



II Ciclo de 20 MasterClass

AGUASRESIDUALES.INFO

MasterClass

11



“Gemelos digitales como herramienta para el soporte a la toma de decisiones en EDAR mediante modelado CFD e Inteligencia Artificial”



30 MARZO

16:30 h. española

Sergio Chiva

Director de la Cátedra FACSA de
Innovación en el Ciclo Integral del Agua
Catedrático de Universidad



II Ciclo de 20 MasterClass

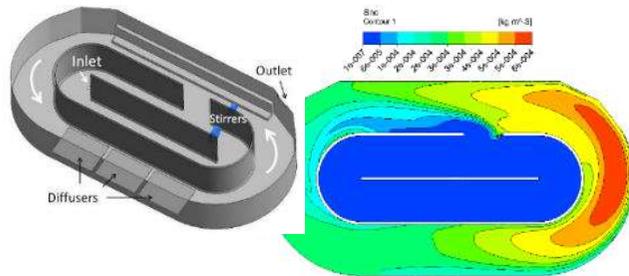
AGUASRESIDUALES.INFO

Principales líneas de investigación

Modelado hidrodinámico mediante técnica CFD: principalmente en fluidos multifase (Gas, líquido, partículas sólidas)

Desarrollo de equipos de medida y experimentación para flujos multifásicos

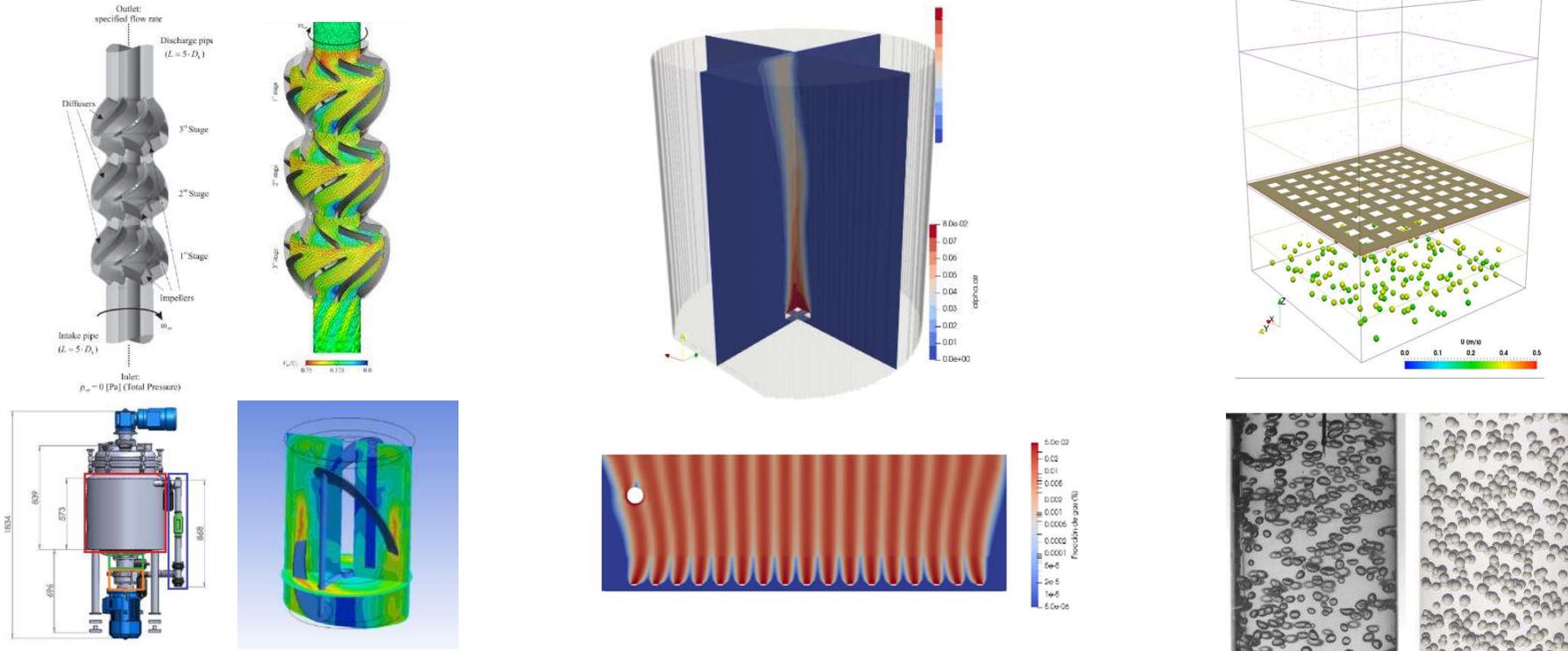
Estudio de dispersión de contaminantes atmosféricas en entornos urbanos: Dispersión de olores



El Grupo de Fluidos Multifásicos

Modelado hidrodinámico mediante técnica CFD

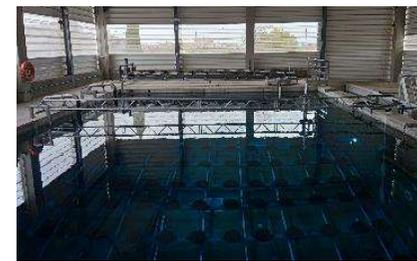
Desarrollo de modelos en ANSYS-CFX, ANSYS-FLUENT, OpenFOAM o códigos in-house para diferentes escenarios complejos con presencia de mas de una fase.



El Grupo de Fluidos Multifásicos

Desarrollo de equipos de medida y experimentación para flujos multifásicos

Tanque de 12 m x 8 m x 5 m de profundidad dotado con soplante, parrillas de difusores extraíble , agitadores. Instrumentada para análisis de SOTE , caracterización hidrodinámica, densidad de área interfacial, transferencia de masa y análisis de la aireación de equipos industriales.

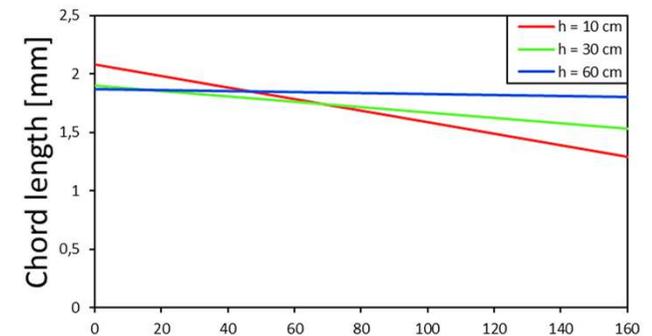
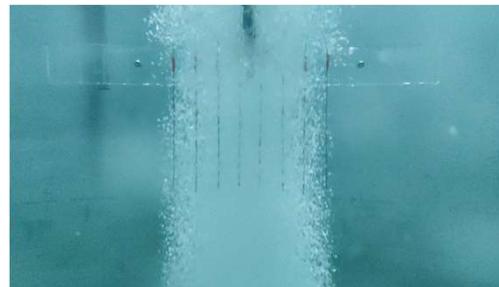
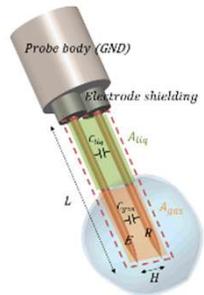
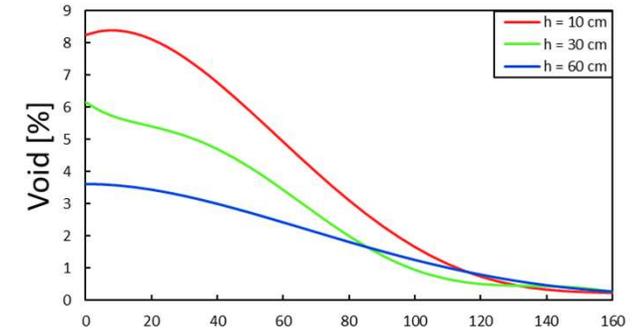
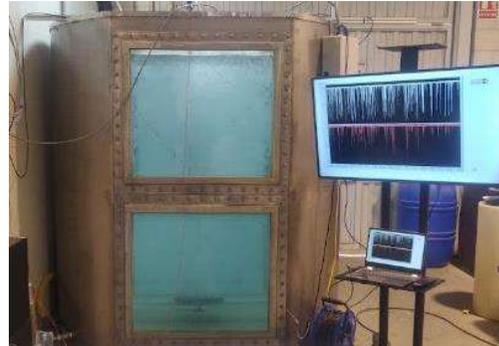
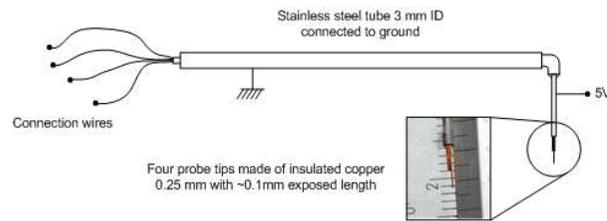


<https://youtu.be/lhghKcysK48>

El Grupo de Fluidos Multifásicos

Desarrollo de equipos de medida y experimentación para flujos multifásicos

Desarrollo de **sondas miniaturizadas** para la caracterización local de la fase gas (burbujas) dispersa en sistema multifásicos: **área interfacial, tamaño de burbuja, velocidad, número de burbujas y fracción de gas.**

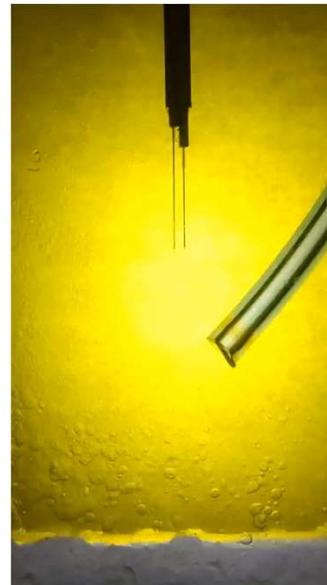


El Grupo de Fluidos Multifásicos

Desarrollo de equipos de medida y experimentación para flujos multifásicos

Desarrollo de sondas para la caracterización local de la fase gas (burbujas) dispersa en sistema multifásicos.

Las sondas no solo pueden ser útiles para aire + agua , sino que se han probados con éxito en diferentes combinaciones de fluidos y fases



*Burbuja Aire +
aceite*



*Gota agua +
aceite*



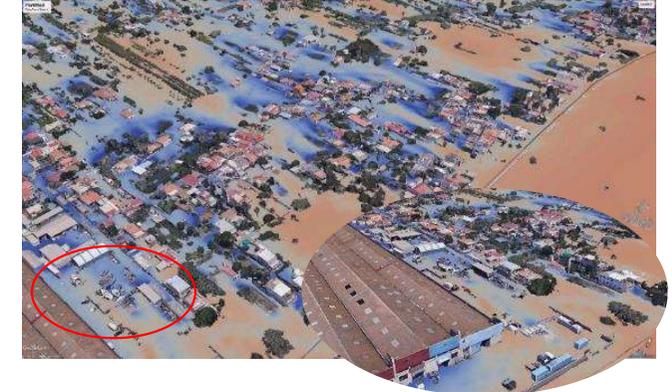
*Burbuja aire + Gota
agua + aceite*



*Burbuja aire + Gota
agua + aceite*

El Grupo de Fluidos Multifásicos

Estudio de dispersión de contaminantes atmosféricas en entornos urbanos
Desarrollo de Gemelos digitales del entorno urbano para analizar la micrometeorología y la dispersión de contaminantes y partículas. Modelos con alta resolución temporal y espacial que contemplen entornos urbanos complejos

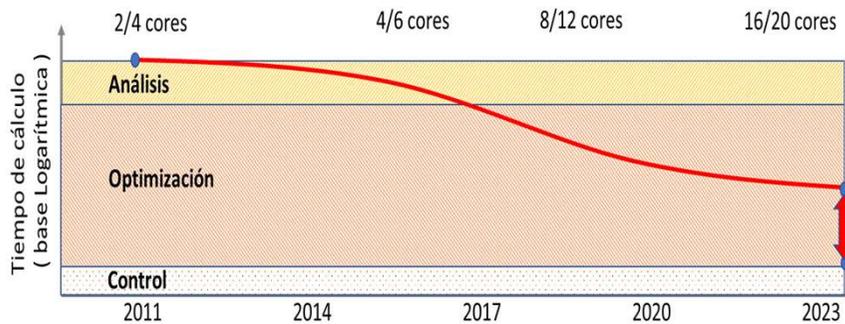


Distribución de la velocidad del viento en un plano en Puerto de Castellón

Development of high resolution digital twins to fast prediction of air pollutants distribution and the odour impact in cities based on the application of artificial intelligence to CFD models (APPWIND). Proyectos de I+D+I en líneas estratégicas, en colaboración público – privada.

PORTMOD: PLATAFORMA DE GESTIÓN AMBIENTAL APLICADA AL CONTROL DE CONTAMINACIÓN ATMOSFÉRICA EN PUERTOS BASADA EN IA Y SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE FLUIDOS. Proyecto Agencia Valenciana de la Innovación. 2022

OBJETIVO



- Las **técnicas CFD** han probado su utilidad como **herramienta de análisis y optimización** de los elementos de una EDAR
- Pero su **tiempo de computación elevado** evita que puedan ser utilizadas en aplicaciones interesantes como el desarrollo de estrategias de explotación o el control de la planta.
- La creación de un **Gemelo Digital que aúne la potencia del cálculo CFD con un tiempo reducido** podría convertirse en una herramienta muy útil en la mejora de la optimización de las plantas



Diseño de instalaciones



Análisis de deficiencias y optimización



Estrategias de explotación



Control de la planta

DEFINICIÓN DE GEMELO DIGITAL

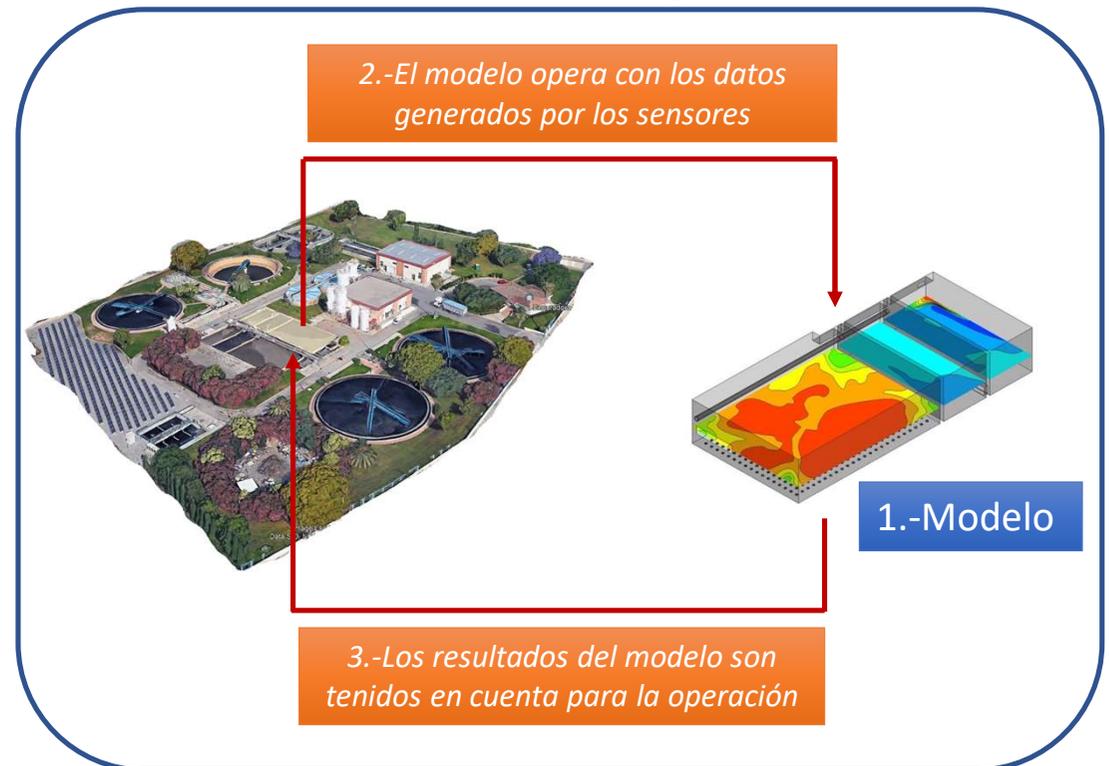
- Introducido por M.Grievés en 2003 por la NASA, pero se remonta a los años 60 (Apolo 13).
- Se trata de un concepto muy ambiguo y genérico, con infinidad de definiciones.
- En general debería contemplar:

1. Un modelo del objeto de estudio

2. Alguna forma de conexión de los datos generados por los sensores del objeto con el modelo

3. Transferencia de la información generada por el modelo para generar acciones en el objeto de estudio

Gemelo Digital



DEFINICIÓN DE GEMELO DIGITAL

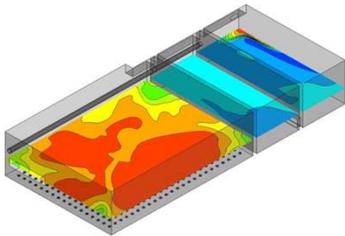


(*) <https://www.gartner.es/es/metodologias/hype-cycle>

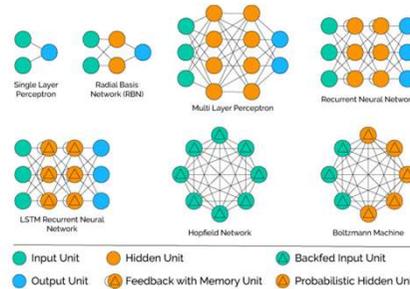


(*) *Gartner hype cycle, 2018*

CFD



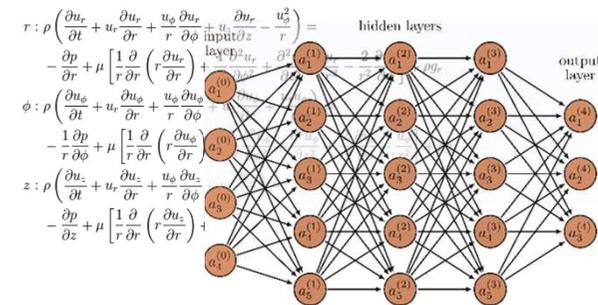
Redes Neuronales (ANN)



Representan muy bien el fenómeno, pero requieren de una gran carga computacional. **Tiempos de cálculo muy largos**

Modelos Data-Driven. Metodología muy sólida, con ejemplos abundantes, pero con dificultades para predicciones transitorias largas en CFD y necesidad de grandes cantidades de datos

Physics-Informed ANN (PINNs)

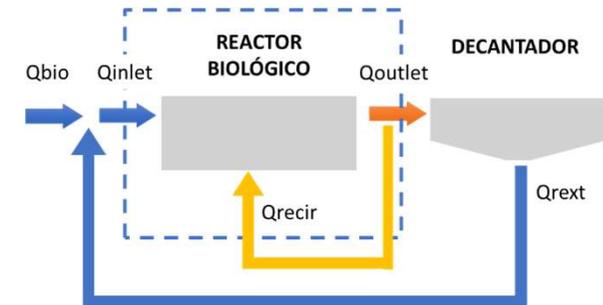


Cuando las leyes físicas (PDE) que gobiernan los datos que se quieren simular se tiene en cuenta a la hora de entrenar las ANN.

Muy prometedora pero todavía “working in progress...”, depende mucho de la aplicación.

Caso de Estudio: Reactor biológico de una EDAR

- Reactor Biológico Ludzack-Ettinger Modificado (MLE)
- EDAR URBANA
- Aireación mediante difusores circulares en tanque aeróbico
- Reactor en dos líneas



Transitorio 24 h

- Q_{inlet} → variable $Q_{bio} + Q_{rext}$
- Q_{recir} → constante 1400 m³/h
- Q_{outlet} → suma $Q_{inlet} + Q_{recir}$

Caso de Estudio: Reactor biológico de una EDAR

Nos centramos en una de la líneas del reactor:

- Zona anóxica: 2 tanques + 2 agitadores
- Zona aerobia: 1 tanque + difusores circulares + 1 agitador

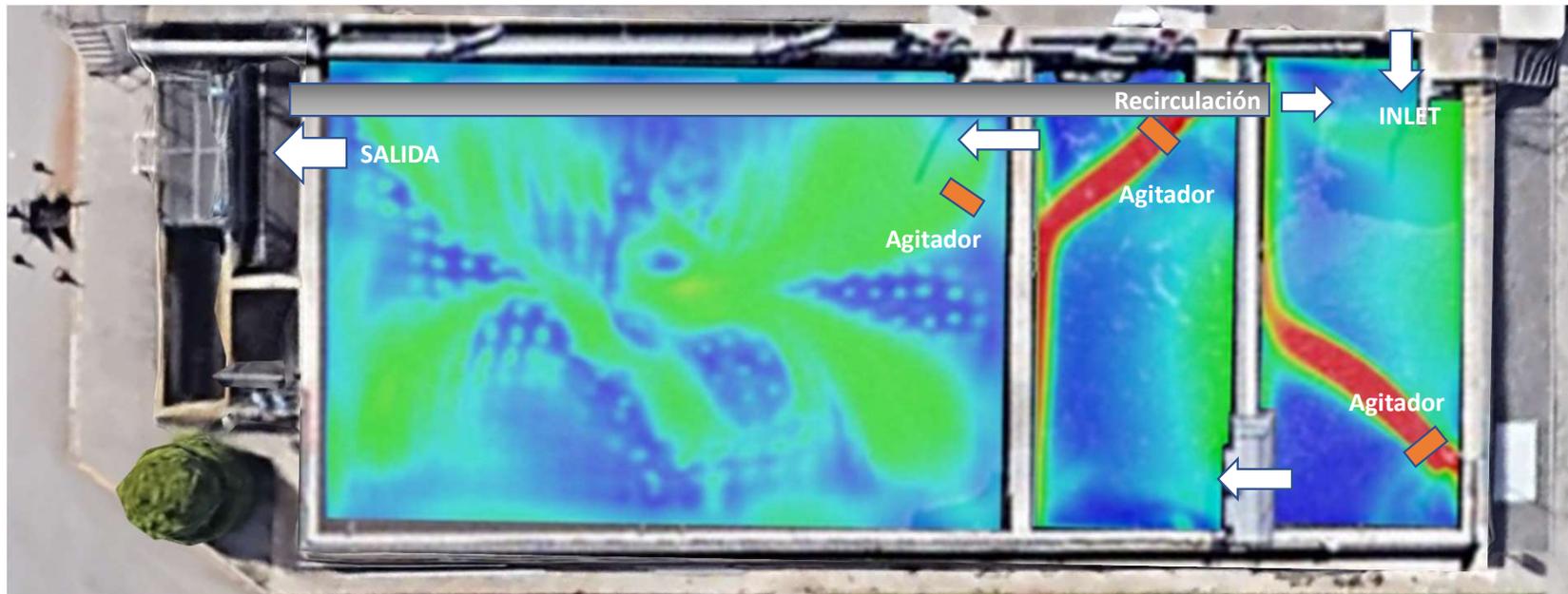


Modelo CFD del Reactor Biológico de la EDAR

Código Open Source

Open  FOAM

- *PimpleFoam* Solver algorithm: solving transient simulations
- *TwoPhaseEulerFoam* algorithm: solving two phase flow transients
- Incompressible Isothermal Newtonian Fluid / Compressible Gas
- $k - \epsilon$ turbulence model

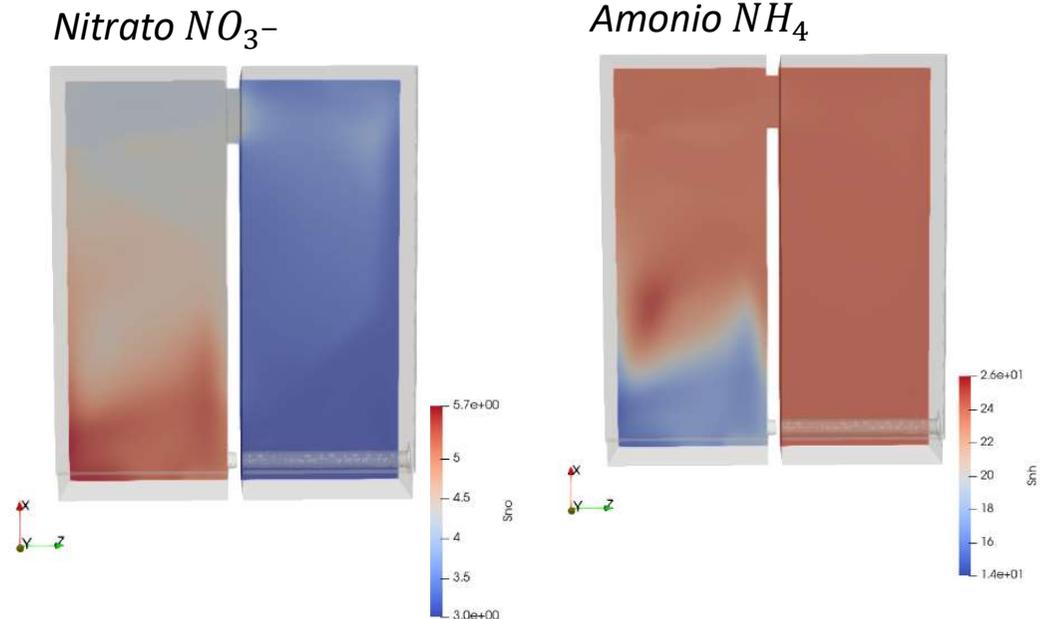


Modelo CFD del Reactor Biológico de la EDAR

MODELO BIOQUÍMICO

- **My_ASM1Foam:** Un nuevo solver desarrollado e implementado en OpenFoam que incluye el modelo ASM1 (Henze et al., 2000).
- El modelo CFD reproduce la evolución de 13 variables bioquímicas

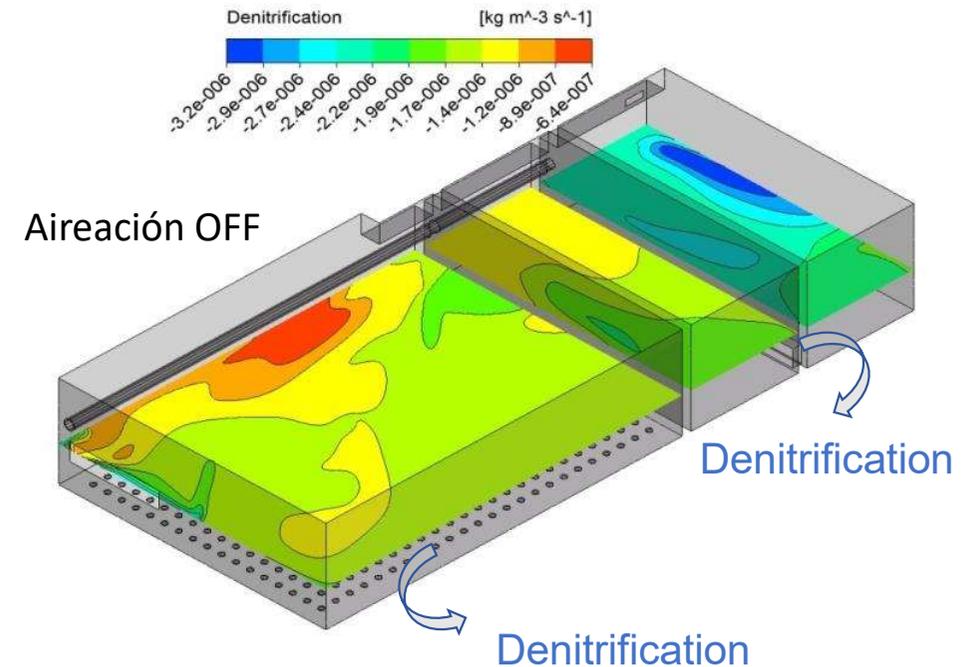
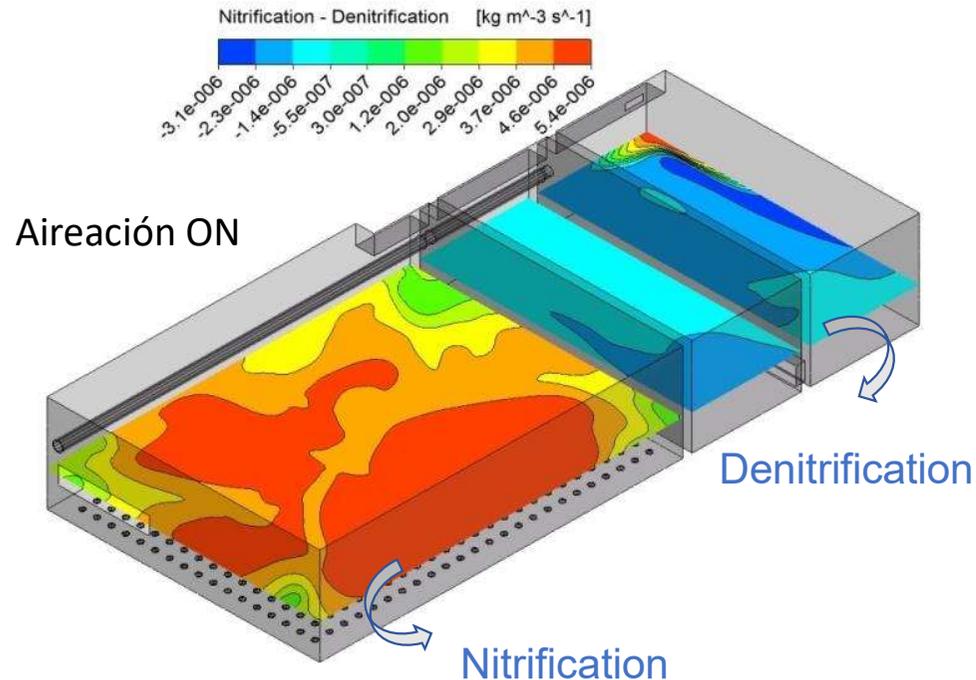
| Variable ASM1 | | | |
|---------------|-----------------------------|----|---|
| 1 | So (g DQO/m ³) | 8 | Xs (g DQO/m ³) |
| 2 | Ss (g DQO/m ³) | 9 | Salk (mol HCO ₃ ⁻ /m ³) |
| 3 | Xba (g DQO/m ³) | 10 | Snh (g N/m ³) |
| 4 | Xbh (g DQO/m ³) | 11 | Sno (g N/m ³) |
| 5 | Xi (g DQO/m ³) | 12 | Snd (g N/m ³) |
| 6 | Si (g DQO/m ³) | 13 | Xnd (g N/m ³) |
| 7 | Xp (g DQO/m ³) | | |



Modelo CFD del Reactor Biológico de la EDAR

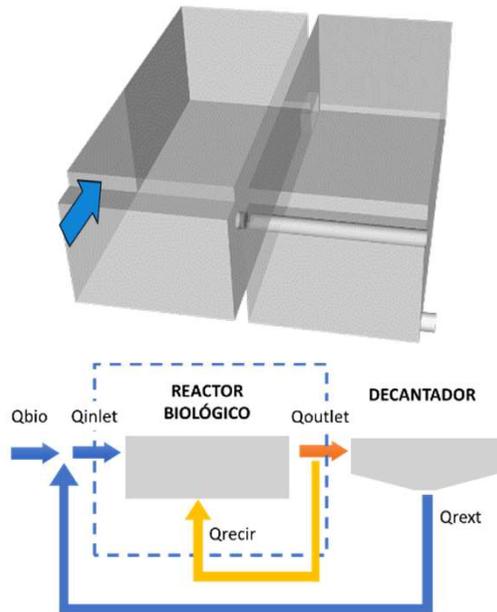
MODELO BIOQUÍMICO

- **My_ASM1Foam**: Un nuevo solver desarrollado e implementado en OpenFoam que incluye el modelo ASM1 (Henze et al., 2000).
- El modelo CFD reproduce la evolución de 13 variables bioquímicas



Modelo CFD del Reactor Biológico de la EDAR

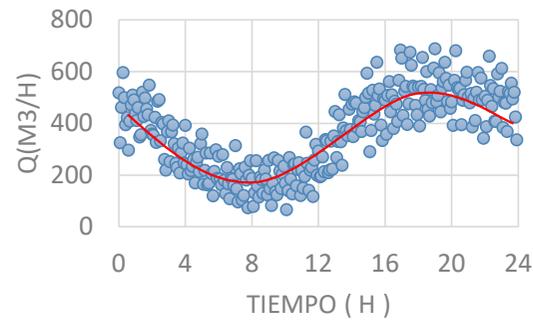
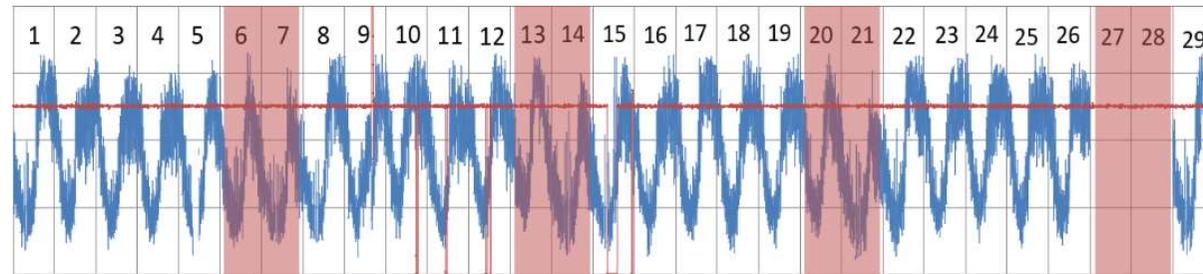
CAUDAL ENTRADA AL REACTOR BIOLÓGICO



Transitorio 24 h

- Q_{inlet} → variable $Q_{bio} + Q_{rext}$
- Q_{recir} → constante 1400 m³/h
- Q_{outlet} → suma $Q_{inlet} + Q_{recir}$

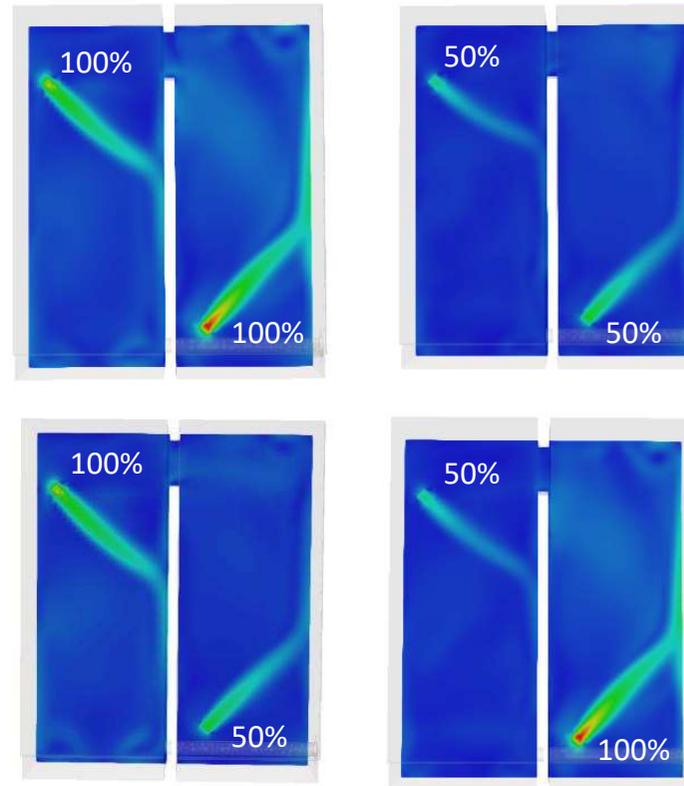
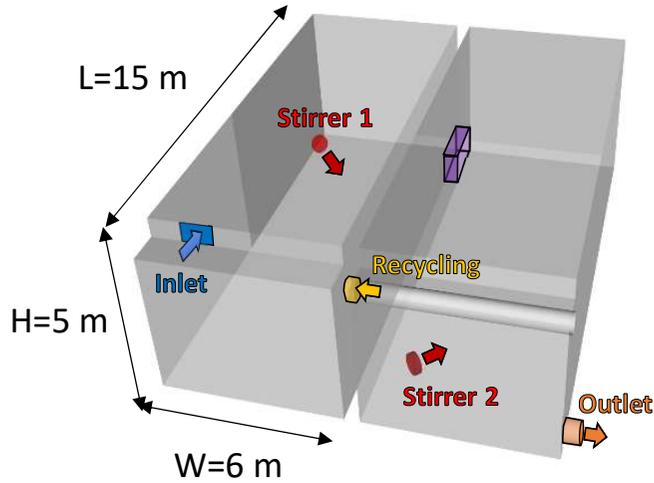
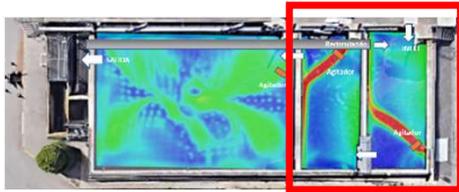
Q influente Q Recirculación externa



Modelo CFD del Reactor Biológico de la EDAR

RESULTADOS MODELO

Tanque anóxico

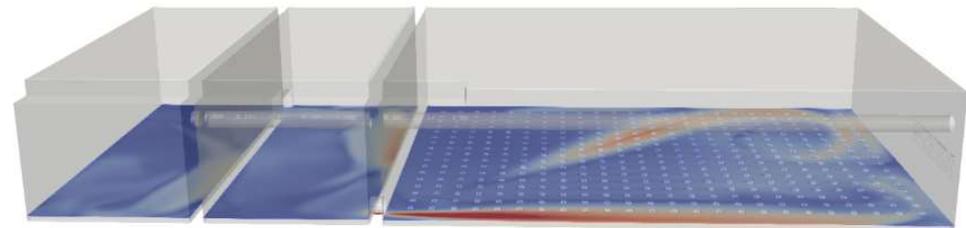
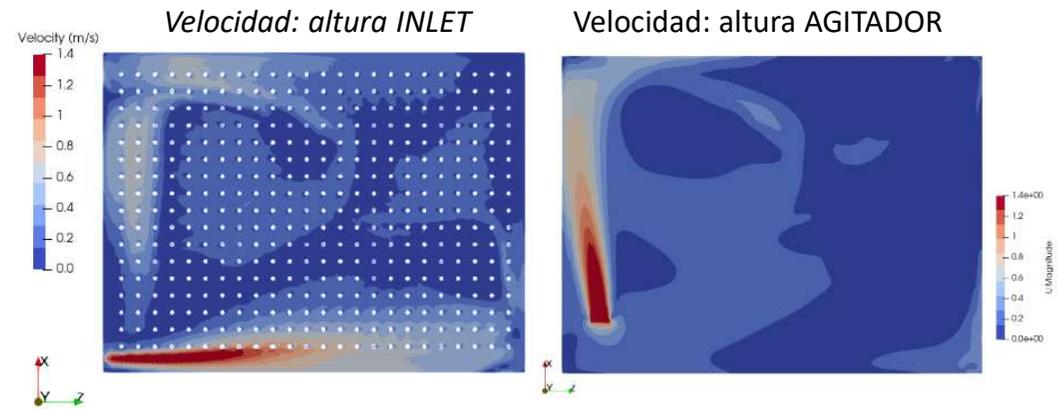
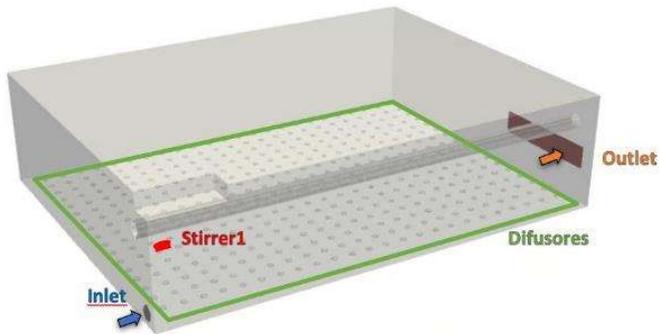
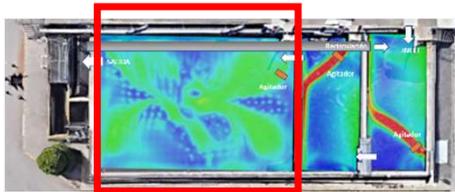


Efecto de la velocidad de rotación de los agitadores

Modelo CFD del Reactor Biológico de la EDAR

RESULTADOS MODELO

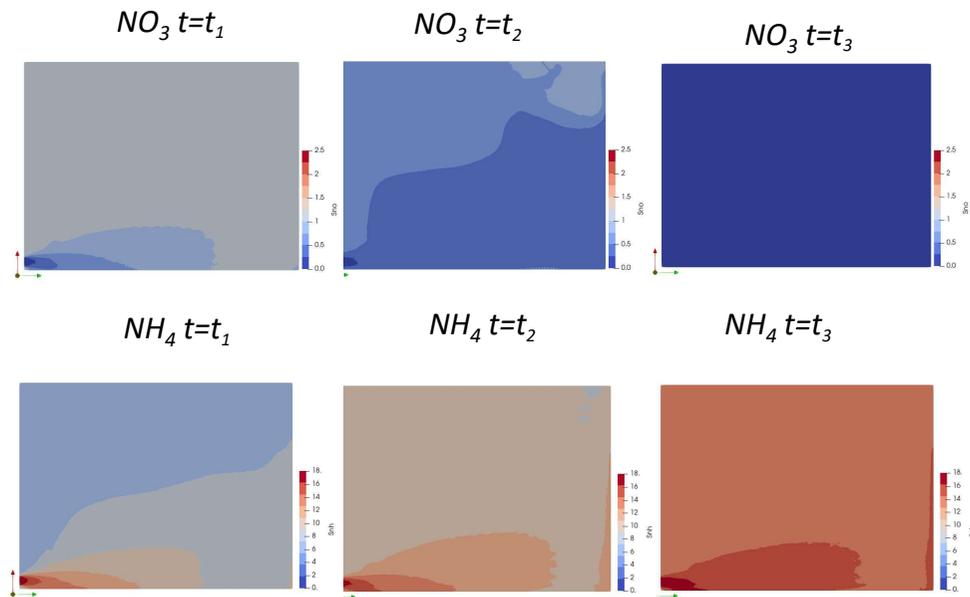
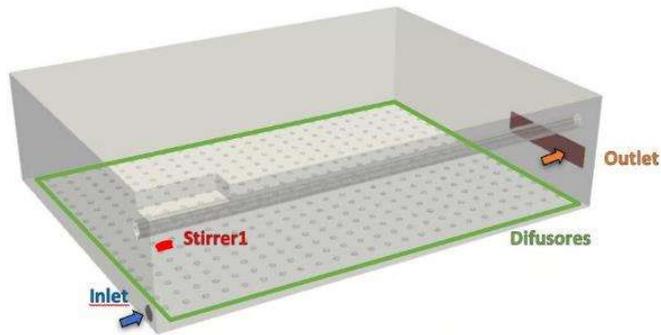
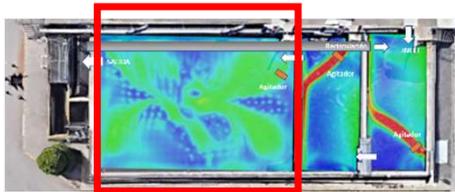
Tanque aerobio (sin aireación)



Modelo CFD del Reactor Biológico de la EDAR

RESULTADOS MODELO

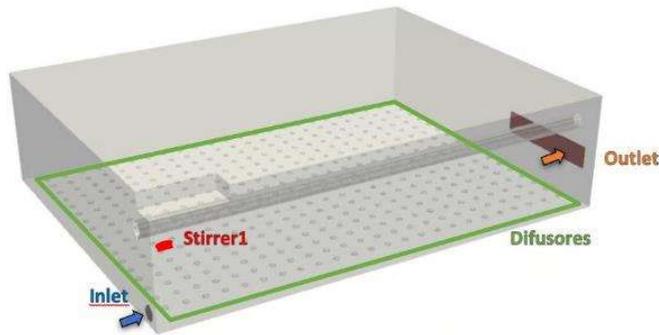
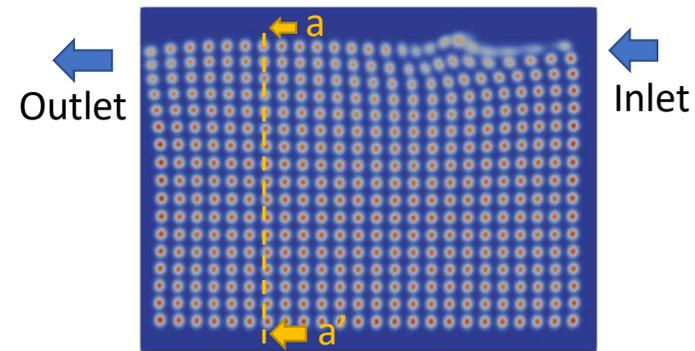
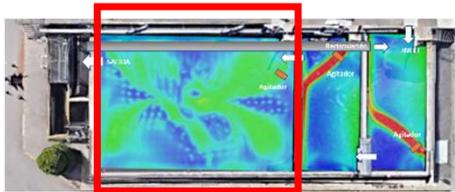
Tanque aerobio (sin aireación)



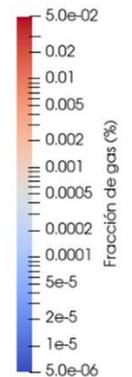
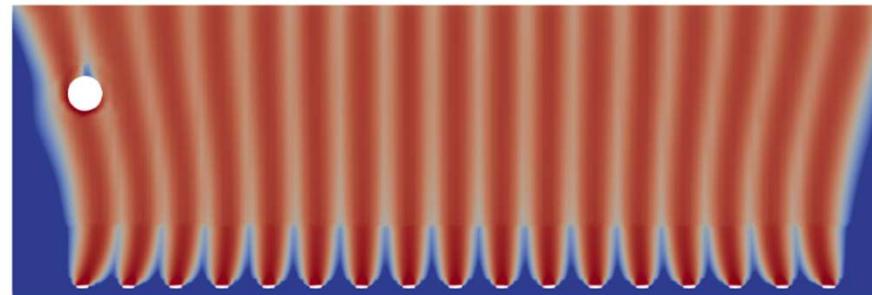
Modelo CFD del Reactor Biológico de la EDAR

RESULTADOS MODELO

Tanque aerobio (aireación)



Sección a a'

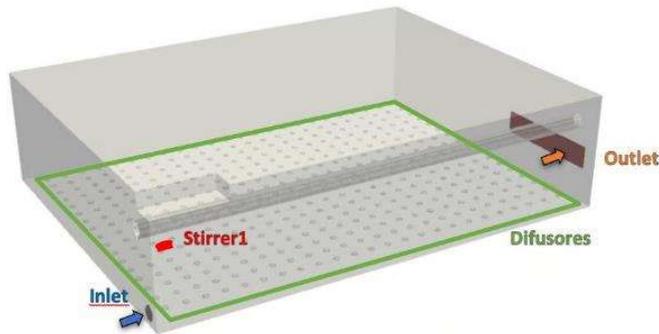
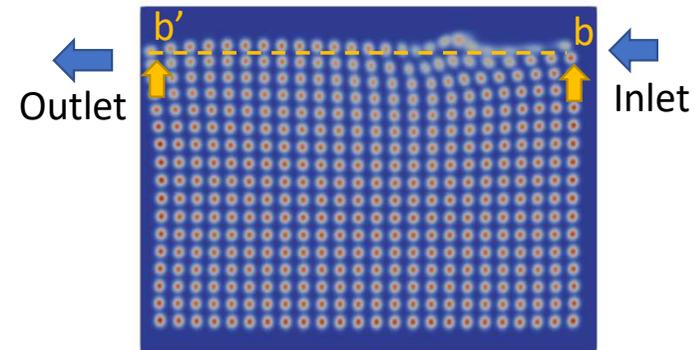
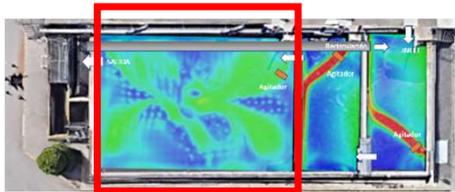


Columnas burbujas creadas por los difusores

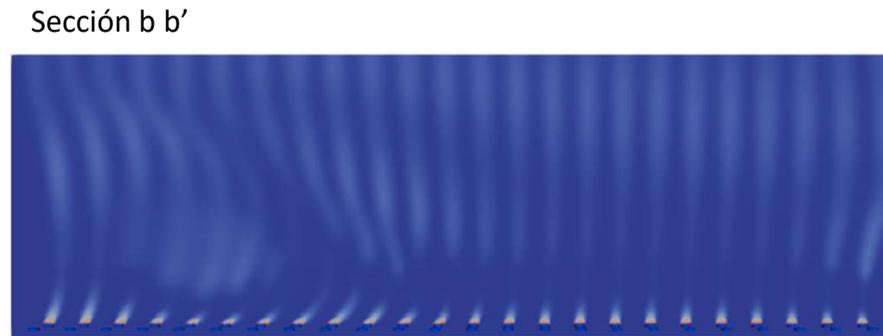
Modelo CFD del Reactor Biológico de la EDAR

RESULTADOS MODELO

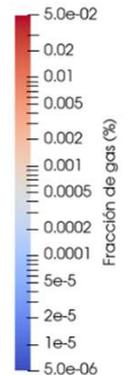
Tanque aerobio (aireación)



Inlet

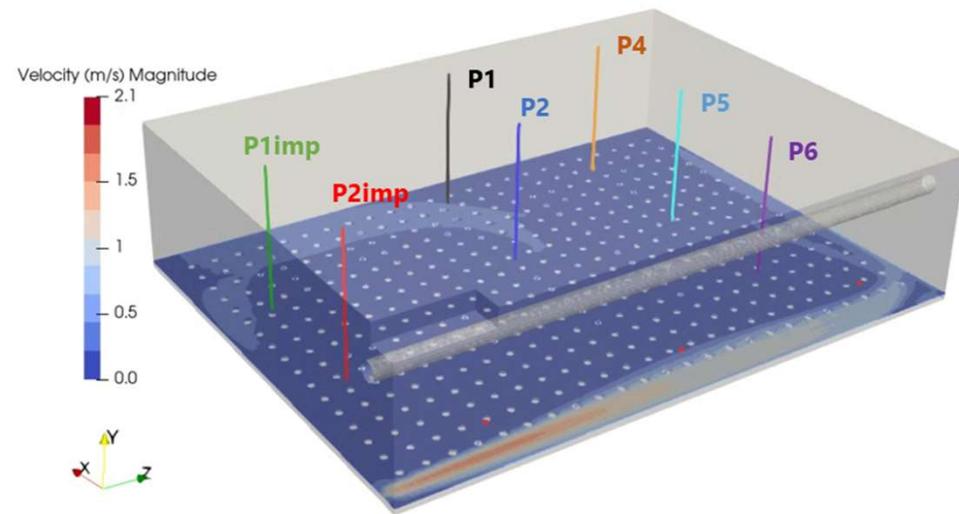


Efecto del caudal entrante



MEDIDAS EXPERIMENTALES EN LA EDAR

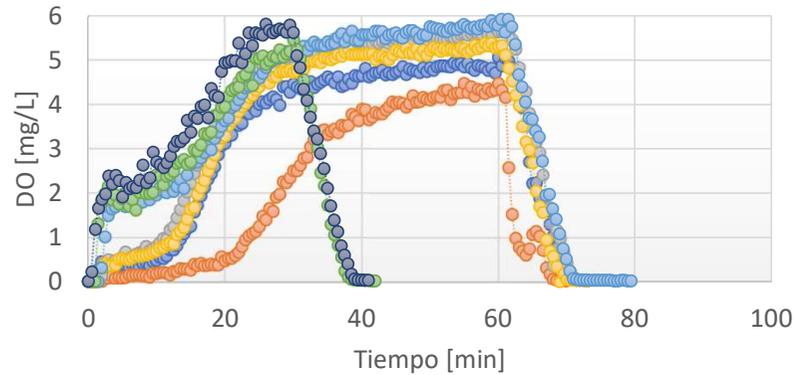
- Perfil vertical de velocidades (ADV)
- Perfil de concentraciones de oxígeno disuelto en agua



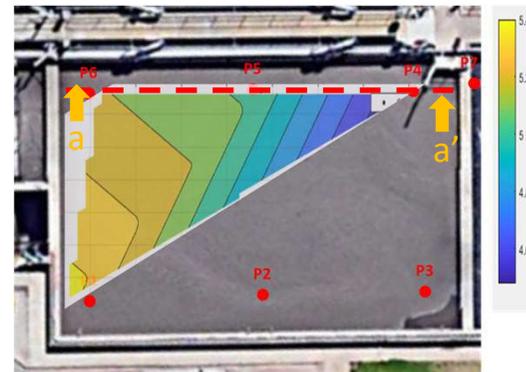
Campaña Experimental y validación modelo CFD

MEDIDAS EXPERIMENTALES EN LA EDAR

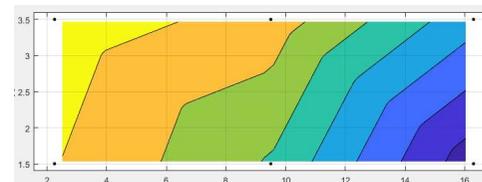
- Perfil vertical de velocidades (ADV)
- Perfil de concentraciones de oxígeno disuelto en agua



● P4-H1 ● P4-H3 ● P5-H1 ● P5-H3
● P6-H1 ● P1-H1 ● P6-H3

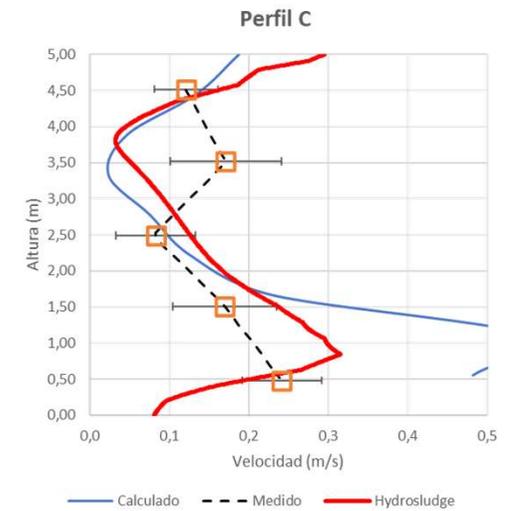
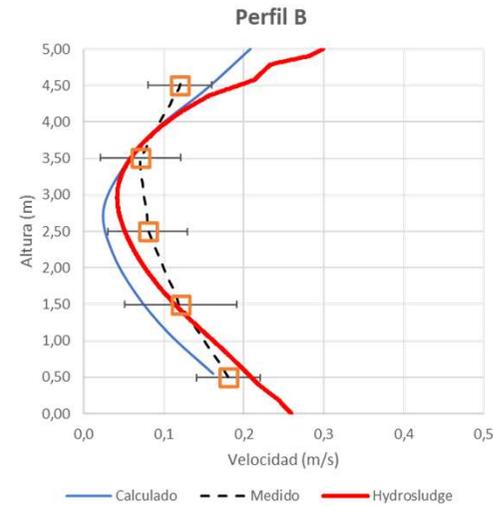
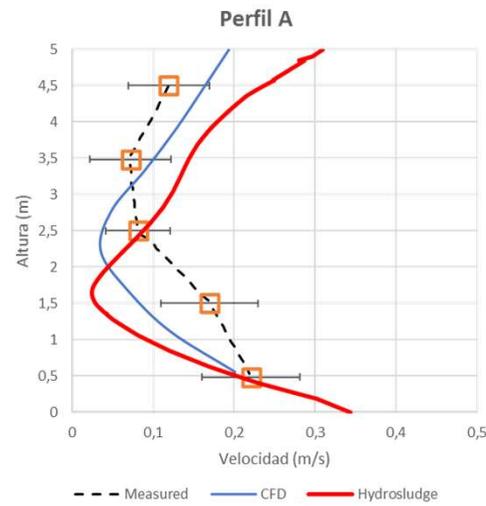
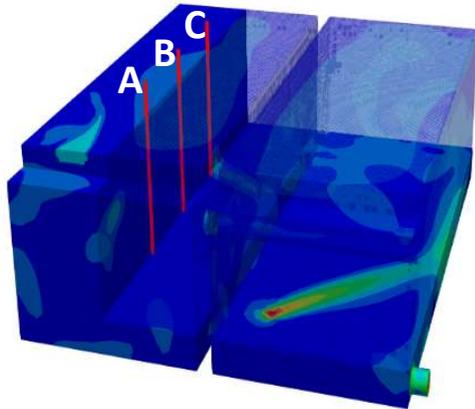
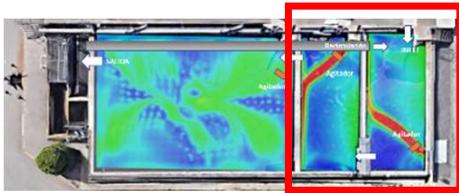


Sección a-a'



VALIDACION MODELO CFD

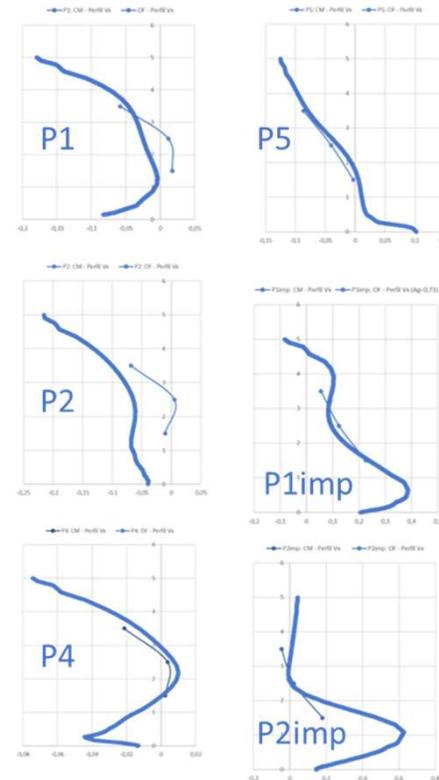
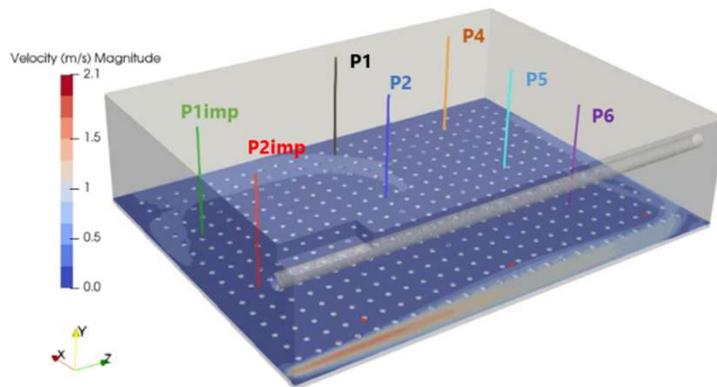
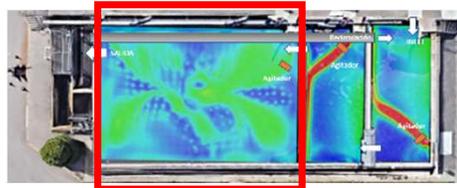
Validación del modelo CFD frente a los datos experimentales de velocidad



Campaña Experimental y validación modelo CFD

VALIDACION MODELO CFD

Validación del modelo CFD frente a los datos experimentales de velocidad



Velocidad X

Transitorio 24h

Hidrodinámica + bioquímica

Tiempo de cálculo:

Total CPU Time: 868 h

16 cores x 54 h



Diseño de instalaciones



Análisis de deficiencias y optimización



Estrategias de explotación



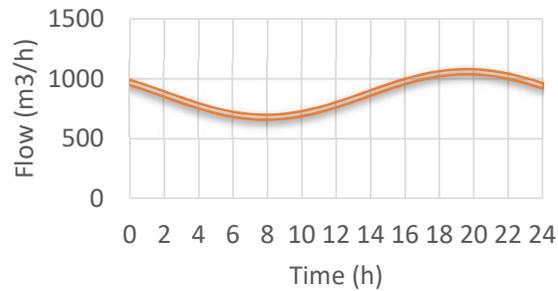
Control de la planta

- Las **técnicas CFD** han probado su utilidad como **herramienta de simulación en EDAR**
- Pero su **tiempo de computación elevado** evita que puedan ser utilizadas en aplicaciones interesantes como el desarrollo de estrategias de explotación o el control de la planta.
- La creación de un **Gemelo Digital que aúne la potencia del cálculo CFD con un tiempo reducido** podría convertirse en una herramienta muy útil en la mejora de la optimización de las plantas

DESARROLLO DEL CONJUNTO DE ENTRENAMIENTO

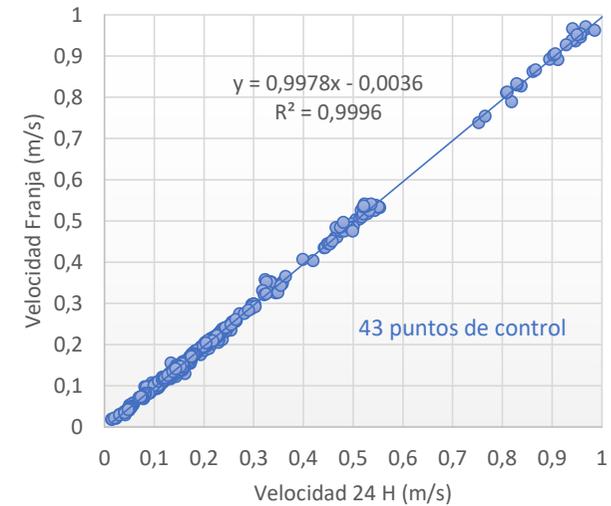
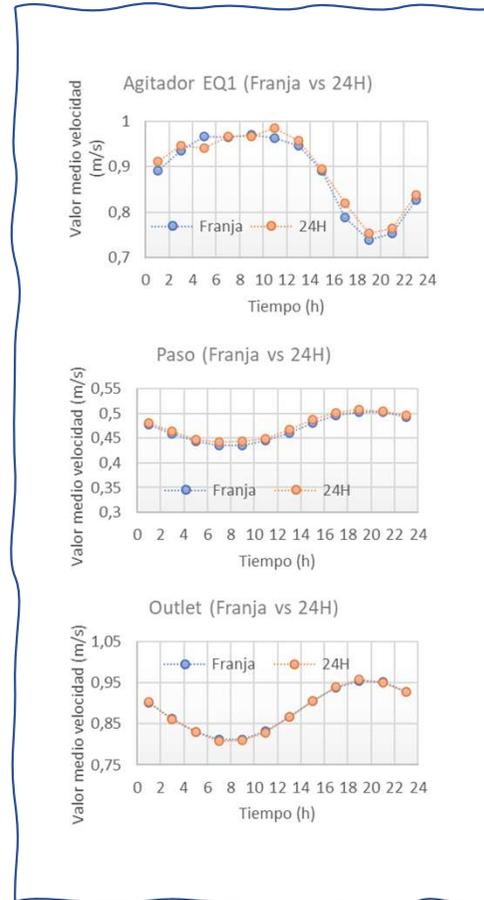
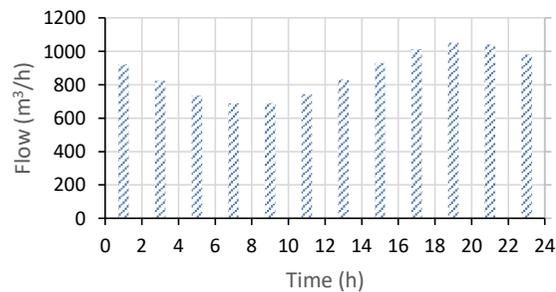
Estrategia 1:

Simulación transitorio 24 h



Estrategia 2:

**Múltiples estacionarios (Franjas)
12 simulaciones de 2 h**



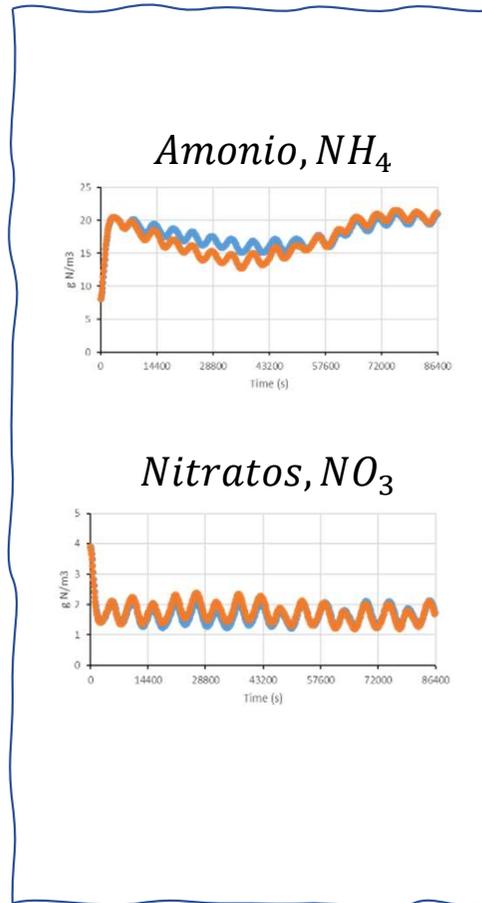
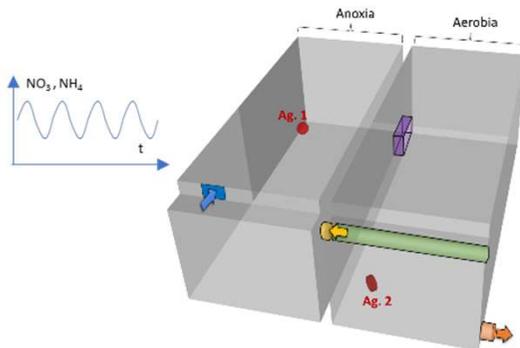
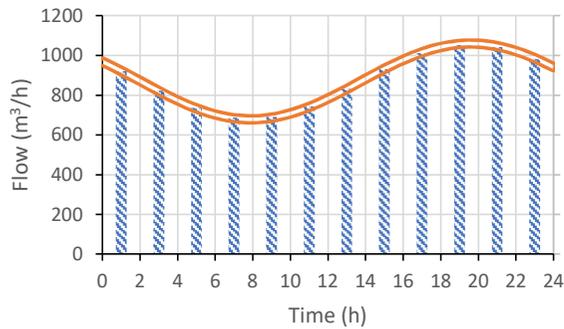
**En este caso, es equivalente el
campo de velocidades en ambas
estrategias**



DESARROLLO DEL CONJUNTO DE ENTRENAMIENTO

Estrategia 1:
Simulación transitorio 24 h

Estrategia 2:
Múltiples estacionarios (Franjas)



Las variables bioquímicas ofrecen el mismo comportamiento dinámico ante un transitorio en ambas estrategias



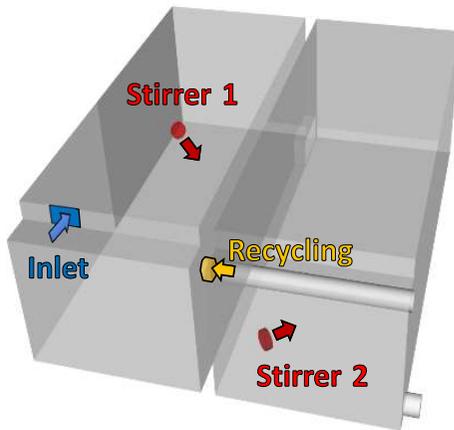
Estrategia 1:
Simulación transitorio 24 h

CPU Time: 868 h

Estrategia 2:
Múltiples estacionarios

CPU Time: 740 h

DESARROLLO DEL CONJUNTO DE ENTRENAMIENTO



1774 casos simulados

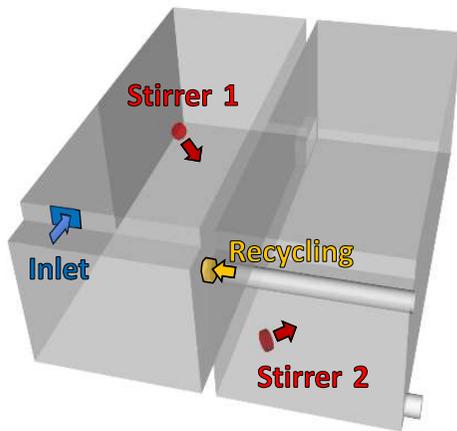
Estacionarios 2h

| | |
|------------------|--|
| Inlet | 87 valores [0.1666 - 0.3389] m ³ /s |
| Recycling | 0.333, 0.3611, 0.3889, 0.4167 y 0.4443 m ³ /s |
| Stirrer 1 | [0.625 - 1.25] N(rpm)/No(rpm) |
| Stirrer 2 | 0.8625 or 1.725 N(rpm)/No(rpm) |

DESARROLLO DE LA RED NEURONAL: HIDRODINÁMICA

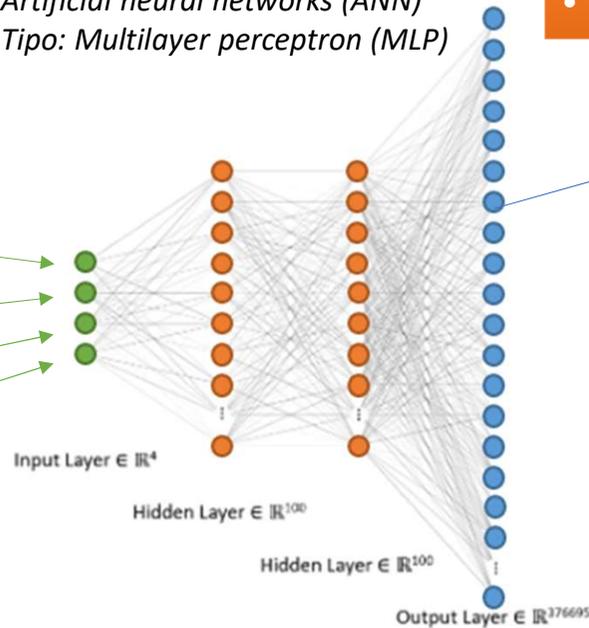
INPUTS

4 parámetros



Inlet
Recycling
Stirrer 1
Stirrer 2

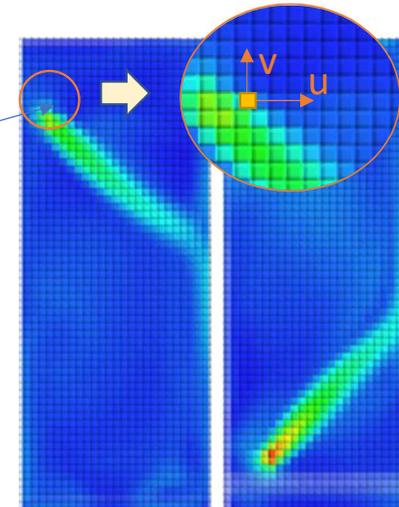
Artificial neural networks (ANN)
Tipo: Multilayer perceptron (MLP)



OUTPUTS

Para cada una de las celdas de la malla CFD

- Componente Velocidad: u, v, w
- Viscosidad turbulenta μ_t



DESARROLLO DE LA RED NEURONAL: HIDRODINÁMICA

OpenFOAM

Predicción Velocidad

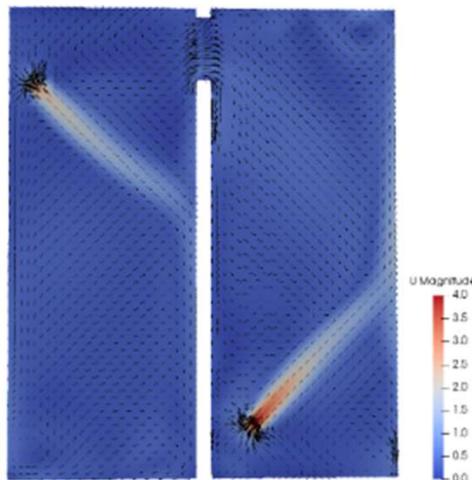


2h de tiempo de simulación

Tiempo de Cálculo: 13875 s

Red Neuronal

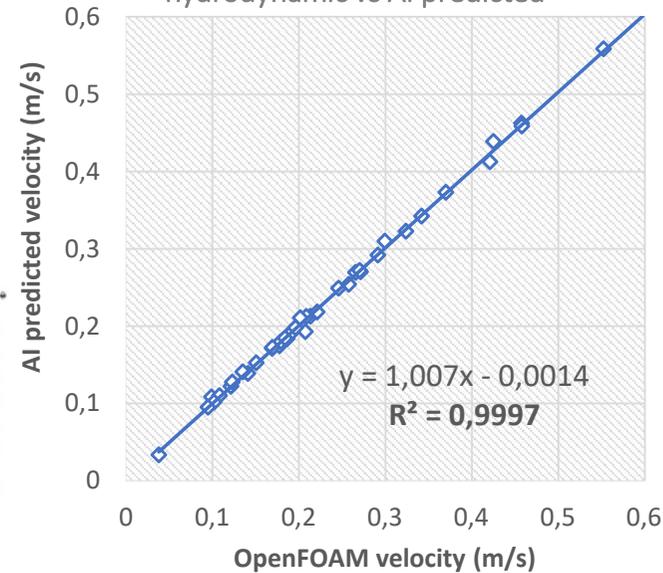
Predicción Velocidad



2h de tiempo de simulación

Tiempo de Cálculo: 0,2 s

Velocity of maximum error case OF hydrodynamic vs AI predicted



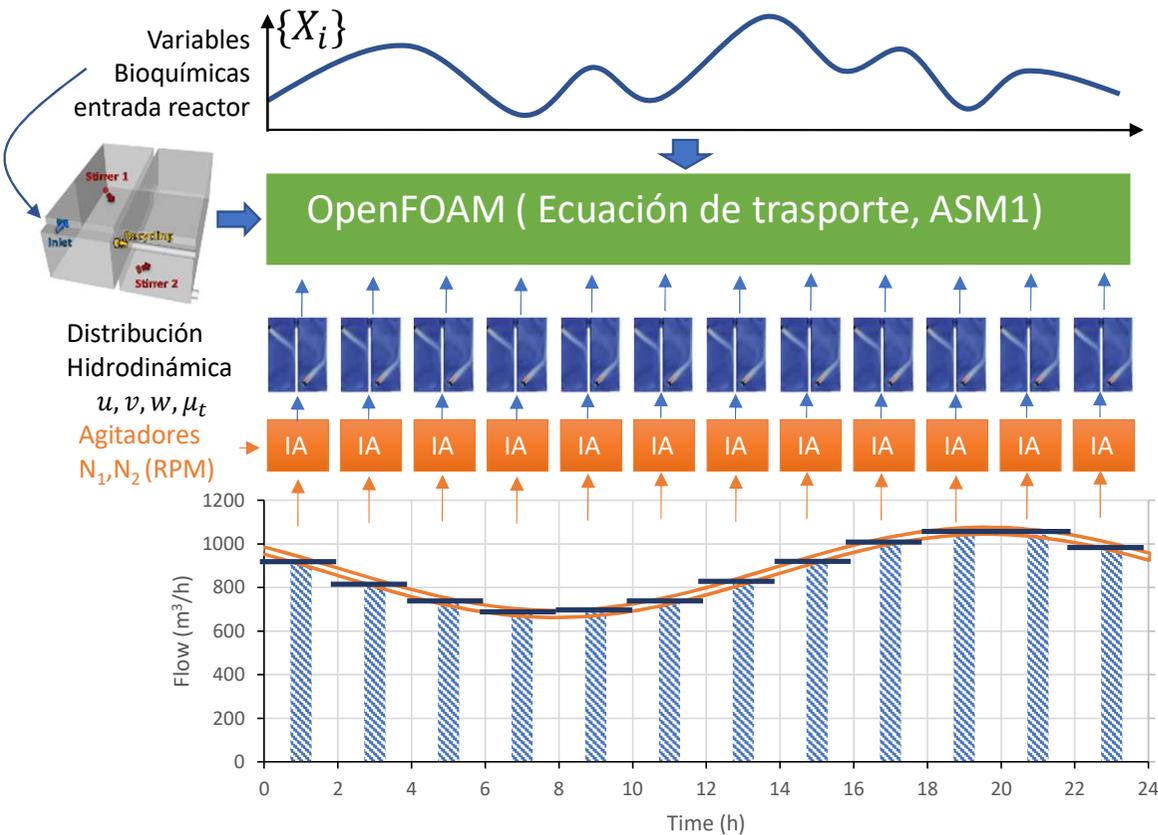
| Errors | | | |
|----------|----------|----------|--------------------|
| Minimum | Maximum | Mean | Standard deviation |
| 4.04E-05 | 3.31E-03 | 2.49E-04 | 3.52E-04 |

La ANN ofrece excelentes predicciones de las componente de la velocidad y la viscosidad turbulenta, con un error medio de 2,5 E-4



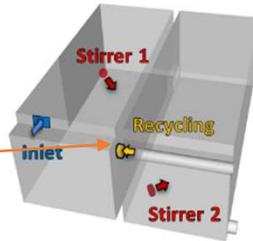
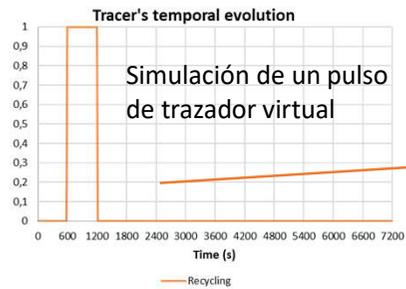
Creación del Gemelo Digital

DESARROLLO DE LA BIOQUÍMICA

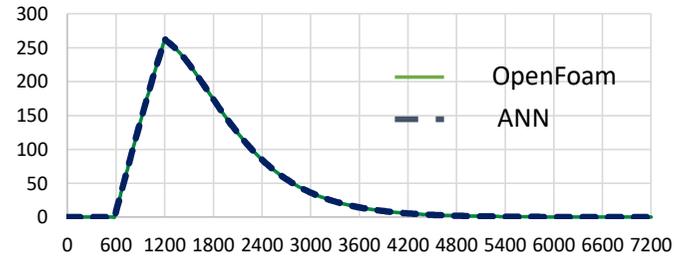


En OpenFoam se resuelve, sobre la misma malla, la ecuación de transporte de las especies químicas con, la velocidad y viscosidad turbulenta (u, v, w, μ_t) aportada por la ANN, y lo hace en forma transitoria con las variaciones de carga contaminante $\{X_i(t)\}$ que entra al reactor:

$$\frac{\partial y}{\partial x} (\rho \cdot \varphi_i) + \nabla (\rho \cdot \vec{u} \cdot \varphi_i) = -\nabla \left(\left(\rho \cdot D_m + \frac{\mu_t}{S_c} \right) \nabla \varphi_i \right) + S_i$$



Evolución de la concentración de trazador en el bioreactor



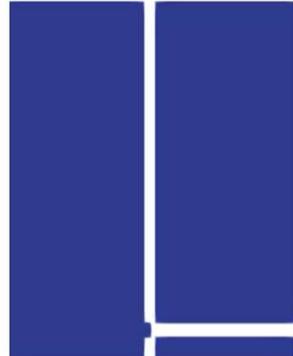
OpenFOAM

Predicción Velocidad

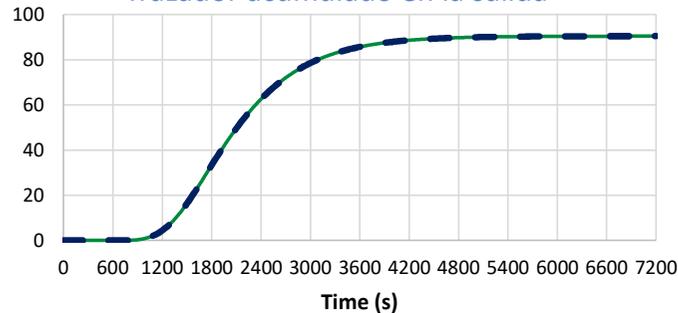


Red Neuronal

Predicción Velocidad



Trazador acumulado en la salida



La predicción del GEMELO DIGITAL ofrece resultados conservativos.

El principio de conservación de masa parece conservarse en la solución que predice el GEMELO DIGITAL con errores poco significativos



Metodología GEMELO DIGITAL

Paso 1: La ANN resuelve la hidrodinámica (\vec{U}, μ_t)

Paso 2: EL código CFD (OpenFOAM + **My_ASM1Foam**) a partir de los valores (\vec{U}, μ_t) actualizados resuelve la distribución bioquímica durante todo el transitorio

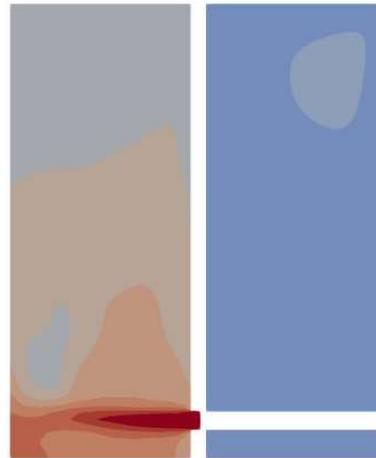
Transitorio hidráulico de 1 horas

Tiempo de cálculo: 88 segundo

En base a 16 cores

$T_{\text{cálculo}} = 0,02 h \ll T_{\text{real}} = 1 h$

Partiendo de **Geometría, Malla, Condiciones de Contorno**



Proceso de desnitrificación en tanque anóxico:
Distribución nitratos

Metodología CFD

EL código CFD (OpenFOAM + **My_ASM1Foam**) resuelve hidrodinámica y la distribución bioquímica durante todo el transitorio

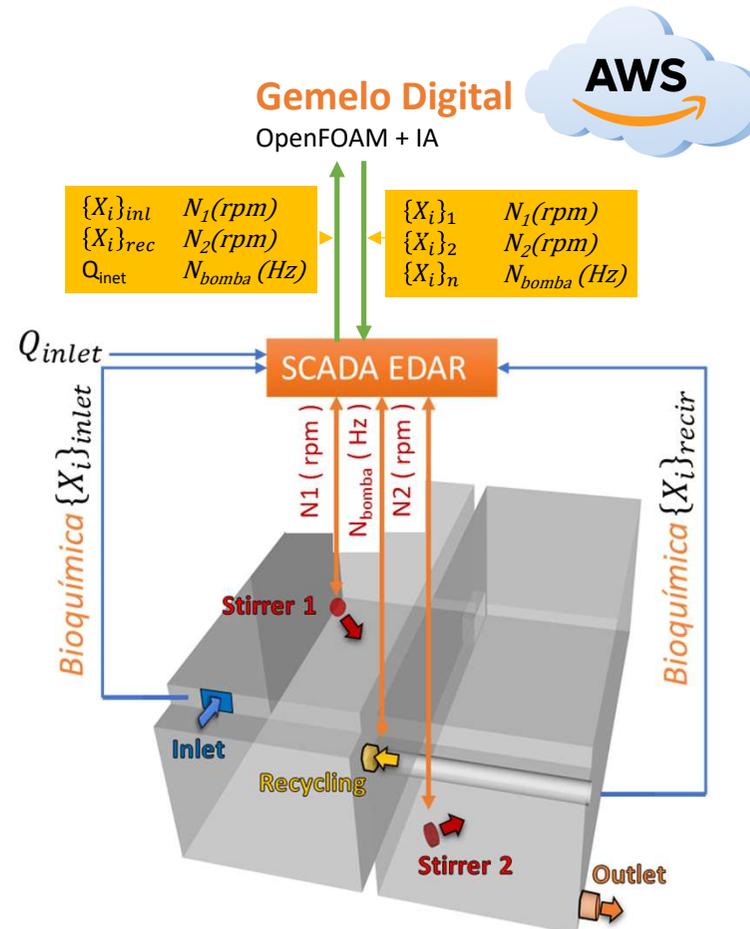
Transitorio hidráulico de 1 horas

Tiempo de cálculo: 8145 segundo

En base a 16 cores

$T_{\text{cálculo}} = 2,26 h > T_{\text{real}} = 1 h$

- Para completar la metodología, el sistema debe funcionar unido a los datos físicos de la planta, algo que no resulta complicado e de conseguir.
 - Esta metodología de GEMELO DIGITAL puede implementarse en una EDAR, sin necesidad de grandes infraestructuras de cálculo.
- Puede utilizarse un servicio de cálculo en un servidor remoto comunicado con el SCADA de la planta de una forma sencilla y escalable.



Desarrollo de aplicaciones del Gemelo Digital

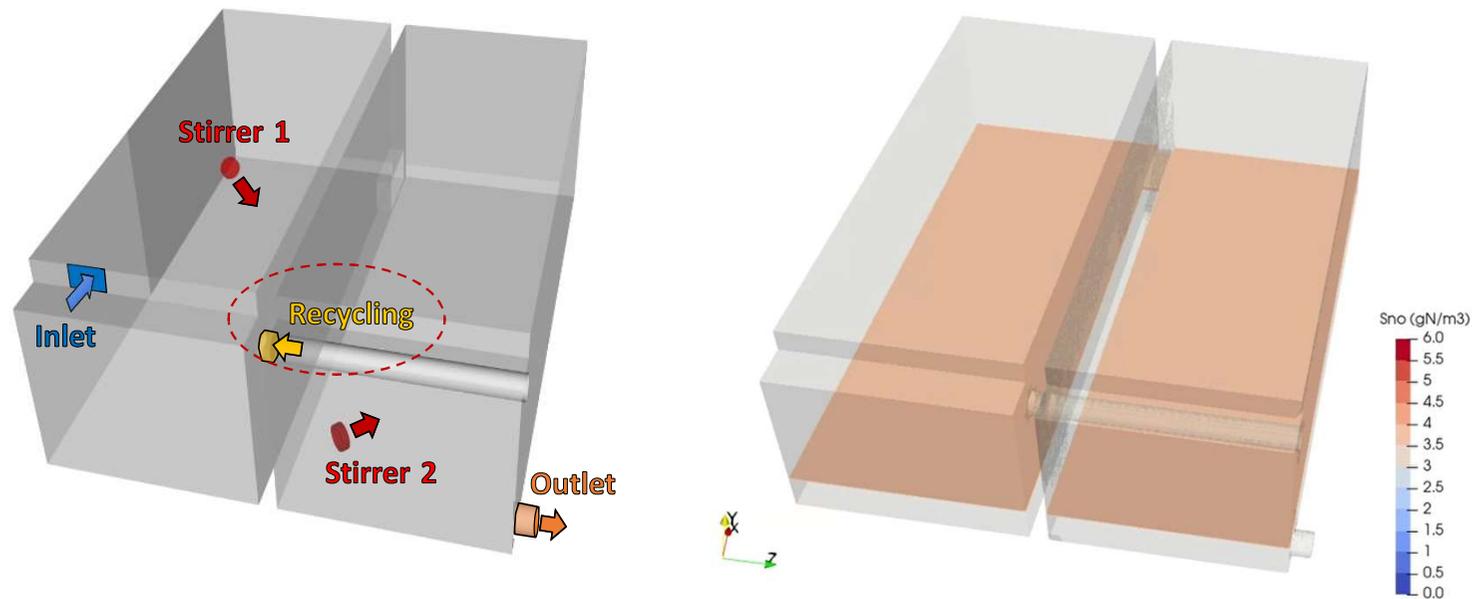
Efecto del caudal de recirculación sobre el tanque anóxico: Evolución de la desnitrificación

Valores Constantes

Inlet, Stirrer 1 and **Stirrer 2**

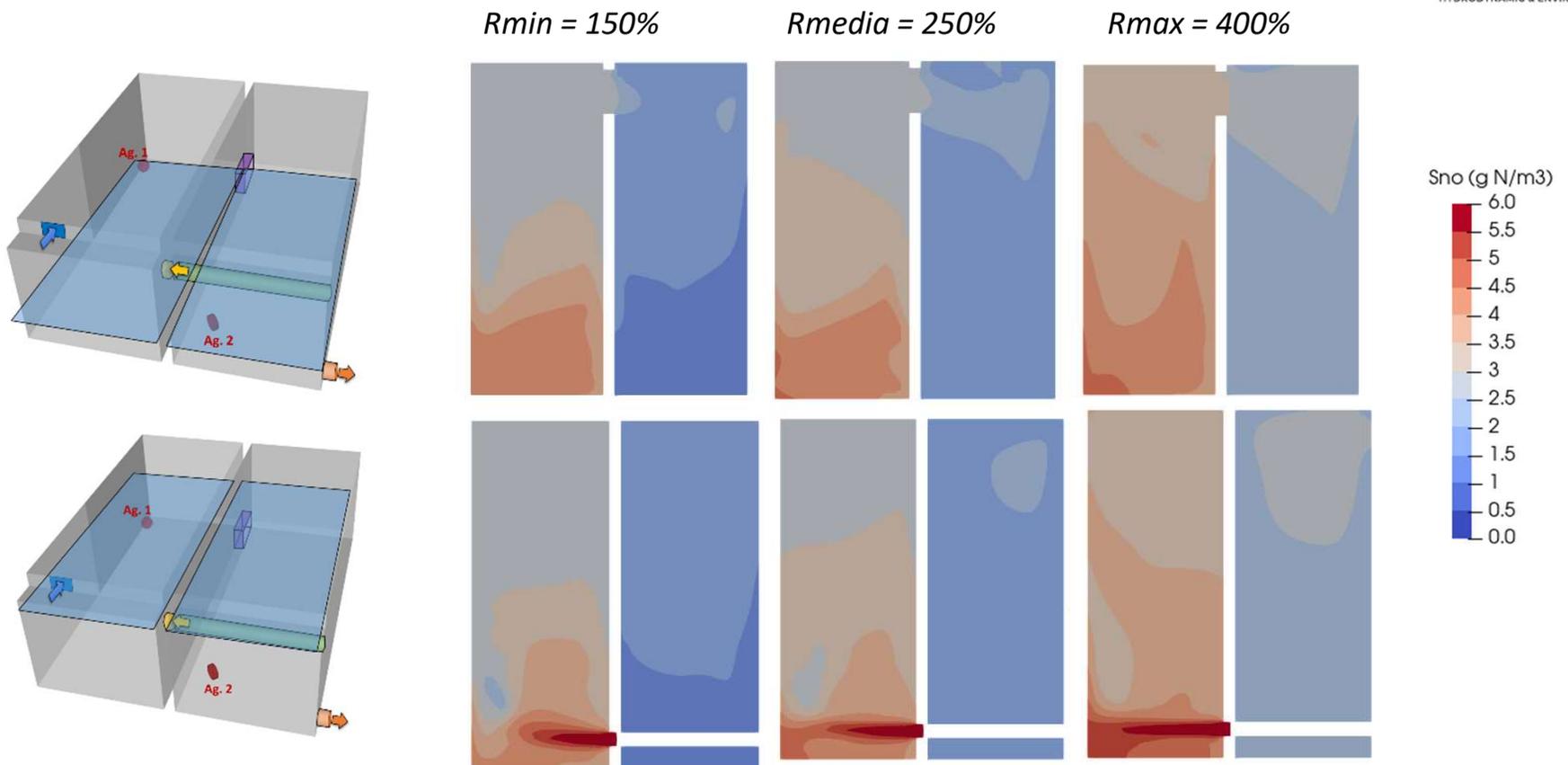
Caudal Recirculación:

- Rmin = 150%
- Rnormal = 250%
- Rmax = 400%



Desarrollo de aplicaciones del Gemelo Digital

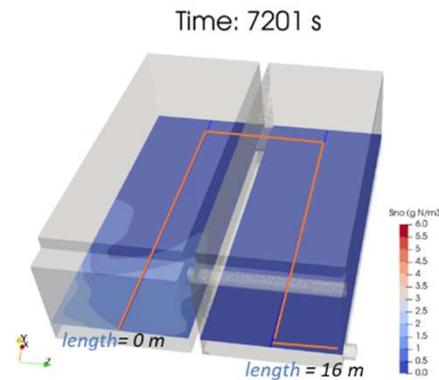
Efecto del caudal de recirculación sobre el tanque anóxico : Evolución de la desnitrificación



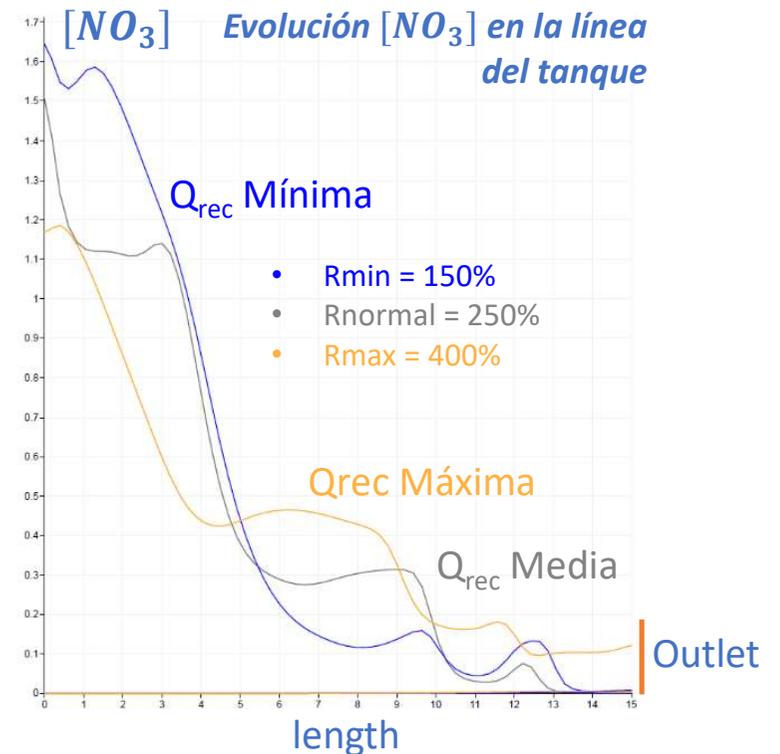
Desarrollo de aplicaciones del Gemelo Digital

Efecto del caudal de recirculación sobre el tanque anóxico : Evolución de la desnitrificación

- En este caso muy sencillo, se puede analizar la evolución de la $[NO_3]$ en el tanque anaerobio en función del caudal de recirculación, y los $[NO_3]$ de entrada.



- Con la metodología del **GEMELO DIGITAL** es posible analizar, en un periodo de tiempo muy breve, la evolución de la bioquímica en el tanque ante varios posibles escenarios.
- Resulta una herramienta útil para la toma de decisiones



- Es factible desarrollar modelos tipo ***Simulation-based data-driven digital twin***, capaces de ofrecer resultados con un tiempo de cálculo muy reducido, y por tanto candidatos a ser utilizado en el control de la planta.
- EL modelo propuesto de gemelo digital posee una parte de **modelo subrogado** para la **hidrodinámica, basado en ANN**, y un **modelo físico**, basado en CFD utilizando OpenFOAM, **para analizar la bioquímica**.
- Es muy importante disponer de un **modelo detallado y bien validado** para que el gemelo digital se útil y resulte operativo, algo que sólo puede aportar los **modelos CFD**.
- Todavía queda mucho camino por recorrer. Se han de explorar nueva técnicas numéricas para la creación de los modelos, como las muy prometedoras PINNs. Se ha avanzar en la vía de disponer de modelos mas robustos y fiables y sin tener que disponer de tantos datos para su desarrollo y validación.

**Gracias por
vuestra atención.**



II Ciclo de 20 MasterClass

AGUASRESIDUALES.INFO