



Α.Π. : 25392
Αθήνα, 19/6/24

ΚΟΣΜΗΤΟΡΑΣ

Προς:
τα Μέλη ΔΕΠ της Σχολής Μηχανολόγων Μηχανικών ΕΜΠ

ΠΡΟΣΚΛΗΣΗ

Σας προσκαλούμε στην εξέταση-παρουσίαση της Διδακτορικής Διατριβής του Υποψήφιου Διδάκτορα κ. ΜΑΡΓΕΤΗ Ανδρέα-Στέφανου του Ιωάννη, Διπλωματούχου Μηχανολόγου Μηχανικού του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου, με τον τίτλο:

«Χρονικά Μη-Μόνιμη Συνεχής Συζυγής Μέθοδος για τα Μοντέλα URANS & (D) DES και Τεχνικές Συμπύεσης στην Αεροδυναμική Βελτιστοποίηση Μορφής»

Η παρουσίαση θα πραγματοποιηθεί την Πέμπτη 18 Ιουλίου 2024 και ώρα 10:00, στο Αμφιθέατρο Πολυμέσων του κτιρίου της Βιβλιοθήκης ΕΜΠ στην Πολυτεχνειούπολη Ζωγράφου, με ταυτόχρονη διαδικτυακή μετάδοση λόγω της εξ' αποστάσεως συμμετοχής δύο καθηγητών από το εξωτερικό.

Για πληροφορίες σχετικά με την απομακρυσμένη σύνδεση παρακαλείστε όπως αποστείλετε ηλεκτρονικό μήνυμα στη διεύθυνση: kgianna@mail.ntua.gr

Ο Κοσμήτορας της Σχολής



Ι. Αντωνιάδης
Καθηγητής Ε.Μ.Π



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

Χρονικά Μη-Μόνιμη Συνεχής Συζυγής Μέθοδος για τα Μοντέλα URANS & (D)DES και Τεχνικές Συμπίεσης στην Αεροδυναμική Βελτιστοποίηση Μορφής

Ανδρέας-Στέφανος Ι. Μαργέτης

Επιβλέπων: Κυριάκος Χ. Γιαννάκογλου, Καθηγητής ΕΜΠ

Περίληψη Διδακτορικής Διατριβής

Η διδακτορική διατριβή εντάσσεται στην περιοχή της αιτιοκρατικής βελτιστοποίησης μορφής στην αεροδυναμική σε προβλήματα που διέπονται από χρονικά μη-μόνιμες Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις (ΜΔΕ), όπως οι μη-μόνιμες εξισώσεις Navier-Stokes, και στις οποίες οι παράγωγοι της συνάρτησης κόστους ως προς τις μεταβλητές σχεδιασμού υπολογίζονται χρησιμοποιώντας τη συζυγή (adjoint) μέθοδο. Το κύριο ζήτημα που εμποδίζει την ευρεία χρήση της χρονικά μη-μόνιμης συζυγούς μεθόδου (unsteady adjoint method) στη βιομηχανία σχετίζεται με το γεγονός ότι οι συζυγείς εξισώσεις ολοκληρώνονται κατάντι στον χρόνο, ξεκινώντας από την τελευταία χρονική στιγμή του ροϊκού επιλύτη. Η απαίτηση να είναι διαθέσιμα τα ήδη υπολογισμένα ροϊκά πεδία σε κάθε χρονικό βήμα του συζυγούς επιλύτη αυξάνει σημαντικά τις απαιτήσεις αποθήκευσης δεδομένων ή/και το υπολογιστικό κόστος. Οι ακραίες προσεγγίσεις αυτού του ζητήματος είναι (α) η τεχνική της πλήρους αποθήκευσης (full storage) της χρονοσειράς της ροής, η οποία αν και έχει το ελάχιστο δυνατό υπολογιστικό κόστος, αυξάνει υπέρμετρα τις απαιτήσεις σε μνήμη, ιδιαίτερα σε βιομηχανικές εφαρμογές, και (β) η τεχνική της μηδενικής αποθήκευσης (zero storage), συνοδευόμενη με επαναλαμβανόμενους υπολογισμούς για την ανάκτηση των ροϊκών πεδίων κάθε χρονικού βήματος, ξεκινώντας πάντα από την αρχική στιγμή, κάτι που αυξάνει δραματικά το υπολογιστικό κόστος. Μια ευρέως χρησιμοποιούμενη εναλλακτική προσέγγιση είναι η τεχνική του διωνυμικού check-pointing, η οποία περιορίζει τις απαιτήσεις μνήμης εις βάρος μια ελεγχόμενης αύξησης του κόστους.

Ο πρώτος στόχος της διατριβής είναι η μείωση τόσο του κόστους, όσο και των απαιτήσεων σε μνήμη της χρονικά μη-μόνιμης συζυγούς μεθόδου, χρησιμοποιώντας τεχνικές συμπίεσης δεδομένων, με και χωρίς απώλεια πληροφορίας. Συγκεκριμένα, συνδυάζονται (α) ο σταδιακός Ιδιο-Γενικευμένος Διαχωρισμός (incremental Proper Generalized Decomposition, iPGD), (β) ο αλγόριθμος ZFP και (γ) ο αλγόριθμος Zlib, δημιουργώντας τον πυρήνα συμπίεσης (compression kernel) iPGDZ⁺. Ο συμβατικός αλγόριθμος PGD απαιτεί να είναι διαθέσιμη ολόκληρη η χρονοσειρά της ροής πριν αυτή συμπιεστεί. Ωστόσο, αν υπήρχε αποθηκευτικός χώρος ικανός να αποθηκεύσει ολόκληρη τη χρονοσειρά χωρίς συμπίεση, η εκ των υστέρων συμπίεση των ροϊκών πεδίων δε θα προσέφερε κάποιο πλεονέκτημα. Αυτό αποτελεί το κίνητρο για την ανάπτυξη του iPGD, το οποίο συμπιέζει τα ροϊκά πεδία κάθε φορά που υπολογίζεται ένα νέο στιγμιότυπο της ροής. Στη διατριβή, το iPGD επανεξετάζεται, βελτιώνεται και επεκτείνεται σε μη-δομημένα πλέγματα. Επιπλέον, δεδομένου ότι το ZFP είναι σχεδιασμένο για δομημένα πλέγματα, αναπτύσσονται τρεις παραλλαγές του με στόχο τη βέλτιστη χρήση του σε μη-δομημένα πλέγματα.

Έχοντας ως κοινή βάση το iPGDZ⁺, αναπτύσσονται δύο τεχνικές: (α) η Compressed Full Storage (CFS), η οποία συμπιέζει ολόκληρη τη χρονοσειρά της ροής με το iPGDZ⁺, εξαλείφοντας την ανάγκη ροϊκών επανυπολογισμών, και (β) η Compressed Coarse-grained Check-Pointing (3CP) η οποία συνδυάζει το iPGDZ⁺ με το διωνυμικό check-pointing, μειώνοντας περαιτέρω τις απαιτήσεις σε μνήμη, αλλά αυξάνοντας το κόστος σε σχέση με το CFS λόγω των απαιτούμενων ροϊκών επανυπολογισμών. Παρ' όλο που η διατριβή εστιάζει αποκλειστικά σε προβλήματα αεροδυναμικής βελτιστοποίησης μορφής, οι τεχνικές συμπίεσης που αναπτύσσονται σε αυτήν μπορούν εύκολα να χρησιμοποιηθούν σε οποιαδήποτε αιτιοκρατικό πρόβλημα βελτιστοποίησης το οποίο μοντελοποιείται από χρονικά μη-μόνιμες ΜΔΕ, χρησιμοποιώντας είτε τη συνεχή

είτε τη διακριτή συζυγή μέθοδο. Στη διατριβή, οι τεχνικές CFS και 3CP αξιολογούνται ως προς τις απαιτήσεις τους σε μνήμη, το κόστος και την ακρίβεια της συμπίεσης, και συγκρίνονται με το διωνυμικό check-pointing.

Το δεύτερο σκέλος της διατριβής επικεντρώνεται στην ανάπτυξη της συνεχούς συζυγούς μεθόδου για τα μοντέλα ροής Detached Eddy Simulation (DES) και Delayed-DES (DDES), βασισμένα στο μοντέλο τύρβης Spalart-Allmaras, για πρώτη φορά στη βιβλιογραφία. Πρόκειται για υβριδικές μεθόδους οι οποίες συνδυάζουν τα μοντέλα ροής Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes (URANS) και Large Eddy Simulation (LES), επιτυγχάνοντας υψηλότερη ακρίβεια σε σχέση με τα μοντέλα (U)RANS, αλλά με σημαντικά μικρότερο υπολογιστικό κόστος σε σχέση με τα LES. Αποδεικνύεται ότι η επίλυση της συζυγούς εξίσωσης του μοντέλου τύρβης είναι απαραίτητη για τον υπολογισμό ακριβών παραγώγων ευαισθησίας, λ.χ. σε πολύ καλή συμφωνία με τις παραγώγους αναφοράς υπολογισμένες με τη μέθοδο των Πεπερασμένων Διαφορών (Finite Differences). Αντίθετα, η συχνά χρησιμοποιούμενη παραδοχή της 'παγωμένης τύρβης', η οποία αμελεί την επίδραση των μεταβλητών σχεδιασμού στην τυρβώδη συνεκτικότητα, οδηγεί στον υπολογισμό παραγώγων ευαισθησίας οι οποίες εν γένει αποκλίνουν σημαντικά από τις τιμές αναφοράς. Δεδομένου ότι τα μοντέλα (D)DES είναι εγγενώς χρονικά μη-μόνιμα, η προτεινόμενη συζυγής μέθοδος μπορεί επίσης να επωφεληθεί από τις τεχνικές συμπίεσης που αναπτύσσονται στη διατριβή.

Όλες οι μέθοδοι προγραμματίστηκαν στο περιβάλλον ανοιχτού κώδικα OpenFOAM, ως επέκταση της ελεύθερα προσβάσιμης *adjointOptimisation* βιβλιοθήκης, η οποία έχει αναπτυχθεί από τη Μονάδα Παράλληλης Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής & Βελτιστοποίησης του Εθνικού Μετσοβίου Πολυτεχνείου (ΜΠΥΡ&Β/ΕΜΠ). Αξιολογούνται αρχικά σε μία σειρά από ακαδημαϊκά προβλήματα αεροδυναμικής βελτιστοποίησης μορφής και, στη συνέχεια, σε ένα ευρύ φάσμα εφαρμογών της αυτοκινητοβιομηχανίας, στις οποίες οι ροή διέπεται από τα URANS και/ή (D)DES μοντέλα ροής. Στόχος των εφαρμογών αυτών είναι η μείωση της οπισθέλκουσας διαφόρων οχημάτων. Σε όλες τις περιπτώσεις, οι τεχνικές CFS και 3CP μειώνουν το κόστος ανά κύκλο βελτιστοποίησης κατά περίπου 30% και 5%, αντίστοιχα, συγκριτικά με το check-pointing. Ταυτόχρονα, το CFS μειώνει τις απαιτήσεις σε μνήμη κατά 5 έως 35 φορές συγκριτικά με το check-pointing (ή 350 έως 1200 φορές συγκριτικά με την πλήρη αποθήκευση χωρίς συμπίεση) στις URANS εφαρμογές και κατά 1.2 έως 8 φορές συγκριτικά με το check-pointing (ή 70 έως 120 φορές συγκριτικά με την πλήρη αποθήκευση) στις DDES εφαρμογές. Από την άλλη πλευρά, το 3CP πετυχαίνει ακόμα μεγαλύτερη μείωση στην απαιτούμενη μνήμη, η οποία κυμαίνεται από ± 30 έως ± 60 συγκριτικά με το check-pointing (ή ± 1900 έως ± 2500 συγκριτικά με την πλήρη αποθήκευση) στις URANS εφαρμογές και από ± 15 έως ± 40 συγκριτικά με το check-pointing (ή περίπου ± 1000 συγκριτικά με την πλήρη αποθήκευση) στις DDES εφαρμογές. Προκειμένου να επεκταθεί το είδος των εξεταζόμενων προβλημάτων, μέρος των μεθόδων συμπίεσης ενσωματώνεται και στο λογισμικό PUMA της ΜΠΥΡ&Β/ΕΜΠ, το οποίο εκτελείται σε κάρτες γραφικών, και χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό παραγώγων ευαισθησίας στην περίπτωση ενός μοντέλου αεροσκάφους με πτέρυγες με μεγάλο λόγο επιμήκους (High Aspect Ratio Wing (HARW) aircraft model) σε συνθήκες διηχητικής ροής.

Τμήματα της ερευνητικής εργασίας χρηματοδοτήθηκαν από την εταιρεία Bayerische Motoren Werke AG (BMW) Μονάχου, από την Ευρωπαϊκή Ένωση και τη Γενική Γραμματεία Έρευνας και Τεχνολογίας (ΓΓΕΤ), μέσω του ερευνητικού προγράμματος exaFOAM Euro-HPC (αρ. Σύμβασης 956416) και από τον Ειδικό Λογαριασμό Κονδυλίων Έρευνας (ΕΛΚΕ) του ΕΜΠ, μέσω τετραετούς υποτροφίας για την υποστήριξη Υποψηφίων Διδασκάντων. Υπολογιστικός χρόνος παρασχέθηκε από το Εθνικό Δίκτυο Υποδομών Τεχνολογίας και Έρευνας (ΕΔΥΤΕ Α.Ε. – GRNET S.A.) στον εθνικό υπερυπολογιστή υψηλών επιδόσεων ARIS, μέσω των έργων 10031, 13004 και 15009.

Λέξεις Κλειδιά: Αεροδυναμική Βελτιστοποίηση Μορφής, Υπολογιστική Ρευστοδυναμική, Χρονικά Μη-μόνιμη Συνεχής Συζυγής Μέθοδος, Τεχνικές Συμπίεσης Δεδομένων, Σταδιακός Ιδιο-Γενικευμένος Διαχωρισμός, ZFP, DES, DDES, Spalart-Allmaras, OpenFOAM

Αθήνα, 2024



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

Unsteady RANS & (D)DES Continuous Adjoint and Compression Techniques in Aerodynamic Shape Optimization

Andreas-Stefanos I. Margetis

Supervisor: Kyriakos C. Giannakoglou, Professor NTUA

PhD Abstract

This PhD thesis focuses on aerodynamic gradient-based shape optimization in problems governed by unsteady PDEs, such as the unsteady Navier-Stokes equations, in which gradients with respect to the design variables are computed using the adjoint method. One of the major challenges hindering the widespread use of unsteady adjoint in industry is the backward in time integration of the adjoint equations. During this, previously computed instantaneous flow fields must be available at each time-step, notably increasing memory requirements and/or computational cost. Treatments of this matter include (a) the full storage of the instantaneous flow field time-series, which, despite having the minimum cost in the absence of flow recomputations, is infeasible in large-scale problems due to excessive memory demands, and (b) a zero-storage policy combined with repetitive flow recomputations starting always from the initial state, which drastically increases the computational overhead. The current state-of-the-art technique for handling unsteady adjoint is binomial check-pointing, which reduces memory demands at the expense of a controllable number of flow recomputations.

The first objective of this PhD thesis is to reduce both the memory requirements and the computational cost of unsteady adjoint by means of lossy and lossless data compression techniques. These are built by synergistically implementing (a) the incremental Proper Generalized Decomposition (iPGD), (b) the ZFP and (c) the Zlib algorithms, giving rise to the so-called iPGDZ⁺ compression kernel. Standard PGD requires the complete time-history of the flow to be available prior to compression. It is though obvious that, if the available hardware has sufficient capacity to store the complete flow solution uncompressed, there is no reason for the fields to be compressed. This is the motivation for developing and using its incremental variant (iPGD) which compresses snapshots incrementally, each time the flow field at a new time-instant is computed. In this thesis, iPGD is revisited, improved and extended to flow fields computed on unstructured grids. Given that ZFP was initially designed for structured data, three variants of the algorithm are developed to optimize its application on unstructured grids.

Two different implementations of the iPGDZ⁺ algorithm are developed: (a) the Compressed Full Storage (CFS) technique, in which the iPGDZ⁺ kernel compresses the entire time-history of the flow in memory, thereby avoiding costly flow recomputations, and (b) the Compressed Coarse-grained Check-Pointing (3CP) technique, which combines iPGDZ⁺ with binomial check-pointing for even greater memory savings, albeit with an increased cost compared to CFS due to flow recomputations. While this thesis focuses solely on aerodynamic shape optimization using continuous adjoint, the devised compression techniques are general and can readily be applied to any gradient-based optimization problem modeled by unsteady PDEs, using either continuous or discrete adjoint. Herein, the CFS and 3CP techniques are assessed in terms of memory savings, computational cost and representation accuracy and compared with binomial check-pointing.

The second objective of this thesis is to extend the continuous adjoint method to higher fidelity eddy-resolving flow models, for the first time in the literature. This involves the development of the continuous adjoint to the incompressible Detached Eddy Simulation (DES) and Delayed-DES (DDES) models, both based on the Spalart-Allmaras turbulence model. It is shown that solving the adjoint to the turbulence model equation is

crucial for the computation of accurate derivatives of the objective function with respect to the design variables, which closely match reference values obtained using Finite Differences. In contrast, derivatives computed under the “frozen turbulence” assumption, which neglects variations in turbulent viscosity due to changes in the design variables, are prone to inaccuracies. As (D)DES models are inherently unsteady, the corresponding adjoint methods can also benefit from compression techniques developed in this thesis.

All methods are implemented as an extension to the publicly available *adjointOptimisation* library of OpenFOAM, developed by the PCOpt/NTUA. They are first applied to academic aerodynamic shape optimization problems and, then, across a wide range of industrial automotive problems governed by the Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes (URANS) and/or (D)DES flow models. These applications are concerned with the shape optimization of various ground vehicles for minimum drag. In all cases, the CFS and 3CP techniques reduce the computational cost per optimization cycle by approximately 30% and 5%, respectively, compared to check-pointing. Additionally, CFS reduces memory footprint by a factor of 5 to 35 compared to check-pointing (or 350 to 1200 compared to full storage without compression) in the URANS cases and by a factor of 1.2 to 8 compared to check-pointing (or 70 to 120 compared to full storage) in the DDES cases. Meanwhile, 3CP achieves even higher memory savings, ranging from ÷30 to ÷60 compared to check-pointing (or ÷1900 to ÷2500 compared to full storage) in the URANS cases and from ÷15 to ÷40 compared to check-pointing (or approximately ÷1000 compared to full storage) in the DDES cases. To extend the application domain, (some of the) compression techniques are also implemented in the GPU-enabled solver PUMA, also developed by the PCOpt/NTUA. This allows the use of the developed compression techniques in computing objective function gradients in the case of a high aspect-ratio wing aircraft model, governed by the compressible URANS equations and featuring shock waves, thereby confirming the versatility of the developed compression tools.

Keywords: Aerodynamic Shape Optimization, Computational Fluid Dynamics, Continuous Adjoint, Unsteady Adjoint, Data Compression, Incremental Proper Generalized Decomposition, ZFP, Spalart-Allmaras, DES, DDES, OpenFOAM.

Athens, 2024