



**ΕΘΝΙΚΟ  
ΜΕΤΣΟΒΙΟ  
ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ**  
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

Α.Π. :  
Αθήνα,

ΚΟΣΜΗΤΟΡΑΣ

**Προς τα Μέλη ΔΕΠ της  
Σχολής Μηχ/γων  
Μηχ/κών**

**ΠΡΟΣΚΛΗΣΗ**

Σας προσκαλούμε στην παρουσίαση της Διδακτορικής Διατριβής του **Υ.Δ. κ. Σκαμάγκη Θεμιστοκλή**, Διπλωματούχου Μηχανικού Περιβάλλοντος από το Δημοκρίτειο Πανεπιστήμιο Θράκης καθώς και κάτοχος Μεταπτυχιακού Διπλώματος του ΔΠΜΣ Υπολογιστική Μηχανική από τη Σχολή Χημικών Μηχανικών του ΕΜΠ, την οποία εκπόνησε στον Τομέα Ρευστών. Η παρουσίαση της Διδακτορικής του Διατριβής θα πραγματοποιηθεί την *Παρασκευή 3 Μαρτίου 2023* και ώρα 9.00π.μ. διαδικτυακά. Ο ελληνικός τίτλος της Διδακτορικής Διατριβής είναι ως εξής:

«Μείωση Υπολογιστικού Κόστους και Σταθεροποίηση των Επιλυτών της Συνεχούς Συζυγούς Μεθόδου στη Βελτιστοποίηση Μορφής στην Αεροδυναμική, με η χωρίς Αβεβαιότητες»

Και ο Αγγλικός ως εξής:

«Computational Cost Reduction and Stabilization of Solvers of the Continuous Adjoint Method in Aerodynamic Shape Optimization, with or without Uncertainties»

**Ο Κοσμήτορας της Σχολής**

**N. Μαρμαράς**  
Καθηγητής Ε.Μ.Π

**Κάθε ενδιαφερόμενη/ος που επιθυμεί να την παρακολουθήσει παρακαλείται να στείλει email στο [kgianna@central.ntua.gr](mailto:kgianna@central.ntua.gr) ώστε να του δοθεί πρόσβαση.**



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο  
Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών  
Τομέας Ρευστών  
Εργαστήριο Θερμικών Στροβιλομηχανών  
Μονάδα Παράλληλης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής & Βελτιστοποίησης

## Μείωση Υπολογιστικού Κόστους και Σταθεροποίηση των Επιλυτών της Συνεχούς Συζυγούς Μεθόδου στη Βελτιστοποίηση Μορφής στην Αεροδυναμική, με η χωρίς Αβεβαιότητες

**Θεμιστοκλής Σκαμάγκης**

*Επιβλέπων: Κυριάκος Γιαννάκογλου, Καθηγητής ΕΜΠ*

### Περίληψη Διδακτορικής Διατριβής

Στη διδακτορική διατριβή αναπτύσσονται τεχνικές με σκοπό τη μείωση του υπολογιστικού κόστους αιτιοκρατικών μεθόδων βελτιστοποίησης μορφής στην αεροδυναμική, για ροές με ήπια χρονική αστάθεια ή/και με αβεβαιότητες. Όλες οι τεχνικές βασίζονται στη συνεχή συζυγή μέθοδο και αναπτύχθηκαν σε περιβάλλον OpenFOAM, συμπληρωματικά του επιλύτη συζυγών εξισώσεων ανοιχτής πρόσβασης ο οποίος έχει αναπτυχθεί από τη Μονάδα Παράλληλης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής & Βελτιστοποίησης του ΕΜΠ. Αρχικά, γίνεται πιστοποίηση των τεχνικών σε ακαδημαϊκές και ακολουθεί η χρήση τους σε βιομηχανικές εφαρμογές.

Η συζυγής μέθοδος για χρονικά μη-μόνιμους επιλύτες έχει μεγάλες απαιτήσεις σε υπολογιστικό κόστος ή/και αποθήκευση δεδομένων. Για αυτό και δεν χρησιμοποιείται συχνά στη βελτιστοποίηση μορφής σε βιομηχανικές εφαρμογές. Οι μόνιμοι επιλύτες πρωτεύουσών και συζυγών εξισώσεων μπορούν, κατά περίπτωση, να χρησιμοποιηθούν όταν η ροή παρουσιάζει ήπια χρονική αστάθεια. Στη διατριβή αυτή εφαρμόζεται η Μέθοδος Αναδρομικών Προβολών (Recursive Projection Method, RPM) για την αντιμετώπιση των δυσκολιών σύγκλισης που παρουσιάζουν οι χρονικά μόνιμοι πρωτεύοντες και (συνεχείς) συζυγείς επιλύτες λόγω της χρονικής αστάθειας της ροής. Με το πέρας της βελτιστοποίησης με μόνιμους επιλύτες, οι βελτιστοποιημένες λύσεις επαναξιολογούνται από μη-μόνιμους επιλύτες πρωτεύοντος προβλήματος για να επιβεβαιωθεί η μείωση του χρονικού μέσου των συναρτήσεων στόχου. Έτσι, η βελτιστοποίηση γίνεται με υπολογιστικό κόστος ως και κατά μία τάξη μεγέθους χαμηλότερο από ότι με χρονικά μη-μόνιμους επιλύτες. Η τεχνική αυτή χρησιμοποιείται επίσης για βελτιστοποίηση μορφής σε ροές όπου εκλύονται στρόβιλοι. Παρότι μπορούν να υπολογιστούν βελτιωμένες λύσεις για τέτοιου είδους ροές με μόνιμους επιλύτες, δεν μπορεί εν τέλει να αποφευχθεί ένας βρόχος βελτιστοποίησης με μη-μόνιμους επιλύτες. Το συνολικό κόστος, όμως, μειώνεται χρησιμοποιώντας τη βελτιστοποιημένη λύση με μόνιμους επιλύτες ως αρχικοποίηση για τη βελτιστοποίηση με μη-μόνιμους.

Σε πιο πολύπλοκες εφαρμογές, οι δυσκολίες σύγκλισης των μόνιμων πρωτεύοντων και συζυγών επιλυτών, ακόμα και με την RPM, είναι πολύ πιο έντονες. Αιτία για αυτό μπορεί να είναι η ποιότητα του πλέγματος γύρω από περίπλοκες γεωμετρίες ή η ύπαρξη πληθώρας ιδιοσυχνοτήτων που προκαλούν τη γρήγορη απόκλιση του συζυγούς επιλύτη. Προκειμένου να αποφευχθούν τέτοια προβλήματα, χρησιμοποιείται (επιπλέον της RPM) ελεγχόμενη απόσβεση της Συζυγούς Ανάστροφης Συμμεταφοράς (Adjoint Transposed-Convection, ATC), ενός όρου που εμφανίζεται στις συνεχείς συζυγείς εξισώσεις ορμής. Η απόσβεση ή απαλοιφή αυτού του όρου χρησιμοποιείται συχνά στη βιβλιογραφία για τη σταθεροποίηση συνεχών συζυγών επιλυτών. Μελετάται, εδώ, η επίδραση που έχει αυτή η πρακτική στην ακρίβεια των παραγώγων ευαισθησίας σε περιπτώσεις όπου η RPM επιτυγχάνει από μόνη της τη σταθεροποίηση του συζυγούς επιλύτη. Η ελεγχόμενη απόσβεση της ATC (εφόσον απαιτείται) αποδεικνύεται πρακτικά αβλαβής και συνεισφέρει σημαντικά στην ευστάθεια των συζυγών επιλυτών. Αντίθετα, η ανεξέλεγκτη απόσβεση του όρου απουσία της RPM είναι αρκετά συχνά επιζήμια. Επίσης, χάριν της RPM, αποφεύγεται η επίλυση συζυγών εξισώσεων βασισμένων στη μέση τιμή των μη-συγκλιμένων πρωτεύοντων πεδίων.

Το δεύτερο σκέλος της διατριβής αφορά την αεροδυναμική βελτιστοποίηση μορφής υπό αβεβαιότητες. Σε τέτοια προβλήματα, προσδιορίζεται ποσοτικά η απόκριση μιας Ποσότητας Ενδιαφέροντος (Quantity of Interest, QoI) ως προς ένα σύνολο μεταβλητών αβεβαιότητας με τις λεγόμενες μεθόδους Ποσοτικοποίησης Αβεβαιότητας (Uncertainty Quantification, UQ). Αυτό αυξάνει σημαντικά το υπολογιστικό κόστος ενός βρόχου βελτιστοποίησης. Χρησιμοποιούνται οι μέθοδοι Πρώτης-Τάξης Δεύτερης-Ροπής (First-Order Second-Moment, FOSM) και Αναπτύγματος Πολυωνυμικού Χάους υποβοηθούμενου από τη Συζυγή Μέθοδο (Adjoint-assisted Polynomial Chaos Expansion, APCE) για τον υπολογισμό των δύο πρώτων στατιστικών ροπών (μέσης τιμής και τυπικής απόκλισης) μιας QoI. Το σταθμισμένο άθροισμα αυτών των ροπών χρησιμοποιείται ως συνάρτηση στόχος. Για μια τέτοια συνάρτηση, η βελτιστοποίηση με παραγώγους ευαισθησίας απαιτεί τις μικτές παραγώγους της QoI ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού και αβεβαιότητας. Καθώς, όμως, αρκεί μόνο ο υπολογισμός της προβολής του μητρώου των μικτών παραγώγων σε διανύσματα, αναπτύσσονται δύο μέθοδοι βελτιστοποίησης με προβολές, οι rFOSM και rAPCE, σε αντιστοιχία με τις δύο μεθόδους UQ που προαναφέρθηκαν. Βασικό κέρδος από τη χρήση των μεθόδων προβολής είναι πως το κόστος υπολογισμού του προβλεπόμενου μητρώου μικτών παραγώγων δεν αυξάνεται με το πλήθος των μεταβλητών αβεβαιότητας ή σχεδιασμού.

Στην rFOSM, το κόστος ανά κύκλο βελτιστοποίησης είναι ίσο με 4 Υπολογιστικές Μονάδες (Equivalent Flow Solutions, EFS), ως δηλαδή να λύνεται το πρόβλημα ροής 4 φορές. Στην rAPCE, το κόστος είναι ίσο με 4L EFS (L είναι το πλήθος των σημείων δειγματοληψίας στην παλινδρόμηση). Το κέρδος είναι σημαντικό ακόμα και για μικρό πλήθος μεταβλητών αβεβαιότητας. Η rAPCE έχει μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος από την rFOSM, αλλά υπολογίζει στατιστικές ροπές με μεγαλύτερη ακρίβεια. Οι δύο μέθοδοι παρουσιάζονται σε προβλήματα αεροδυναμικής βελτιστοποίησης μορφής για στρωτές και τυρβώδεις ροές. Στις τελευταίες, η επίλυση γίνεται με χρήση του μοντέλου τύρβης των Spalart-Allmaras και της συζυγούς του εξίσωσης.

Οι βιομηχανικές εφαρμογές περιλαμβάνουν την αεροδυναμική βελτιστοποίηση μορφής οχημάτων επίγειας μεταφοράς με χρήση μόνιμων επιλυτών σε συνδυασμό με την RPM και μιας πτέρυγας αεροσκάφους παρουσία αβεβαιοτήτων ως προς τις συνθήκες ροής με χρήση των rFOSM και rAPCE.

**Λέξεις Κλειδιά:** Αεροδυναμική Βελτιστοποίηση Μορφής, Συνεχής Συζυγής Μέθοδος, Στιβαρός Σχεδιασμός, Μέθοδος Αναδρομικών Προβολών, Ευστάθεια Εξισώσεων, Συζυγής Ανάστροφη Συμμεταφορά, Ποσοτικοποίηση Αβεβαιότητας, Ανάπτυγμα Πολυωνυμικού Χάους, OpenFOAM.

Αθήνα, 2023



National Technical University of Athens  
School of Mechanical Engineering  
Fluids Section  
Laboratory of Thermal Turbomachines  
Parallel CFD & Optimization Unit

## **Computational Cost Reduction and Stabilization of Solvers of the Continuous Adjoint Method in Aerodynamic Shape Optimization, with or without Uncertainties**

***Themistoklis Skamagkis***

*Supervisor:* Kyriakos C. Giannakoglou, Professor NTUA

### **PhD Thesis Abstract**

The objective of this thesis is the development and assessment of techniques for the reduction of the computational cost of gradient-based aerodynamic shape optimization for flows that exhibit mild unsteadiness and/or in the presence of uncertainties. All these techniques are based on the continuous adjoint method and have been developed in the OpenFOAM environment, as a complement to the adjoint solver developed and made publicly available by the Parallel CFD & Optimization Unit of the National Technical University of Athens (PCOpt/NTUA). They are first validated in academic cases and are later used for aerodynamic shape optimization in industrial applications.

It is well known that adjoint-based shape optimization using unsteady solvers is costly and/or memory demanding. For this reason, it is sparingly used in real-world applications. When mild unsteadiness is present, steady primal and adjoint solvers can be used instead provided that convergence difficulties are properly treated. In this thesis and for this type of applications, the steady primal and the corresponding (continuous) adjoint solvers are both stabilized by implementing the Recursive Projection Method (RPM), a stabilization method for iterative procedures. Upon completion of the optimization using steady solvers, unsteady re-evaluations of the optimized solutions should normally be used to confirm a reduction in the time-averaged objective function. Thus, shape optimization costs less, even by an order of magnitude, than an optimization using unsteady adjoint. This approach is further tested in flows with vortex shedding wherein steady flow solutions are computed with the help of the RPM. Although vortex shedding problems can be optimized with steady solvers, optimization using unsteady adjoint cannot be avoided. However, the latter starts with a good initialization, computed by the steady solvers, and this reduces a lot the overall CPU cost.

In complex cases, the convergence difficulties of the primal and adjoint solvers are far more prevalent. For instance, the RPM may not necessarily ensure convergence of the adjoint solver on its own. This might be due to the lack of good grid quality, often in applications involving complex geometries (e.g. a car with wheels, side mirrors, surface details etc.), or the existence of many unstable modes causing rapid divergence of the solver. To overcome this difficulty, the controlled damping of the Adjoint Transposed-Convection (ATC) term in the adjoint momentum equations is occasionally employed along with the RPM. In the literature, the damping or, even, elimination of the ATC term is frequently used for the stabilization of continuous adjoint solvers. The effect of this treatment on the computed Sensitivity Derivatives (SDs) is studied in cases in which the RPM, on its own, makes the adjoint solver converge. Controlled/mild ATC damping (if needed), as applied in this thesis, proves to be harmless and greatly contributes to robustness. On the contrary, the uncontrolled damping or, even, elimination of the ATC, an action that would have been required in the absence of the RPM, may become harmful. In addition, the RPM stabilization helps avoiding the solution of the adjoint equations based on averaged primal fields.

In the second part, this thesis tackles aerodynamic shape optimization in the presence of uncertainties. In such problems, Uncertainty Quantification (UQ) techniques are used to measure the effect of uncertain variables on a Quantity of Interest (QoI). The inclusion of UQ in a shape optimization loop may noticeably increase the computational cost. Two UQ methods, namely the First-Order Second-Moment (FOSM) and the

Adjoint-assisted Polynomial Chaos Expansion (APCE) are studied. Both FOSM and APCE compute the first two statistical moments (mean value and standard deviation) of the QoI and the objective function to be minimized is their weighted sum. Gradient-based optimization with such an objective function requires mixed derivatives of the QoI with respect to the design and uncertain variables. However, in practice, only the projection of the matrix of mixed derivatives on some vectors needs to be computed, instead of the matrix itself. These projections are herein exploited in both UQ methods to reduce the CPU cost, yielding projected counterparts of these two methods. Their key point is that the cost of computing the projected matrix of mixed derivatives does not scale with the number of either the design or the uncertain variables.

In the projected FOSM (pFOSM), the cost per optimization cycle with gradient-based methods is 4 Equivalent Flow Solutions (EFS), i.e. as if the flow equations are solved 4 times. The cost of the projected APCE (pAPCE) is equal to  $4L$  EFS ( $L$  is the number of collocation points needed in the regression). The gain in CPU cost is significant even if only a few uncertain variables are involved. The pAPCE method is more expensive than pFOSM but computes more accurate statistical moments. Over and above to some laminar flow problems, pFOSM and pAPCE are demonstrated in aerodynamic shape optimization problems with turbulent flows, solved using the Spalart-Allmaras model and its adjoint.

The industrial applications involve aerodynamic shape optimization of ground vehicles using steady solvers and the RPM and of an aircraft wing in the presence of flow uncertainties, to assess the pFOSM and pAPCE.

**Keywords:** Aerodynamic Shape Optimization, Continuous Adjoint, Robust Design Optimization, Recursive Projection Method, Stability, Adjoint Transposed-Convection, Uncertainty Quantification, Polynomial Chaos Expansion, OpenFOAM.

Athens, 2023