



# 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

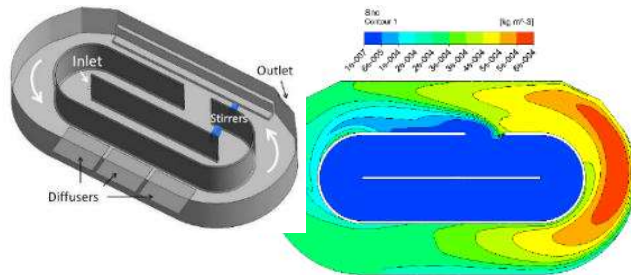
AGUASRESIDUALES.INFO

## 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

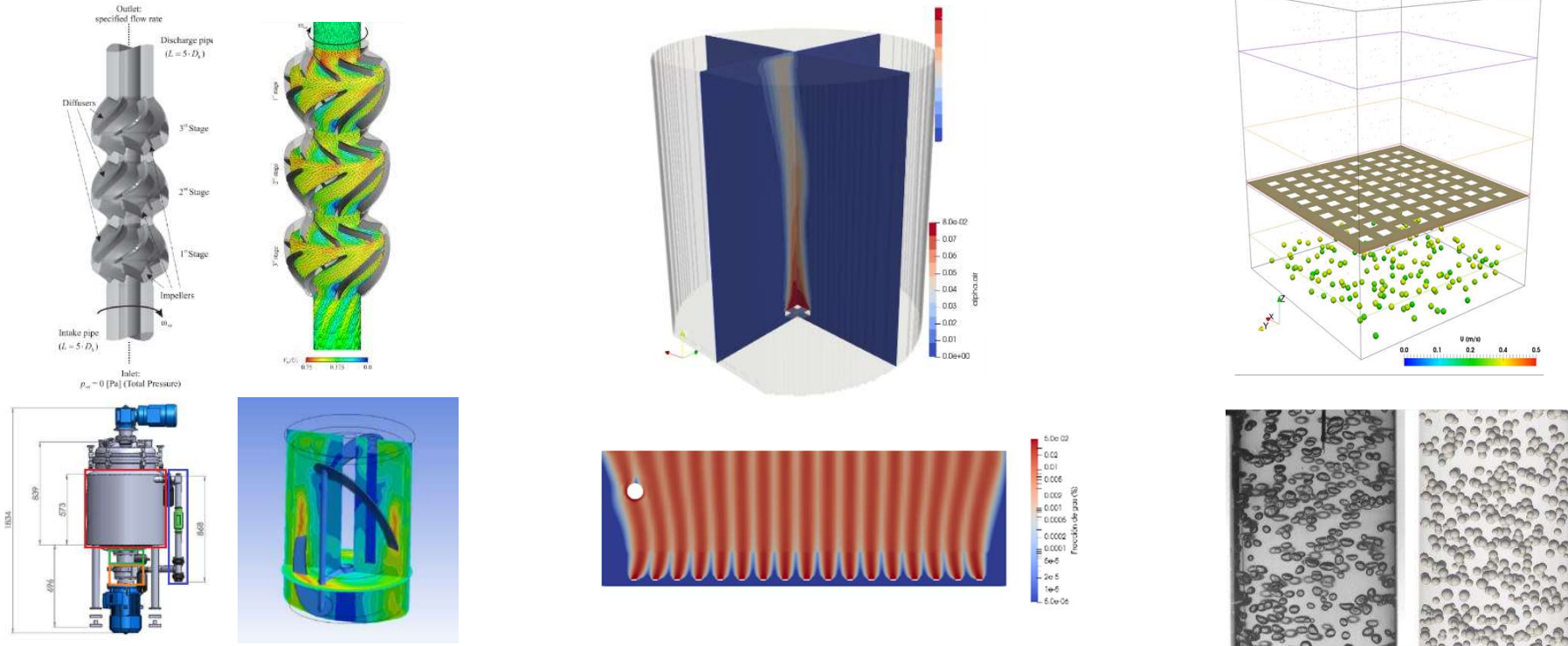
**Estudio de dispersión de contaminantes atmosféricas en entornos urbanos:** Dispersión de olores



# El Grupo de Fluidos Multifásicos

## Modelado hidrodinámico mediante técnica CFD

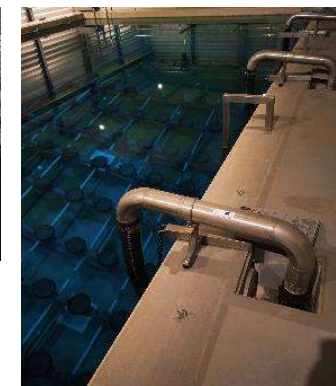
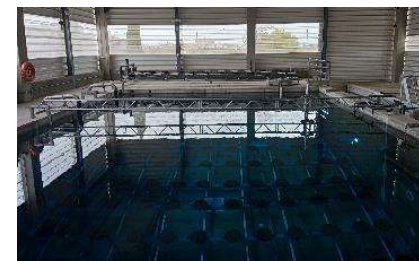
Desarrollo de modelos en ANSYS-CFX, ANSYS-FLUENT, OpenFOAM o códigos in-house para diferentes escenarios complejos con presencia de mas de una fase.



## 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.

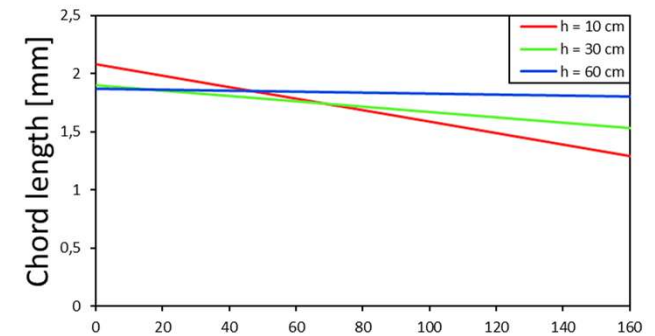
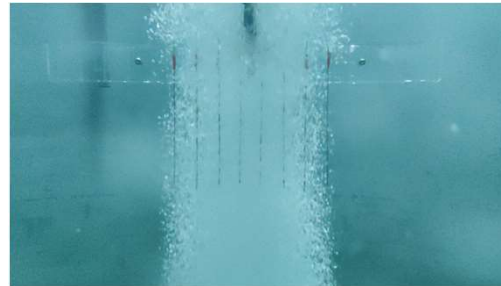
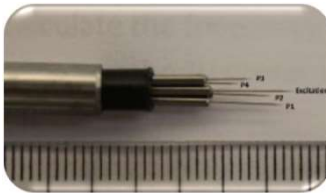
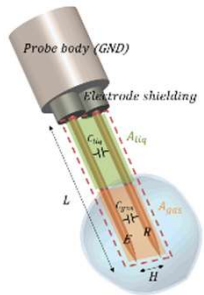
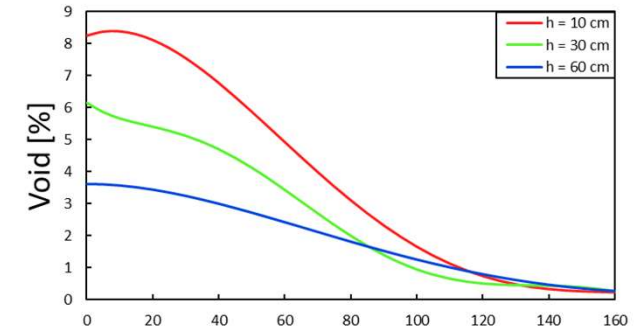
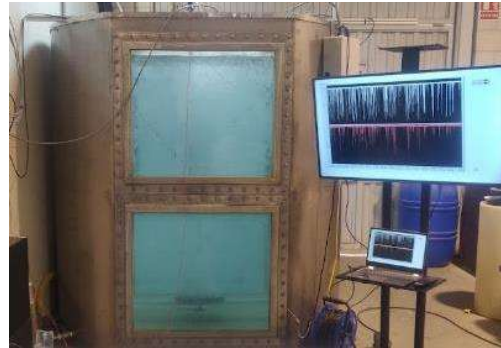
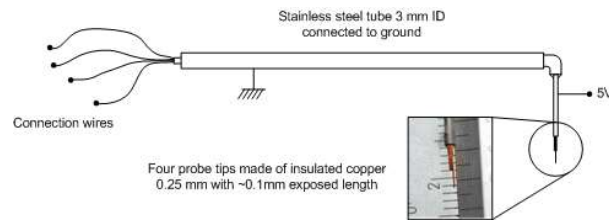


<https://youtu.be/lhghKcysK48>

## 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.**

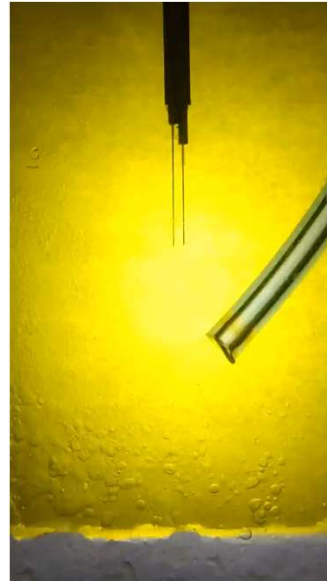


## El Grupo de Fluidos Multifásicos

**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 atmosféricos 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



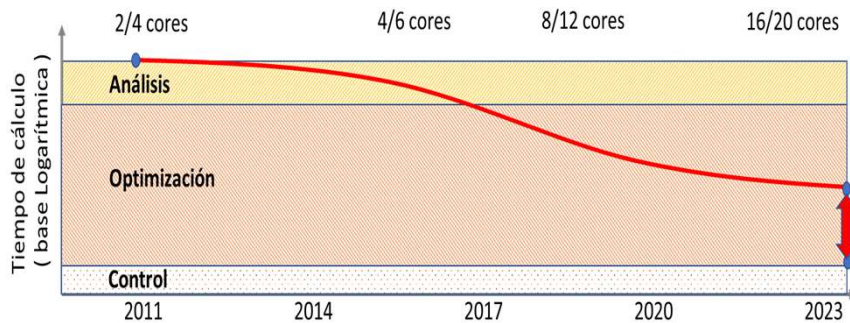
Distribución de la velocidad del viento en un plano en Puerto de Castellón

*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 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



**Diseño de instalaciones**



**Análisis de deficiencias y optimización**



**Estrategias de explotación**



**Control de la planta**

## DEFINICIÓN DE GEMELO DIGITAL

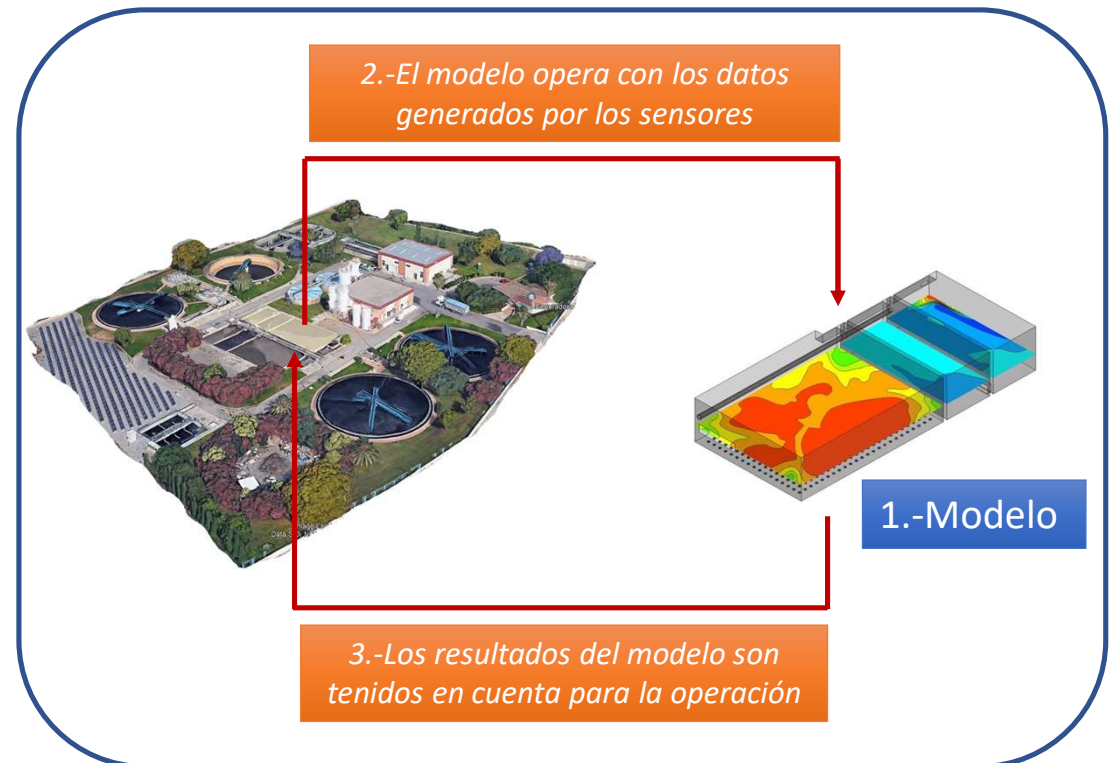
- Introducido por M.Grievés en 2003 por la NASA, pero se remonta a los años 60 ( Apolo 13 ).
- Se trata de un concepto muy ambiguo y genérico, con infinidad de definiciones.
- En general debería contemplar:

1. Un modelo del objeto de estudio

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

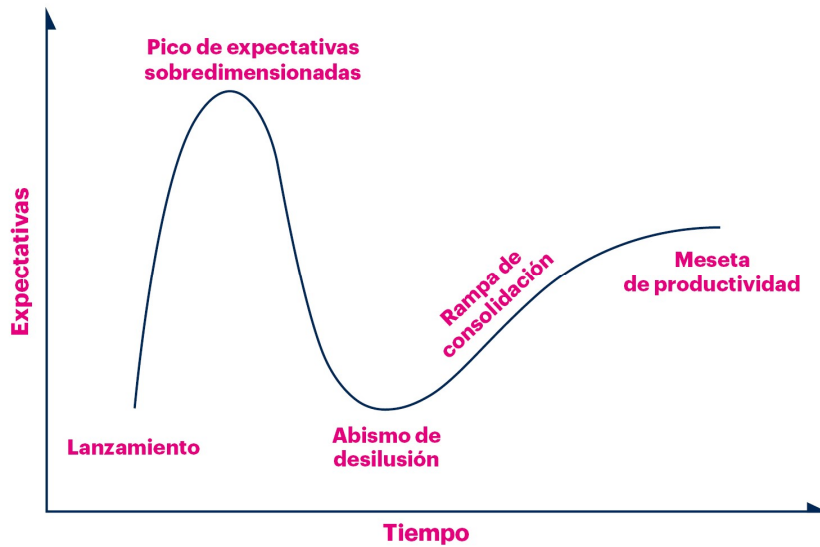
3. Transferencia de la información generada por el modelo para generar acciones en el objeto de estudio

## Gemelo Digital

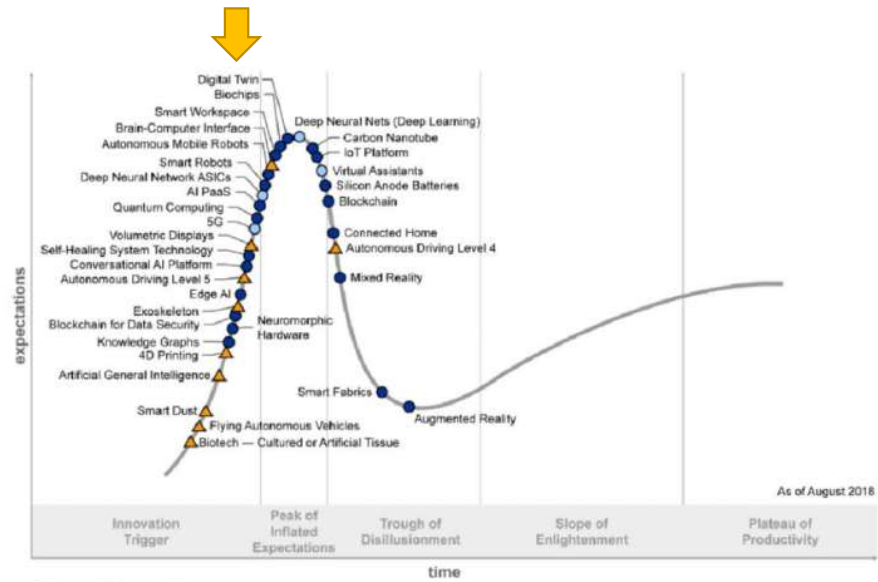


# El concepto de Gemelo Digital

## DEFINICIÓN DE GEMELO DIGITAL

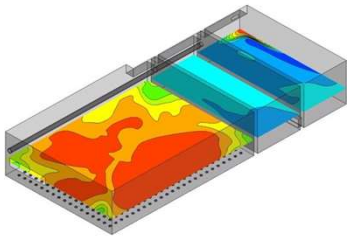


(\*) <https://www.gartner.es/es/metodologias/hype-cycle>

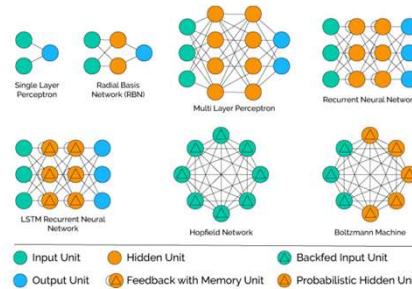


(\*) *Gartner hype cycle, 2018*

### CFD



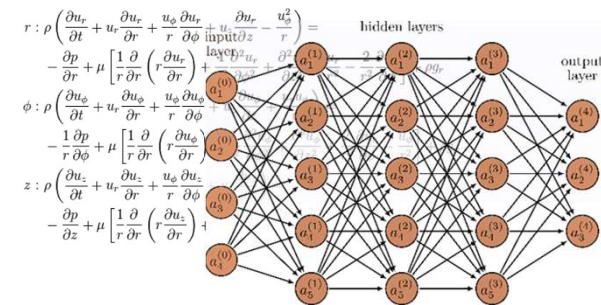
### Redes Neuronales ( ANN )



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 )

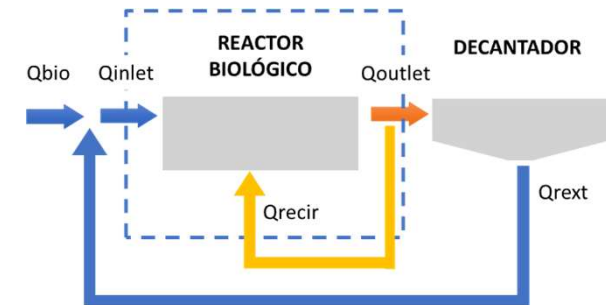


Cuando las leyes físicas ( PDE ) que gobiernan los datos que se quieren simular se tiene en cuenta a la hora de entrenar las ANN.

**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 m<sup>3</sup>/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

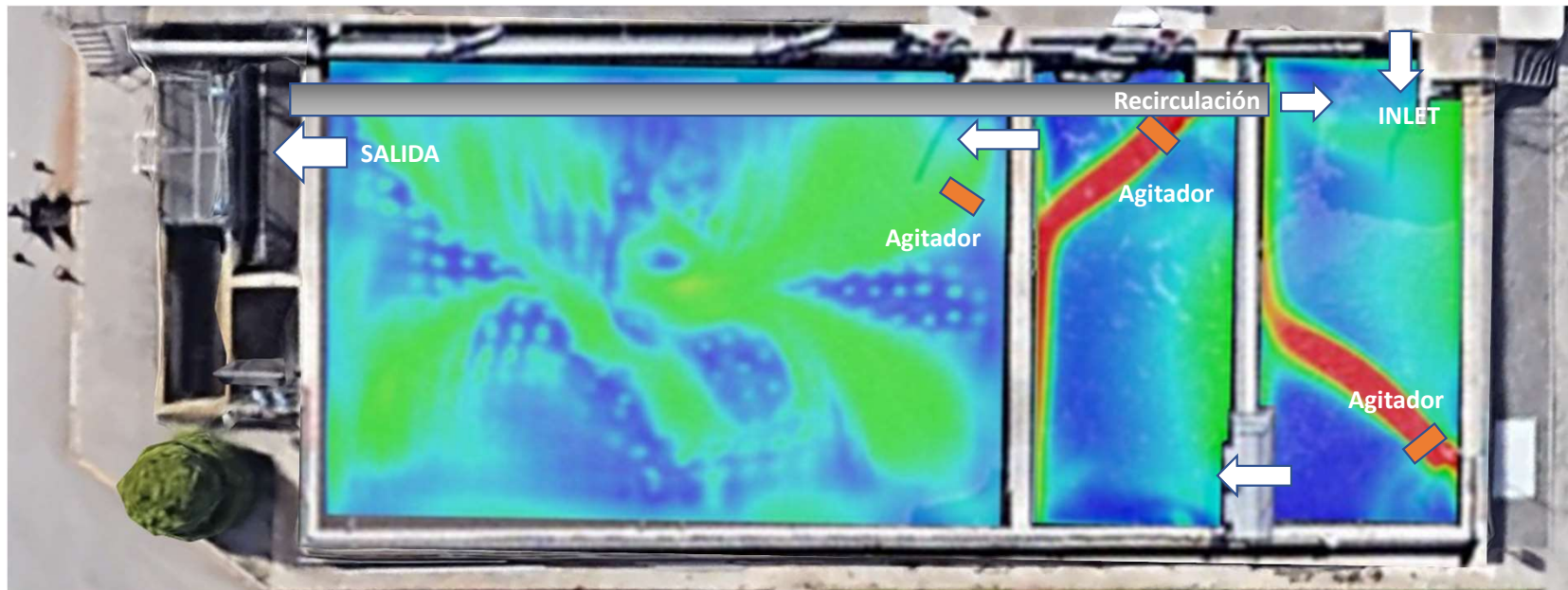


## Modelo CFD del Reactor Biológico de la EDAR

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

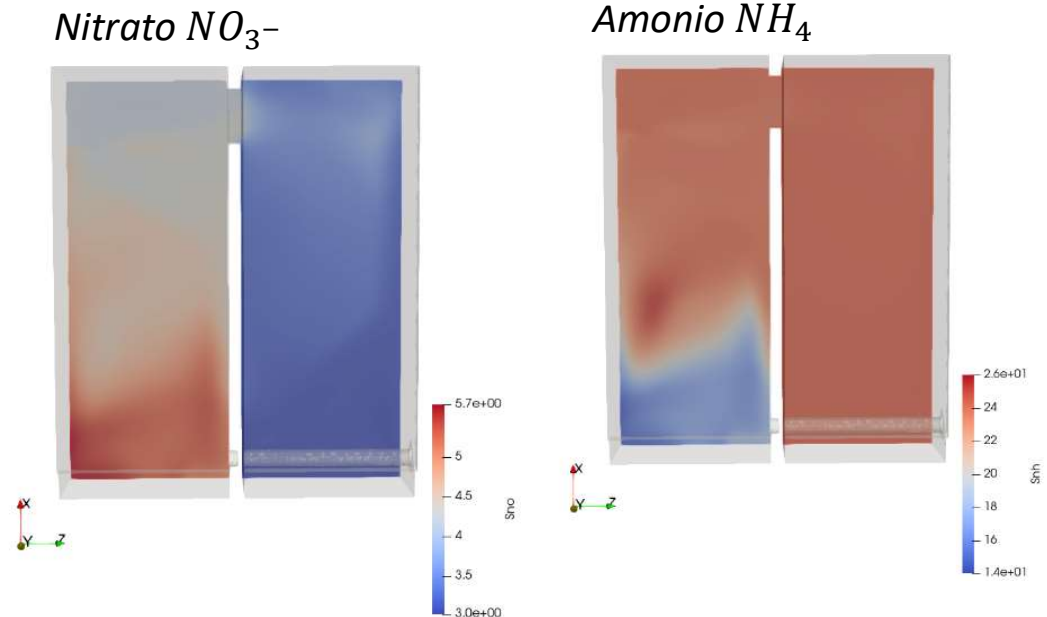


## Modelo CFD del Reactor Biológico de la EDAR

### 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 <sup>3</sup> )  | 8  | Xs (g DQO/m <sup>3</sup> )                                |
| 2             | Ss (g DQO/m <sup>3</sup> )  | 9  | Salk (mol HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> /m <sup>3</sup> ) |
| 3             | Xba (g DQO/m <sup>3</sup> ) | 10 | Snh (g N/m <sup>3</sup> )                                 |
| 4             | Xbh (g DQO/m <sup>3</sup> ) | 11 | Sno (g N/m <sup>3</sup> )                                 |
| 5             | Xi (g DQO/m <sup>3</sup> )  | 12 | Snd (g N/m <sup>3</sup> )                                 |
| 6             | Si (g DQO/m <sup>3</sup> )  | 13 | Xnd (g N/m <sup>3</sup> )                                 |
| 7             | Xp (g DQO/m <sup>3</sup> )  |    |   |

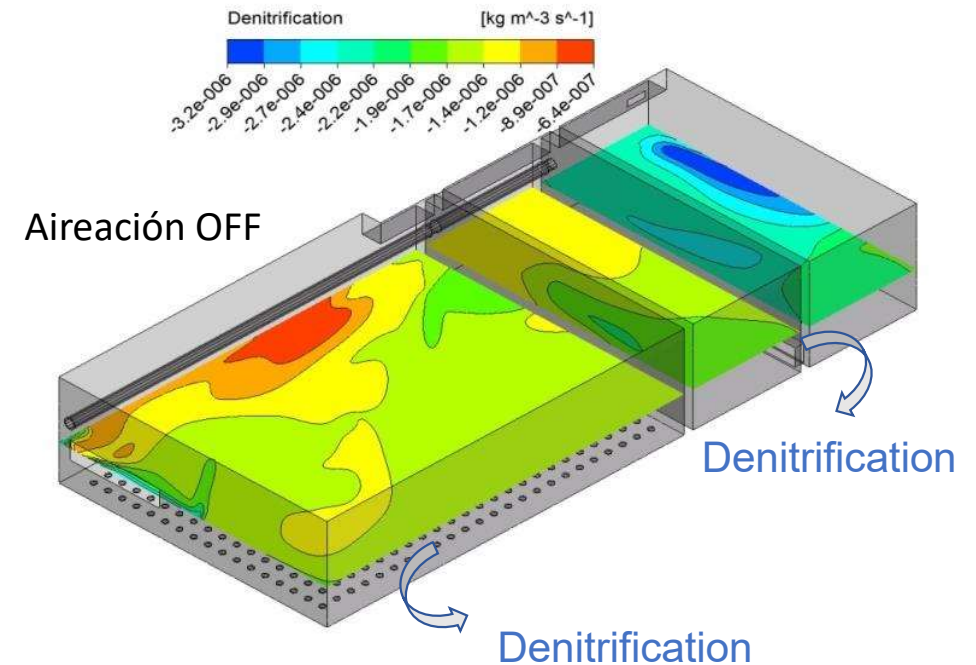
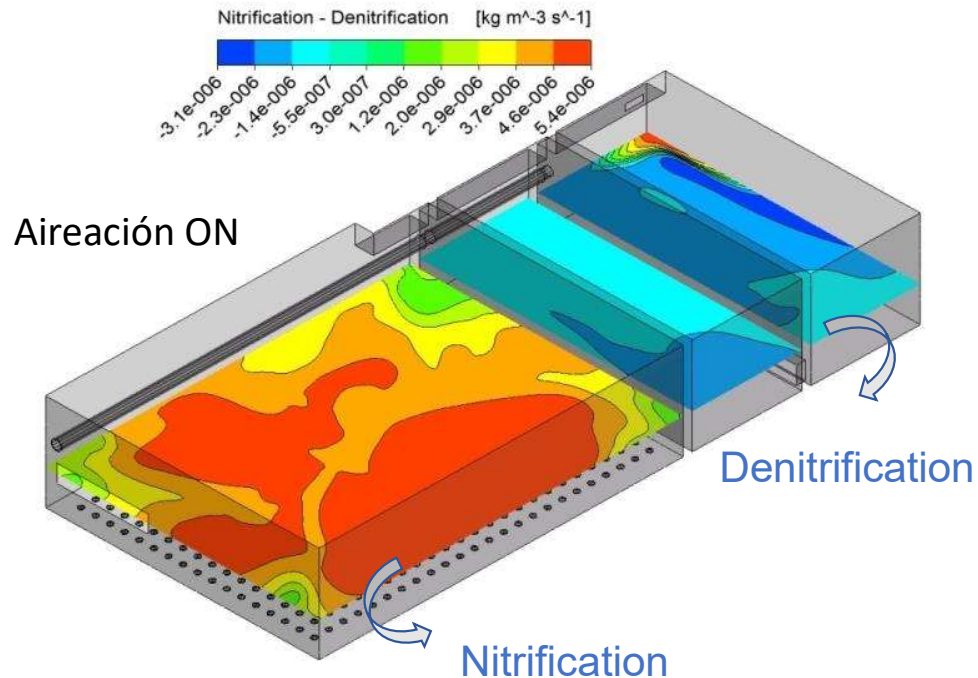




## Modelo CFD del Reactor Biológico de la EDAR

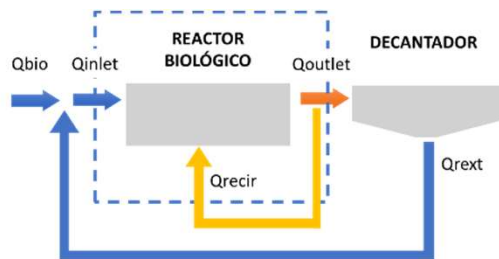
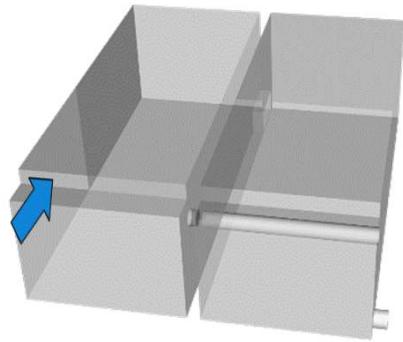
### MODELO BIOQUÍMICO

- **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

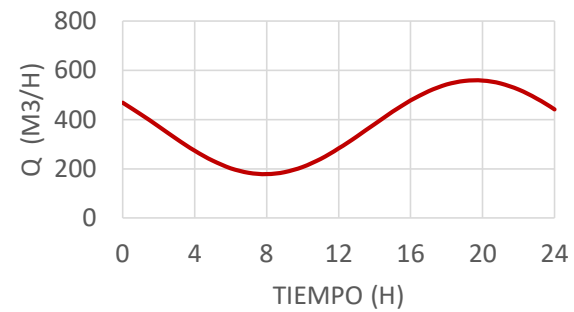
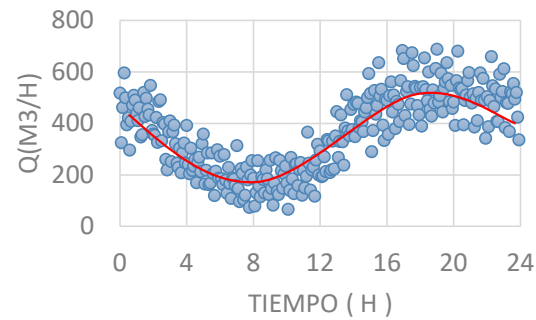
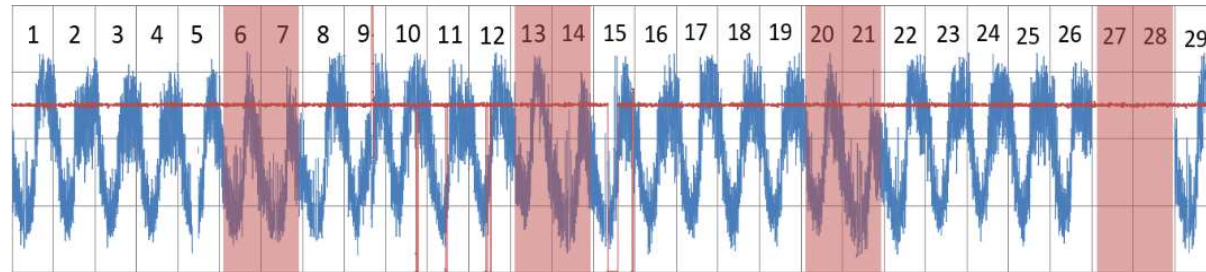
## CAUDAL ENTRADA AL REACTOR BIOLÓGICO



Transitorio 24 h

- $Q_{inlet}$  → variable  $Q_{bio} + Q_{rext}$
- $Q_{recir}$  → constante 1400 m<sup>3</sup>/h
- $Q_{outlet}$  → suma  $Q_{inlet} + Q_{recir}$

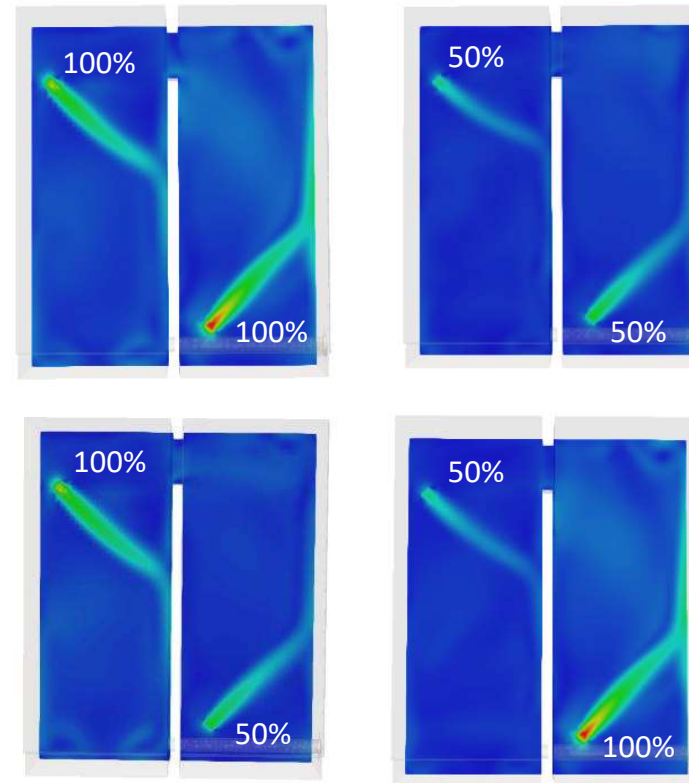
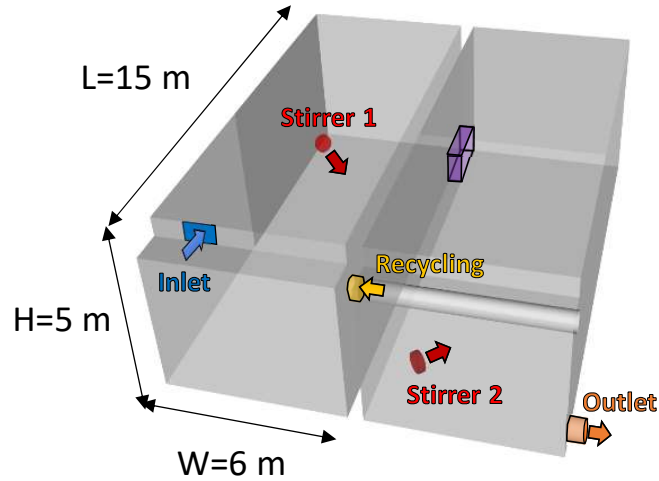
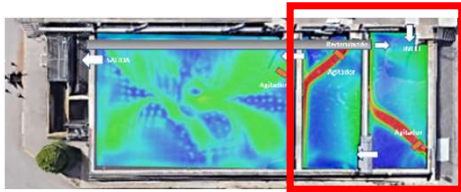
$Q$  influente  $Q$  Recirculación externa



# Modelo CFD del Reactor Biológico de la EDAR

## RESULTADOS MODELO

Tanque anóxico

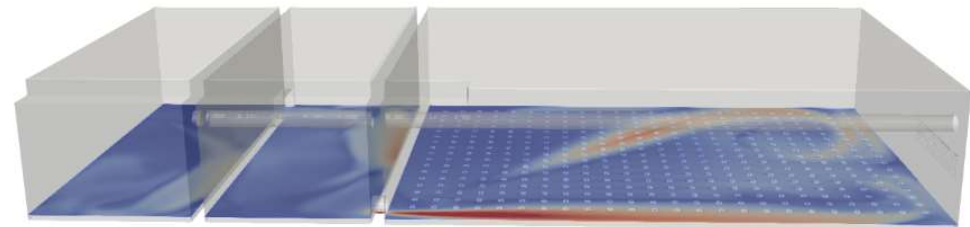
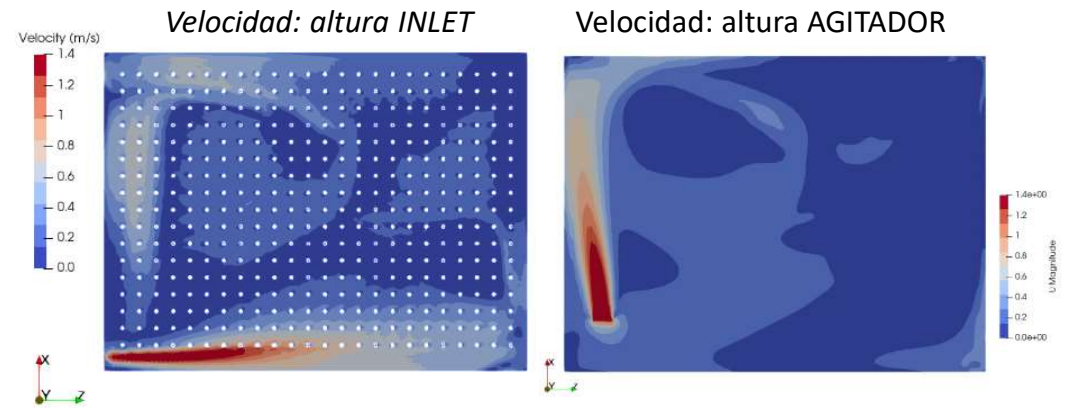
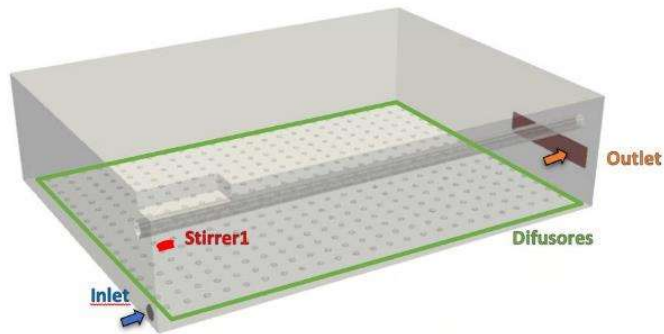
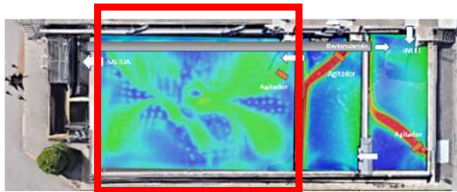


*Efecto de la velocidad de rotación de los agitadores*

# Modelo CFD del Reactor Biológico de la EDAR

## RESULTADOS MODELO

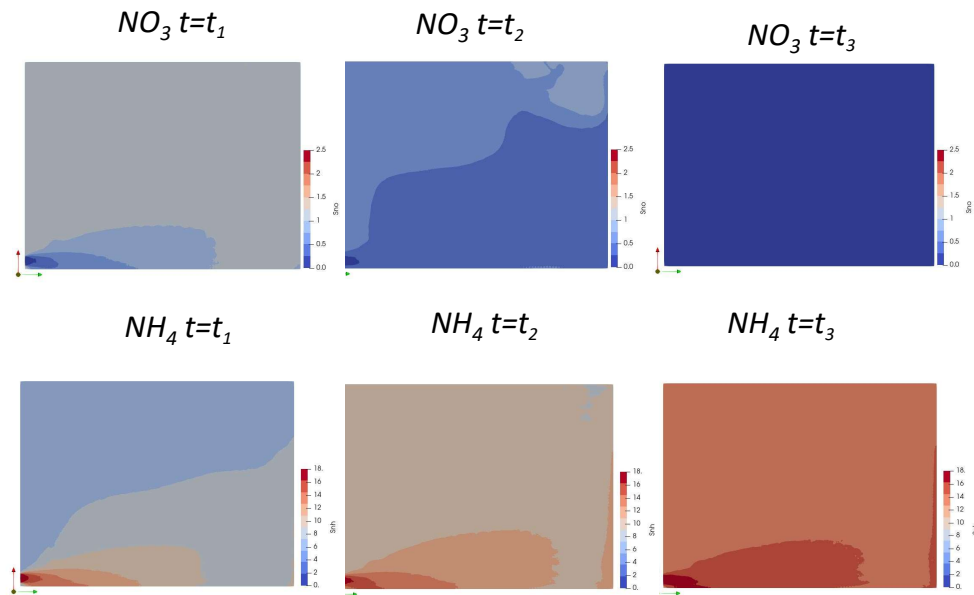
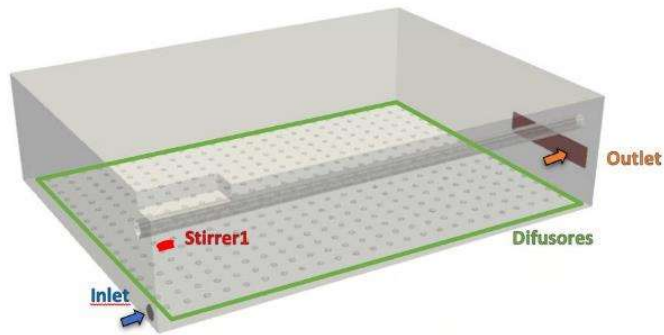
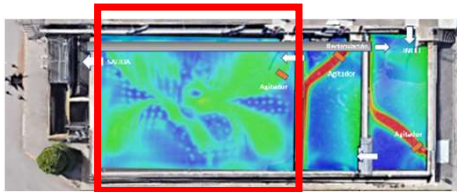
Tanque aerobio ( sin aireación )



# Modelo CFD del Reactor Biológico de la EDAR

## RESULTADOS MODELO

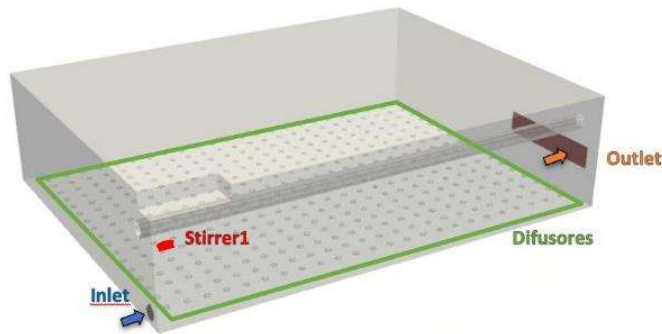
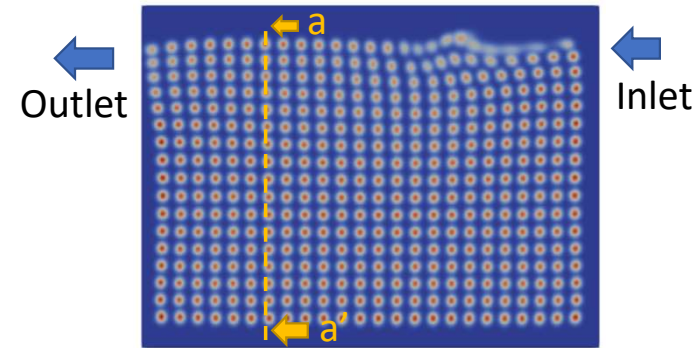
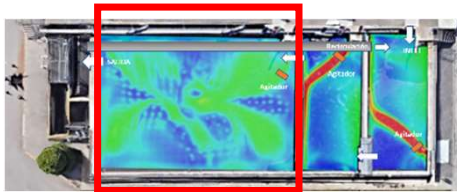
Tanque aerobio ( sin aireación )



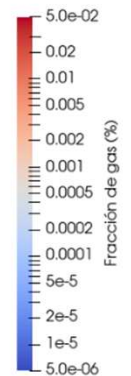
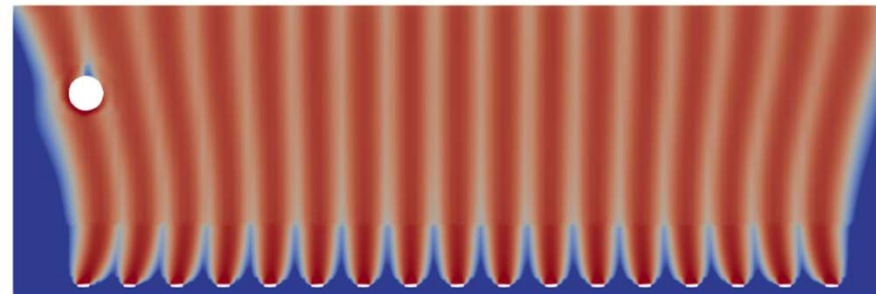
# Modelo CFD del Reactor Biológico de la EDAR

## RESULTADOS MODELO

Tanque aerobio (aireación)



Sección a a'

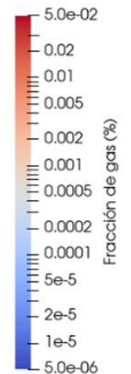
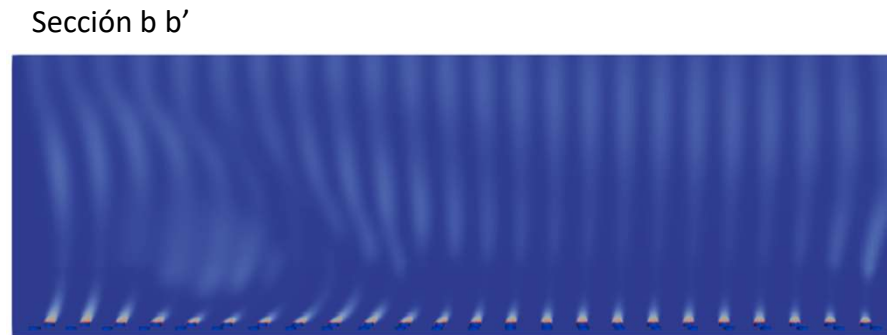
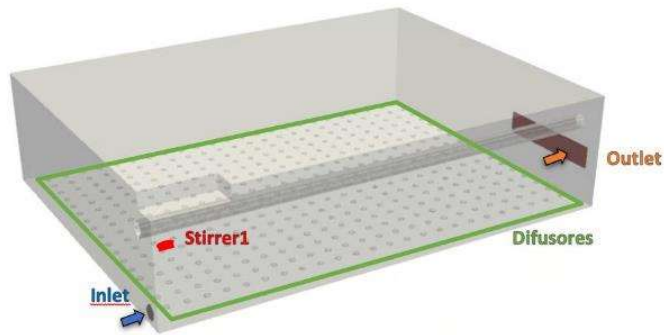
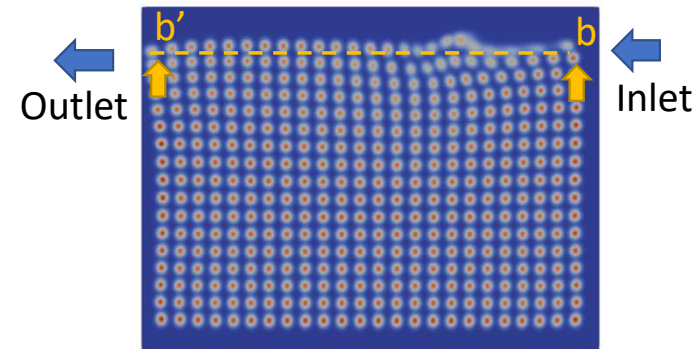
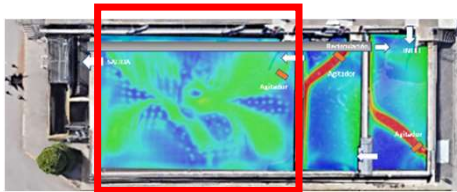


Columnas burbujas creadas por los difusores

# Modelo CFD del Reactor Biológico de la EDAR

## RESULTADOS MODELO

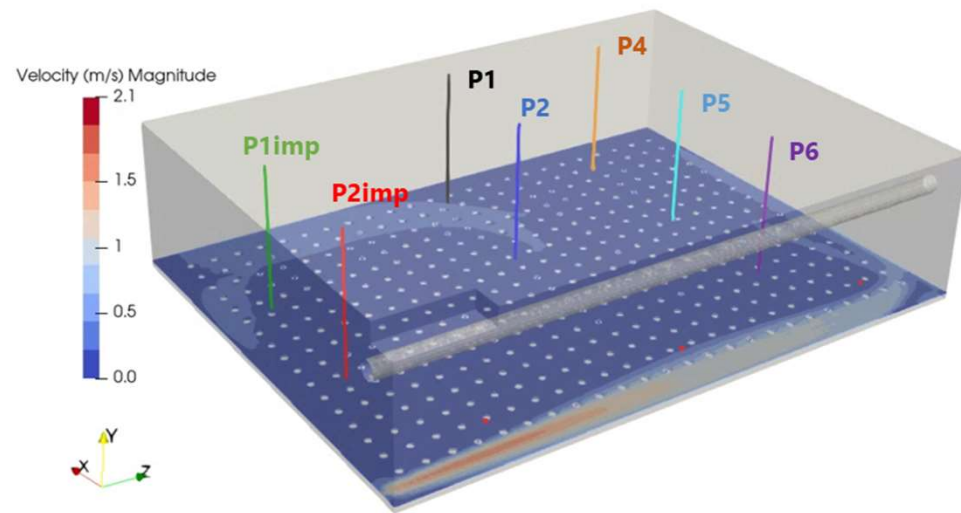
Tanque aerobio (aireación)



Efecto del caudal entrante

## MEDIDAS EXPERIMENTALES EN LA EDAR

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

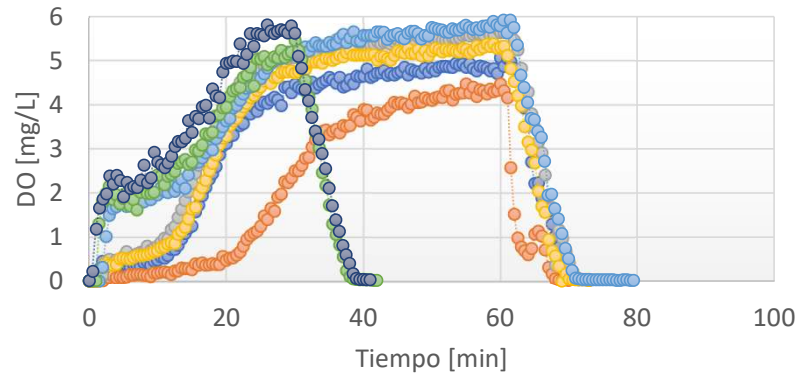




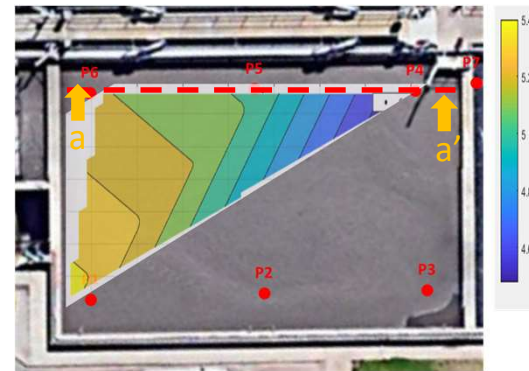
## Campaña Experimental y validación modelo CFD

### MEDIDAS EXPERIMENTALES EN LA EDAR

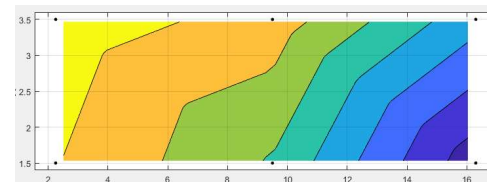
- Perfil vertical de velocidades ( ADV )
- Perfil de concentraciones de oxígeno disuelto en agua



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

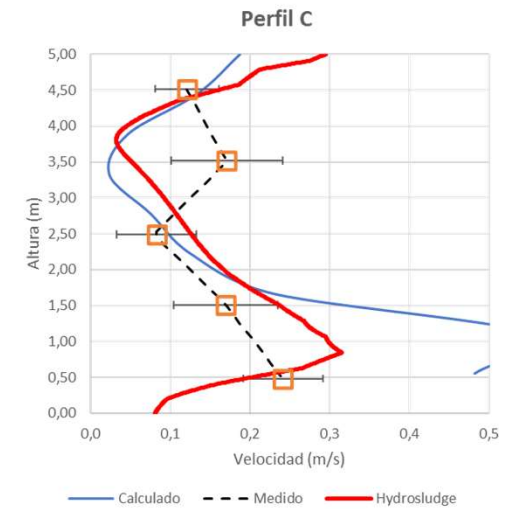
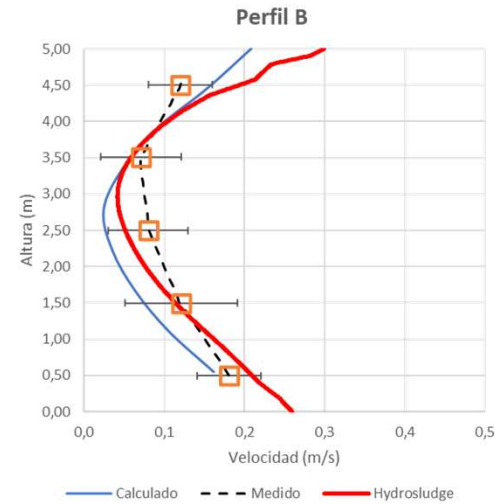
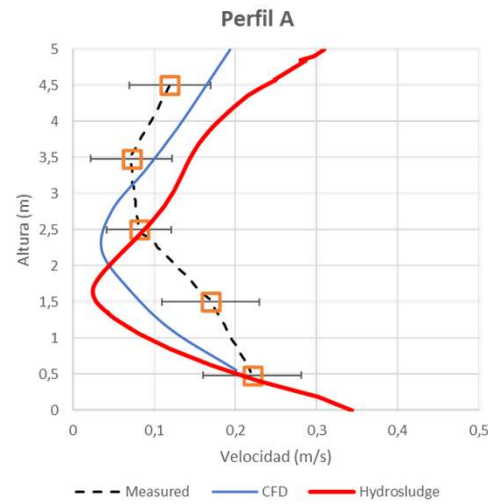
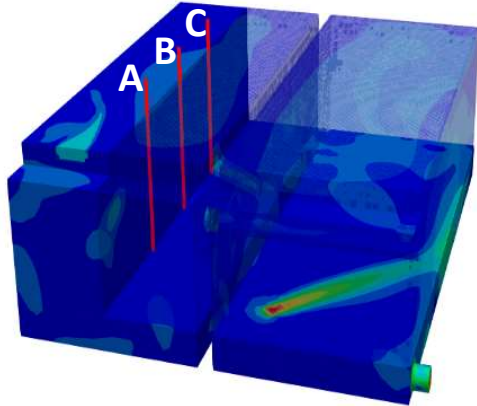
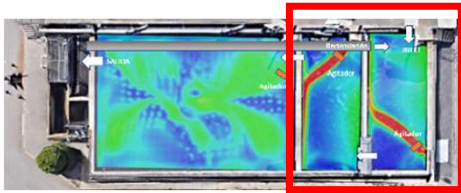


Sección a-a'



## VALIDACION MODELO CFD

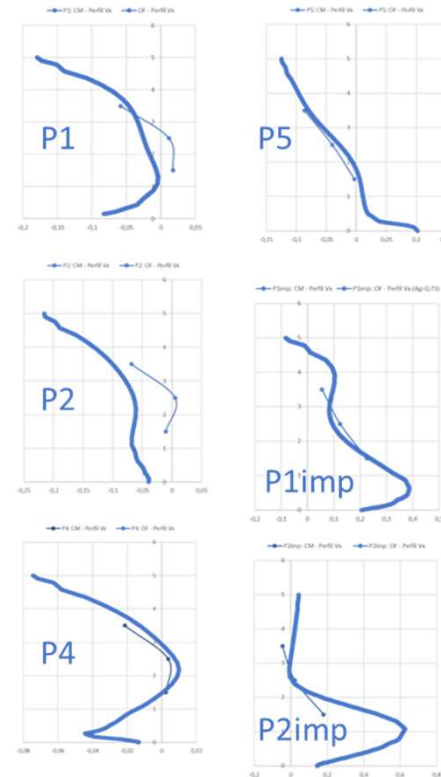
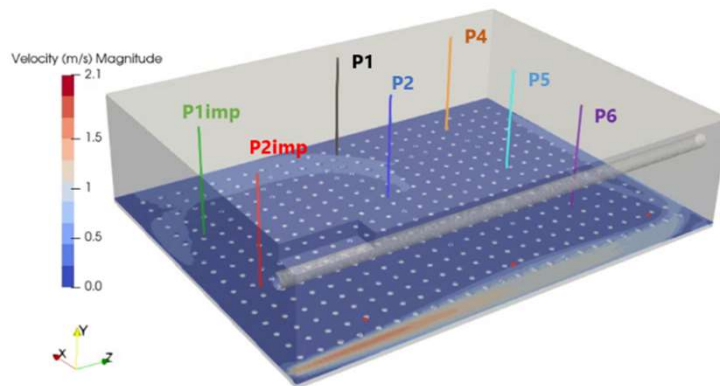
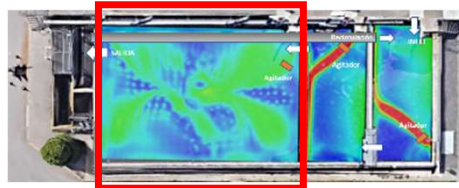
Validación del modelo CFD frente a los datos experimentales de velocidad



# Campaña Experimental y validación modelo CFD

## VALIDACION MODELO CFD

Validación del modelo CFD frente a los datos experimentales de velocidad



*Velocidad X*

## TIEMPO DE CÁLCULO

### 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



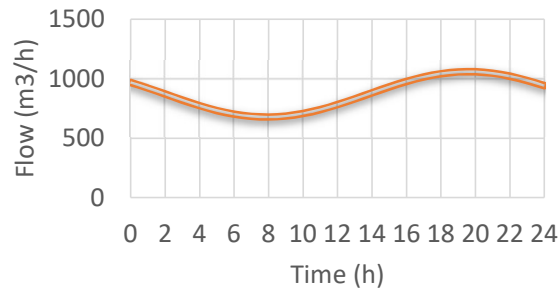
Control de la planta

- 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

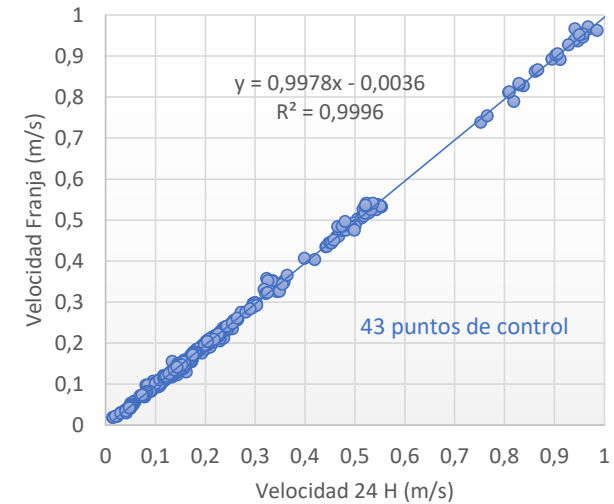
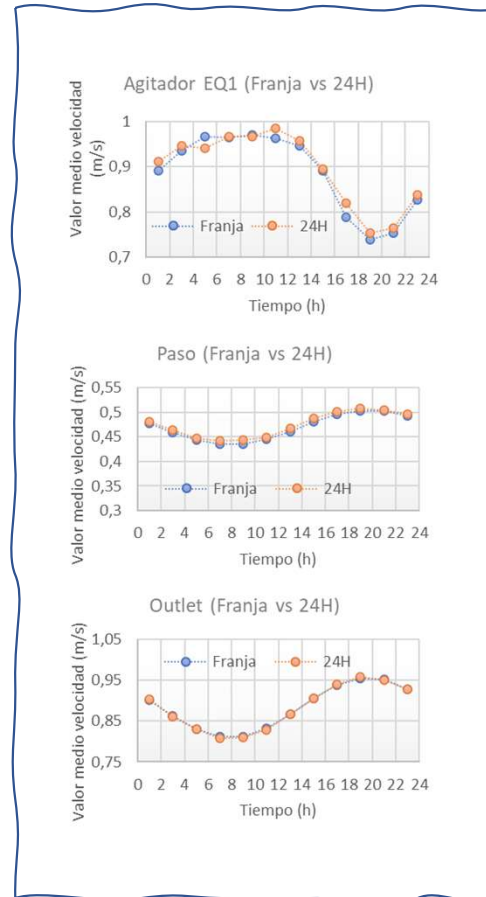
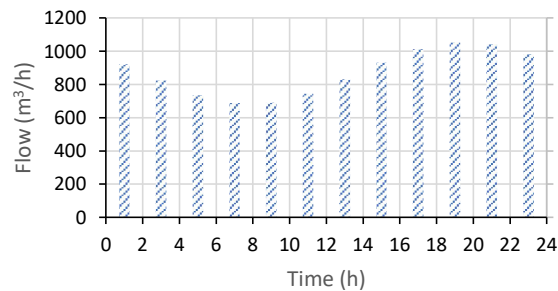
*Estrategia 1:*

**Simulación transitorio 24 h**



*Estrategia 2:*

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



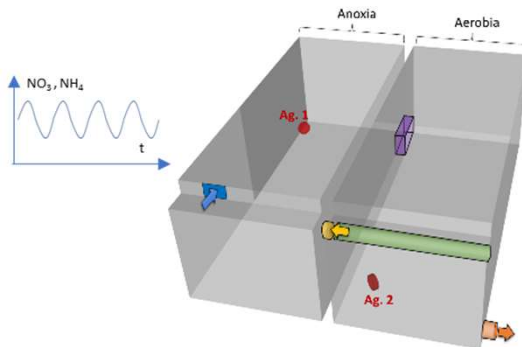
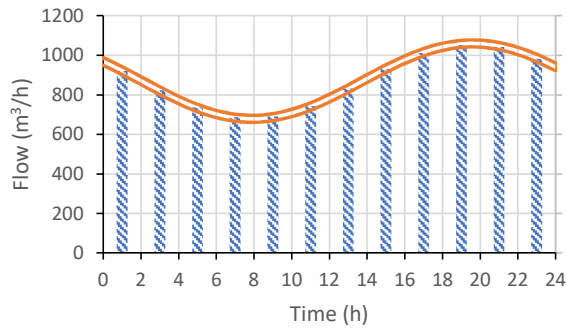
**En este caso, es equivalente el  
campo de velocidades en ambas  
estrategias**



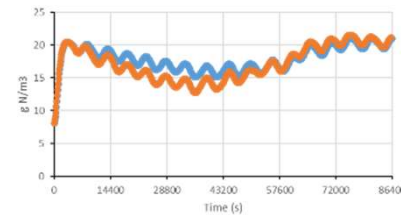
## DESARROLLO DEL CONJUNTO DE ENTRENAMIENTO

*Estrategia 1:*  
Simulación transitorio 24 h

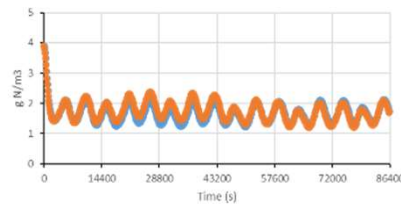
*Estrategia 2:*  
Múltiples estacionarios ( Franjas )



*Amonio, NH<sub>4</sub>*



*Nitratos, NO<sub>3</sub>*



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



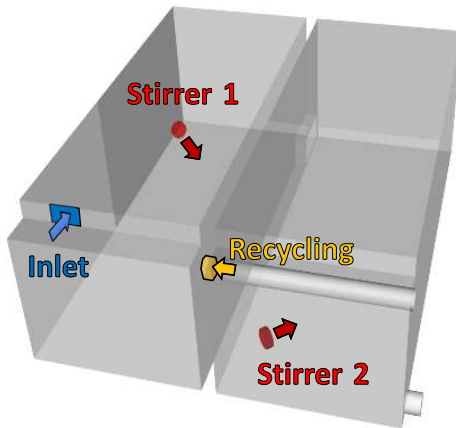
*Estrategia 1:*  
Simulación transitorio 24 h

CPU Time: 868 h

*Estrategia 2:*  
Múltiples estacionarios

CPU Time: 740 h

## DESARROLLO DEL CONJUNTO DE ENTRENAMIENTO



### 1774 casos simulados

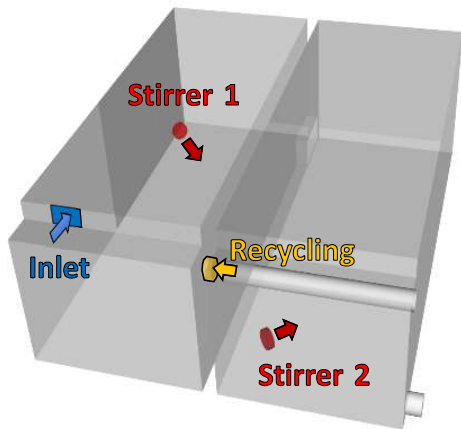
Estacionarios 2h

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

## DESARROLLO DE LA RED NEURONAL: HIDRODINÁMICA

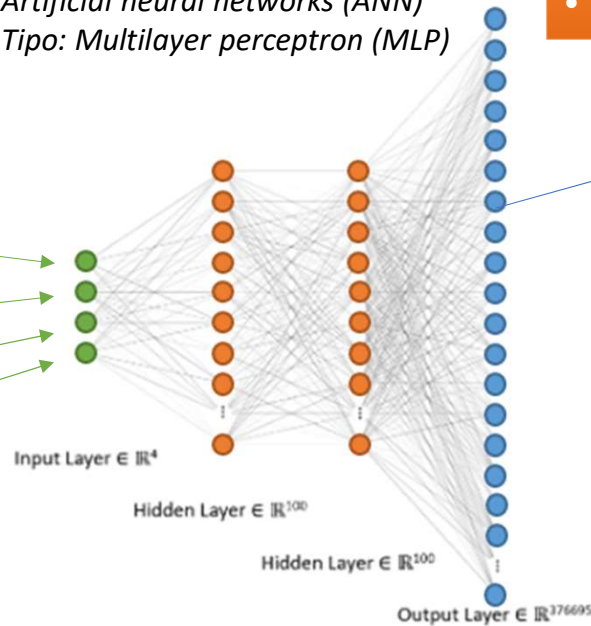
### INPUTS

4 parámetros



Inlet  
Recycling  
Stirrer 1  
Stirrer 2

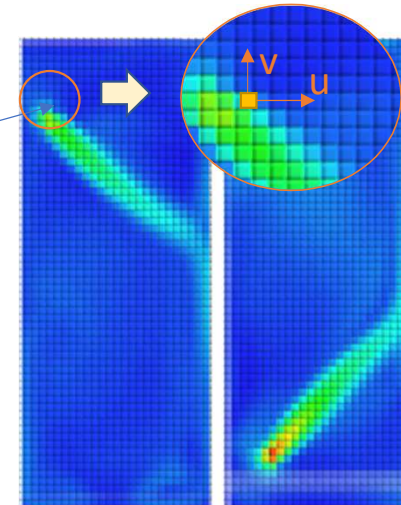
Artificial neural networks (ANN)  
Tipo: Multilayer perceptron (MLP)



### OUTPUTS

Para cada una de las celdas de la malla CFD

- Componente Velocidad:  $u, v, w$
- Viscosidad turbulenta  $\mu_t$





OpenFOAM

Predicción Velocidad



2h de tiempo de simulación

Tiempo de Cálculo: 13875 s

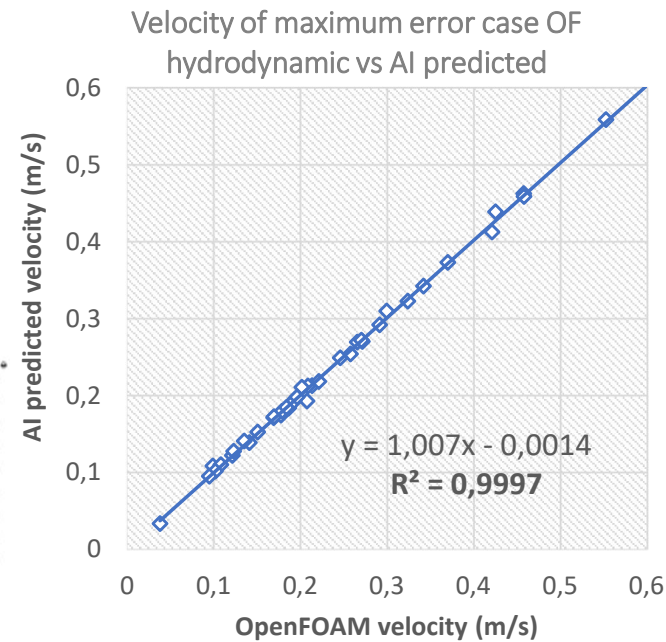
Red Neuronal

Predicción Velocidad



2h de tiempo de simulación

Tiempo de Cálculo: 0,2 s



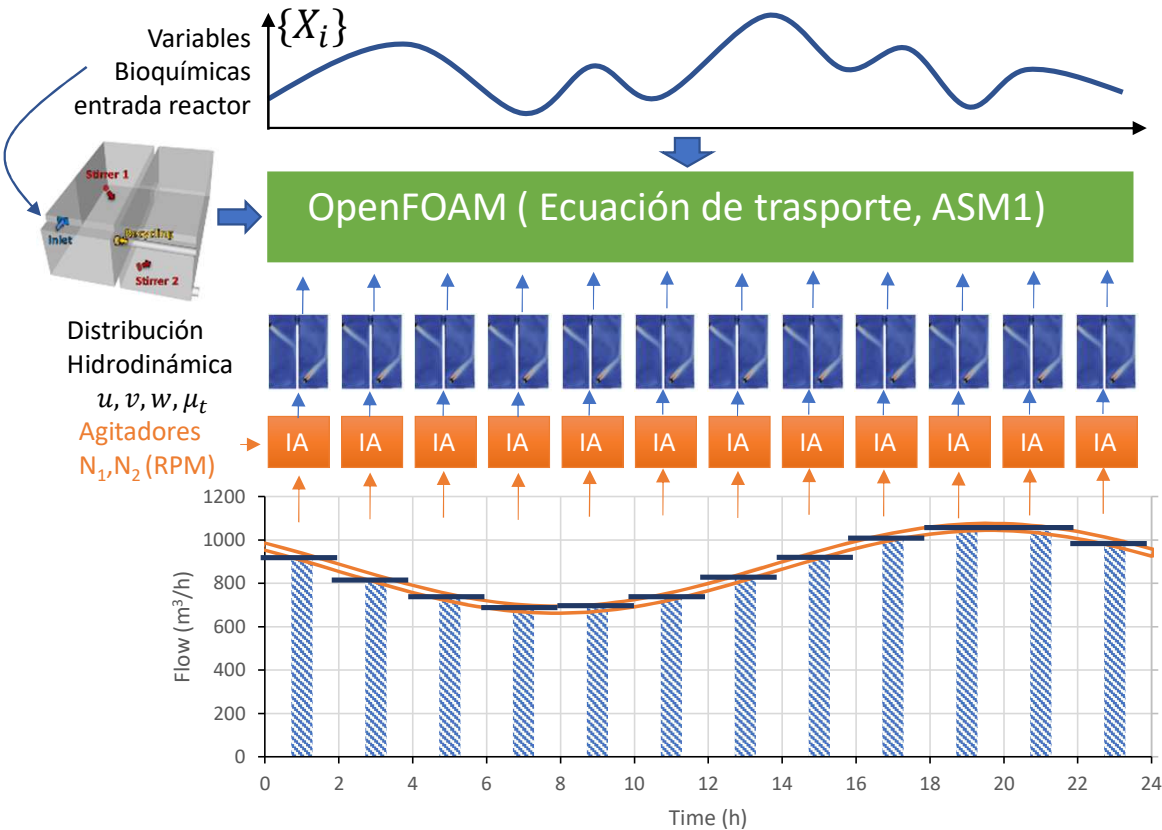
| Errors   |          |          |                    |
|----------|----------|----------|--------------------|
| Minimum  | Maximum  | Mean     | Standard deviation |
| 4.04E-05 | 3.31E-03 | 2.49E-04 | 3.52E-04           |

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



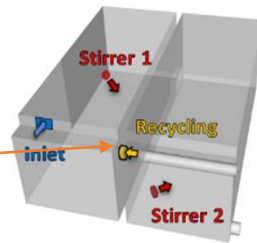
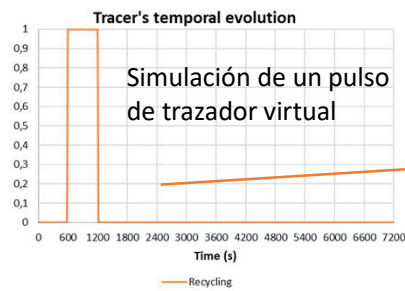
# Creación del Gemelo Digital

## DESARROLLO DE LA BIOQUÍMICA

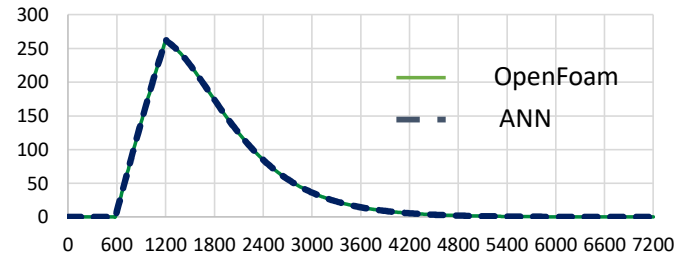


En OpenFoam se resuelve, sobre la misma malla, la ecuación de transporte de las especies químicas con, la velocidad y viscosidad turbulenta ( $u, v, w, \mu_t$ ) aportada por la ANN, y lo hace en forma transitoria con las variaciones de carga contaminante  $\{X_i(t)\}$  que entra al reactor:

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



Evolución de la concentración de trazador en el bioreactor



OpenFOAM

Predicción Velocidad

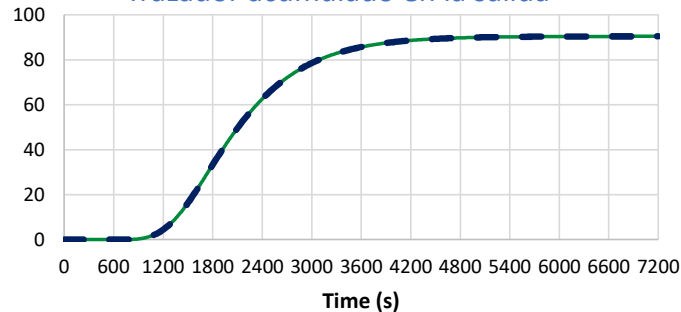


Red Neuronal

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 ( $\vec{U}, \mu_t$ )

Paso 2: EL código CFD ( OpenFOAM + **My\_ASM1Foam** ) a partir de los valores ( $\vec{U}, \mu_t$ ) actualizados resuelve la distribución bioquímica durante todo el transitorio

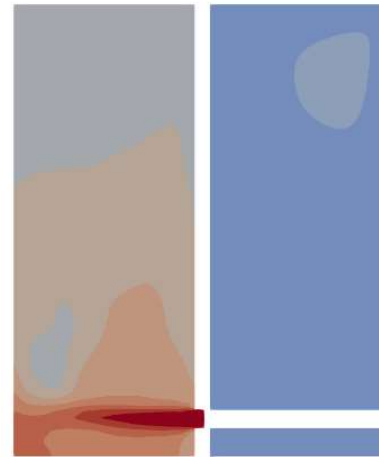
*Transitorio hidráulico de 1 horas*

**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

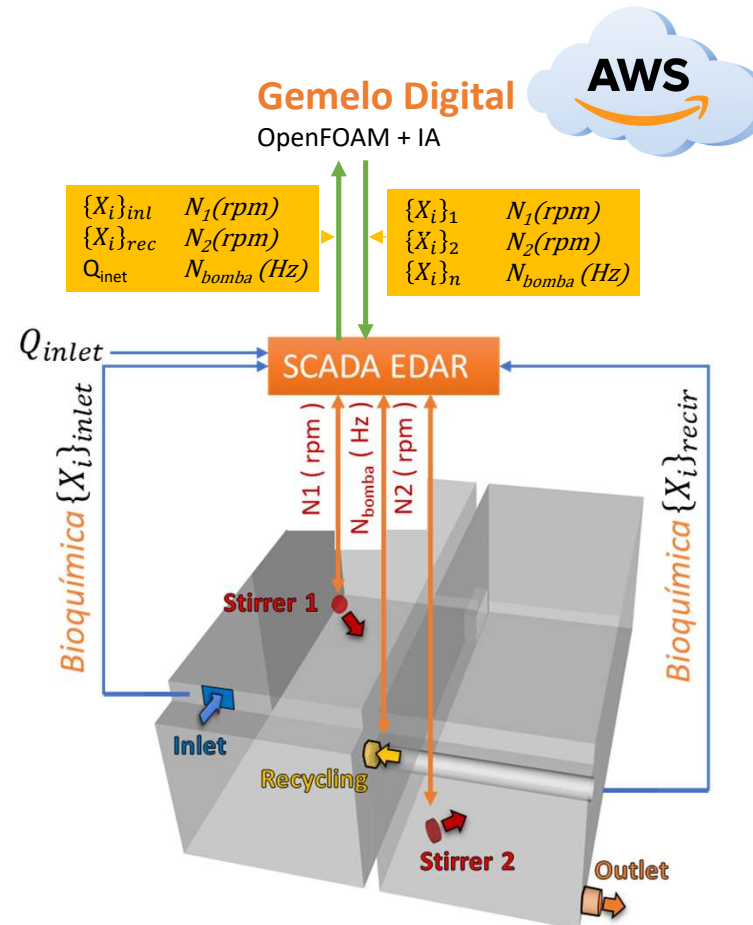
*Transitorio hidráulico de 1 horas*

**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

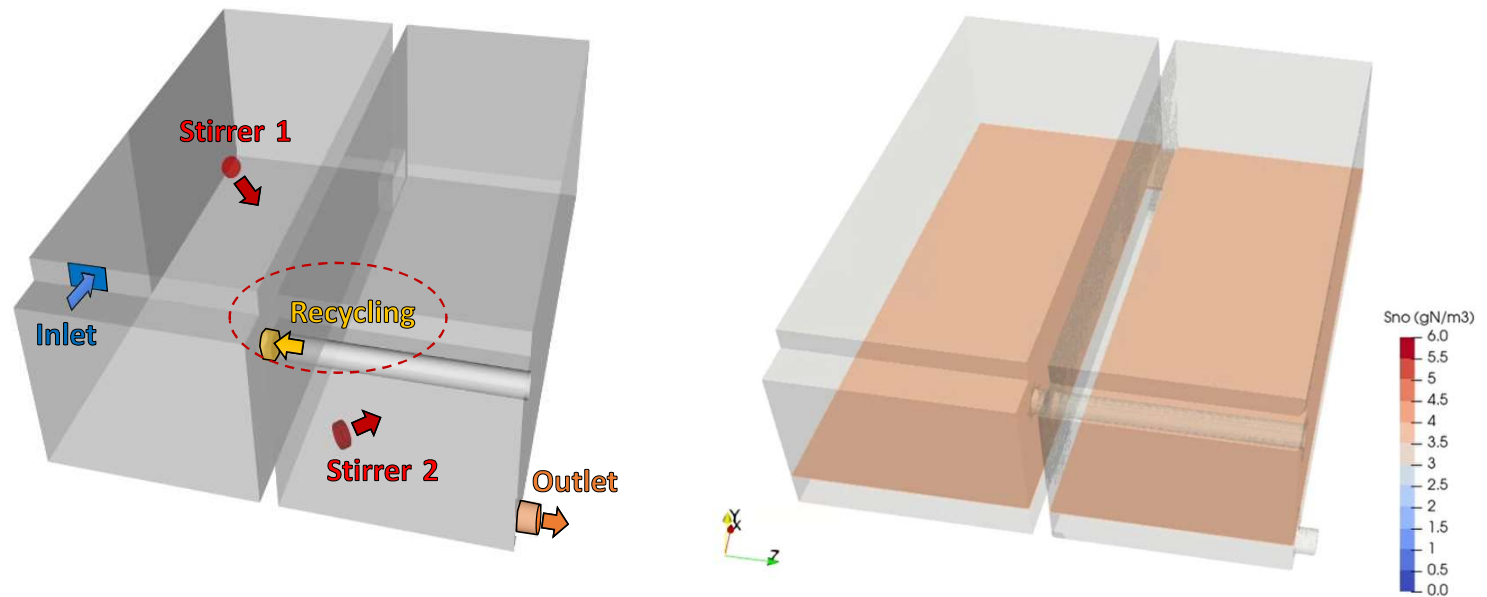
## Efecto del caudal de recirculación sobre el tanque anóxico: Evolución de la desnitrificación

### Valores Constantes

**Inlet, Stirrer 1** and **Stirrer 2**

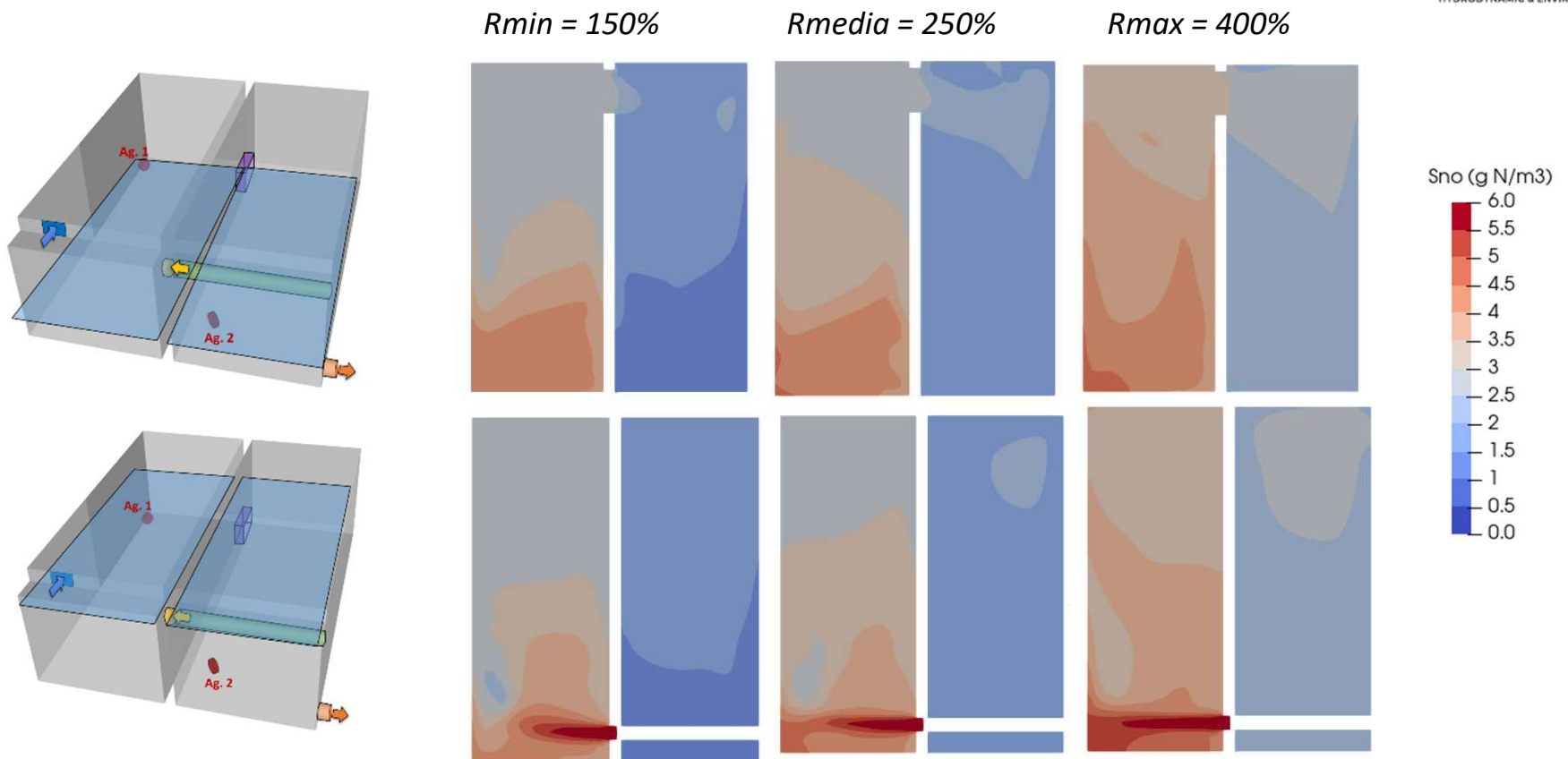
### Caudal Recirculación:

- $R_{min} = 150\%$
- $R_{normal} = 250\%$
- $R_{max} = 400\%$



## Desarrollo de aplicaciones del Gemelo Digital

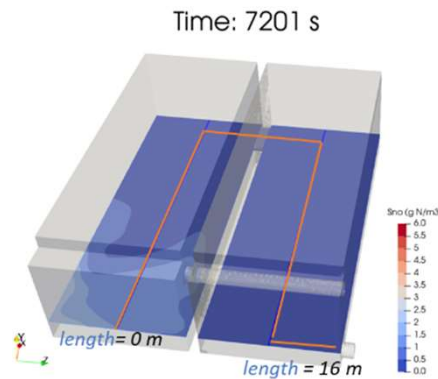
### Efecto del caudal de recirculación sobre el tanque anóxico : Evolución de la desnitrificación



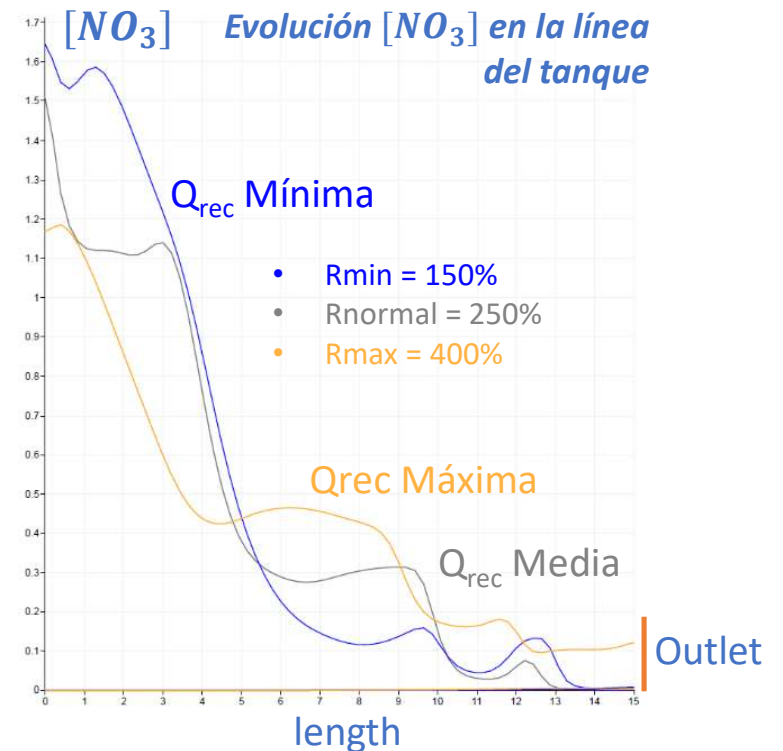
## Desarrollo de aplicaciones del Gemelo Digital

### 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