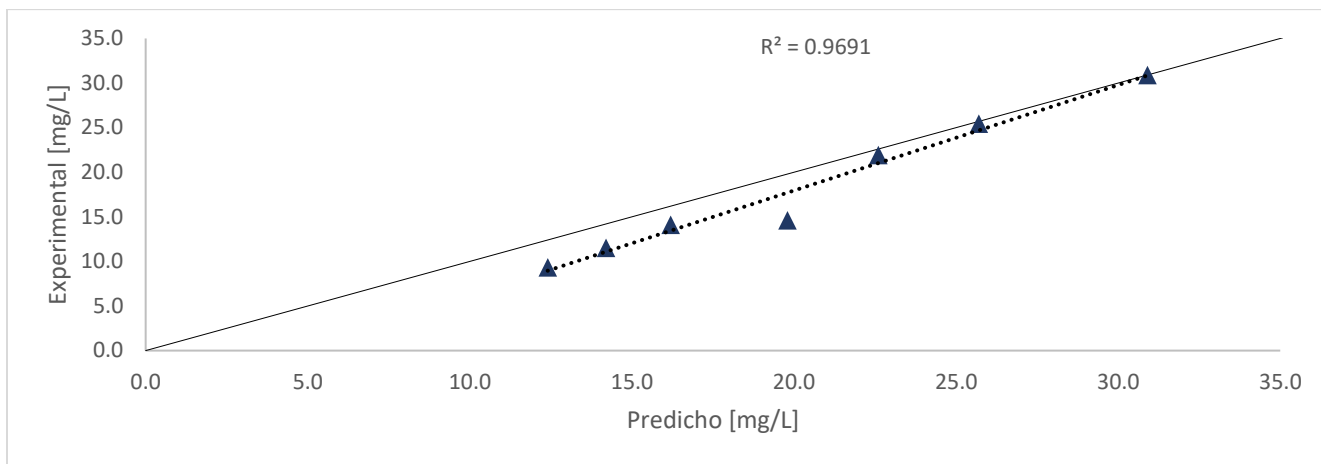


Figura 57. Valores experimentales y valores predichos para Ortofosfatos en lote 4.

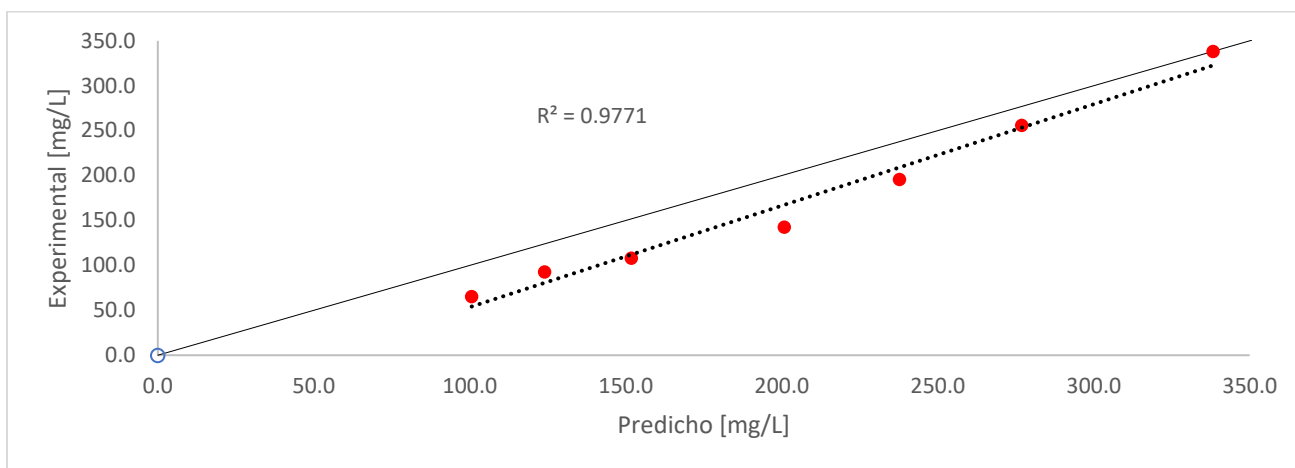


Figura 58. Valores experimentales y valores predichos para Alcalinidad en lote 4.

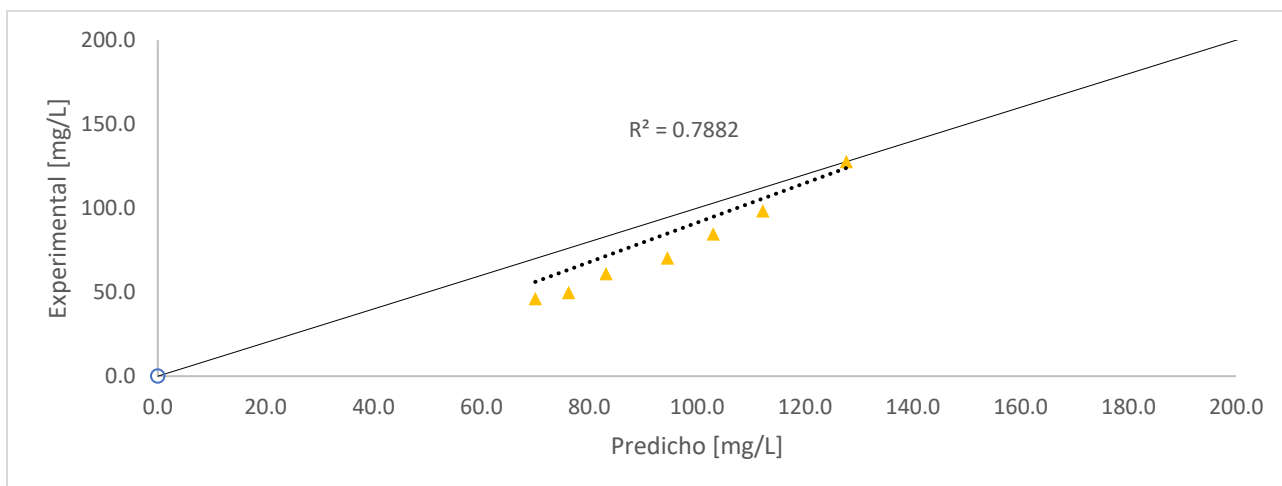


Figura 59. Valores experimentales y valores predichos para Nitratos en lote 4.

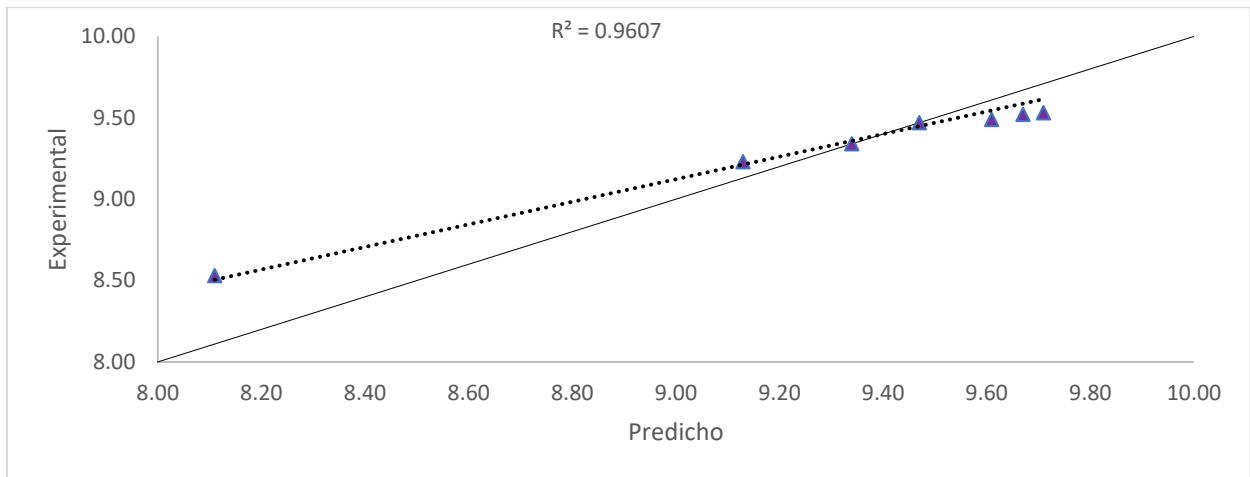


Figura 60. Valores experimentales y valores predichos para pH en lote 4.

Lote 5:

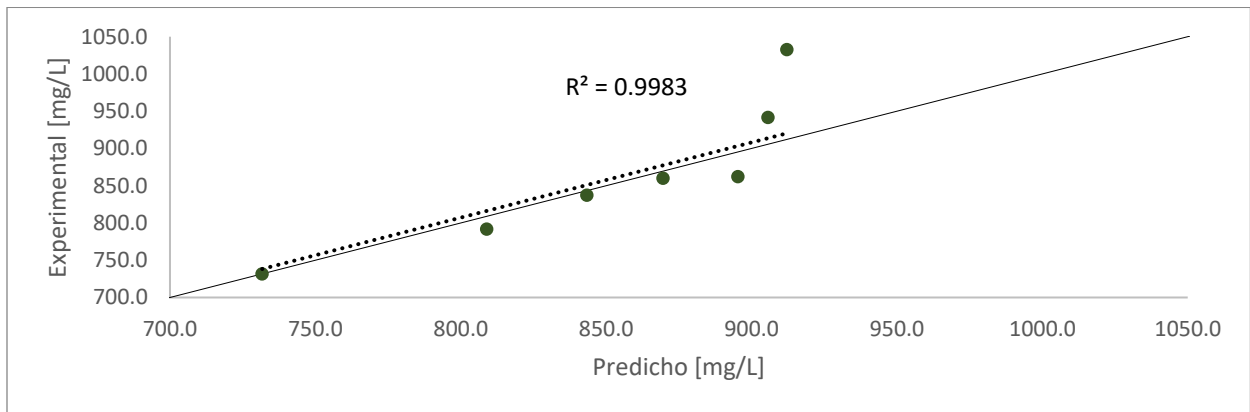


Figura 61. Valores experimentales y valores predichos para Biomasa en lote 5.

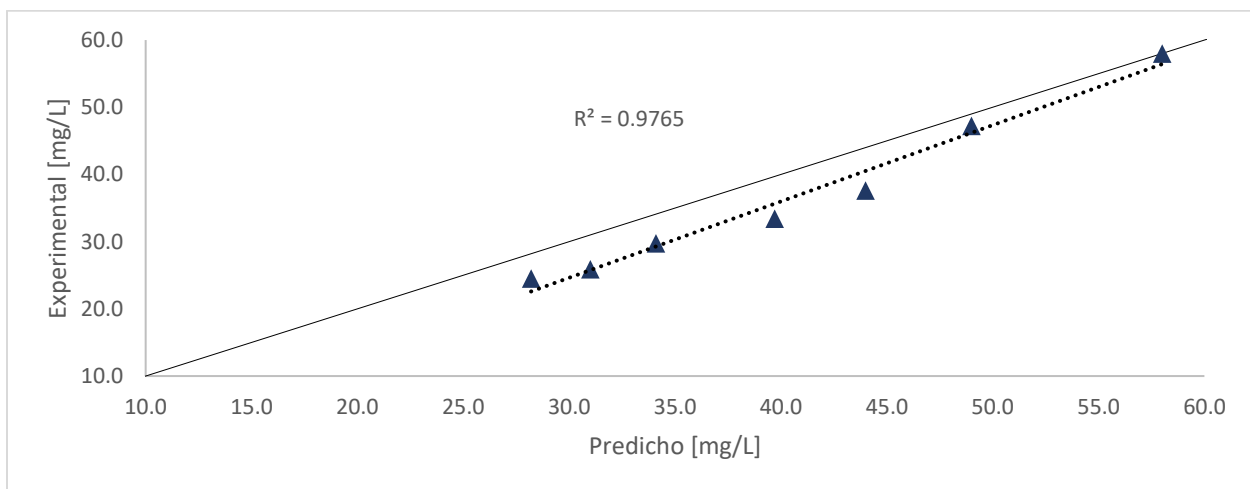


Figura 62. Valores experimentales y valores predichos para Ortofosfatos en lote 5.

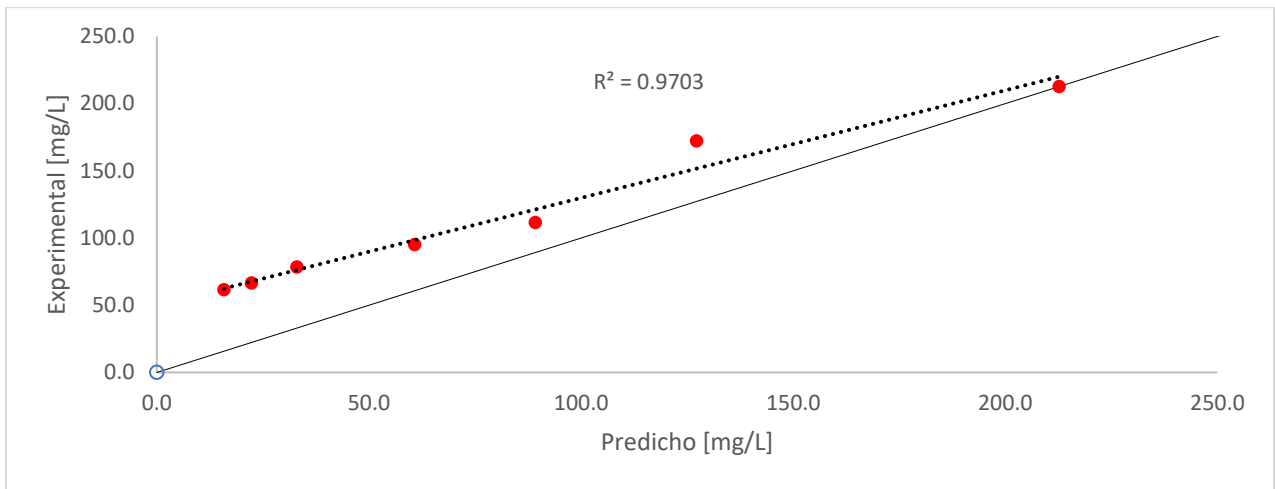


Figura 63. Valores experimentales y valores predichos para Alcalinidad en lote 5.

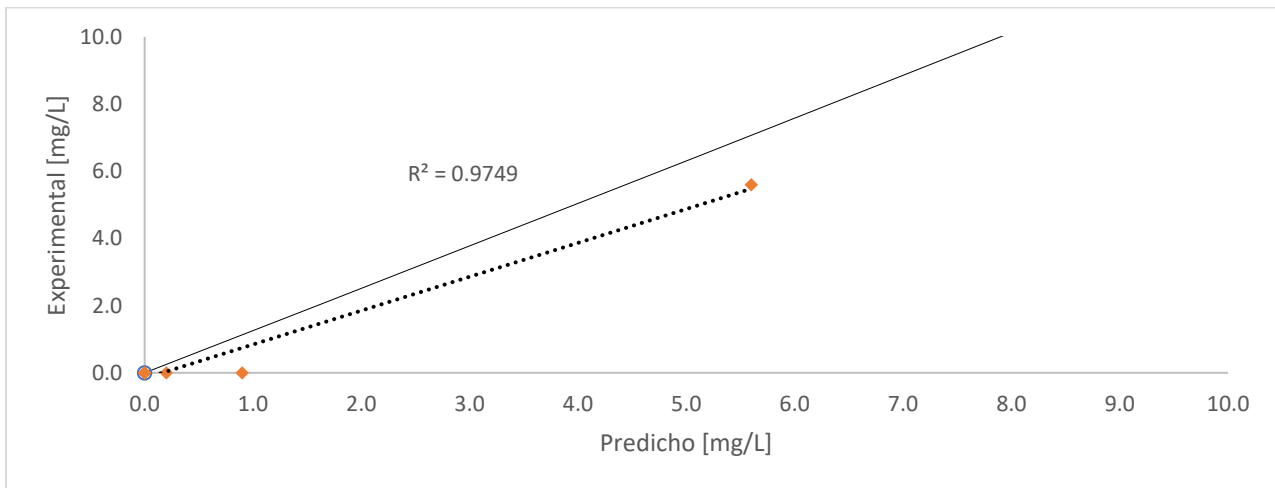


Figura 64. Valores experimentales y valores predichos para Nitrógeno Amoniacal en lote 5.

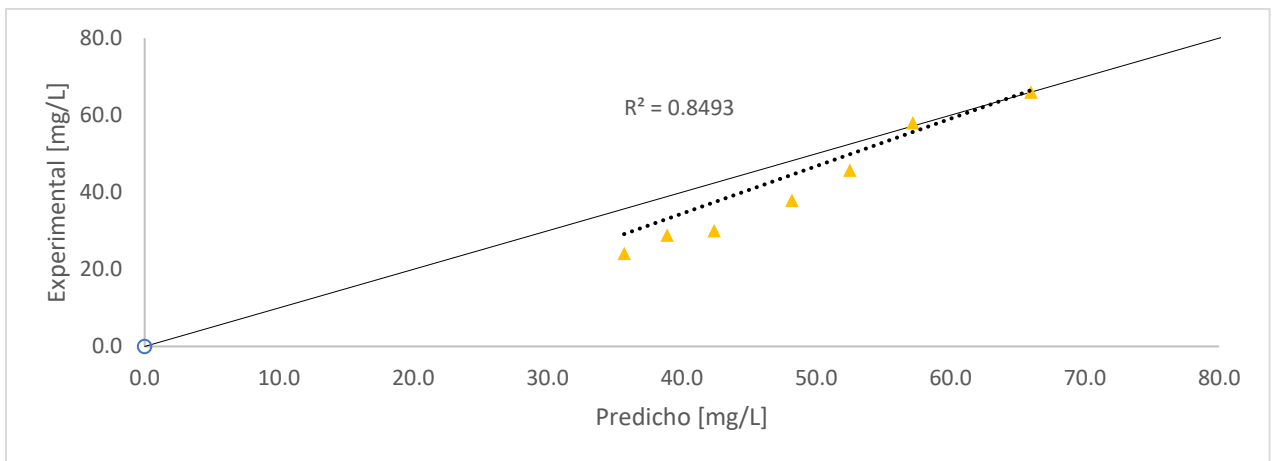


Figura 65. Valores experimentales y valores predichos para Nitratos en lote 5.

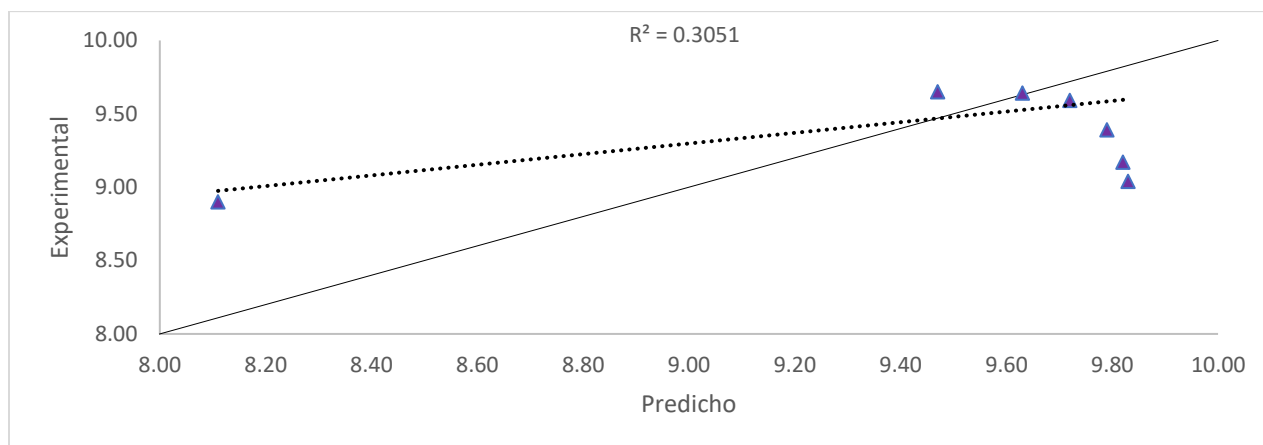


Figura 66. Valores experimentales y valores predichos para pH en lote 5.

La precisión entre los datos experimentales y las predicciones del modelo están descritos en la Tabla 14:

Tabla 14. Precisión de predicciones del modelo después de recalibración.

	Lote 1	Lote 2	Lote 3	Lote 4	Lote 5	Promedio
Biomasa	98.7%	67.9%	90.1%	90.1%	99.8%	89.3%
HPO ₄ ²⁻	74.1%	46.9%	77.1%	96.9%	97.7%	78.5%
C	85.1%	12.2%	79.1%	97.7%	97.0%	74.2%
NH ₄ ⁺	99.8%	-	97.1%	-	97.5%	98.1%
NO ₃ ⁻	5.2%	5.3%	0.4%	78.8%	84.9%	34.9%
pH	30.2%	10.1%	38.2%	96.1%	30.5%	41.0%
Fracción volumen agua residual (PTAR)	0.015	0.750	0.667	0.000	0.000	

Para la Biomasa y el Nitrógeno Amoniacal, en general, expresamente se demuestra que la cinética del modelo recalibrado es efectiva para predecir el comportamiento de éstos mismos parámetros a lo largo del tiempo de cultivo con una precisión de 89.3% y 98.1%, respectivamente.

Mientras que, en los últimos lotes (4 y 5) para Ortofosfatos y Alcalinidad, la precisión del modelo ajusta los datos experimentales (>96%) y en los primeros tres lotes no. Esto último se puede deber a que el cambio en la composición poblacional en el consorcio, derivado de que esos lotes estuvieron alimentados con agua proveniente del efluente de la PTAR, promoviera diferentes tasas de consumo de especies fósforo y carbono inorgánico.

En el caso particular de los Nitratos, el lote 1 al 3, presenta muy baja precisión (menor a 6%), pero al igual que Ortofosfatos y Alcalinidad, los dos últimos lotes restantes, presentó un mayor reajuste. Esto es porque en los primeros lotes, posiblemente existieron otras fuentes de nitrógeno además de nitratos y amonio como nitrógeno orgánico, que hicieron fluctuar con desviaciones elevadas las predicciones del modelo; que, a diferencia de los dos últimos lotes, dónde fue escasa la presencia de otras fuentes de nitrógeno porque justamente esos lotes no fueron preparados con agua proveniente del efluente de la PTAR.

Y por último el pH, fue el que más variabilidad tuvo en los porcentajes de precisión, siendo el del lote 4, el más alto con 96.1% contrastando con el 10.1% del lote 2. Las causas pueden estar fuertemente relacionadas con la fracción de agua residual del efluente con el que se alimentó; es decir, al alimentar con el agua del efluente, llegan numerosas especies de bacterias y que una mayor proporción de estas bacterias producirá más CO₂ haciendo que el pH no suba cómo lo predicho por el modelo.

En adición, en la tabla 14 se muestra en la última fila los porcentajes de la fracción de agua residual (AR) proveniente del efluente de la PTAR, y se observa que entre menor sea la proporción de agua residual, los porcentajes de precisión son pequeños comparados con lo que fueron exclusivamente montados con agua residual sintética. El lote 2 y 3 fueron los que más imprecisión presentaron a diferencia del resto; esto es por la composición del agua de cultivo, ya que tuvieron mayor proporción de agua residual (75% y 65%, respectivamente), a diferencia de los lotes 4 y 5 (0%), que fue en su totalidad agua residual sintética, y que en esos lotes presentaron los porcentajes de precisión más altos. En la figura 67, a lo anterior mencionado, se puede observar que las barras color naranja y amarillo (lote 2 y 3, respectivamente) tienen los tamaños de barra más pequeños (los de menor precisión) que el resto de las demás, correspondientes a los otros lotes restantes. Esta variación se debe a la carga orgánica que presenta el agua residual del efluente; es decir, que hay mucha carga bacteriana.

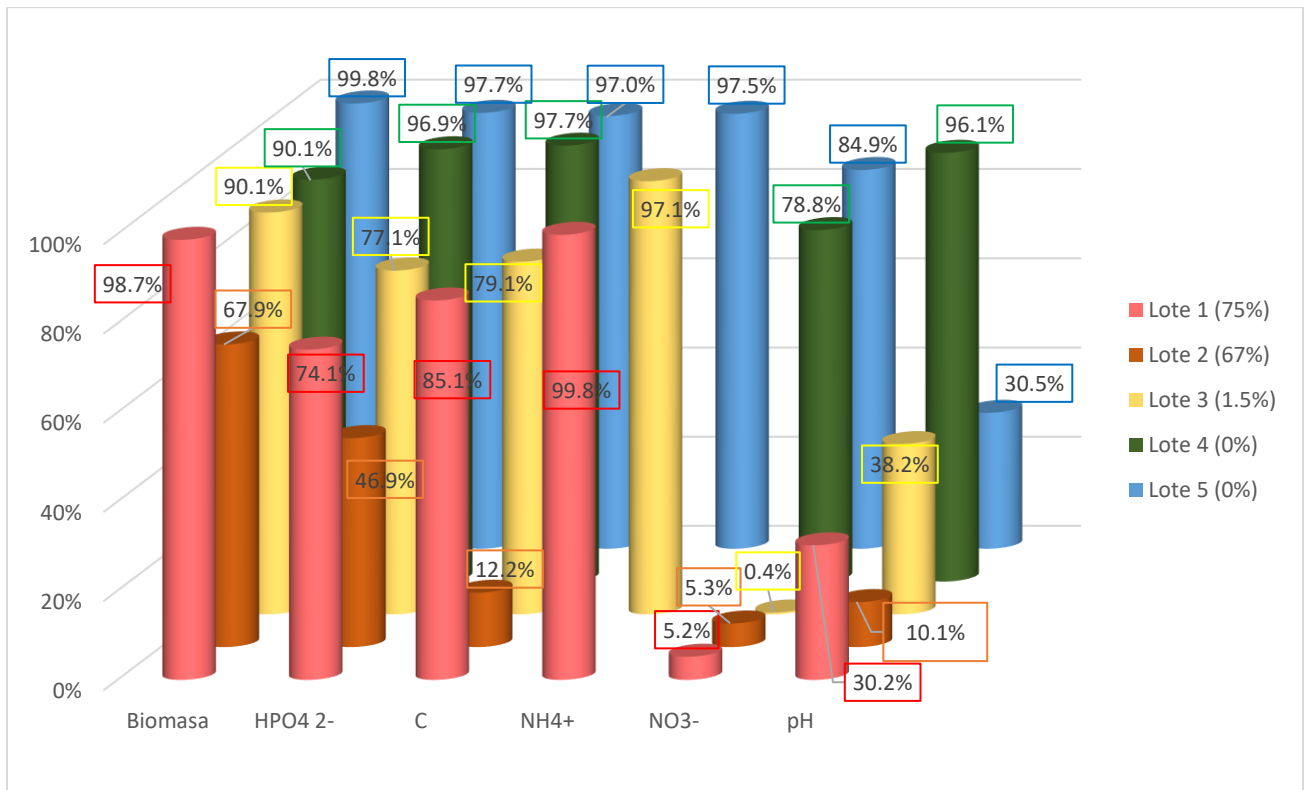


Figura 67. Relación entre porcentajes de precisión del modelo para los diferentes parámetros.

7.3.1 Comparación entre las medias de la raíz de errores cuadráticos antes y después de recalibración.

En la Tabla 15, los valores marcados en verde son los errores cuadráticos medios que disminuyeron su valor cuando se realizó la recalibración de las constantes cinéticas. Esto es deseable, ya que un valor cercano a cero (menor incertidumbre y desviación), indica una mejor precisión del modelo que se está validando. Los marcados en azul, el valor del error hubo un aumento ligero y no significativo, es decir que después de la recalibración perdió muy poca precisión y se conserva un mismo rango de error aceptable. Por otro lado, las celdas marcadas con amarillo indican que también aumentaron su valor de error cuadrático y perdieron precisión como las anteriores de color azul, pero este aumento en el valor si afectó más significativamente. Y finalmente, hay una celda marcada en rojo, en el que la recalibración aumentó muy significativamente su precisión.

Tabla 15. Media de la raíz de errores cuadráticos (RMSE) antes y después de recalibración para cada parámetro de cada lote.

Parámetro [mg/L]	Promedio		Lote 1		Lote 2		Lote 3		Lote 4		Lote 5	
	A	D	A	D	A	D	A	D	A	D	A	D
Biomasa	70.5	56.7	70.1	10.0	119.6	83.3	44.5	103.6	18.6	36.8	99.5	49.9
HPO ₄ ²⁻	11.0	6.7	12.9	7.1	16.8	11.1	15.7	8.1	3.3	2.6	6.5	4.5
C	78.2	65.6	37.5	49.5	116.9	94.6	148.9	109.5	24.7	37.2	63.2	37.4
NH ₄ ⁺	4.2	1.6	7.5	1.1	-	-	5.0	3.5	-	-	0.0	0.3
NO ₃ ⁻	82.7	66.5	168.2	129.6	110.8	75.6	121.9	98.3	6.8	20.2	5.6	8.7
pH*	0.62	0.58	0.90	0.84	0.70	0.65	0.70	0.68	0.30	0.19	0.50	0.52

*adimensional. A = antes recalibración, D = después recalibración.

7.4 Remoción y Productividad

En la Tabla 16 se reporta cada uno de las productividades de biomasa y las remociones de nitrógeno, fósforo y carbono. Para el cálculo de remoción, se tomó el dato experimental del último día y se compara con el dato del día de mayor concentración, dividido entre el número de diferencia entre esos días con la siguiente ecuación:

$$(15) \quad \%R = \frac{\text{Conc. final} - \text{Conc. máxima}}{\Delta \text{días}} * 100$$

Mientras que, para productividad, se compara la concentración inicial y final y se divide entre el número de días de cultivo, en este caso, todos los lotes fueron de 14 días:

$$(16) \quad Prod = \frac{\text{Conc. final biomasa} - \text{Conc. inicial biomasa}}{14}$$

También en la Tabla 16 se etiqueta con colores dónde una celda de verde representa una excelente remoción o productividad, mientras que los de tono verde más claro representan un nivel bueno, después los amarillos que representan un nivel regular y finalmente los colores rojos, que son de niveles bajos.

Tabla 16. Remoción y Productividad.

lote	Remoción (mg L ⁻¹ d ⁻¹)				Productividad (mg L ⁻¹ d ⁻¹)
	HPO ₄ ²⁻	C	NH ₄ ⁺	NO ₃ ⁻	
1	1.9	16.7	11.4	3.1	16.7
2	1.6	-	-	6.1	12.4
3	1.6	21.7	6.3	13.4	23.9
4	1.5	19.2	-	5.6	16.1
5	2.3	10.5	1.9	2.9	26.0

*En las celdas sin cifras, significa que no hubo remoción verdadera.

Para el nitrógeno amoniacal, las remociones fueron desde 1.9 hasta 11.4 mg L⁻¹ d⁻¹. En el lote 2 y 4 no presentaron remoción, esto porque ese lote se inoculó con agua residual sin nitrógeno amoniacal y fue complementado con nitratos como fuente de nitrógeno. De acuerdo con Eze, *et al* (2018), reportaron remoción de 4.3 mg L⁻¹ d⁻¹ y de acuerdo con Hernández-García (2017), hubo remoción de entre 2.8 y 2.6 mg L⁻¹ d⁻¹ en cultivos con especies de *Scenedesmus* y *Desmodesmus*; por lo que, los valores de remoción de este estudio son consistentes y entran en el rango de remoción reportado. También entre mayor sea la concentración inicial de nitrógeno amoniacal, mayor la remoción; esto se debe principalmente a la volatilización del amoníaco cuando aumenta el pH del medio.

En el caso de fósforo, los valores reportados en este estudio fueron de 1.5 hasta 2.3 mg L⁻¹ d⁻¹, mientras que los reportados por Hernández-García (2017) fueron 0.41 y 0.43 mg L⁻¹ d⁻¹ y de Eze, *et al* (2018) fue de 0.28 mg L⁻¹ d⁻¹. Los valores obtenidos en este trabajo son considerablemente mayores con respecto a los trabajos de años anteriores, por lo que es convenientemente deseable para generar un agua con mejor calidad. Este cambio importante en los valores se debe muy fuertemente al cambio poblacional en el consorcio, ya que no solo existen microalgas, sino contiene otros géneros de microorganismos como pueden ser bacterias presentes en el agua residual que coexisten con microalgas. Además, los valores de pH registrados en los lotes de este trabajo son mayores a los trabajos de Eze y Hernández-García, favoreciendo más la precipitación de fósforo y teniendo mejores remociones.

Para la alcalinidad, los valores fueron desde 10.5 hasta 21.7 mg L⁻¹ d⁻¹; sin embargo, en el lote 2 no hubo como tal remoción, puesto que, en los resultados experimentales, se presentó

un aumento inhabitual y un cambio en la tendencia en los valores de alcalinidad al final del lote.

En cuanto a los nitratos, está presente el fenómeno de la nitrificación que transforma un porcentaje del amonio en nitrito seguido de nitratos y lo que explica el aumento de nitratos a lo largo del tiempo de cultivo. Cuando se consume totalmente el nitrógeno amoniacal, empieza un mayor consumo de nitratos. Según Barlandas-Calderón (2018), durante el monitoreo de nitratos; en la puesta en marcha del reactor, reporta un comportamiento similar al de este trabajo. Es decir, al inicio del tiempo de cultivo, aumenta hasta llegar a un punto máximo y coincide al mismo tiempo con la remoción total del nitrógeno amoniacal (0 mg/L).

En la figura 68, tomando el ejemplo anterior, en los datos del lote 3; se puede ver este efecto, precisamente en el día 7, donde la concentración de nitratos para el día 7 es de 241.5 mg/L y que es el dato más grande en todo el tiempo de cultivo y, por otro lado, la concentración de nitrógeno amoniacal para el mismo día es de 0.9 mg/L. Por lo que, el nitrato empieza a consumirse de forma más notoria cuando se empieza a disminuir el nitrógeno amoniacal. Entonces para comparar las remociones de nitratos, se toma en cuenta desde la concentración máxima hasta el último día; ya que, en ese periodo del lote, hay una remoción porque los nitratos son la única fuente de nitrógeno disponible y los fenómenos de nitrificación y volatilización de amoníaco ya no están presentes. El comportamiento anterior también es visto en los trabajos de Hernández-García (2017) y Eze, et al (2018).

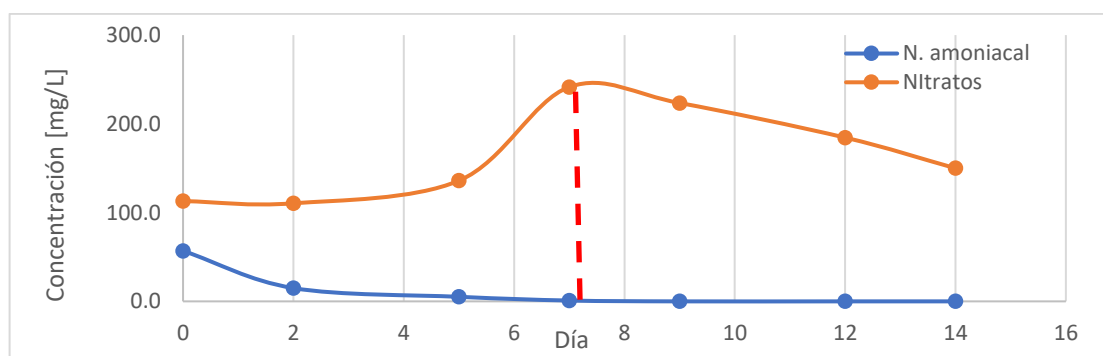


Figura 68. Variación de especies de nitrógeno en función del tiempo para un lote de cultivo de microalgas en agua residual.

Los nitratos son el sustrato más difícilmente de remover, ya que porcentualmente, sólo en el lote 4 y 5 removieron entre un 61.2% y un 61.1% con respecto a la concentración inicial; sin

embargo, en los lotes restantes, no se presentó remoción. En este trabajo, los valores de la remoción que se reportan fueron desde 2.9 hasta 13.4 mg L⁻¹ d⁻¹.

Para la productividad, encontramos un rango de 12.4 hasta 26.0 mg L⁻¹ d⁻¹, y se deben por varios factores, como la variación de nutrientes, los factores climatológicos que estimulan o inhiben el crecimiento y la carga bacteriana que existe en simbiosis con las microalgas. Según los datos reportados por Hernández-García (2017), Eze, *et al* (2018) y Barlandas-Calderón (2018) registraron productividades de entre 1.9, 10.7 y 2.8 mg L⁻¹ d⁻¹, respectivamente. Aquí se puede observar que en este estudio se obtuvieron productividades mayores a los trabajos de Hernández-García, Eze y Barlandas-Calderón, y esto se puede atribuir a un mayor control del sistema de cultivo.

7.5 Comparación de remociones con valores reportados en literatura

En esta sección los resultados experimentales y teóricos se compararon con otros trabajos de investigación dónde usaron, modelos matemáticos para el monitoreo de parámetros y su remoción, como en este trabajo.

Tabla 17. Comparativo de trabajos de modelos de crecimiento y remoción de nutrientes en microalgas cultivadas en agua residual.

Características	Especies	Nutriente	Remoción Teórica [mg / L · d]	Remoción Experimental [mg / L · d]	Autor, año
4 CSTR 1.4 L 192 hr. 25°C	<i>Scenedesmus</i>	TIC	2.98	2.92	Solimeno, 2019
		NH ₄ ⁺	0.16	0.17	
		NO ₃ ⁻	0.03	0.03	
		PO ₄ ³⁻	0.15	0.21	
Batch 2 L, 20 °C, 6 días	<i>Chlorella vulgaris</i>	TN	7.0 – 3.2	7.0 – 3.7	Ruiz <i>et al</i> , 2013
		TP	0.36 – 1.6	0.31 – 1.6	
PBR 20 L 23°C, 8 días	Algas verdes inmovilizadas	P	-	1.5	Shi <i>et al</i> , 2013
		NH ₄ ⁺		0.8	
		NO ₃ ⁻		6.3	
Batch 1.2 m3 ~25°C 14 días	<i>Scenedesmus</i> , <i>Desmodesmus</i> , Cianobacterias, etc.	HPO ₄ ²⁻	1.8 – 3.5	1.5 – 2.3	Este estudio
		NH ₄ ⁺	11.4 – 16.0	6.3 – 11.4	
		NO ₃ ⁻	3.4 – 9.5	2.9 – 13.1	
		C	11.2 – 35.9	10.5 – 21.7	

TIC: Carbono Inorgánico Total. PO₄³⁻: Ion fosfato. TN: Nitrógeno Total. TP: Fósforo Total. CSTR: Reactor Tanque Agitado. PBR: Reactor de Lecho Empacado. P: Fósforo. C: Carbono.

Se encontraron estos trabajos con la característica en común de haber sido monitoreados o simulados, en el desarrollo o validación de sus respectivos modelos matemáticos.

En la figura 69, se puede observar ilustrativamente, los diferentes valores remoción experimentales de cuatro trabajos experimentales (incluido este trabajo) descritos en la tabla 17.

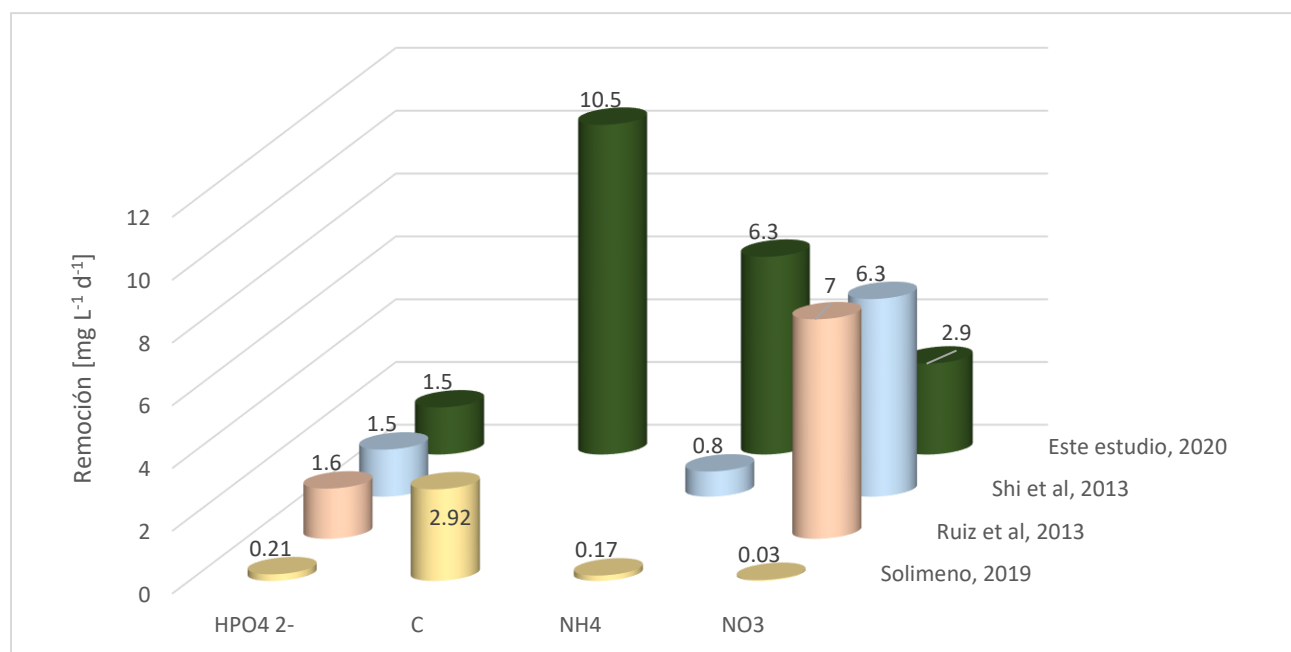


Figura 69. Comparativa entre las remociones experimentales de este trabajo y de otros experimentos.

En el parámetro de fósforo, los valores de remoción de este estudio entran en el rango, e inclusive lo supera, es decir que es más eficiente que los restantes estudios.

Para el caso del carbono, la remoción obtenida es este trabajo es casi 3.6 veces más eficiente que la presentada por Solimeno (2019).

Para el nitrógeno amoniacal, de igual manera, en este estudio notoriamente se remueve mucho más rápido que los otros reportados. Por otro lado, en caso de nitratos, nuestras remociones fueron de 2.9 mg / L d la más mínima y 13.1 la máxima, por lo que las remociones están dentro del rango en el que reportan los demás estudios.

7.6 Comparación de productividades con valores reportados en literatura

En esta sección los resultados experimentales y teóricos se compararon con otros trabajos de investigación dónde usaron, modelos matemáticos para el monitoreo de parámetros y productividades, como en este trabajo, descritos en la Tabla 18:

Tabla 18. Comparativo de productividades experimentales para trabajos con condiciones de operación por lote (Batch) y especies de microalgas anteriormente trabajadas.

Características	Especies	Productividad (mg/L-d)	Autor, año
Batch 2 L, 6 días	<i>Chlorella vulgaris</i>	100	Ruiz et al, 2013
Batch 0.1 L, 14 días	<i>Desmodesmus</i>	19.0 – 29.0	Ji et al, 2014
Batch 1500 L 13 días	<i>Scenedesmus</i> , <i>Chlorella</i> , etc.	220 - 50	Gouveia et al, 2016
Batch 10 L, 28 días	<i>Scenedesmus</i> , <i>Desmodesmus</i>	23.0 – 19.0	Hernández-García, 2017
Batch 21 días	<i>Chlorella</i> , <i>Scenedesmus</i>	50 - 27	Mohammadi et al, 2018
Batch 0.1 L, 10 días	<i>Chlorella</i> <i>Scenedesmus</i>	18 - 59	Lasmone, 2018
Batch, 1200 L 14 días	<i>Scenedesmus</i> , <i>Desmodesmus</i> , etc.	12.4 – 26.0	Este estudio

En la figura 70 se comparan los datos experimentales reportados de la tabla 18, mostrando que los valores determinados de este estudio son relativamente pequeños comparados con los reportados en otros estudios, pero todavía dentro del rango de valores reportados.

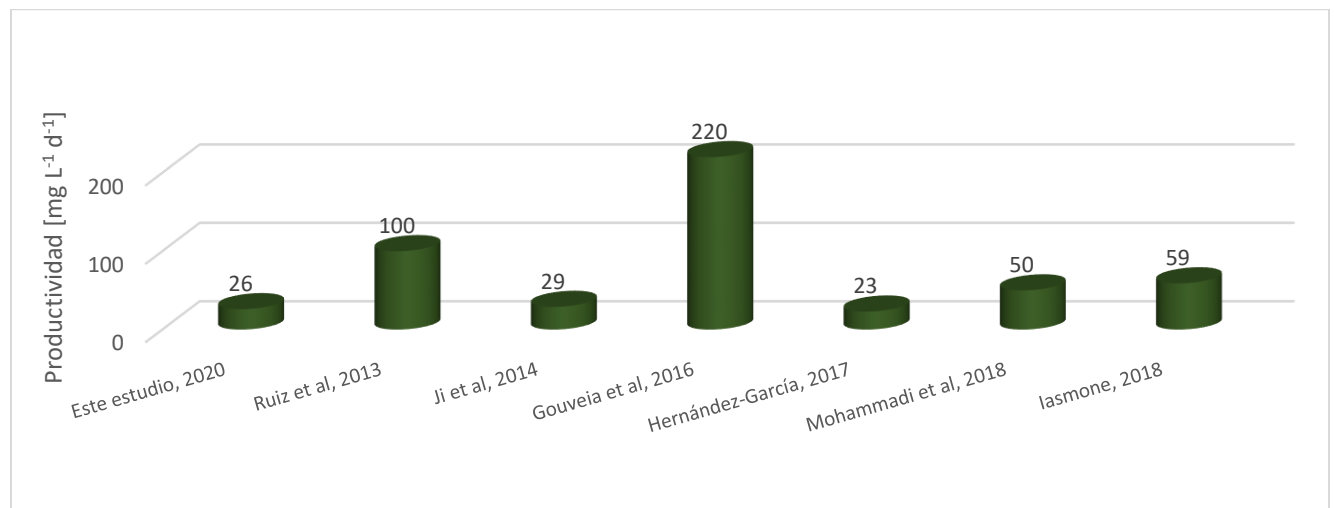


Figura 70. Comparativa entre las productividades experimentales de este estudio y otros experimentos.

7.7 Consideraciones del escalamiento a Planta Piloto

Este trabajo de validación fue principalmente promovido por dos importantes factores. Primero, la calidad del agua del efluente de la PTAR de la FCPyS dentro de Ciudad Universitaria varían; es decir, que los niveles de carga bacteriana así como la concentración de las especies de P, C y N varían a lo largo del año escolar (depende mucho cuando es periodo vacacional o periodo regular de clases); es por eso que se optó por preparar un medio de cultivo modificado que asemejen las condiciones de un agua tratada promedio y que las concentraciones de las especies fisicoquímicas se encuentren dentro de un rango promedio; es decir, que se formuló, para este trabajo, una agua residual sintética. Esto se hizo, debido a que las altas concentraciones de fósforo (entre 40 y hasta 80 mg/L) y las bajas concentraciones de nitrógeno amoniacal (menores a 80 mg/L) que el agua del efluente tenía, perjudicaban la productividad y calidad de la biomasa.

Y el segundo factor consiste en el escalamiento de un nivel laboratorio a un nivel piloto. Dado que el modelo fue calibrado primeramente para un cultivo con especies de *Scenedesmus obliquus*, *Desmodesmus intermedius*, *Desmodesmus opoliensis*, *Desmodesmus magnus* y *Desmodesmus communis*; la predominancia mayoritaria fue de microalgas. Al momento de su escalamiento, este consorcio microalgal fue inoculado en el reactor, y cuya exposición al entorno (específicamente a la Reserva Ecológica del Pedregal de San Ángel), ha favorecido la proliferación de otras especies de microalgales y cianobacterias (géneros *Oscillatoria*, *Spirulina*, etc.), además de las bacterias provenientes del agua tratada de la PTAR de la FCPyS; y que en conjunto han formado un nuevo consorcio microalgal-bacteriano. Este nuevo consorcio trajo consigo la necesidad de recalibrar las constantes cinéticas, ya que cada especie presente tiene su propia tasa de crecimiento, de consumo y de mortalidad, y que al momento de recalibrar ya se tomaría en cuenta las tasas cinéticas de las nuevas especies para formar constantes cinéticas promedio.

8. CONCLUSIONES

Se valida la hipótesis planteada ya que los parámetros cinéticos reajustados del modelo multinutriente de Eze et al (2018) proporcionaron datos teóricos, proveniente de simulaciones en MATLAB, que son consistentemente ajustables con los datos experimentales para la predicción del crecimiento microalgal y consumo de nutrientes inorgánicos.

Se valida el modelo con una precisión mayor al 90.1% para el consorcio microalgal que contiene *Scenedesmus spp*, *Desmodesmus spp.*, *Chlorella spp.*, entre otros, cultivado con una composición de 100% de agua residual sintética en el reactor de 1.2 metros cúbicos de la Planta Piloto Atzintli. En adición, se comprobó en este trabajo que este modelo cinético multinutriente predice con más precisión a los sistemas de cultivo con biomasa del consorcio microalgal que tengan mayor proporción de agua residual sintética en su composición que la proveniente del efluente de la PTAR aledaña.

También se lograron los objetivos señalados, en el desarrollo de la base de datos experimentales que principalmente se usó para el reajuste de los parámetros cinéticos y asimismo empleado para las simulaciones con la rutina programada en MATLAB que sirvieron en la construcción de gráficas y las pruebas estadísticas que confirman la validez del modelo sobre el comportamiento de los parámetros fisicoquímicos.

Finalmente, los resultados de remoción son mucho más eficientes, principalmente para las especies de carbono y nitrógeno amoniacal, comparado con otros trabajos experimentales. Por otra parte, los resultados de productividad se encuentran dentro de los valores reportados por otros estudios.

8.1 Recomendaciones

Se propone que el modelo cinético de la producción de microalgas se complemente con las siguientes recomendaciones:

Por los hallazgos encontrados en este estudio, se sugiere que el modelo multinutriente se recalibre cuando sea escalado a volúmenes mayores como el realizado aquí, debido a que las condiciones ambientales externas influyeron en el escalamiento de laboratorio a planta piloto.

Ya que se encuentra a la intemperie, las pérdidas por evaporización del agua ocurren, y requiere una corrección de los parámetros involucrados. Asimismo, en el reactor existen variaciones de temperatura y de flujo lumínico, debido a los cambios de estación que cada año se presentan. Por último, se sugiere caracterizar todas las especies de nitrógeno como Nitrógeno Total, así se considerarán otras fuentes de nitrógeno no determinados como nitrito y nitrógeno orgánico. Y para mantener altas productividades, proponer un sistema de inyección de CO₂; serviría como fuente de carbono inorgánico, regularía el pH dentro de los rangos óptimos y garantizaría una producción más controlada.

9. BIBLIOGRAFÍA Y REFERENCIAS

- APHA, AWWA, WPCF. (1989). Métodos Normalizados para el Análisis de Aguas Potables y Residuales. Díaz de Santos.
- Aslan S. y Kapdan I.K. (2006). Batch Kinetics and phosphorus removal from synthetic wastewater by algae. *Ecological Engineering*. 28: 64-70
- Barlandas Calderón J. D. (2018). Construcción y puesta en marcha de reactor de alta tasa en planta piloto de tratamiento de agua residual con microalgas.
- Behari L., Subudhi E., Pradhan D. (2019). *The role of microalgae in wastewater treatment*. Springer. India
- Cai T., Park S. & Li Y. (2013). Nutrient recovery from wastewater streams by microalgae: Status and prospects. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 19: 360 – 369.
- Chisti, Y. (2007). Biodiesel from microalgae. *Biotechnology Advances*, 25(3), 294–306.
- CONAGUA. (2015). Estadística del Agua en México. Edición 2015.
- CONAGUA. (2019). Inventario Nacional de Plantas Municipales de Potabilización y de Tratamiento de Aguas Residuales en Operación. Diciembre 2019.
- Dalrymple, O. K., Halfhide, T., Udom, I., Gilles, B., Wolan, J., Zhang, Q., & Ergas, S. (2013). Wastewater use in algae production for generation of renewable resources: a review and preliminary results. *Aquatic Biosystems*, 9(1), 2.
- Demirbas A. & Demirbas M. (2010) *Algae Energy: Algae as a new source of biodiesel*. Springer. Londres.
- Difusa, A., Talukdar, J., Kalita, M. C., Mohanty, K., & Goud, V. V. (2015). Effect of light intensity and pH condition on the growth, biomass and lipid content of microalgae *Scenedesmus* species. *Biofuels*, 6(1-2), 37–44.
- Domínguez-Gómez, M. (2018). Optimización de un reactor hrap para la depuración de aguas residuales urbanas. Facultad de Ciencias del Mar y Ambientales. Universidad de Cádiz, España.
- EnAlgae, Voort, M.P.J. van der, Vulsteke, E., Visser, C.L.M. de. (2015). Macro-economics of algae products, Public Output report of the EnAlgae project, Swansea, June 2015, 47 pp.
- Eze V. C., Velasquez-Orta S. B., Hernández-García A., Monje-Ramírez I., Orta-Ledesma M.T. (2018). Kinetic modelling of microalgae cultivation for wastewater treatment and carbon dioxide sequestration. *Algal Research* 32 p. 131 – 141.
- FAO (Food and Agriculture Organization). (2019). Estudio del potencial del uso alternativo de fuentes de agua: las aguas residuales. Buenos Aires, Argentina
- Fuentes-Díaz, M. (2002). Serie autodidáctica de medición de la calidad del agua, segunda parte. Identificación de Sistemas Terciarios para el Tratamiento de Aguas Residuales

Vol. 9. Subdirección General de Administración del Agua (CNA). Coordinación de Tratamiento y Calidad del Agua & Instituto Mexicano de Tecnología del Agua.

GACETA UNAM, Saavedra Diana. (2018). Inauguran planta innovadora de tratamiento de agua. Recuperado de <https://www.gaceta.unam.mx/inauguran-planta-innovadora-de-tratamiento-de-agua/>. Fecha: 12 de marzo de 2020.

Gonzalez – Fernandez C., Muñoz R. (2017). Microalgae-Based Biofuels and Bioproducts from Feedstock Cultivation to End-Products. Woodhead Publishing. Elsevier.

González Gálvez O. D. (2018). Craqueo Catalítico de microalgas del lago Nabor Carrillo para la obtención de Bio-Aceite. Ciudad Universitaria, CDMX. Universidad Nacional Autónoma de México.

Gonzalez-Camejo, J., Barat, R., Paches, M., Murgui, M., Seco, A., Ferrer, J. (2018) Wastewater nutrient removal in a mixed microalgae-bacteria culture: effect of light and temperature on the microalgae-bacteria competition. Environmental technology 39 (4), 503-515.

Gouveia L. (2011). Microalgae as a Feedstock for Biofuels-Springer. Verlag Berlin Heidelberg

Gouveia L., Graca S., Sousa C., Ambrosano L., Ribeiro B., Botrel E. P. (2016). Microalgae biomass production using wastewater: treatment and costs scale-up considerations. Algal Research 16, 167-176.

HACH. (2000). Manual de Análisis de Agua. Segunda edición. HACH COMPANY.

Hernández-García, A. (2017), Efecto de las condiciones de cultivo en la composición bioquímica y producción de biomasa de un consorcio de microalgas cultivadas en agua residual y lixiviado. México.

Hernández-Pérez, A. & Labbé, J.I. (2014). Microalgas, cultivo y beneficios. Revista de Biología Marina y Oceanografía, 49(2), 157-153.

Ignacio de Godos, Zouhayr Arbib, Manuel J. Feria, Enrique Lara, Jose Ramón Santiago, Frank Rogalla, Maikel Fernández & M^a Angeles de la Rubia. (2014). Proyecto All-gas - Cultivo de microalgas con producción de biocombustibles y eliminación de nutrientes. Universidad de Cádiz.

Ji F., Liu Y., Rui H., Li G., Zhou Y. & Dong R. (2014). Biomass production and nutrients removal by a new microalgae strain *Desmodesmus* sp. in anaerobic digestion wastewater. Bioresource Technology 161, pp 200–207.

Kojima H. & Lee Y. K.(2001). Photosynthetic microorganisms in Enviromental Biotchnology. Springer-Verlag. Hong-Kong. P 310

Lasimone F., Panico A., De Felice V., Fantasma F., Iorizzi M. & Pirozzi F.(2018). Effect of light intensity and nutrients supple on microalgae cultivated in urban wastewater: biomass production, lipids accumulation and settleability characteristics. Journal of Enviromental Managment.

- Lee, Seung-Hoon, Chi-Yong Ahn, Beom-Ho Jo , Sang-Ah Lee , Ji-Yeon Park , Kwang-Guk An & Hee-Mock Oh. (2013). Increased Microalgae Growth and Nutrient Removal Using Balanced N:P Ratio in Wastewater. *Journal of Microbiology and Biotechnology* 23(1), pp 92–98.
- Levy, J. B., Hornack, F. M., & Levy, M. A. (1987). Simple determination of Henry's law constant for carbon dioxide. *Journal of Chemical Education*, 64(3), 260.
- López Rocha C. J. (2019). Obtención de un bioplástico a partir de biomasa de un consorcio microalgal cultivado en agua residual. Ciudad Universitaria, CDMX. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Martinelle, K., & Häggström, L. (1997). On the dissociation constant of ammonium: effects of using an incorrect pKa in calculations of the ammonia concentration in animal cell cultures *Biotechnology Techniques*, 11(8), 549–551.
- Millero, F. J., Pierrot, D., Lee, K., Wanninkhof, R., Feely, R., Sabine, C. L., ... Takahashi, T. (2002). Dissociation constants for carbonic acid determined from field measurements. *Deep Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers*, 49(10), 1705–1723.
- Ministerio de Desarrollo Económico Dirección de Agua Potable y Saneamiento Básico. (2000). **REGLAMENTO TÉCNICO DEL SECTOR DE AGUA POTABLE Y SANEAMIENTO BASICO: Sistemas de Potabilización**. Bogotá, Colombia.
- Ministerio de Agricultura y Pesca, Alimentación y Medio Ambiente & Agencia Estatal de Meteorología. (2016). **Resumen Annual Climatológico en España**. Madrid, España.
- Mohammadi M., Mowla D., Esmailzadeh F., Ghasemi Y. (2018). Cultivation of microalgae in a power plant wastewater for sulfate removal and biomass production: a batch study. *Environmental Chemical Engineering*.
- N. Abdel-Raouf, A.A. Al-Homaidan & I.B.M. Ibraheem. (2012). REVIEW: Microalgae and wastewater treatment. *Saudi Journal of Biological Sciences* 19, pp 257-275.
- NOM-001-SEMARNAT-1996: Límites máximos permisibles de contaminantes en las descargas de aguas residuales en aguas y bienes nacionales. (2015). SEMARNAT.
- NOM-002-SEMARNAT-1996: Límites máximos permisibles de contaminantes en las descargas de aguas residuales a los sistemas de alcantarillado urbano o municipal. (1998). SEMARNAT.
- NOM-001-SEMARNAT-1997: Límites máximos permisibles de contaminantes para las aguas residuales tratadas que se reúsen en servicios al público. (1998). SEMARNAT.
- NMX-AA-036-SCFI-2000: Análisis de agua - determinación de acidez y alcalinidad en aguas naturales, residuales y residuales tratadas. (2001). SEMARNAT
- Park, J. B. K., & Craggs, R. J. (2011). Algal production in wastewater treatment high rate algal ponds for potential biofuel use. *Water Science and Technology*, 63(10), 2403–2410.

- Park, J. B. K., Craggs, R. J., & Shilton, A. N. (2011). Recycling algae to improve species control and harvest efficiency from a high rate algal pond. *Water Research*, 45(20), 6637–6649.
- Park, J. B. K., Craggs, R. J., & Shilton, A. N. (2011). Wastewater treatment high rate algal ponds for biofuel production. *Bioresource Technology*, 102(1), 35–42.
- Pérez, M., Nolasco N.A., Vasavada, A., & Johnson, M. (2015). Algae-Mediaqted Valorization of Industrial Waste Streams. *Industrial Biotechnology* 11(4):229-234.
- Pittman J. K., Dean A. P., & Osundeko O. (2011). The potential of sustainable algal boifuel production using wastewater resources. *Biosource Technology*. 102: 17- 25
- Qiu, R., Gao, S., Lopez, P. A., & Ogden, K. L. (2017). Effects of pH on cell growth, lipid production and CO 2 addition of microalgae *Chlorella sorokiniana*. *Algal Research*, 28, 192–199.
- Riveros Olivares B. (2013). *Tratamientos de Aguas Residuales Municipales en la Ciudad de México*. Ciudad de México. UNAM.
- Rojas Romero L. (2019). *Modelización y simulación de la cosecha por ozono-flotación de microalgas cultivadas en agua residual para la producción de biocombustibles*. Ciudad Universitaria, CDMX. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Romero Frasca E. (2019). *Generación de biomasa microalgal crecida en agua residual doméstico para la producción de bioetanol empleando levaduras silvestres*. Ciudad Universitaria, CDMX. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Ruiz J., Arbib Z., Álvarez-Díaz P.D., Garrido-Pérez C., Barragán J. & Perales J. A. (2013). Photobiotreatment model (PhBT): a kinetic model for microalgae biomass growth and nutrient removal in wastewater. *Enviromental Technology*.
- Russell Rhinehart R., (2016). *Nonlinear regression modelling for engineering applications. Modelling, model validation, and enabling designo r experiments*. WILEY, Asme Press.
- Salazar G. M. (2006) *Aplicación e importancia de las microalgas en el tratamiento de aguas residuales*. *ContactoS*. 59; 64-70.
- Shi J., Podola B., Melkonian M. (2013). Application of a prototype-scale Twin-Layer photobiorreeactor for effective N and P removal from different process stages of municipal wastewater by immobilized microalgae. *Biosource Technology*.
- Skoog, A.D., West, D.M., Holler, F.J. & Crouch S.R. (2005). *Fundamentos de Química Analítica*. Thomson Editorial. 8va Edición. México D.F.
- Solimeno A., Gómez-Serrano C., Acién F. G.(2019) *BIO_ALGAE 2: improved model of microalgae and bacteria consortia for wastewater treatment*. *Enviromental Science and Pollution Research*.

- Solimeno, A., Parker, L., Lundquist, T., & García, J. (2017). Integral microalgae-bacteria model (BIO_ALGAE): Application to wastewater high rate algal ponds. *Science of The Total Environment*, 601-602, 646–657.
- Spolaore, P. ; Joannis-Cassan, C. ; Duran, E. ; Isambet, A. (2006). Commercial applications of microalgae. *J. Biosci. Bioeng.*, 101 (2): 87–96
- Tilley, E., Ulrich, I., Lüthi, C., Reymond, P., Schertenleib, R., y Zurbrügg, C. (2018): compendio de sistemas y tecnologías de saneamiento. Dübendorf (Suiza): Instituto Federal Suizo para la Ciencia y la Tecnología Acuática (EAWAG), 2da. Edición revisada.
- Torres J.M. & González-Romero, E. (2015). Fitorremediación en aguas dulces contaminada. La Investigación del Grupo Especializado de Termodinámica de las Reales Sociedades Españolas de Física y Química (pp.79-93) Chapter: vol. 7.
- United Nations, The United Nations World Water Development Report 2021: Valuing Water. UNESCO, Paris
- Vacca-Jimeno, V.A. (2017). Uso de la microalga *Chlorella* sp. viva en suspensión en la decoloración del agua residual de una empresa textil. *Prospectiva* volume 15, p.93 – 99
- Van Bodegom, P. (2007). Microbial Maintenance: A Critical Review on Its Quantification. *Microbial Ecology*, 53(4), 513–523.
- Valeriano González M. T. (2018). Cosecha de microalgas mediante flotación por ozono-aire para la producción potencial de biodiesel. Ciudad Universitaria, CDMX. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Vielma-Hernández, E. (2018). Diseño y construcción de un sedimentador de alta tasa para la cosecha de biomasa microalgal, como parte del proceso de producción de biocombustibles. Ciudad Universitaria, CDMX. Universidad Nacional Autónoma de México.
- Zhang, Q. H., Wang, X. C., Xiong, J. Q., Chen, R., & Cao, B. (2010). Application of life cycle assessment for an evaluation of wastewater treatment and reuse project – Case study of Xi'an, China. *Bioresource Technology*, 101(5), 1421–1425.

ANEXO

Tabla 19. Resultados experimentales de los parámetros fisicoquímicos de los 5 lotes montados en Planta Piloto Aztintli.

día	SST	±SD	P	±SD	C	±SD	NH ₄ ⁺	±SD	NO ₃ ⁻	±SD	pH	±SD
0	325.0	0.0	48.9	1.3	278.3	4.5	79.8	1.8	142.7	2.1	8.23	0.08
3	420.7	10.0	48.0	0.3	106.0	1.1	20.2	1.8	276.7	9.9	7.66	0.28
5	465.7	5.8	46.3	0.9	38.9	1.1	1.9	1.6	260.7	3.1	9.02	0.16
7	473.3	10.0	45.0	0.6	40.7	2.7	0.0	0.0	270.0	2.0	8.83	0.39
10	529.4	10.0	21.8	0.8	34.6	1.1	0.0	0.0	244.7	4.2	9.38	0.20
11	541.3	15.3	25.9	1.1	38.6	0.6	0.0	0.0	230.0	7.2	9.42	0.19
14	558.4	15.3	22.8	1.2	44.0	0.0	0.0	0.0	242.7	3.1	9.21	0.10
0	410.0	15.3	66.4	2.5	165.4	4.8	0.0	0.0	182.7	2.3	9.51	0.01
4	460.0	0.0	31.9	1.6	140.4	1.1	0.0	0.0	228.0	1.7	9.46	0.01
7	520.0	10.0	50.3	3.3	147.1	2.7	0.0	0.0	156.0	1.0	9.47	0.02
11	563.3	15.3	38.8	1.9	156.9	1.6	0.0	0.0	185.3	5.7	9.50	0.01
14	583.3	25.2	43.6	2.8	177.3	2.8	0.0	0.0	232.3	8.5	9.54	0.01
0	495.0	7.1	52.8	1.9	545.0	8.8	56.9	1.6	113.0	2.8	8.42	0.01
2	580.0	14.1	44.4	0.9	413.4	1.2	15.0	1.6	110.5	3.5	8.50	0.01
5	635.0	7.1	45.4	2.3	399.7	20.4	5.1	0.8	136.0	1.4	8.78	0.02
7	640.0	0.0	41.8	0.4	306.8	0.6	0.9	1.6	241.5	12.0	8.83	0.01
9	675.0	35.4	38.2	0.3	277.6	2.8	0.0	0.0	223.5	3.5	8.93	0.01
12	780.0	14.1	33.8	0.4	262.1	2.2	0.0	0.0	184.5	3.5	9.08	0.01
14	830.0	14.1	30.4	0.7	241.7	3.8	0.0	0.0	150.0	1.4	9.28	0.01
0	510.0	10.0	30.9	0.2	338.3	2.3	0.0	0.0	127.7	5.0	8.53	0.01
3	551.7	2.9	25.8	1.1	259.7	4.0	0.0	0.0	99.8	7.6	9.23	0.01
5	606.7	15.3	12.2	0.7	200.7	2.5	0.0	0.0	86.8	2.5	9.34	0.01
7	626.7	11.5	15.1	0.8	147.6	3.1	0.0	0.0	72.7	3.5	9.47	0.02
10	653.7	10.0	14.8	1.5	113.5	2.8	0.0	0.0	64.2	2.3	9.49	0.01
12	697.7	7.1	12.2	2.0	98.6	1.6	0.0	0.0	52.7	4.1	9.52	0.02
14	735.0	7.6	10.0	1.1	69.9	2.1	0.0	0.0	49.5	1.8	9.53	0.02
0	731.7	10.4	58.0	3.1	212.7	3.2	5.6	0.8	66.0	2.6	8.90	0.01
3	801.7	7.1	47.8	1.9	174.3	1.3	0.0	0.0	58.8	1.7	9.65	0.02
5	854.7	7.1	38.4	0.4	113.9	4.6	0.0	0.0	46.7	2.6	9.64	0.01
7	885.1	11.5	34.4	2.1	97.8	2.0	0.0	0.0	39.1	1.9	9.59	0.01
10	898.7	7.1	31.0	2.2	81.6	2.3	0.0	0.0	31.4	1.0	9.39	0.01
12	990.0	10.0	27.2	1.7	69.8	1.0	0.0	0.0	30.4	2.4	9.17	0.02
14	1095.0	8.7	26.0	2.1	65.3	1.3	0.0	0.0	25.7	3.1	9.04	0.02

Tabla 20. Resultados teóricos de las simulaciones de los parámetros fisicoquímicos de los 5 lotes montados en Planta Piloto Atzintli para antes y después de recalibración.

día	ANTES RECALIBRACIÓN						DESPUÉS RECALIBRACIÓN					
	SST	P	C	NH ₄ ⁺	NO ₃ ⁻	pH	SST	P	C	NH ₄ ⁺	NO ₃ ⁻	pH
0	325.0	48.9	278.3	79.8	142.7	8.25	325.0	48.9	278.3	79.8	142.7	8.11
3	391.8	35.4	153.2	0.4	112.7	9.52	422.2	40.5	171.4	18.2	139.5	9.46
5	412.3	28.9	11.3.0	0.0	93.7	9.65	462.8	36.1	127.5	4.0	130.3	9.60
7	427.8	23.5	81.7	0.0	77.9	9.72	489.4	32.4	99.3	0.7	120.3	9.68
10	442.3	17.4	50.2	0.0	59.0	9.78	519.1	27.7	68.4	0.0	105.9	9.74
11	445.2	15.7	43.2	0.0	53.8	9.79	527.3	26.3	60.1	0.0	101.5	9.76
14	449.7	11.7	29.6	0.0	40.8	9.81	546.8	22.6	40.6	0.0	89.2	9.80
0	410.0	66.4	165.4	0.0	182.7	8.11	410.0	66.4	165.4	0.0	182.7	8.11
4	459.6	44.6	68.3	0.0	126.3	9.64	465.4	54.5	106.7	0.0	153.8	9.42
7	477.3	33.3	30.3	0.0	95.7	9.78	499.6	47.0	70.8	0.0	135.2	9.63
11	482.9	22.7	12.0	0.0	66.1	9.83	532.0	38.7	37.8	0.0	113.8	9.76
14	481.6	17.1	8.4	0.0	50.1	9.84	546.9	33.6	23.6	0.0	100.1	9.80
0	495.0	52.8	545.0	56.9	113.0	8.11	495.0	52.8	545.0	56.9	113.0	8.11
2	588.7	41.5	369.4	2.9	94.0	9.38	611.1	45.4	415.3	23.8	106.6	9.25
5	656.6	29.7	236.6	0.0	71.1	9.62	732.3	36.8	280.3	2.3	93.6	9.55
7	691.2	23.7	166.8	0.0	59.1	9.71	785.5	32.4	221.3	0.3	85.9	9.64
9	716.8	18.9	112.9	0.0	49.1	9.77	831.1	28.5	170.9	0.0	78.9	9.70
12	738.7	13.6	61.5	0.0	37.2	9.81	887.8	23.5	108.2	0.0	69.3	9.77
14	744.9	11.0	42.5	0.0	31.0	9.83	916.9	20.8	76.3	0.0	63.6	9.80
0	510.0	30.9	338.3	0.0	127.7	8.11	510.0	30.9	338.3	0.0	127.7	8.11
3	565.5	22.0	229.9	0.0	96.8	9.38	566.6	25.7	276.9	0.0	112.2	9.13
5	595.1	17.4	170.6	0.0	80.5	9.56	602.7	22.6	237.7	0.0	103.0	9.34
7	617.5	13.8	124.0	0.0	66.9	9.67	636.7	19.8	200.8	0.0	94.5	9.47
10	638.3	9.8	76.8	0.0	50.7	9.76	682.0	16.2	151.8	0.0	83.1	9.61
12	645.3	7.8	57.7	0.0	42.1	9.79	707.7	14.2	124.0	0.0	76.2	9.67
14	648.4	6.3	45.6	0.0	35.0	9.80	729.6	12.4	100.6	0.0	70.0	9.71
0	731.7	58.0	212.7	5.6	66.0	8.11	731.7	58.0	212.7	5.6	66.0	8.11
3	794.0	42.3	87.1	0.0	49.5	9.64	808.9	49.0	127.2	0.9	57.2	9.47
5	812.5	34.6	44.6	0.0	41.2	9.76	843.4	44.0	89.2	0.2	52.5	9.63
7	819.7	28.4	22.7	0.0	34.2	9.81	869.5	39.7	60.8	0.0	48.2	9.72
10	819.0	21.3	10.4	0.0	26.0	9.84	895.3	34.1	33.0	0.0	42.4	9.79
12	815.5	17.6	7.9	0.0	21.6	9.85	905.6	31.0	22.3	0.0	38.9	9.82
14	811.1	14.6	7.0	0.0	17.9	9.85	912.1	28.2	15.8	0.0	35.7	9.83

Código de modelización de MATLAB, (ejemplar de datos experimentales de lote 5 y constantes cinéticas recalibradas). Archivo 1 de 2:

```
function C=ProposedmodelDesmoMO(t,y)

global numax numaxB numaxD Ka YHCO3 num YHPO4 H Kdes Kb K1 K2 Po R numaxNO3 Co
fCO2 KH Ynitrate YNH4 KsC KsN KsN1 KsP T;

C = zeros(6,1);%number of differential equations
YHCO3=1.1321;
YNH4=0.081;
Ynitrate=0.279;
YHPO4=0.027;
numaxB = 0.14; %NH4 to NO3- oxidation rate, day-1
numaxNO3=0.088; %NO3- specific microalgae growth rate, day-1
numax = 0.17; %NH4+ specific microalgae growth rate, day-1
numaxD = 0.001; %death rate, day-1
num = 0.043; %rate of nutrient uptake for maintenance, day-1
KsC = 124.9; %HCO3- half saturation constant, mg/L
KsN = 31.5; %NH4+ half saturation constant, mg/L
KsN1 = 31.5; %NO3- half saturation constant, mg/L
KsP = 10.5; %HPO4- half saturation constant, mg/L
T = 273+25; %temperature, K
Po = 101325; %atmospheric pressure, Pa
fCO2 = 0.0003; %mol fraction CO2 in atmosphere
KH = (exp(11.25-(395.9/(T-175.9))))*1000; %Henry's law constant, Pa.L/mol
Ka = 0.14*24; %mass transfer of CO2, day-1
Kdes = 0.72; %masss transfer of NH3, day-1
K1 = 4.375*10^-7; % H2CO3 ionisation const
K2 = 1.358*10^-10; % HCO3 ionisation const
Kb = 4.95*10^-10; %NH4 dissociation const
R = (Co+(Ka*Po*fCO2*44000/KH));
%Biomass
C(1)=numax*(y(1))*((y(2)^1)/(KsP+(y(2)^1)))*(y(3)/(KsC+y(3)))*(((y(4)/(KsN+y(4)))
)+numaxNO3/numax*(y(5)/(KsN1+y(5))))-numaxD*y(1);
%orthoPhosphoates
C(2)=-
(YHPO4)*numax*(y(1))*((y(2)^1)/(KsP+(y(2)^1)))*(y(3)/(KsC+y(3)))*(((y(4)/(KsN+y(4)
))))+numaxNO3/numax*(y(5)/(KsN1+y(5))))-num*y(2);
%Alkalinity
C(3)=-
(YHCO3)*numax*(y(1))*((y(2)^1)/(KsP+(y(2)^1)))*(y(3)/(KsC+y(3)))*(((y(4)/(KsN+y(4)
))))+numaxNO3/numax*(y(5)/(KsN1+y(5))))+(Ka*Po*fCO2*44000/KH);
%pH
H=(abs((-K1*(y(3)./R-1)-sqrt(((K1*(y(3)./R-1)).^2
4*(K1*K2*y(3)./R)))./(2*y(3)./R)));
%ammonium
C(4)=-numaxB*(exp(numaxB*t))*y(4)-
YNH4*numax*y(1)*((y(2)/(KsP+(y(2))))*(y(3)/(KsC+y(3)))*((y(4)/(KsN+y(4)))))-
(y(4)*Kdes*(1/(1+(H/Kb))));
%nitrates
C(5)=numaxB*(exp(numaxB*t))*y(4)-
Ynitrate*numaxNO3*y(1)*(y(2)/(KsP+y(2)))*(y(3)/(KsC+y(3)))*(y(4)/(KsN1+y(4)))-
num*y(5);
%ammonia
C(6)=y(4)*Kdes*(1/(1+(H/Kb)));
end
```

Archivo 2 de 2:

```
clear all;clc
global pH Et NO3 NH30 H R Kdes Kb K1 K2 Mb Co P No Ho;

% Experimental data with SD
Et=[0 3 5 7 10 12 14]; %time

y1=[731.7 801.7 854.7 885.1 898.7 990.0 1095.0]; %biomasa
err1=[10.4 7.1 7.1 11.5 7.1 10.0 8.7];

y2=[58.0 47.8 38.4 34.4 31.0 27.2 26.0]; %ortofosfatos
err2=[3.1 1.9 0.4 2.1 2.2 1.7 2.1];

y3=[212.7 174.3 113.9 97.8 81.6 69.8 65.3]; %alcalinidad
err3=[3.2 1.3 4.6 2.0 2.3 1.0 1.3];

y4=[5.6 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0]; %n. amoniacal
err4=[0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0];

y5=[66.0 58.8 46.7 39.1 31.4 30.4 25.7]; %nitratos
err5=[2.6 1.7 2.6 1.9 1.0 2.4 3.1];

y6=[8.90 9.65 9.64 9.59 9.39 9.17 9.04]; %pH
err6=[0.01 0.02 0.01 0.01 0.01 0.02 0.02];

%Initial conditions
Mb = y1(1); %initial biomass mg/L
P = y2(1); %initial ortophosphosphates P mg/L
Co = y3(1); %Initial Alkalinity C mg/L
No = y4(1); %Initail ammonium N mg/L
NO3 = y5(1); %initial Nitrates NO3 mg/L

%Other data
Kdes = 0.72; %mass transfer of NH3, day-1
Kb = 4.95*10^-10; %NH4 dissociation const
Ho=10^-(y6(1));
NH30 = Kdes*No*(1/(1+((Ho)/Kb)));

y0 = [Mb;P;Co;No;NO3;NH30];
[t,y]=ode45('ProposedmodelDesmoMO',[0:1:max(Et)+2],y0);

H = (abs((-K1*(y(:,3))./R-1)-sqrt(((K1*(y(:,3))./R-1)).^2)-
4*(1*K1*K2*y(:,3)./R)))/(2*y(:,3)./R));
pH = -log10(H);

%Graphic
%figure(1)
subplot(3,2,1),
plot(t,y(:,1),'b-') %biomass function
e = errorbar(Et,y1,err1); %biomass data
e.Marker='.';
e.LineStyle='none';
e.Color='k';
xlabel('Tiempo [día]'), ylabel('Biomasa [mg/L]')
hold on
```



```

subplot(3,2,2), plot(t,y(:,2),'c-')           %P function
e = errorbar(Et,y2,err2);                     %P data
e.Marker='.';
e.LineStyle='none';
e.Color='k';
xlabel('Tiempo [día]'), ylabel('Ortofosfatos [mg/L]')
hold on
subplot(3,2,3), plot(t,y(:,3),'k-')           %C function
e = errorbar(Et,y3,err3);                     %C data
e.Marker='.';
e.LineStyle='none';
e.Color='k';
xlabel('Tiempo [día]'), ylabel('Alcalinidad [mg CaCO3/L]')
hold on
subplot(3,2,4), plot(t,y(:,4),'m-')           %NH4+ function
e = errorbar(Et,y4,err4);                     %NH4+ data
e.Marker='.';
e.LineStyle='none';
e.Color='k';
xlabel('Tiempo [día]'), ylabel('Nitrógeno Amoniacal [mg/L]')
hold on
subplot(3,2,5), plot(t,y(:,5),'g-')           %NO3- function
e = errorbar(Et,y5,err5);                     %NO3- data
e.Marker='.';
e.LineStyle='none';
e.Color='k';
xlabel('Tiempo [día]'), ylabel('Nitratos [mg/L]')
hold on
subplot(3,2,6), plot(t,pH,'r-')               %pH function
e = errorbar(Et,y6,err6);                     %pH data
e.Marker='.';
e.LineStyle='none';
e.Color='k';
xlabel('Tiempo [día]'), ylabel('pH')
hold on

```