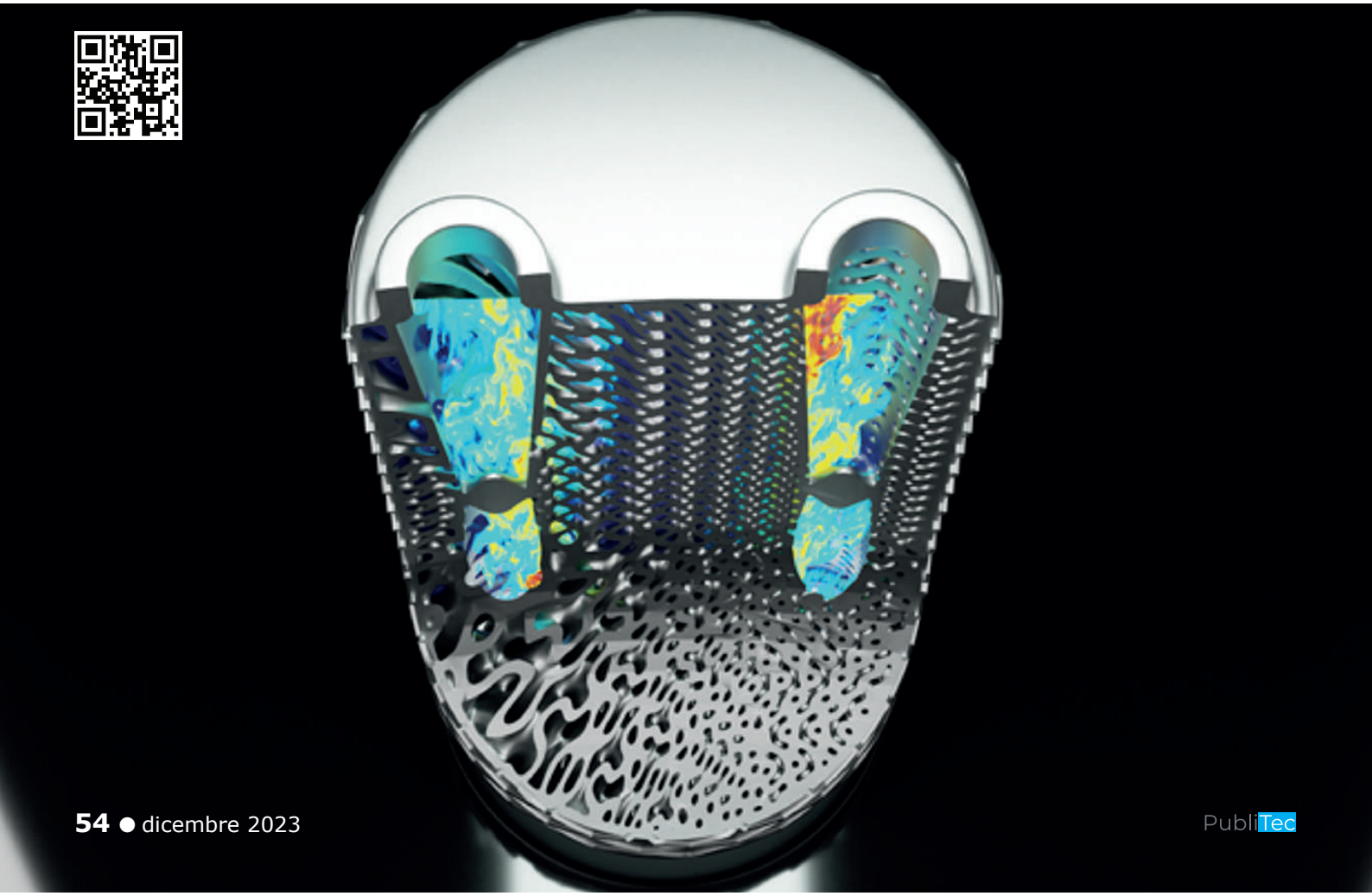
Ottimizzazione topologica di **scambiatori di calore a microcanali**

Il caso presentato in questo articolo (*) è stato sviluppato nell'ambito del progetto FF4EuroHPC (**). I partner Optimad, Aidro e CINECA hanno collaborato per affrontare una specifica sfida aziendale nel settore manifatturiero e superarla con l'aiuto dell'High Performance Computing: parliamo dello sviluppo di una metodologia di progettazione avanzata per generare configurazioni innovative di scambiatori di calore a microcanali.

di: Alessandro Alaia, Edoardo Lombardi, Marco Cisternino, Giacomo Uffreduzzi, Antonio Memmolo, Claudio Domenico Arlandini, Tommaso Tirelli, Alberto Tacconelli, Paolo Ambrogiani



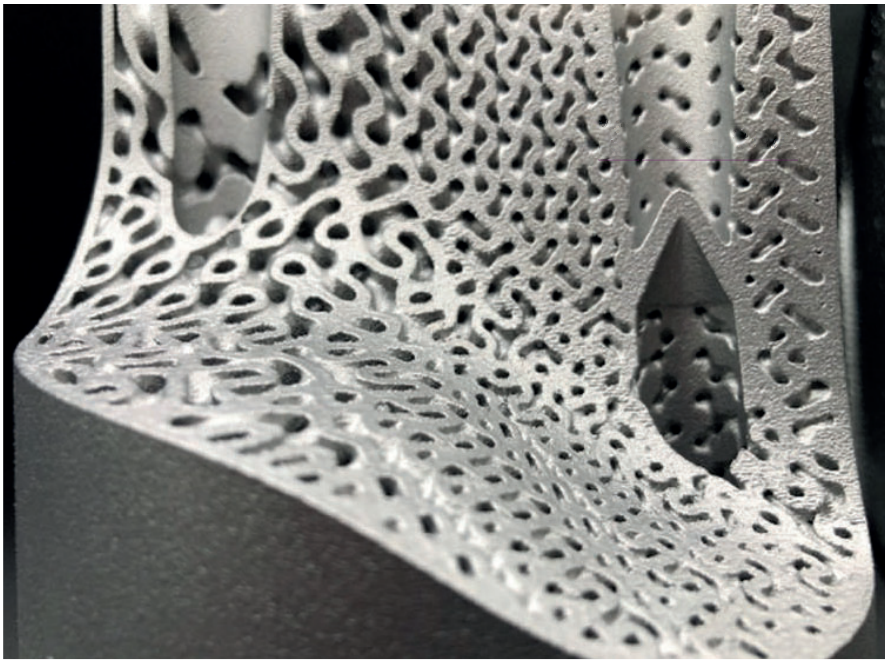
PubliTec

Gli scambiatori di calore a microcanali (MCHX *o Micro Channel Heat Exchangers*) sono dispositivi in cui i fluidi scorrono in confinamenti laterali con dimensioni millimetriche. Grazie all'efficiente distribuzione dei flussi e alla leggerezza, stanno riscontrando interesse e applicabilità in diversi settori industriali, tra cui l'aerospaziale, la bioingegneria, l'elettronica e l'oil & gas.

La sfida: sviluppare una metodologia di progettazione per configurazioni innovative

Le prestazioni di MCHX sono fortemente influenzate dalla progettazione (forma e topologia) dei microcanali. Gli approcci di progettazione basati su campagne sperimentali richiedono molte iterazioni, con conseguenti costi significativi di ricerca e sviluppo e un elevato time-to-market. In pratica, a causa dei vincoli di budget e di tempo, vengono valutate dai progettisti solo poche configurazioni tra quelle possibili, arrivando così a soluzioni non sempre ottimali. D'altra parte, un approccio di progettazione incentrato sulla simulazione pone diverse sfide, tra cui la modellazione, l'integrazione del software e la sua robustezza. Inoltre, a causa dell'intrinseca natura multiscala del problema di scambio termofluidodinamico, le simulazioni di trasferimento di calore coniugato (CHT) di MCHX richiedono modelli computazionali ad alta risoluzione per risolvere bene la fluidodinamica alla più piccola scala spazio-temporale dei microcanali. Di conseguenza, i costi associati a questi calcoli limitano fortemente un'esplorazione esaustiva di queste soluzioni progettuali. L'ottimizzazione è un requisito fondamentale per un'infrastruttura informatica. Le soluzioni in-house di *High Performance Computing* (HPC) sono generalmente sottodimensionate per questi compiti, soprattutto per le piccole e medie imprese. Di conseguenza, è necessario identificare scorciatoie per far fronte alle limitate risorse computazionali (ad esempio, il numero dei progetti fattibili è limitato a priori in modo euristico, vengono sviluppati modelli semplificati ad-hoc per un singolo caso d'uso, ecc.) con conseguenti flussi di lavoro entropici, ulteriori aumenti di costi di ricerca e sviluppo e, in ultima analisi, impatti negativi sulla competitività commerciale. Pertanto, l'uso del calcolo parallelo diventa un imperativo per mantenere i tempi di sviluppo compatibili con gli obiettivi industriali.

L'ottimizzazione topologica (TO) è una metodologia di progettazione avanzata per generare configurazioni innovative difficili da ottenere con le tecniche di progettazione convenzionali. Le forme complesse risultanti dalla TO non possono essere facilmente prodotte con tecniche tradizionali come la lavorazione meccanica sottrattiva, lo stampaggio a iniezione o la fusione. Il livello di maturità tecnologica (TRL) della produzione additiva (AM) con la tecnologia della sinterizzazione laser è aumentato nell'ultimo decennio, rendendo questa tecnologia una pietra miliare per nuovi modelli di business nell'industria manifatturiera. L'AM presenta diversi vantaggi tra cui cicli veloci di produzione specialmente per piccole serie, un design flessibile che consente di realizzare componenti con geometrie complesse. Un'applicazione molto promettente è quindi quella di combinare sia TO che AM per la progettazione MCHX. Nonostante l'enorme potenziale, i produttori di MCHX non hanno ad oggi sfruttato la libertà offerta dal paradigma TO+AM a causa delle difficoltà sopra menzionate.



● Un esempio di MCHX (credits: Aidro). La struttura reticolare interna è ottenuta utilizzando un TPMS (Giroide) con frequenza e spessore delle pareti variabili.

● *An example of MCHX (3DHX, courtesy of Aidro). The internal lattice structure is obtained using a TPMS (gyroid) with variable frequency and wall thickness.*

La soluzione: il framework TOLOMHE per l'ottimizzazione topologica

TOLOMHE è una piattaforma incentrata sull'High Performance Computing (HPC) sviluppata per l'ottimizzazione topologica di MCHX. Combinando l'ottimizzazione avanzata, la simulazione, l'apprendimento automatico e l'implementazione su un'infrastruttura HPC, la piattaforma TOLOMHE mira a: i) aumentare la competitività dei produttori di MCHX fornendo uno strumento di progettazione conveniente per gli MCHX, e ii) convalidare un modello di business innovativo per il fornitore di software indipendente basato sul paradigma "Optimization-as-a-Service".

Gli elementi costitutivi di TOLOMHE sono un ottimizzatore indipendente dal solutore (modeFRONTIER), un risolutore multi-fisico multiscala per la simulazione del trasferimento di calore coniugato (CHT) (immerFLOW) e un software per la manipolazione della geometria (Mimic). modeFRONTIER (ESTECO) è uno strumento leader del settore per l'ottimizzazione multidisciplinare della progettazione. immerFlow (Optimad) è un solutore CFD ad alta produttività basato su un paradigma di contorno immerso, particolarmente adatto per flussi di lavoro automatizzati con geometrie complesse. Mimic (Optimad) è uno strumento per la manipolazione della geometria assistita da computer con parametrizzazione topologica di geometrie implicite. La natura multiscala

TECHNOLOGY

Topology optimization of micro-channel heat exchangers

The success story presented in this article (*) was developed during the first tranche of FF4EuroHPC Project (**). Partners Optimad, Aidro and CINECA teamed up to address specific business challenge in the manufacturing sector and overcome it with the help of High-Performance Computing: the development of an advanced design methodology to generate innovative configurations of Micro Channel Heat Exchangers.

by: Alessandro Alaia, Edoardo Lombardi, Marco Cisternino, Giacomo Uffreduzzi, Antonio Memmolo, Claudio Domenico Arlandini, Tommaso Tirelli, Alberto Tacconelli, Paolo Ambrogiani

Micro Channel Heat Exchanger (MCHX) are heat exchangers in which the fluid flows in lateral confinements with dimensions of millimetres. Thanks to high specific properties, efficient flow distribution and lightweight, they are gaining popularity in several industrial fields, including aerospace, bioengineering, electronics, and oil & gas.

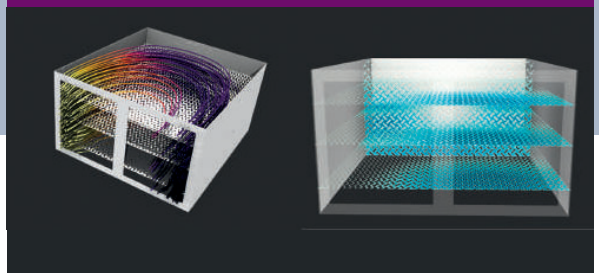
The challenge: developing an advanced design methodology to generate innovative configurations

Performances of MCHX are strongly affected by the design (shape and topology) of micro-channels. Design approaches based on experimental campaigns require many iterations, resulting in significant R&D costs and large time-to-market. In practice, due to budget and time constraints, only a few configurations are assessed, leading to sub-optimal solutions. On the other hand, a simulation-centric design approach poses several challenges including modelling, Software integration, and robustness. In addition, due to inherent multiscale nature of the problem, Conjugate Heat Transfer (CHT) simulations of MCHX require high-resolution computational models to well-resolve the fluid-dynamics at the smallest space-time scale of microchannels. Consequently, the costs associated with these computations limit severely an exhaustive exploration of the design space. Optimization is a peak requirement for a computing infrastructure. In-house HPC solutions are usually under-sized for these tasks, especially for small and medium sized enterprises. As a consequence, shortcuts must be taken to cope with the limited computational resources (e.g. the space of feasible designs is limited a priori in a heuristic manner, simplified models are developed ad-hoc for a single use case, etc.) resulting in entropic workflows, further increase of R&D costs, and ultimately affects the competitiveness on the market. Thus, the use of parallel computing becomes imperative to maintain development times compatible with industrial turnovers.

Topology optimization (TO) is an advanced design methodology to generate innovative configurations that are difficult to obtain with conventional design techniques. The complex shapes resulting from TO cannot be easily manufactured by traditional techniques such as Computer Numerical Control machining, injection moulding or vacuum casting. The Technology Readiness Level (TRL) of Additive Manufacturing (AM), e.g. laser-sintering, has boosted over the last decade, making this technology a cornerstone for new business models in the manufacturing industry. AM has several advantages such as faster production cycle, flexible design, and opens possibilities precluded to traditional manufacturing

● Differenti sezioni della geometria ottimizzata per lo scambiatore di calore aria-olio. Il carico termico ottimizzato (maggiore di 30 kW) è stato calcolato con una temperatura di ingresso dell'aria di 50°C, un flusso di massa d'aria di 0,5 kg/s, temperatura di ingresso dell'olio di 130°C e portata in volume di 54 l/min. La caduta di pressione massima consentita è stata fissata a 130 kPa per l'olio.

● *Different sections of the optimized geometry for the ACOC heat exchanger. The optimized heat load (greater than 30kW) was calculated with an air inlet temperature of 50°C, an air mass flow of 0.5kg/s, an oil inlet temperature of 130°C, and a volumetric flow rate of 54l/min. The maximum pressure drop allowed was set to 130 kPa for oil.*

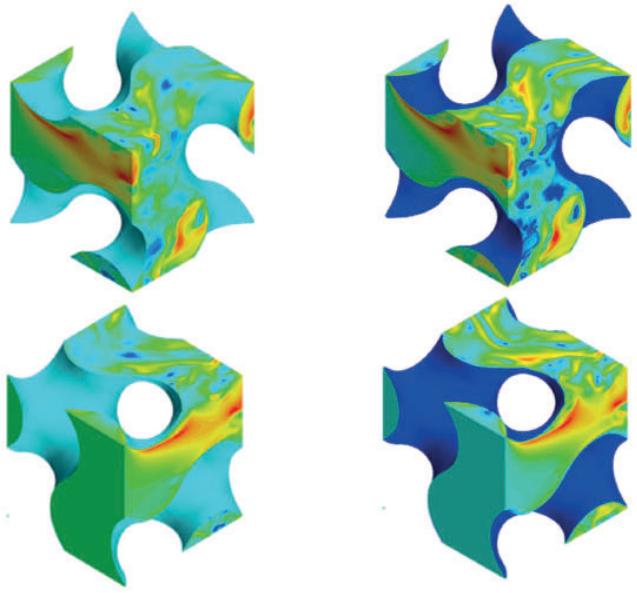


dell'accoppiamento fluidodinamico/termico in MCHX viene affrontata attraverso un modello di *Machine Learning* (ML). L'approccio risultante è caratterizzato da tre modelli matematici/numerici annidati.

1. Il modello in microscala è costituito da una rete neurale profonda che stima la permeabilità locale e i coefficienti di scambio termico dalla topologia del canale (locale) e dalle condizioni di flusso. Il dataset (sintetico) utilizzato per l›addestramento offline è stato creato su un cluster HPC (Galileo100, infrastruttura di CINECA con 528 nodi di calcolo, ognuno dei quali con 2 CPU Intel Cascade Lake 8260, con 24 core ciascuna). Ogni punto dati corrisponde a una simulazione ad alta risoluzione eseguita su una singola cella di topologie reticolari "prototipo".

2. Il modello in macroscala viene utilizzato per simulare il campo di flusso su scala macroscopica per un determinato layout dello scambiatore di calore. L'effetto della microscala è incorporato in termini di permeabilità locale e coefficienti di scambio termico. Questi vengono calcolati per mezzo di valutazioni feed-forward a basso costo del modello ML. Di conseguenza, il costo computazionale di una simulazione per l'intero scambiatore di calore è drasticamente ridotto.

3. Il Framework di Ottimizzazione evolutiva utilizzato per esplorare l'intero spazio di progettazione e migliorare il progetto iniziale. Gli algoritmi genetici richiedono un gran numero di valutazioni del modello durante l'esplorazione iniziale dello spazio di progettazione (da poche centinaia a diverse migliaia a seconda del problema specifico). Per realizzare questa esplorazione in modo accettabile, l'ottimizzazione viene eseguita sull'infrastruttura HPC, sfruttando così l'elevata scalabilità degli algoritmi genetici. Inoltre, gli algoritmi genetici sono adatti per l'ottimizzazione multi-obiettivo e multi-vincolo. Nell'ambito di modeFRONTIER, è stata selezionata come algoritmo di ottimizzazione una strategia ibrida che combina la programmazione quadratica sequenziale (SQP) e l'algoritmo genetico di ordinamento non dominato (NSGA-II). Durante l'ottimizzazione della topologia, la progettazione dell'MCHX viene descritta implicitamente in termini di funzione di set di livelli per evitare costosi (e soggetti a errori) cicli di remeshing. Al termine dell'ottimizzazione, viene restituita all'utente una rappresentazione esplicita della geometria complessiva dello scambiatore di calore in termini di tassellatura superficiale fornita da mimic.



● Esempio di simulazione su microscala eseguita su topologie reticolari "prototipali". Le simulazioni vengono utilizzate per addestrare offline un modello ML per prevedere la permeabilità locale e il coefficiente di trasferimento del calore date le condizioni del flusso locale e la topologia reticolare.

● *Example of microscale simulation performed on "prototype" lattice topologies. The simulations are used to train an offline ML model to predict local permeability and heat transfer coefficient given local flow conditions and lattice topology.*

Vantaggi per l'azienda e impatto di TOLOMHE

La value proposition di TOLOMHE ruota attorno a tre concetti principali:

- È implementato sull'infrastruttura HPC, quindi garantisce l'accesso a un'infrastruttura di calcolo adeguata.
- Non richiede alcuna conoscenza preliminare per l'utilizzo dell'HPC o dell'ottimizzazione. Questo aiuta a rimuovere la barriera all'ingresso per gli utenti HPC per la prima volta.
- Tutti gli strumenti necessari sono integrati in un'unica piattaforma. Questa soluzione può eliminare tutti i problemi relativi all'integrazione di diversi strumenti (CAE/CAD) e alle licenze.

Grazie all'adozione di TOLOMHE, ci si aspetta che l'utente finale acceleri la transizione da un modello di business build-to-print a un modello di business build-to-spec, riducendo i costi di ricerca e sviluppo e il time-to-market per i nuovi prodotti.

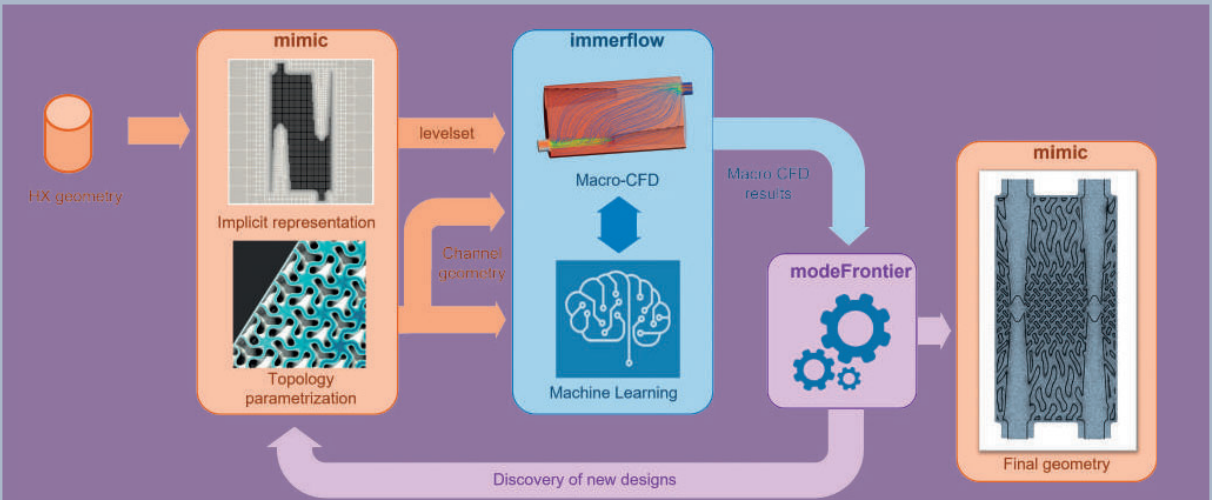
Il lavoro svolto nell'ambito dell'esperimento TOLOMHE porta ulteriori benefici di business all'utente finale:

- L'automazione del flusso di lavoro di progettazione ha il potenziale per ridurre il time-to-offer del 90% e il time-to-market del 50% (da pochi mesi a un mese).
- I risparmi possono potenzialmente arrivare a 100.000 euro all'anno reindirizzando la manodopera qualificata ad altre attività a valore aggiunto per l'utente finale. ●

Note:

(*) Il presente articolo è tratto dalla rivista internazionale Futurities (EnginSoft) Anno 20, estate 2023

(**) Il progetto FF4EuroHPC ha ricevuto finanziamenti dall'impresa comune europea per il calcolo ad alte prestazioni (JU) nell'ambito della convenzione di sovvenzione n. 951745. L'impresa comune riceve sostegno dal programma di ricerca e innovazione Orizzonte 2020 dell'Unione europea e da Germania, Italia, Slovenia, Francia e Spagna.



● Rappresentazione schematica del flusso di lavoro di ottimizzazione TOLOMHE. Nuovi design vengono scoperti dall'ottimizzatore in base ai risultati delle simulazioni CFD eseguite su macroscala. Le simulazioni su macroscala utilizzano un modello ML per dedurre la permeabilità locale e i coefficienti di scambio termico in base al campo di flusso locale e alla topologia del canale. Alla fine del ciclo di ottimizzazione, la geometria ottimale viene calcolata unendo la geometria del layout dello scambiatore con la topologia del canale ottimale scoperta dall'ottimizzatore.

● *Schematic representation of the TOLOMHE optimization workflow. New designs are discovered by the optimizer based on the results of CFD simulations performed at the macroscale. Macroscale simulations use an ML model to infer the local permeability and heat exchange coefficients based on local flow field and channel topology. At the end of the optimization loop, the optimal geometry is calculated by merging the HX layout geometry with the optimal channel topology discovered by the optimizer.*

technologies, as it allows to realize components with complex geometries with relatively contained costs. A very promising application is therefore to combine both TO and AM for MCHX design. Despite the enormous potential, MCHX manufacturers are prevented from exploiting the freedom provided by the paradigm TO+AM due to the above-mentioned difficulties.

The solution: TOLOMHE framework for topology optimization

TOLOMHE is a High-Performance Computing (HPC)-centric platform developed for topology optimization of MCHX. By combining advanced optimization, simulation, machine learning and deployment on a HPC infrastructure, TOLOMHE platform aims to i) increase the competitiveness of MCHX manufacturers by providing a cost-effective design tool for MCHXs, and to ii) validate an innovative business model for the independent software vendor based on the "Optimization-as-a-Service" paradigm.

The building blocks of TOLOMHE are a solver-agnostic optimizer (modeFRONTIER), a multiscale multi-physics solver for Conjugate Heat Transfer (CHT) simulation (immerFLOW), and a software for geometry manipulation (mimic). modeFRONTIER (ESTECO) is an industry-leading tool for multi-disciplinary design optimization. immerFlow (Optimad) is a high-productivity CFD solver based on an immersed boundary paradigm, particularly well-suited for automated workflows with complex geometries. Mimic (Optimad) is a tool for computer aided geometry manipulation featuring topology parametrization of implicit geometries. The multiscale nature of the fluid-dynamic / thermal coupling in MCHX is addressed through a machine learning (ML) model. The resulting approach is characterized by three nested mathematical / numerical models.

1. Micro-scale model. The microscale model consists of a deep neural network which estimates local permeability and heat transfer coefficients from the (local) channel topology and flow conditions. The (synthetic) dataset used for the offline training was created on a HPC cluster (Galileo100, infrastructure of CINECA with 528 computing nodes, each of them with 2 CPU Intel CascadeLake 8260, with 24 core each). Each data point corresponds to high-resolution simulation performed on a single cell of "prototype" lattice topologies.

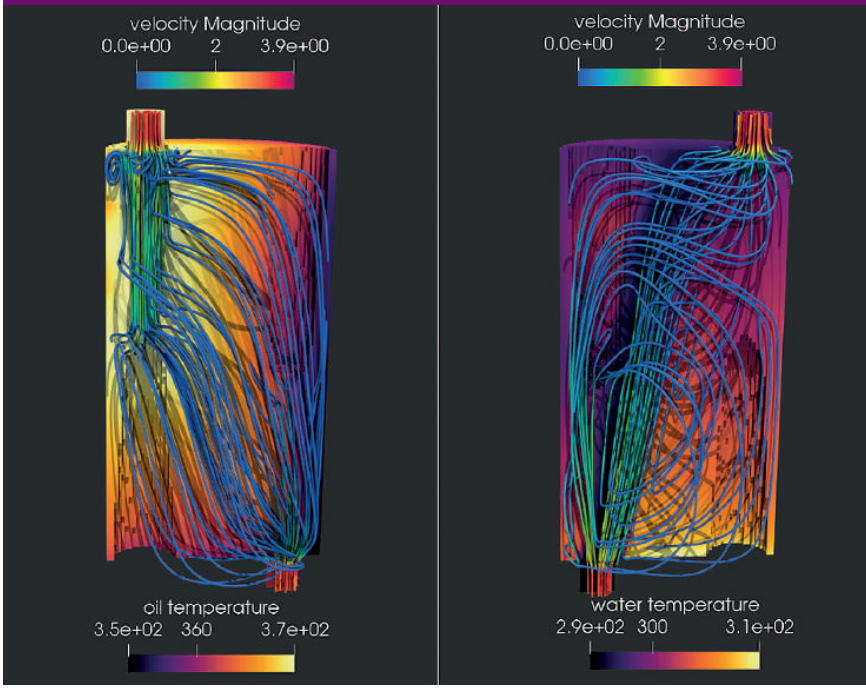
PubliTec

2. Macro-scale model is used to simulate the flow field at the macroscopic scale for a given layout of the heat-exchanger. The effect of the microscale is incorporated in terms of local permeability and heat-exchange coefficients. These are computed by means of cheap feed-forward evaluations of the ML model. Consequently, the computational cost of a simulation for the entire heat-exchanger is drastically reduced.
3. Evolutionary optimization framework is used to explore the entire design space and improve the initial design. Genetic algorithms require a large number of model evaluations during the initial exploration of the design space (from few hundreds to several thousand depending on the specific problem). To achieve this exploration in an acceptable timeframe, the optimization is performed on the HPC infrastructure, thus leveraging the high scalability of genetic algorithms. Moreover, genetic algorithms are well-suited for multi-objective and multi-constrained optimization. Within modeFRONTIER, a hybrid strategy combining Sequential Quadratic Programming (SQP) and the Non-Dominated Sorting Genetic Algorithm (NSGA-II) was selected as the optimization algorithm.
During the topology optimization the design of the MCHX is described implicitly in terms of level set function to avoid expensive (and error-prone) remeshing loops. At the end of the optimization, an explicit representation of the overall heat exchanger geometry is returned to the user in terms of a surface tessellation as provided by mimic.

Business benefits and impact of TOLOMHE

TOLOMHE value proposition revolves around three main concepts:
• It has been deployed on the HPC infrastructure thus it grants access to adequate computing infrastructure.
• No prior knowledge was required for using HPC or optimization. This helps to remove the entry barrier for first time HPC users.
• All the required tools are integrated into a single platform. This solution can remove all the issues related to integration of different (CAE/CAD) tools and licensing.
Thanks to the adoption of TOLOMHE, the end-user is expected to accelerate the transition from a build-to-print to a build-to-spec business model by reducing R&D costs and time-to-market for new products.
The work carried out within the TOLOMHE experiment brings further business benefits to end-user:
• Automation of the design workflow has the potential to shorten the time-to-offer by 90%, and time-to-market by 50% (from a few months to a one month).
• Savings can potentially add up to 100,000per year by redirecting skilled labor to other added value activities for end-user.

Notes:
(*)
The article was taken from the international journal "Futurities", EnginSoft, Year 20, Summer 2023
(**)
The FF4EuroHPC project has received funding from the European High-Performance Computing Joint Undertaking (JU) under grant agreement No. 951745. The JU receives support from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme and from Germany, Italy, Slovenia, France, and Spain.

● Risultati di esempio di una simulazione CHT eseguita su scala macroscopica di un MCHX. Le linee del flusso sono colorate in base ai campi di velocità e temperatura sia per il fluido caldo (a sinistra) che per quello freddo (a destra). Gli effetti su microscala sia sulla perfusione del fluido che sul trasferimento di calore sono incorporati in termini di permeabilità e coefficienti di scambio termico non lineari e spazialmente variabili. Questi coefficienti vengono calcolati al volo dal modello ML, realizzando così l'accoppiamento bidirezionale tra scala macro e micro.

● *Examples of results from a CHT simulation performed on an MCHX at macroscopic scale. The flow lines are coloured by the velocity and temperature fields for both hot fluid (left) and cold fluid (right). Microscale effects on both fluid perfusion and heat transfer are incorporated in terms of non-linear, spatially variable permeability and heat exchange coefficients. These coefficients are calculated on the fly by the ML model, thus achieving the bi-directional coupling between macro- and micro-scale.*