

Jornadas de Automática

Identificación de estados y parámetros cinéticos del proceso de nitrificación en suelo agrícola mediante Filtro de Kalman Extendido

Francisca Reales^{a,*}, Luis Orihuela^{a,b}

^aCentro de Investigación en Tecnología, Energía y Sostenibilidad, Universidad de Huelva, 21819, Huelva, España.

^bDept. Ingeniería Electrónica, Sistemas Informáticos y Automática, Universidad de Huelva, 21007, Huelva, España.

To cite this article: Reales, Francisca, Orihuela, Luis. 2026. State and Kinetic Parameter Identification of the Nitrification Process in Agricultural Soil Using an Extended Kalman Filter . Jornadas de Automática, 47.
<https://doi.org/10.17979/ja-cea.2026.47.13764>

Resumen

El seguimiento de las especies nitrogenadas en la solución del suelo es imprescindible para optimizar la fertilización agrícola, pero su medición *in situ* resulta costosa y lenta. Los electrodos selectivos de iones (ISE) representan una alternativa económica, aunque al no estar la tecnología lo suficientemente madura, presentan limitaciones: no pueden medir todas las especies y, en las que sí pueden medir, introducen errores apreciables. Para solventarlo, este trabajo propone un Filtro de Kalman Extendido (EKF) orientado a la estimación conjunta de las concentraciones (estados) y las tasas cinéticas (parámetros) del proceso de nitrificación. El algoritmo se alimenta empleando medidas ruidosas de las concentraciones de dos especies (amonio y nitrato). Su validación sobre datos experimentales demuestra que el estimador reconstruye la dinámica del sistema de forma robusta frente a distintas inicializaciones paramétricas y al orden de presentación de los ensayos. Además, esta metodología permite inferir con éxito el estado intermedio del proceso (concentración de nitrito), cuya medición empírica no se encuentra disponible.

Palabras clave: Estimación de parámetros y estados, Biología de sistemas, Modelado e identificación de procesos, Modelado e identificación, Identificación de sistemas no lineales

State and Kinetic Parameter Identification of the Nitrification Process in Agricultural Soil Using an Extended Kalman Filter

Abstract

Monitoring nitrogen species in the soil solution is essential to optimize agricultural fertilization, but their *in situ* measurement is costly and time-consuming. Ion-selective electrodes (ISEs) represent a cost-effective alternative, although they have limitations: they cannot detect all species, and they introduce noticeable errors in the ones they do measure. To overcome this, this work proposes an Extended Kalman Filter (EKF) aimed at the joint estimation of concentrations (states) and kinetic rates (parameters) of the nitrification process. The algorithm relies on noisy measurements of concentration of two species (ammonium and nitrate). Its validation on experimental data demonstrates that the estimator robustly reconstructs the system dynamics against different parameter initializations and the presentation order of the experiments. Furthermore, this methodology successfully infers the intermediate state of the process (nitrite concentration), for which empirical measurements are unavailable.

Keywords: Parameter and state estimation, Systems biology, Process modeling and identification, Modeling and identification, Nonlinear system identification

*Francisca Reales: francisca.viejo@dieia.uhu.es

1. Introducción

En el contexto agrícola, la concentración de las distintas especies del nitrógeno en el suelo es un aspecto fundamental, puesto que determina tanto el rendimiento de los cultivos como la lixiviación de nitratos hacia los acuíferos. El uso masivo de fertilizantes sintéticos ha alterado gravemente el ciclo natural del nitrógeno, generando problemas ambientales graves, como la contaminación de aguas subterráneas o la eutrofización, y suponiendo costes económicos por el desperdicio de fertilizantes Sebilo et al. (2013), por lo que es urgente la búsqueda de soluciones más sostenibles. Para ello, es imprescindible entender en profundidad los procesos que gobiernan la dinámica del nitrógeno en el suelo.

La nitrificación es un proceso biológico mediado por bacterias quimioautótrofas, principalmente *Nitrosomonas* y *Nitrobacter*, mediante el cual el ion amonio (NH_4^+) se oxida, en condiciones aeróbicas, a nitrito (NO_2^-) en una fase denominada nitrificación y posteriormente, a nitrato (NO_3^-) en una segunda etapa llamada nitratación. Comprender en profundidad la dinámica de este proceso es esencial para identificar las necesidades nutricionales del cultivo y diseñar estrategias de fertilización más eficientes.

La cinética de la nitrificación está muy condicionada por factores ambientales y biológicos, como la temperatura, la humedad, la estructura del suelo o el pH (Sabey et al. (1959); Sahrawat (2008)). Una de las principales limitaciones de los modelos existentes en la literatura, como los de McLaren (1969), Saunders and Bazin (1973) o Šimůnek et al. (2022), es la dificultad para estimar los parámetros asociados, ya que son muy dependientes de las condiciones específicas del suelo, el clima local o el cultivo. Por este motivo, en la práctica se suele recurrir a parámetros obtenidos de la literatura, estimados de manera aproximada para rangos amplios de las variables mencionadas, lo que reduce la capacidad predictiva del modelo.

A esto se suma que la obtención de datos reales de la concentración de las especies de nitrógeno en el suelo es un proceso lento y costoso debido a la ausencia de instrumentos de medida *in situ*.

Recientemente, en Reales and Orihuela (2025) se ha propuesto una solución para la estimación de los parámetros basada en la metodología de identificación de sistemas lineales descrita por Ljung (1995). El trabajo que ahora se presenta proporciona un enfoque más amplio con respecto al anterior en varios aspectos. Primero, el modelo recoge la dinámica de la reserva de agua del suelo, lo que permite una mejor representación de la evolución de las especies del nitrógeno. Además, en este trabajo se diferencia entre dos tipos de parámetros cinéticos: los relacionados con las tasas de transformación de unas especies en otras y los que describen los intercambios de las especies nitrogenadas con el medio. Por último, se aborda la estimación conjunta de estados y parámetros, utilizando el EKF. Para solventar la falta de instrumentación de análisis, las mediciones se realizan utilizando dispositivos de bajo coste basados en ISE. Estos sensores son mucho más baratos que los equipos de laboratorio pero presentan un mayor ruido de medición, el cual ha sido caracterizado.

El documento se organiza de la siguiente forma: la Sección 2 describe el modelo y el problema de identificación; la

Sección 3 presenta los métodos utilizados; la Sección 4 detalla el material agronómico y la instrumentación; la Sección 5 discute los resultados; y finalmente, la Sección 6 recoge las conclusiones y líneas futuras de trabajo.

2. Definición del problema

2.1. Descripción del modelo del proceso de nitrificación

Las entradas y salidas de nitrógeno en la solución del suelo en el caso del fertirriego, solo son posibles si los compuestos se encuentran disueltos en la fase líquida. Por tanto, el conocimiento de la dinámica del agua en el suelo permite profundizar en el modelado de la evolución de las especies del nitrógeno. La FAO (*Food and Agriculture Organization*) desarrolló un modelo de balance que describe la dinámica de la reserva de agua en el suelo (Allen et al. (1998)). La reserva es el volumen de agua que un suelo puede retener y es en ese volumen en el que las especies nitrogenadas estarán disueltas. Este modelo sirve de base para describir la dinámica de las especies nitrogenadas teniendo en cuenta algunas consideraciones: en primer lugar, debido a la nitrificación, las especies del nitrógeno sufren una cadena de desintegración de primer orden, debido a la cual hay una salida del soluto i que da lugar a una entrada del soluto $i + 1$. Además, los iones pueden quedar atrapados en la matriz del suelo o ser liberados por el agua. Por todo ello, la dinámica de la concentración de las especies puede escribirse como:

$$C_1(k+1) = \frac{(1 - \mu_1 - \mu'_1)R(k)}{R(k+1)}C_1(k) + \frac{I(k)}{R(k+1)}C_{I_1}(k), \quad (1)$$

$$C_2(k+1) = \frac{(1 - \mu_2 - \mu'_2)R(k)}{R(k+1)}C_2(k) + \frac{\mu'_1 R(k)}{R(k+1)}C_1(k) + \frac{I(k)}{R(k+1)}C_{I_2}(k), \quad (2)$$

$$C_3(k+1) = \frac{(1 - \mu_3)R(k)}{R(k+1)}C_3(k) + \frac{\mu'_2 R(k)}{R(k+1)}C_2(k) + \frac{I(k)}{R(k+1)}C_{I_3}(k), \quad (3)$$

donde $C_i(k)$ es la concentración del i -ésimo soluto de la cadena en el instante k [mg/L], $R(k)$ es la reserva de agua en la zona radicular en el instante k [mm], $I(k)$ representa la lámina de riego efectiva aplicada [mm] y $C_{I_i}(k)$ es la concentración en el agua de riego del soluto i [mm]. El parámetro μ'_i se refiere a la constante de desintegración de primer orden que modela la oxidación del elemento i para dar lugar al elemento $i + 1$, mientras que μ_i es la constante de desintegración que modela el intercambio del elemento i con el medio, independiente de la cadena de desintegración. Aunque se haya considerado que la aplicación de fertilizantes disueltos puede hacer variar la concentración de todas las especies, en la práctica agrícola habitual, los fertilizantes no contienen NO_2^- .

Nótese como las ecuaciones dinámicas incluyen dos tipos de términos: por una parte, aquellos que modelan las reacciones químicas, y por otro, aquellos que modelan las entradas de fertilizantes disueltos. Los factores $R(k)/R(k+1)$ y $I(k)/R(k+1)$ recogen la disolución de la concentración cuando varía la reserva o cuando se riega.

Las entradas del sistema son $I(k)$ y $C_{I_i}(k)$, $\forall i$. Se considera que se dispone de medidas ruidosas de las concentraciones de amonio ($y_1(k)$) y nitrato ($y_3(k)$) (ver Hipótesis 2). Se asume que $R(k)$ es conocida, porque la medición de la reserva se hace con métodos fiables (ver Sección 4). Los parámetros $\mu_1, \mu'_1, \mu_2, \mu'_2$ y μ_3 son, *a priori*, desconocidos.

2.2. Problema de identificación

Dado el modelo dinámico del proceso de nitrificación descrito por las ecuaciones (1)-(3), y dado un conjunto de datos experimentales $\mathcal{D}^N$ definido por las secuencias de entradas conocidas y salidas medidas:

$$\mathcal{D}^N = \{R(k), I(k), C_{I_i}(k), y_1(k), y_3(k)\}_{k=1}^N, \quad (4)$$

el objetivo de este trabajo es estimar de forma simultánea:

1. Los estados del sistema: $C_1(k)$, $C_2(k)$ y $C_3(k)$.
2. El vector de parámetros $\theta = [\mu_1, \mu'_1, \mu_2, \mu'_2, \mu_3]^T$.

La resolución de este problema se hace en base a las siguientes hipótesis.

Hipótesis 1. Se asume que la reserva $R(k)$, el riego $I(k)$ y la concentración de nutrientes en la solución de riego $C_{I_i}(k)$, $\forall i$, es conocida para todo k .

Hipótesis 2. Se asume que pueden medirse las concentraciones de NH_4^+ y NO_3^- en solución de suelo, pero sujetas a un error, de forma que:

$$y_1(k) = C_1(k) + v_1(k), \quad (5)$$

$$y_3(k) = C_3(k) + v_2(k). \quad (6)$$

donde los ruidos v_1, v_2 se asumen gaussianos de distribución conocida.

Hipótesis 3. Se asume que los parámetros a identificar son constantes para las condiciones experimentales.

Las Hipótesis 1 y 2 son aceptables atendiendo al procedimiento experimental que se detalla en la Sección 4. En un experimento de campo, la medición de la reserva no es sencilla y habría que incluirla en el vector de estados y asumir que su medición está también sujeta a errores.

La Hipótesis 3 puede suscitar más dudas, porque se conoce que estos parámetros pueden cambiar con la temperatura, y otras condiciones ambientales. Sin embargo, tal y como se detalla en la Sección 4, el experimento se ha ejecutado en condiciones controladas, por lo que no resulta una hipótesis fuerte. En un experimento de campo, habría que introducir una dependencia con otras variables, externas o internas, que se deja como trabajo futuro.

3. Métodos

3.1. Modelado en el espacio de estados de la nitrificación

La dinámica de la nitrificación descrita previamente por las ecuaciones (1)-(3) junto con las medidas (5)-(6) se pueden reformular de manera equivalente como una representación conjunta en el espacio de estados, de cara a abordar la identificación de estados y parámetros. Así, el comportamiento de la cadena de desintegración se puede expresar mediante el siguiente sistema dinámico:

$$x(k+1) = \delta_R(k)A(\theta)x(k) + \delta_I(k)Bu(k) + w(k), \quad (7)$$

$$y(k) = Cx(k) + v(k), \quad (8)$$

donde $x(k) = [C_1(k) \ C_2(k) \ C_3(k)]^T$ representa el vector de estados del sistema, $u(k) = [C_{I_1}(k) \ C_{I_2}(k) \ C_{I_3}(k)]^T$ es el vector de entradas, $y(k) = [y_1(k) \ y_3(k)]^T$ define el vector de salidas, $\delta_R(k) = \frac{R(k)}{R(k+1)}$ y $\delta_I(k) = \frac{I(k)}{R(k+1)}$, $v(k)$ es el ruido de medida de distribución conocida, y $w(k)$ es un ruido de proceso que se ha introducido para modelar posibles errores de modelado. Se asume que $w(k) \sim \mathcal{N}(0, Q_w)$, con Q_w conocida.

La matriz $A(\theta)$ tiene la estructura:

$$A(\theta) = \begin{bmatrix} 1 - \mu_1 - \mu'_1 & 0 & 0 \\ \mu'_1 & 1 - \mu_2 - \mu'_2 & 0 \\ 0 & \mu'_2 & 1 - \mu_3 \end{bmatrix}, \quad (9)$$

y las matrices constantes B y C pueden obtenerse de forma directa de las ecuaciones (1)-(3) y (5)-(6).

El producto $A(\theta)x(k)$ puede escribirse de la siguiente forma:

$$A(\theta)x(k) = x(k) + \phi(x(k))\theta, \quad (10)$$

donde:

$$\phi = \begin{bmatrix} -x_1 & -x_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x_1 & -x_2 & -x_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & x_2 & -x_3 \end{bmatrix}, \quad (11)$$

por lo que el sistema dinámico puede describirse como:

$$x(k+1) = x(k) + \delta_R(k)\phi(x(k))\theta + \delta_I(k)Bu(k) + w(k) \quad (12)$$

Esto ilustra que el modelo es lineal con respecto a los estados y afín con respecto a los parámetros por separado. Sin embargo, el problema de identificación conjunta resulta no lineal debido al producto de ambas variables desconocidas.

3.2. Extensión del espacio de estados

Para estimar simultáneamente estados y parámetros, se define el estado aumentado:

$$z(k) = \begin{bmatrix} x(k) \\ \theta(k) \end{bmatrix}. \quad (13)$$

La evolución temporal de los parámetros se puede modelar como:

$$\theta(k+1) = \theta(k) + \eta(k), \quad (14)$$

donde $\eta(k) \sim \mathcal{N}(0, Q_\theta)$ es un ruido gaussiano de media cero, con Q_θ conocida. Aunque, de acuerdo a la Hipótesis 1, los parámetros son constantes, la consideración de este término de perturbación es necesaria para la estimación de parámetros, ya que aporta la flexibilidad necesaria para que el estimador corrija los posibles errores de inicialización.

De este modo, y conocida la dinámica de $x(k)$, se obtiene:

$$z(k+1) = f(z(k), u(k)) + N(k), \quad (15)$$

donde:

$$f(z(k), u(k)) = \begin{bmatrix} \delta_R(k)A(\theta)x(k) + \delta_I(k)Bu(k) \\ \theta(k) \end{bmatrix}, \quad (16)$$

$$N(k) = \begin{bmatrix} w(k) \\ \eta(k) \end{bmatrix}. \quad (17)$$

La ecuación de salida para el sistema aumentado se expresa como:

$$y(k) = \tilde{C}z(k) + v(k), \quad (18)$$

siendo la matriz de observación aumentada $\tilde{C} = [C \ 0]$ donde 0 representa una matriz de ceros de dimensiones adecuadas.

3.3. Filtro de Kalman Extendido

Tal y como se ha detallado anteriormente, el modelo resulta no lineal por el producto entre los estados y los parámetros. Esto motiva la elección del filtro de Kalman extendido como estimador.

El EKF trata de calcular una estimación del estado aumentado $\hat{z}(k)$ que garantice que la esperanza del error sea nulo, es decir, $\mathbb{E}[e(k)] = \mathbb{E}[z(k) - \hat{z}(k)] = \mathbf{0}$ y que minimice la esperanza del error cuadrático, es decir, $\mathbb{E}[e(k)^T e(k)]$ Ribeiro (2004).

El EKF se implementa con los dos pasos clásicos de cualquier filtro de Kalman, a saber, filtrado y predicción, que se especifican a continuación. Se introduce la notación $(k|k)$ para las variables filtradas en el instante k , y $(k+1|k)$ para las variables predichas en el instante k .

Filtrado:

$$\hat{z}(k|k) = \hat{z}(k|k-1) + L(k)(y(k) - \tilde{C}\hat{z}(k|k-1)), \quad (19)$$

$$P(k|k) = (I - L(k)\tilde{C})P(k|k-1), \quad (20)$$

donde $L(k)$ es la ganancia de Kalman a diseñar, y $P(k) = \mathbb{E}[e(k)e(k)^T]$ es la matriz de covarianza.

Predicción:

$$\hat{z}(k+1|k) = f(\hat{z}(k|k), u(k)), \quad (21)$$

$$P(k+1|k) = F(k)P(k|k)F(k)^T + Q, \quad (22)$$

donde $Q = \text{diag}(Q_w, Q_\theta)$ y $F(k)$ es el jacobiano de la función (16), que está dado por:

$$F(k) = \begin{bmatrix} \delta_R(k)A(\theta(k)) & \delta_R(k)\phi(x(k)) \\ 0 & I \end{bmatrix}. \quad (23)$$

Notese que el paso de filtrado del EKF es completamente equivalente al de un filtro de Kalman estandar, porque la ecuación de salida (18) es lineal. El paso de predicción cambia, pues se hace uso de la aproximación lineal con el jacobiano a la hora de predecir la matriz de covarianzas.

Para conseguir los objetivos que se propone el EKF, la ganancia de Kalman se escoge de tal forma que minimice la traza de la matriz de covarianza, dando lugar a:

$$L(k) = P(k|k-1)\tilde{C}^T \left(\tilde{C}P(k|k-1)\tilde{C}^T + R \right)^{-1}, \quad (24)$$

donde R es la covarianza del ruido de medida en (5)-(6).

4. Materiales

4.1. Muestras agronómicas

Cada muestra agronómica, cuatro en total, consistió en una bandeja de aluminio de 1 L (ver Figura 1) que contenía suelo desnudo, para evitar las interferencias de una planta en las variables a analizar.



Figura 1: Muestras agronómicas. Suelo contenido en bandejas de aluminio con instalación de sondas Rhizon Soil Moisture Samplers.

Las bandejas se colocaron en una cámara climática para mantenerlas bajo condiciones controladas de temperatura y humedad, de forma que se diera soporte a la Hipótesis 1. Los experimentos comienzan con la adición de una dilución de NH_4^+ a las muestras de suelo.

Para la extracción de la solución del suelo se utilizaron las sondas Rhizon Soil Moisture Samplers. Para más detalles del diseño experimental, vease Reales and Orihuela (2025).

4.2. Instrumentación

La concentración de NH_4^+ se midió con la sonda IMACIMUS de NT-Sensors¹, que utiliza un electrodo selectivo de iones (ISE). Las concentraciones de NO_3^- se midieron con otro sensor ISE, el ionómetro Horiba LAQUAtwin NO_3^- ². Tal y como se ha detallado, la concentración de NO_2^- no fue medida en este estudio.

Los sensores ISE no son tan precisos como otras técnicas analíticas, como la cromatografía de iones³. Por lo tanto, se asume que las medidas están afectadas por un ruido que fue caracterizado en trabajos previos (Reales and Orihuela (2025)). El ruido de medida de IMACIMUS se describe mediante una distribución gaussiana $\mathcal{N}(-0,25, 1,21)$ mg/L, mientras que el correspondiente a LAQUAtwin se describe como $\mathcal{N}(13,05, 34,06)$ mg/L.

La reserva de agua en el suelo se estimó por diferencia de masa. Habiendo medido de antemano el peso de una bandeja de suelo seco, la diferencia entre este valor de referencia y la masa medida en las muestras del experimento corresponde a la cantidad de agua retenida en las bandejas. Las pesadas se realizaron en una balanza con precisión de centígramo.

La cantidad de fertilizante aplicada a la muestra de suelo se midió utilizando una balanza de precisión con un error despreciable. Este fertilizante fue disuelto en agua destilada, cuyo volumen fue medido con una probeta graduada, cometiendo un error también despreciable.

¹<https://www.imacimus.com/es/>

²<https://www.horiba.com/esp/water-quality/productos/detail/action/show/Product/laquatwin-no3-11c-no3-11s-no3-11-794/>

³Los sensores ISE tienen un coste inferior a 1000 €, mientras que un cromatógrafo estándar cuesta alrededor de 30 000 €. Además, cada medición individual es más económica con los sensores ISE.

5. Resultados y discusión

5.1. Configuración experimental

La configuración del EKF requiere la definición de las condiciones iniciales de las matrices de covarianza y los estados del sistema. La matriz de covarianza inicial se define como:

$$P(0|-1) = \begin{bmatrix} P_x(0|-1) & \mathbf{0}_{3 \times 5} \\ \mathbf{0}_{5 \times 3} & P_\theta(0|-1) \end{bmatrix}, \quad (25)$$

siendo $P_x(0|-1)$ la matriz de covarianzas predicha inicial de los estados y $P_\theta(0|-1)$ la matriz de covarianzas predicha inicial para los parámetros, que se escogieron como:

$$P_x(0|-1) = \text{diag}\{10, 10, 100\}, \quad (26)$$

$$P_\theta(0|-1) = \text{diag}\{10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-2}, 10^{-3}\}. \quad (27)$$

Las matrices Q_w y Q_θ toman los valores:

$$Q_w = \text{diag}\{2, 1, 30\}, \quad (28)$$

$$Q_\theta = \text{diag}\{10^{-10}, 10^{-10}, 10^{-10}, 10^{-10}, 10^{-10}\}. \quad (29)$$

Las medidas de las salidas $y_1(k)$ y $y_3(k)$ fueron corregidas eliminando sus componentes de sesgo (-0.25 y 13.05 mg/L, respectivamente). Por tanto, la matriz de covarianza del ruido de medida R se configuró utilizando las varianzas de los sensores:

$$R = \begin{bmatrix} 1,2153 & 0 \\ 0 & 34,0564 \end{bmatrix}. \quad (30)$$

Las condiciones iniciales predichas para estados y parámetros se escogieron como:

$$\hat{x}(0|-1) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 500 \end{bmatrix}^T, \quad (31)$$

$$\hat{\theta}(0|-1) = \begin{bmatrix} 0 & 0,5 & 0 & 0,5 & 0 \end{bmatrix}^T. \quad (32)$$

El ensayo experimental incluye cuatro repeticiones independientes, por tanto, la secuencia de datos se presentó al algoritmo de estimación de manera anidada. Sea $i \in \{1, 2, 3, 4\}$ el índice de la repetición actual y N_i la duración total en días del ensayo i . El vector de estado aumentado estimado y la matriz de covarianza al final de la repetición i se expresan:

$$\hat{z}_i(N_i|N_i) = \begin{bmatrix} \hat{x}_i(N_i|N_i) \\ \hat{\theta}_i(N_i|N_i) \end{bmatrix} \quad (33)$$

$$P_i(N_i|N_i) = \begin{bmatrix} P_{x,i}(N_i|N_i) & P_{x\theta,i}(N_i|N_i) \\ P_{\theta x,i}(N_i|N_i) & P_{\theta,i}(N_i|N_i) \end{bmatrix} \quad (34)$$

La dinámica de los estados del sistema se reinician en la presentación de cada repetición del experimento, mientras que los parámetros cinéticos se mantienen a lo largo de las repeticiones, es decir, en la repetición $n+1$, la inicialización del vector de estado aumentado y la matriz de covarianza se establece transfiriendo los parámetros estimados en el último día de la repetición n , mientras se resetean a sus valores iniciales los estados:

$$\hat{z}_{i+1}(0|-1) = \begin{bmatrix} \hat{x}(0|-1) \\ \hat{\theta}_i(N_i|N_i) \end{bmatrix}, \quad (35)$$

$$P_{i+1}(0|-1) = \begin{bmatrix} P_x(0|-1) & \mathbf{0}_{3 \times 5} \\ \mathbf{0}_{5 \times 3} & P_{\theta,i}(N_i|N_i) \end{bmatrix}. \quad (36)$$

5.2. Estimación de las concentraciones de solutos

Para evaluar el rendimiento del EKF, se utilizaron los datos de las cuatro repeticiones del experimento. La Figura 2 muestra la evolución temporal de las concentraciones medidas experimentalmente frente a las estimaciones de los estados generadas por el modelo para el NH_4^+ y NO_3^- , además de la estimación del estado no observado (concentración de NO_2^-).

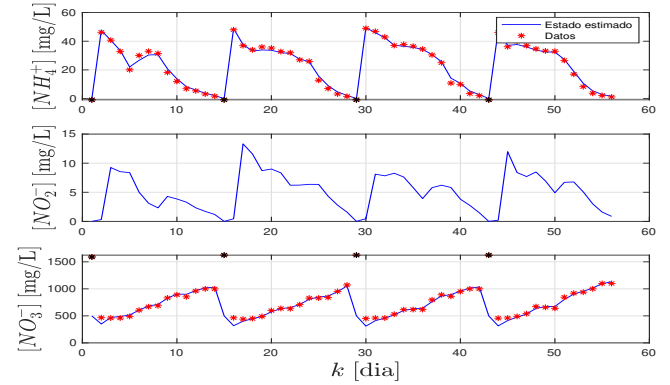


Figura 2: Salida estimada del modelo frente a datos experimentales.

Visualmente, se aprecia cómo el filtro captura de manera precisa la dinámica de ambos solutos, reflejando correctamente el consumo paulatino del NH_4^+ y la consecuente aparición de NO_3^- en el sistema.

Para cuantificar la precisión de esta estimación, se ha calculado la Raíz del Error Cuadrático Medio (RMSE) comparando las predicciones del modelo frente a los datos experimentales y estudiando además su sensibilidad al orden de presentación de los experimentos y a los valores de inicialización de los parámetros.

Se evaluaron las 24 permutaciones posibles correspondientes a las cuatro repeticiones experimentales. En cada iteración, las condiciones iniciales del filtro y sus matrices de covarianza se reiniciaron a sus valores de diseño. Los resultados de este análisis se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1: Análisis de precisión y sensibilidad del EKF evaluado sobre las 24 permutaciones del orden de los ensayos.

Soluto	μ_{RMSE} (mg/L)	σ_{RMSE} (mg/L)
Amonio (NH_4^+)	1.57	0.004
Nitrato (NO_3^-)	44.33	0.08

El RMSE medio obtenido para el NH_4^+ es de 1.57 mg/L, lo que demuestra una alta precisión en la estimación de este estado. En el caso del NO_3^- , el error es de 44.33 mg/L. Considerando que este elemento alcanza concentraciones de hasta 1100 mg/L, este valor representa una desviación inferior al 5 %.

La desviación estándar del error frente a las distintas permutaciones es marginal, lo que confirma que el filtro es robusto e independiente del orden en el que se procesan los datos.

Se estudió también la sensibilidad del RMSE a la condición inicial de los parámetros en tres escenarios: el caso nominal, una subestimación del 50 % de los valores iniciales y una sobreestimación del 100 %. Los resultados se recogen en la Tabla 2. Puesto que el error se mantiene prácticamente constante tanto en NH_4^+ como en NO_3^- , podemos confirmar que el

filtro converge hacia la dinámica real del sistema con independencia del punto de partida.

Tabla 2: Análisis de sensibilidad del RMSE frente a variaciones en la condición inicial de los parámetros (θ_0).

Escenario	RMSE NH_4^+	RMSE NO_3^-
Subestimación (-50 %)	1.57	40.63
Nominal	1.58	44.23
Sobreestimación (+100 %)	1.61	43.98

5.3. Estimación de los parámetros

La Figura 3 muestra la evolución de los parámetros, pudiéndose observar la convergencia progresiva hacia bandas de estabilización acotadas. Este comportamiento se ve respaldado por la Figura 4, donde se observa la evolución de la varianza de dichos parámetros. Como se aprecia, todas ellas presentan una reducción rápida y estable. La combinación de ambos resultados confirma la capacidad del estimador para identificar el total de los parámetros, incluso aquellos asociados con el estado no medido.

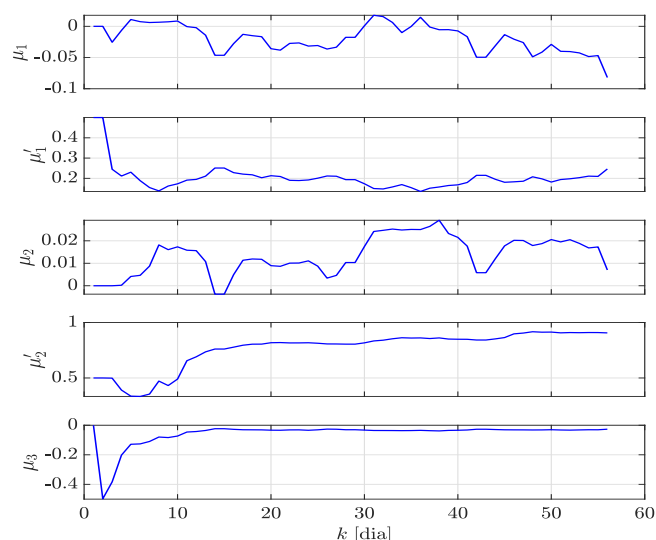


Figura 3: Evolución temporal de los valores de los parámetros.

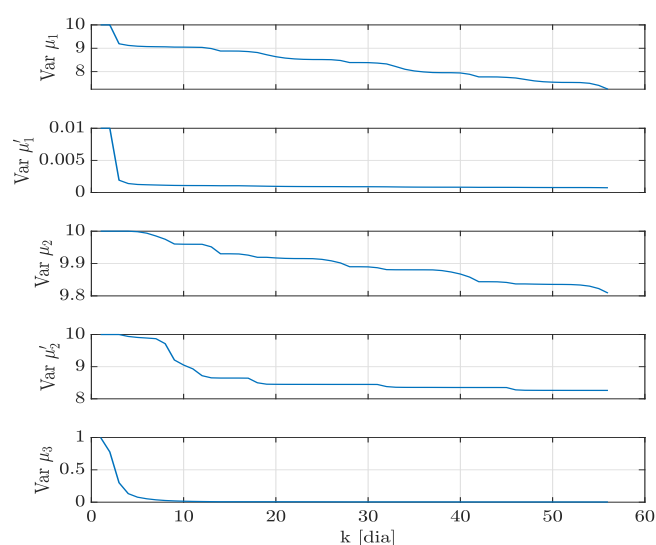


Figura 4: Convergencia de la incertidumbre de los parámetros.

6. Conclusiones

En el estudio que se presenta se ha diseñado e implementado un EKF orientado a la estimación conjunta de estados y parámetros cinéticos del proceso de nitrificación. Dado que el estimador es capaz de reconstruir con precisión las dinámicas de las concentraciones de las especies del nitrógeno, se consigue una considerable reducción de costes y tiempo al emplear dispositivos de medida *low cost* frente a los convencionales análisis de laboratorio. Del análisis del comportamiento del estimador frente a los datos experimentales, se puede concluir que, por un lado, el algoritmo es capaz de estimar de forma precisa las dinámicas de la nitrificación, resultando altamente robusto frente a errores en la inicialización de los parámetros y a permutaciones en el orden de presentación de los datos.

Por otro lado, se ha demostrado que los parámetros cinéticos reducen de forma progresiva su incertidumbre con el paso del tiempo y convergen a valores estables, confirmando la capacidad del algoritmo para capturar toda la cinética de la nitrificación, incluyendo las tasas asociadas al estado no observado.

El estudio de la dependencia de los parámetros a variables externas como la temperatura o la humedad se contempla para trabajos futuros.

7. Agradecimientos

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por la Agencia Estatal de Investigación (Ayuda Ramón y Cajal RYC2021-032919-I, Consolidación Investigadora CNS2025-166171) y por la Fundación Biodiversidad del Ministerio para la Transición Ecológica y el Reto Demográfico, a través de la Convocatoria de ayudas para la mejora ambiental en el ámbito agrícola y forestal y el desarrollo sostenible del entorno de Doñana.

Referencias

- Allen, R. G., Pereira, L. S., Raes, D., Smith, M., 1998. Crop Evapotranspiration: Guidelines for Computing Crop Water Requirements. Food and Agriculture Organization of the United Nations, Rome. URL: <https://www.fao.org/4/x0490e/x0490e00.htm>
- Ljung, L., 1995. System identification toolbox: User's guide. Citeseer.
- McLaren, A. D., 1969. Steady state studies of nitrification in soil: theoretical considerations. Soil Science Society of America Journal 33 (2), 273–276.
- Reales, F., Orihuela, L., 2025. Exploiting a data-driven model of nitrification for filtering and estimation of nitrogen species. IFAC-PapersOnLine 59 (23), 285–290.
- Ribeiro, M. I., 2004. Kalman and extended Kalman filters: Concept, derivation and properties. Institute for Systems and Robotics 43 (46), 3736–3741.
- Sabey, B., Frederick, L., Bartholomew, W., 1959. The formation of nitrate from ammonium nitrogen in soils: III Influence of temperature and initial population of nitrifying organisms on the maximum rate and delay period. Soil Science Society of America Journal 23 (6), 462–465.
- Sahrawat, K., 2008. Factors affecting nitrification in soils. Communications in Soil Science and Plant Analysis 39 (9-10), 1436–1446.
- Saunders, P., Bazin, M., 1973. Nonsteady state studies of nitrification in soil: theoretical considerations. Soil Biology and Biochemistry 5 (5), 545–557.
- Sebilo, M., Mayer, B., Nicolardot, B., Pinay, G., Mariotti, A., 2013. Long-term fate of nitrate fertilizer in agricultural soils. Proceedings of the National Academy of Sciences 110 (45), 18185–18189.
- Šimůnek, J., Šejna, M., Brunetti, G., van Genuchten, M. T., 2022. The HYDRUS software package for simulating the one-, two-, and three-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably-saturated porous media. Technical Manual I. Hydrus D 1.