



**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. **ΑΛΕΞΙΑ Παύλου**, διπλωματούχος **Μηχανολόγος Μηχανικός ΕΜΠ**, την οποία εκπόνησε στον Τομέα Ρευστών. Η παρουσίαση θα πραγματοποιηθεί την Τρίτη 25 Οκτωβρίου 2022 και ώρα. 9.00π.μ. διαδικτυακά. Ο ελληνικός τίτλος της Διδακτορικής Διατριβής είναι ο εξής:

*«Συνεισφορά στη Βελτιστοποίηση Μορφής μέσω της Συζυγούς Μεθόδου, σε Ροές Ενός και Περισσοτέρων Ρευστών»*

Και ο Αγγλικός ως εξής  
*«Contribution to Adjoint-based Shape Optimization, in Single- and Multi-Fluid Flows».*

**Ο Κοσμήτορας της Σχολής**

  
**N. Μαρμαράς**  
**Καθηγητής Ε.Μ.Π**

- Για οδηγίες για την πρόσβαση σας διαδικτυακά απευθυνθείτε στον Επιβλέποντα του Υ.Δ.. Καθ. Κ. Γιαννάκογλου ( [kgianna@central.ntua.gr](mailto:kgianna@central.ntua.gr) )



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

## Συνεισφορά στη Βελτιστοποίηση Μορφής μέσω της Συζυγούς Μεθόδου, σε Ροές Ενός και Περισσότερων Ρευστών

Αλεξιάς Παύλος

Επιβλέπων: Κυριάκος Χ. Γιαννάκογλου, Καθηγητής ΕΜΠ

### Περίληψη Διατριβής

Για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης στο πλαίσιο της Υπολογιστικής Ρευστοδυναμικής (ΥΡΔ) με χρήση παραγώγων, η (συνεχής) συζυγής μέθοδος χρησιμοποιείται ευρύτατα για τον υπολογιστικά αποδοτικό υπολογισμό των παραγώγων. Κάθε ξεχωριστό πρόβλημα βελτιστοποίησης απαιτεί πιθανόν τη χρήση διαφορετικού ροϊκού μοντέλου, συνάρτησης-στόχου και περιορισμών και, κατ' επέκταση, η συζυγής μέθοδος πρέπει να προσαρμοσθεί κατάλληλα. Επιπρόσθετα, η συζυγής μέθοδος είναι απαραίτητο να συνδυάζεται με ένα σύνολο μεθόδων/εργαλείων για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης σε βιομηχανικής κλίμακας εφαρμογές. Στη βάση αυτών, ο στόχος αυτής της εργασίας είναι διττός. Ο πρώτος είναι η επέκταση της συνεχούς συζυγούς μεθόδου σε ροές που περιγράφονται από δύο ασυμπίεστα αναμείξιμα ρευστά. Ενώ ο δεύτερος είναι η ανάπτυξη των μεθόδων που χρειάζεται να συνδυασθούν με τη συνεχή συζυγή μέθοδο για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης μορφής βιομηχανικής κλίμακας σε ροές ενός ή και περισσότερων ρευστών. Οι μέθοδοι αυτές περιλαμβάνουν την ανάπτυξη (α) αλγορίθμου για την εξομάλυνση των παραγώγων κατά τη χρήση της κομβικής παραμετροποίησης, (β) μιας μεθόδου παραμόρφωσης πλέγματος ικανής να διατηρεί υψηλής ποιότητας πλέγματα κατά τη διάρκεια της παραμόρφωσης, καθώς και (γ) διαδικασίας επιβολής σχεδιαστικών περιορισμών κατά τη βελτιστοποίηση.

Ως προς τη συνεχή συζυγή μέθοδο, αρχικά απαιτείται η επίλυση των εξισώσεων ροής για δύο αναμείξιμα ασυμπίεστα ρευστά. Για τον λόγον αυτόν, χρησιμοποιείται ένας χρονικά-μόνιμος επιλύτης των εξισώσεων (πρωτεύον πρόβλημα), τόσο για στρωτές όσο και για τυρβώδεις ροές. Σε τυρβώδεις ροές, εφαρμόζεται το μοντέλο τύρβης Spalart-Allmaras για τον υπολογισμό της τυρβώδους συνεκτικότητας. Η συνεχής συζυγής μέθοδος εφαρμόζεται στο ροϊκό μοντέλο δύο ρευστών και παρουσιάζεται αναλυτικά η διαφόριση των εξισώσεων μέσω της οποίας προκύπτουν οι συζυγείς εξισώσεις, οι οριακές τους συνθήκες, αλλά και η έκφραση των παραγώγων ευαισθησίας. Οι τελευταίες επαληθεύονται για στρωτές και τυρβώδεις ροές.

Για την επίλυση προβλημάτων βελτιστοποίησης μορφής απαιτείται η επιλογή μιας μεθόδου παραμετροποίησης. Στη διδακτορική διατριβή ακολουθείται η μέθοδος της κομβικής παραμετροποίησης στην οποία οι συντεταγμένες όλων των κόμβων του επιφανειακού πλέγματος είναι μεταβλητές σχεδιασμού. Η προσέγγιση αυτή προσφέρει το μέγιστο πλήθος μεταβλητών σχεδιασμού για τη δεδομένη χωρική διακριτοποίηση, με το μειονέκτημα ότι η ύπαρξη αριθμητικού θορύβου στις παραγώγους μπορεί να οδηγήσει σε μη-ομαλές επιφάνειες. Συνεπώς, είναι απαραίτητο να συνδυάζεται με μια μέθοδο εξομάλυνσης των παραγώγων, η οποία βασίζεται στην επίλυση μιας Μερικής Διαφορικής Εξίσωσης (ΜΔΕ) διατυπωμένης επί καμπύλων επιφανειών.

Η επόμενη συνεισφορά αφορά την παραμόρφωση πλέγματος για χρήση κατά τη βελτιστοποίηση μορφής, για την οποία προτείνεται μια μέθοδος βασισμένη σε τεχνικές βελτιστοποίησης ποιότητας πλέγματος. Κατά τη διάρκεια της βελτιστοποίησης μορφής, η χειροτέρευση της ποιότητας του υπολογιστικού πλέγματος λόγω της παραμόρφωσής του αποτελεί κυρίαρχο πρόβλημα. Γι' αυτό, αναπτύσσεται μια μέθοδος βελτιστοποίησης του πλέγματος κατά τη διάρκεια της παραμόρφωσης. Μια τέτοια μέθοδος μπορεί να αποτρέψει την ανάγκη επαναπλεγματοποίησης του χωρίου. Για αυτό ορίζεται μια μετρική ποιότητας, η οποία αντικατοπτρίζει τη

συνάρτηση καταλληλότητας ως προς την οποία βελτιστοποιείται το πλέγμα. Η μέθοδος εφαρμόζεται για τη βελτιστοποίηση τόσο ογκικών όσο και επιφανειακών πλεγμάτων επιτρέποντας την ολίσθηση των επιφανειακών κόμβων του πλέγματος. Η μετρική αυτή διαφορίζεται αναλυτικά ως προς τις κομβικές συντεταγμένες του πλέγματος και οι υπολογιζόμενες παράγωγοι πρώτης και δεύτερης τάξης χρησιμοποιούνται σε μια μέθοδο Newton. Κατά την εφαρμογή της, προσαρμόζεται ο Εσσιανός πίνακας χρησιμοποιώντας μια τροποποιημένη παραγοντοποίηση Cholesky η οποία εγγυάται ότι αυτός είναι θετικά ορισμένος. Τέλος, η μέθοδος επεκτείνεται για τη βελτιστοποίηση πλεγμάτων που περιέχουν κελιά με υψηλή ανισοτροπία (απαραίτητα για την σωστή πρόλεξη του οριακού στρώματος), χρησιμοποιώντας κατάλληλες χωρικές μετατροπές. Στο πλαίσιο της βελτιστοποίησης μορφής, ο βελτιστοποιητής πλέγματος συνδυάζεται με μια μέθοδο παραμόρφωσης Laplace για τη βελτίωση της απόδοσής του.

Για να μπορέσουν να ικανοποιηθούν σχεδιαστικοί περιορισμοί, αρχικά, η μέθοδος εξομάλυνσης προσαρμόζεται ώστε να διατηρεί συγκεκριμένα τμήματα της επιφάνειας σταθερά, επιβάλλοντας ταυτόχρονα τον επιθυμητό βαθμό συνέχειας της επιφάνειας. Επίσης, αναπτύσσονται μέθοδοι για τον χωρικό περιορισμό της βέλτιστης γεωμετρίας με χρήση στερεολιθογραφικών (STL) επιφανειών οριοθέτησης. Τέλος, εφαρμόζονται περιορισμοί για τη διατήρηση του πάχους μιας γεωμετρίας λ.χ. πτερυγίων. Προγραμματίζεται μια ροή εργασιών, στο πλαίσιο βελτιστοποίησης μορφής στη μηχανική των ρευστών, η οποία συνδυάζει την κομβική παραμετροποίηση, την παραμόρφωση και βελτιστοποίηση πλέγματος, και (εφόσον απαιτείται) τους αναγκαίους σχεδιαστικούς περιορισμούς με τη συνεχή συζυγή μέθοδο για τον υπολογισμό των παραγώγων. Αυτή δοκιμάζεται και εφαρμόζεται σε ακαδημαϊκές και βιομηχανικές εφαρμογές, σε ροές ενός αλλά και δύο ρευστών.

Η πρώτη εφαρμογή αφορά την ελαχιστοποίηση της οπισθέλκουσας σε ένα επιβατικό όχημα. Στην εφαρμογή αυτή, ορίζεται ένα σύνολο περιορισμών οι οποίοι επιτρέπουν μόνο σε συγκεκριμένα τμήματα του οχήματος να παραμορφώνονται, ενώ, επιπλέον, εγγυώνται τη συνέχεια πρώτης παραγώγου στην επιφάνεια του. Η δεύτερη βιομηχανική εφαρμογή στοχεύει στην ελαχιστοποίηση των απωλειών ολικής πίεσης σε ένα σύστημα κλιματισμού (HVAC) αυτοκινήτου, που υπόκειται σε χωρικούς περιορισμούς ώστε η γεωμετρία να παραμένει μέσα σε συγκεκριμένα όρια κατά τη διάρκεια της βελτιστοποίησης. Στην τρίτη εφαρμογή στόχος είναι η βελτίωση των χαρακτηριστικών ενός παθητικού αναμεικτή ροής. Συγκεκριμένα διατυπώνεται και επιλύεται ένα πρόβλημα βελτιστοποίησης δύο στόχων για τη μεγιστοποίηση της ανάμειξης και την ελαχιστοποίηση των απωλειών ολικής πίεσης. Το πρόβλημα βελτιστοποίησης δύο στόχων μετατρέπεται σε πρόβλημα ενός στόχου με χρήση συντελεστών βάρους. Χρησιμοποιώντας διαφορετικούς συντελεστές βάρους δημιουργείται το μέτωπο των μη-κυριαρχούμενων λύσεων. Στην εφαρμογή αυτή ορίζονται δύο παραμετροποιήσεις, οι οποίες συνδυάζονται τόσο διαδοχικά όσο και ταυτόχρονα κατά τη διάρκεια της βελτιστοποίησης οδηγώντας σε καλύτερες σχεδιαστικές λύσεις του παθητικού αναμεικτή. Στην τέταρτη και τελευταία εφαρμογή, επιδιώκεται η μεγιστοποίηση της αναμειξιμότητας ενός ενεργητικού αναμεικτή ο οποίος περιλαμβάνει μια πτερωτή τύπου Rustron. Αυτό επιτυγχάνεται με την αλλαγή του σχήματος των πτερυγίων της πτερωτής διατηρώντας όμως σταθερό το πάχος τους.

Η διατριβή πραγματοποιήθηκε στο πλαίσιο του Ευρωπαϊκού ερευνητικού προγράμματος IODA, το οποίο έλαβε χρηματοδότηση από τη δράση Marie Skłodowska-Curie κατά τα τρία πρώτα έτη της.

**Λέξεις κλειδιά:** Υπολογιστική Ρευστοδυναμική (ΥΡΔ), Ροές Δύο Ρευστών, Βελτιστοποίηση Μορφής, Παραμετροποίηση Σχήματος, Συνεχής Συζυγής Μέθοδος, Βελτιστοποίηση Πλέγματος, Σχεδιαστικοί Περιορισμοί

Αθήνα, 2022



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

## Contribution to Adjoint-based Shape Optimization, in Single- and Multi-Fluid Flows

### Συνεισφορά στη Βελτιστοποίηση Μορφής μέσω της Συζυγούς Μεθόδου, σε Ροές Ενός και Περισσότερων Ρευστών

Alexias Pavlos

*Supervisor:* Kyriakos C. Giannakoglou, Professor NTUA

#### PhD Thesis Abstract

The adjoint method is widely being used to solve shape optimization problems relying upon CFD and gradient-based search, due to the cost-effective computation of gradients it offers. Different optimization problems require different flow models, objectives, and constraints, and the adjoint method must be adapted accordingly. In addition, the adjoint must be coupled with a set of methods/tools to create a complete optimization workflow that can solve industrial-scale problems. On account of this, the aim of this PhD thesis is twofold. The first is to extend the already well-established continuous adjoint method for single-fluid to flows of two incompressible miscible fluids governed by the necessary mixing model, in order to solve shape optimization problems related to mixing devices. The second is to develop the methods to be integrated with the developed adjoint solver to perform shape optimization in single and two-fluid industrial-scale problems. These methods include the developments of (a) a gradient smoothing technique to be used along with a node-based parameterization, (b) a mesh deformation algorithm capable of producing high-quality deformed meshes, and (c) methods to apply a set of design constraints using the node-base parameterization.

Regarding the continuous adjoint method, at first, the (primal) equations governing steady (laminar or turbulent) flows with two miscible fluids are solved. In turbulent flows, the Spalart-Allmaras turbulence model is used. The continuous adjoint method to the two-fluid model is developed, leading to the field adjoint equations, their boundary conditions, and the sensitivity derivatives' expression. The computed sensitivities are verified in both laminar and turbulent flow cases.

Shape optimization problems require a parameterization scheme. In this thesis, a node-based parameterization is followed, in which the coordinates of each boundary node are the design variables. This approach offers the richest possible design space, though numerical noise in the adjoint derivatives can cause shape irregularities. Thus, it is necessary to couple it with the smoothing of sensitivities. This is carried out by implicitly solving a set of PDEs onto curved surfaces. In order to meet different design constraints often imposed in shape optimization, the implicit smoother is enhanced to maintain the desired continuity level between different patches on the surface. In addition, a packaging constraint algorithm is developed, in which STL surfaces delimit the space in which the shape should stay. Furthermore, a thickness constraint method is also considered and applied in the context of shape optimization of rotor blades.

The next contribution of this thesis concerns mesh deformation using mesh optimization techniques during shape optimization. In shape optimization, mesh quality degradation due to its deformation is a known issue, and a mesh optimization method is necessary to allow extended shape deformations. This can delay or even overcome the need for re-meshing during the optimization. A quality metric based on the geometric definition of Sphericity is introduced for mesh optimization, acting as the mesh fitness function to be maximized during mesh deformation. The method can be applied for optimizing both volume and surface meshes and has the capability of sliding nodes along the surface. This mesh quality metric is analytically differentiated twice with

respect to (w.r.t.) the mesh points, and its first and second derivatives are used by the Newton method. In case the Hessian is not positive definite, it is appropriately manipulated using a modified Cholesky decomposition. Finally, the method is extended to account for high aspect-ratio cells (necessary for the correct boundary resolution) by using appropriate  $R^3$  space transformations. In the context of shape optimization, the mesh optimizer is coupled with a Laplacian morpher with an inverse distance-depending diffusivity to improve efficiency.

A workflow that combines the shape parameterization, mesh deformation, optimization, and (if required) constraint handling, coupled with the continuous adjoint method for the computation of gradients, is implemented on an open-source CFD package based on OPENFOAM. This is tested in several academic and industrial-scale applications for single and two-fluid flows.

The first industrial-scale application concerns the minimization of the drag force in a concept car model. Constraints allowing only the car's rear part to be deformed during the optimization while maintaining a C1 constraint across the surface are imposed. The second case aims at minimizing the total pressure losses of an HVAC system of a passenger car in which a set of packaging constraints are imposed. In the third case, the optimization targets the improvement of the characteristics of a static mixing device equipped with a set of baffles. In specific, a multi-objective optimization problem is formulated and solved for maximum mixture uniformity at the exit and minimum total pressure losses. The multi-objective optimization problem is converted into a single-objective one through the weighted sum of the two objective functions. A Pareto front of non-dominated solutions is derived using different value-sets of weights. In the fourth and final case, the optimization targets the maximization of the mixture uniformity of an active mixing device that contains a Rushton disc impeller. The goal is to optimize the surface of the blades of the impeller while maintaining their thickness.

This work was conducted within the IODA ITN, a Research Fellowship Programme of the European Union funded by Marie Skłodowska-Curie Actions over the first 3 years, in ENGYS S.R.L. (Italy); NTUA (Greece) was also a beneficiary in the same Network.

**Keywords:** Computational Fluid Dynamics (CFD), Two-Fluid Flows, Shape Optimization, Shape Parameterization, Adjoint Methods, Mesh Optimization, Constraint Imposition.

Athens, 2022