



# PROYECTOS SINÉRGICOS 2018 EN I+D

**ACRONIMO: FOTOCAOS CM (Y2018/EMT5062)**

**TITULO PROYECTO: Nuevos métodos computacionales avanzados para la simulación y optimización de procesos fotoquímicos**

**PRESUPUESTO CONCEDIDO: 421.600€**

Madrid, 1 de febrero de 2023

# FOTOCAOS - ¿Quiénes participamos?



Grupo de Ingeniería Química y  
Ambiental (GIQA)

6 investigadores  
Dr. Javier Marugán (IP)  
[javier.marugan@urjc.es](mailto:javier.marugan@urjc.es)

## FOTOCAOS

Nuevos métodos  
computacionales  
avanzados para la  
simulación y optimización  
de procesos fotoquímicos



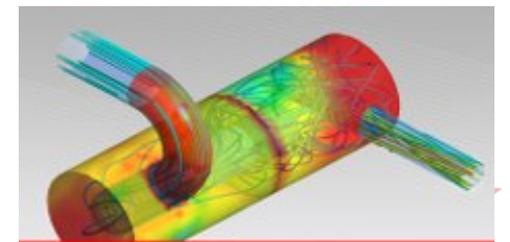
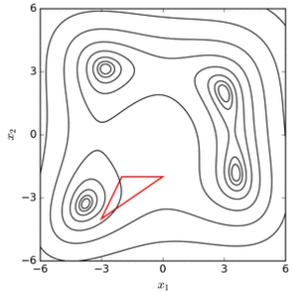
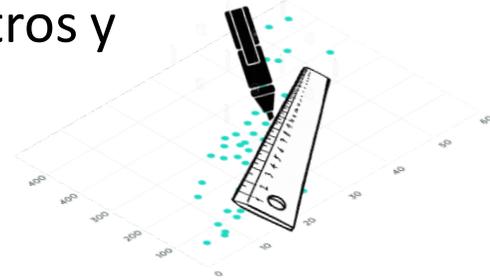
Grupo de Computación Avanzada,  
Percepción y Optimización (CAPO)

6 Investigadores  
Dr. Antonio Sanz (IP)  
[antonio.sanz@urjc.es](mailto:antonio.sanz@urjc.es)



# FOTOCAOS - ¿Qué objetivos planteamos?

- Actualizar el stack computacional del modelado en ingeniería química al siglo XXI
  - Cinética y reacción química (ej. tratamiento de aguas): ajuste de parámetros y modelar la reacción química en herramientas CFD libres (OpenFoam)
  - Fluidodinámica (ej. aerodinámica): optimización tiempo de simulación
  - Radiación (ej. transmisión de calor): optimización tiempo de simulación
- 3 bloques
  - Microescala
    - Ajustar modelos cinéticos mecanísticos: metaheurísticas, redes
  - Mesoescala
    - Optimización hardware/software: computación multithread, distribuida, heterogénea
  - Macroescala
    - Nuevas aplicaciones del software optimizado



# FOTOCAOS - ¿Qué resultados hemos obtenido?

- Producción científica
  - 13 JCRs, 21 OpenAccess, 17 congresos internacionales, 5 PhD, 3 investigadores contratados TC y 1 TP, 5 estancias (4 intl+1 nac)
- Resultados por bloques (Micro, Meso, Macro)
  - Microescala
    - Ajuste modelos cinéticos mecanísticos: Aplicación de redes neuronales de aprendizaje por refuerzo para obtención de parámetros de ajuste de la reacción sin supervisión. Resultados comparables con simulaciones supervisadas en tiempo y calidad.
    - Interfaz gráfica para definir modelos en estándar SBML
    - Ajuste metaheurístico de parámetros con modelos SBML: reduce error un 23% y tiempo 80%
      - Pendiente de publicación
    - Módulo de reacción química en OpenFOAM compatible con modelos definidos en SBML
      - Pendiente de publicación



# FOTOCAOS - ¿Qué resultados hemos obtenido?

- Resultados por bloques (Micro, Meso, Macro)

- Mesoescala

- Optimización hardware: Inclusión de cómputo multithread en esquema de paralelización híbrida (OpenMP/OpenMPI) con aumento de escalabilidad de x10 en resolución de problemas CFD
    - Optimización software: Reformulación del almacenamiento de fuentes de radiación y propiedades ópticas en memoria y reordenamiento de instrucciones de control en OpenFOAM
    - Obtención de speedup promedio de x15 (llegando a x56) vs ANSYS Fluent
      - Reducción tiempo 93% promedio (llegando a 98%)
      - Art.83 con ENGYS para mejorar OpenFOAM en CFD

- Macroescala

- Nuevas aplicaciones del software optimizado: aplicación de simulación paramétrica mediante motor metaheurístico
      - Pendiente de publicación

