arXiv:2301.13118v1 [physics.flu-dyn] 30 Jan 2023

一种集成高斯过程回归与贝叶斯优化的全自动化框架，用于设计针肋

Susheel Dharmadhikari
宾夕法尼亚州立大学机械工程系，
State College，PA 16802
sud85@psu.edu

Reid A. Berdanier宾夕法尼亚州立大学机械工程系，State College，PA 16802 rberdanier@psu.edu

Karen A. Thole宾夕法尼亚州立大学机械工程系，State College，PA 16802 kat18@psu.edu

工程系 **Amrita Basak***
f Mechanical E
宾夕法尼亚州立大学工程系，
State College，宾夕法尼亚州 16802，
aub1526@psu.edu

2023年1月31日

摘要

针肋对于涡轮叶片冷却至关重要，因此过去已有大量针肋设计研究。随着金属增材制造技术的发展，复杂几何形状的新型设计方法现已成为可能。为此，本文提出一种贝叶斯优化方法，用于设计能够实现低压力损失的直列针肋。针肋形状通过二维特征化（参数化）的分段三次样条定义。形状的复杂程度取决于分析中使用的样条数量。从方法开发的角度出发，本研究采用三条样条。得益于这种分段建模，五个特征即可定义一种独特的针肋设计。确定设计后，本文建立了一个基于计算流体力学的模型，用于计算流动过程中的压降。研究基于高斯过程代理模型开展贝叶斯优化，以获得使压降最小化的针肋特征最优组合。结果表明，优化结果趋向于形成气动设计，从而降低压降，这与现有认识相符。此外，研究还针对不同规模的输入数据进行了多轮优化迭代。结果显示，对于代理模型，仅需二十五个初始试验设计数据点，即可收敛至相近的最优设计。敏感性分析表明，针肋各行之间的距离是影响压降的最主要特征。总之，新开发的自动化框架展现出卓越的能力，能够设计出具有优异性能特征的针肋。

1 引言

热端部件（例如燃气轮机的涡轮转子叶片）在高达 1500 K 以上的温度下运行，形成了严苛的环境。因此，人们采用创新技术来促进这些部件的冷却。涡轮转子叶片通常具有复杂的冷却结构。叶片可分为三个主要部分，每个部分都有专用的冷却剂供给腔室。这些部分包括：(i) 前缘区域、(ii) 中弦区域和 (iii) 后缘区域。涡轮叶片的压力面温度相对高于吸力面，因此配备了

额外的冷却。这通过有利于叶片压力面的内部冷却和外部冷却来实现，尤其是在后缘区域 [1]。

尾缘的内部冷却已得到广泛研究。为充分利用冷却剂的冷却能力，研究人员开发了强化传热设计。该叶片区域的独特之处在于内部腔室与外部主流条件之间存在压降。该区域允许通过增加摩擦损失来实现更强的传热强化。完全桥接的针肋阵列会造成较大的压力损失，但在强化传热方面也表现出色。因此，针肋是尾缘冷却的理想选择。此外，完全桥接的针肋设计还能提高叶片的结构刚度。基于这些原因，大量文献支持采用冲击阵列来强化传热，并为翼型的尾缘部分提供结构支撑 [2]。

因此，针肋设计的主要目标之一是降低压降，同时提高传热。过去，研究人员已通过实验和计算研究来实现这一目标。Otto 等人 [3] 开展了粒子图像测速研究，以了解错列针肋阵列中流动的发展特性。他们发现，马蹄涡和卡门不稳定性是促进湍流混合的关键因素。Chyu 等人 [4] 研究了针肋横截面对热性能的影响。他们研究了方形、圆形和菱形针肋，发现圆形针肋在压降和传热之间实现了最佳折衷。

随着金属增材制造技术的进步，制造不受传统制造约束限制的复杂针肋设计已变得切实可行，可能性大幅提升。近期针对这类独特设计及其相应参数的测试研究充分证明了这一点 [5], [6]。这项制造技术的引入推动了对更具创新性的设计策略的研究，尤其是数据驱动工具的应用 [7]。这些策略以针肋设计的参数化为基础，随后通过优化获得所需的针肋形状。

因此，可以优化针肋形状的多个相关参数，以最大限度地降低压降并提高传热。现有文献展示了采用星形或凹坑球体等独特几何形状的针肋实验结果 [5]。然而，对针肋进行实验优化成本高且耗时。因此，计算研究在开发新型设计和创新解决方案方面发挥了关键作用。Eyi 等人 [8, 9] 使用参数化贝塞尔曲线定义鳍片前缘，并以参数化形式对其进行优化。Wileke 等人 [10] 采用伴随优化降低 U 形通道的总压力损失。类似地，Ghosh 等人和 Dilgen 等人采用拓扑优化技术来探究制造约束[11, 12]。Fabbri [13] 应用遗传算法优化针肋设计。Hamadneh 等人使用粒子群优化（粒子群优化）评估了多种针肋几何形状，以提升热性能 [14]。

最近，Ghosh 等人采用结合约束贝叶斯优化（BO）的高斯过程（GP）代理模型，对针肋阵列的热性能进行了优化 [7]。由于复杂几何形状的计算流体力学模拟具有黑箱特性，GP 与贝叶斯优化在数据有限的情况下尤其展现出了良好的应用前景。然而，鉴于此类技术在针翅优化中的应用尚处于相对早期阶段，设计空间中更复杂的构型尚未得到充分探索。此外，由于缺乏利用 ANSYS Fluent 等成熟计算工具进行自动化模拟，相关研究受到了一定限制，从而使优化仅能进行少量迭代。本文通过采用一种新颖的基于样条的针翅定义方法，解决了上述现有不足，该方法为探索复杂几何形状提供了可能。此外，本文分析中开展的模拟均为完全自动化进行，因此能够实现相对较多的设计迭代。

本研究中的优化过程旨在最小化压降。结果表明，该框架能够利用有限的训练数据学习设计原则，并在经过 < 50 次迭代后收敛至期望解。此外，本研究还考察了该算法的数据需求，以量化算法充分运行所需的初始数据量。我们还进行了敏感性分析，以了解各特征对压降的影响。尽管本文分析的目标是最小化压降，但只需稍作修改，即可用于实现其他期望目标。

2 方法论

2.1 针翅特征化

2.1.1 针翅形状的特征

二维中的一般闭合形状是由点的轨迹构成的，表示为 $x = f(\theta)$ 和 $y = g(\theta)$，并以 θ 为参数。最常见的参数化形式可用半径为 r 的圆来表示，该圆由 $x = r\cos\theta$和 $y = r\sin\theta$ 得出。通过在构造 $f(\theta)$ 和$g(\theta)$ 时采用更复杂的函数表示形式，可以生成各种形状变化。在多种此类方法中，本文采用分段三次样条来生成二维参数化形状。这些形状的复杂程度取决于其构造方式，也取决于生成过程中使用的样条数量。

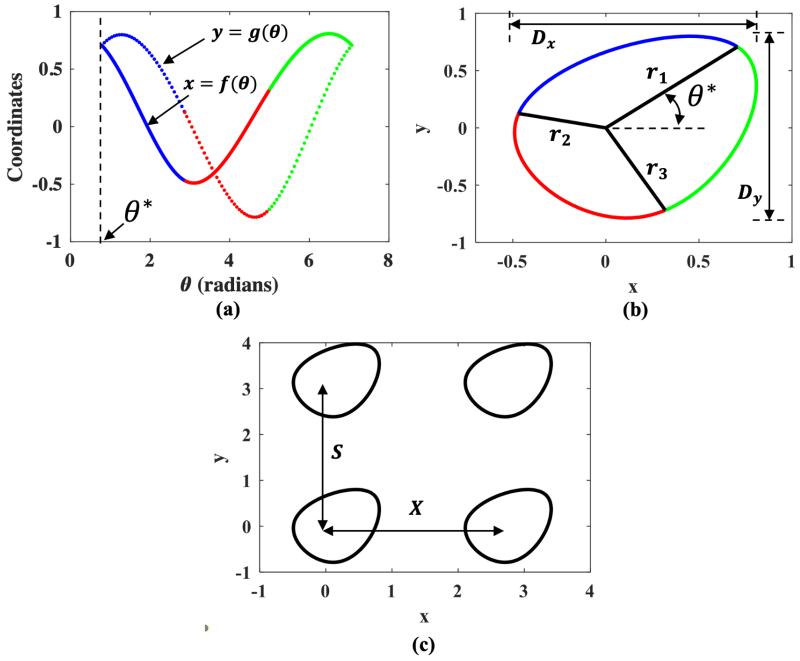


图1：(a) 使用三个分段三次样条构造的两条曲线（$x = f(\theta)$ 和 $y = g(\theta)$）。（b）由三个样条及其定义参数得到的针肋形状。（c）由两行两列构成的针翅阵列。

基于这一点，本文的分析采用三个样条进行。作为示例，图1(a)展示了两条曲线（$x = f(\theta)$ 和 $y = g(\theta)$），二者均由三个三次样条构成。所得形状以及各个样条的贡献如图1(b)所示。该形状表明存在三个径向距离（r_1、 r_2 和 r_3），为样条插值提供了必要的坐标。

为了优化该形状，需要选取影响几何形状的特征。已确定以下三个特征，即 r_2、 r_3 和 θ^*，是使用上述流程生成的任何形状的定义要素。特征 r_1 的大小保持为恒定的 1 mm，以确保参考尺寸，防止优化算法选择极端的几何形状（过小或过大）。如图 1(a) 和图1(b)所示， r_1 与X轴的夹角记为 θ^*。它控制着针肋的方向。图1(b)还示出了 D_x 和 D_y，分别表示针肋在 X 轴和 Y 轴上的投影长度。

2.1.2 针翅阵列的特征

除单个鳍片的三个特征外，阵列的设置还由两个额外特征控制，用于表示鳍片各行和各列之间的距离。在文献中，行间距记为 S，列间距则记为 X，如图1(c)所示。因此，S/D 和 X/D 是针翅文献中通常讨论的两个比值，其中 D 是鳍片垂直于流动方向的投影长度。在这种表述中，对这些比值稍作调整

以避免设计中出现数值不一致。作者没有使用 S/D 和 X/D，而是根据图1(b)中的投影长度定义 S/D_y 和 X/D_x 作为两个额外特征。这项修改避免了两个鳍片形状在网格上相交；当优化收敛到具有较高 D_x/D_y 比值的鳍片时，便会观察到这种情况。

因此，针肋阵列的设计（Ω）可由五个特征唯一确定，即 r_2、 r_3、θ^*、 S/D_y 和 X/D_x:

$$\Omega = [r_2, r_3, \theta^*, S/D_y, X/D_x] \tag{1}$$

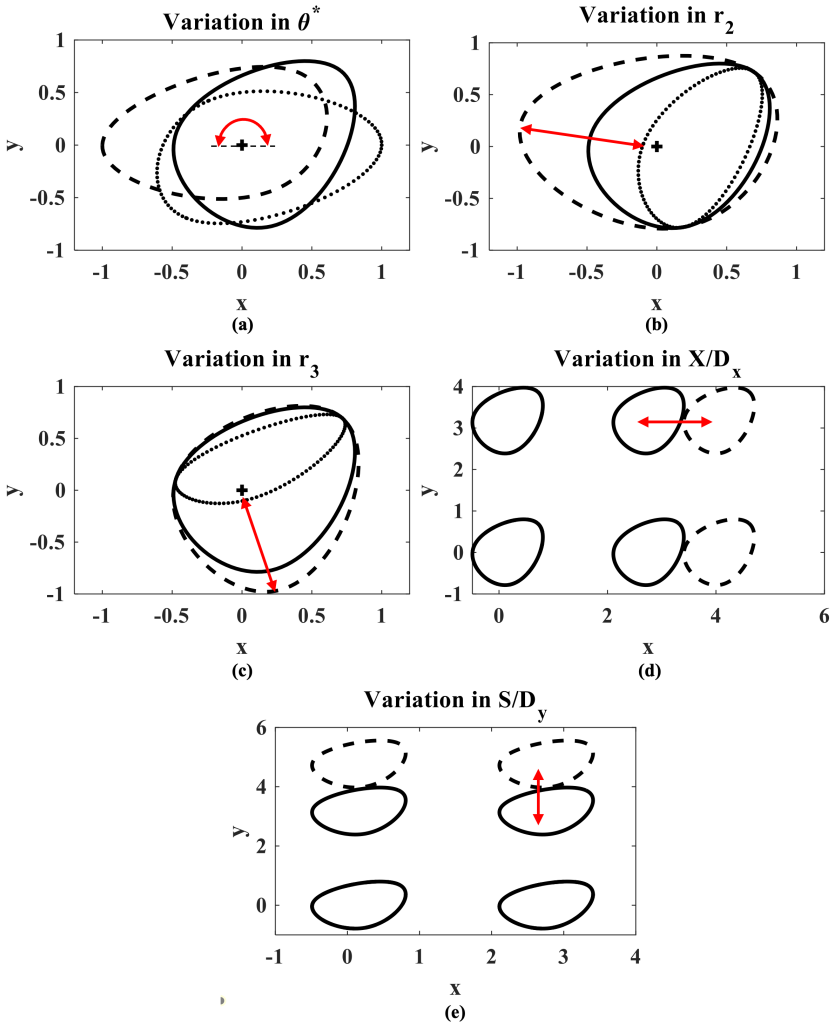


图2: （a） θ^*、（b） r_2、（c） r_3、（d） X/D_x 和（e） S/D_y的特征空间变化。（红色）箭头表示参数变化的范围和方向。

2.1.3 设计空间

为进行优化，需要对五个特征的变化范围施加一些约束。由于参考径向距离（r_1）保持为 1 mm，另外两个半径 r_2 和 r_3 的变化范围为下界 0.1 mm 至上界 1 mm。选择该下界是为了避免样条计算中的数值问题；当半径趋近于零时会出现这类问题。这些参数变化对鳍片形状的影响如图2所示。

如图 2 所示，方向参数（θ^*）的变化范围为 0 至 π 弧度。由于流动特性，任何满足 θ^* 的针肋设计都与 $2\pi - \theta^*$ 具有相同的特性。因此，取 0 至 π 的范围即可涵盖所有不同的方向。这三个参数的每一种变化

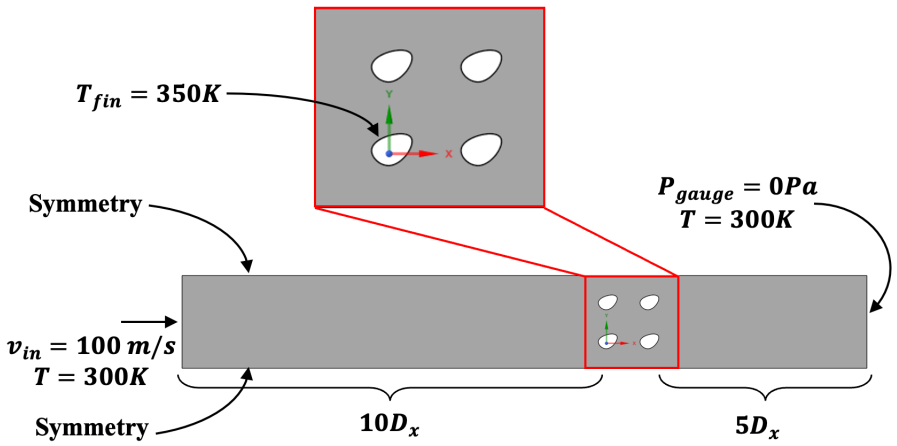
θ^*、 r_2 和 r_3 的变化会产生独特的形状，从而形成大量设计组合。阵列参数的变化相对简单。根据文献 [5], ，这些参数的取值范围设为 2 至 3，其对阵列的影响如图 2(d) 和 (e) 所示。设计空间用向量 Ω^* 表示如下：

$$\begin{aligned}\Omega^* = &[r_2 \in [0.1, 1], \\ &r_3 \in [0.1, 1], \\ &\theta^* \in [0, \pi], \\ &S/D_y \in [2, 3], \\ &X/D_x \in [2, 3]]\end{aligned} \tag{2}$$

2.2 计算流体力学（CFD）模型的开发

2.2.1 模拟区域和边界条件

二维针肋阵列的几何形状及其对应的流场区域如图3所示。流场区域的入口通道向上游延伸至 $10D_x$ ，以使流动在与针肋发生相互作用前充分发展。入口速度（v_{in}）保持为100 m/s，温度为300 K。针肋被建模为具有无滑移条件的静止壁面，并保持恒定温度（T_{fin}）350 K。区域出口定义为大气压（$P_{gauge} = 0$），温度为300 K；出口通道也延伸至 $5D_x$ ，以捕捉尾流区中的流动特性。顶部和底部区域采用对称边界条件。这确保了设计空间中的任何变化（例如，由于 S/D_y引起的变化）都不会对仿真产生影响。包含针肋的感兴趣区域如图3插图所示，后续将在结果中展示。



Fi图 3：CFD模型中采用的仿真域和边界条件。

2.2.2 流动与热传递控制方程

流体流动的动力学由质量守恒和柯西动量方程控制。此外，对流体流动的物理过程作出以下假设：

1. 流体（即空气）被视为不可压缩流体（密度为常数），因此质量守恒可转化为体积守恒。2. 空气的材料性质采用线性本构行为进行建模，即视为空气为牛顿流体，其内部剪切应力与剪切速率成正比。3. 流体附着于针肋表面和壁面，满足无滑移条件。4. 湍流采用5%的湍流强度和10的黏度比进行规定。5. 在规定针肋的壁面性质时，采用粗糙度常数为0.5的标准粗糙度模型。

基于上述假设，采用时间平均的雷诺平均纳维–斯托克斯方程（RANS）描述流体通过针肋阵列的流动。对于不可压缩牛顿流体和定常流动，采用爱因斯坦求和记号表示的方程如下：

$$\rho\bar{u}_j\frac{\partial\bar{u}_i}{\partial x_j}=\rho\bar{f}_i+\frac{\partial}{\partial x_j}\left[-\bar{p}\delta_{ij}+\mu\left(\frac{\partial\bar{u}_i}{\partial x_j}+\frac{\partial\bar{u}_j}{\partial x_i}\right)-\rho\overline{u_i'u_j'}\right] \tag{3}$$

这里， ρ是流体的密度， $\bar{u}_j$是 j^{th}方向上的平均速度， $\frac{\partial\bar{u}_i}{\partial x_j}$是相对于 j^{th}方向的速度梯度。因此，$\rho\bar{u}_j\frac{\partial\bar{u}_i}{\partial x_j}$表示流体微元的平均动量因平均流动中的对流而产生的变化。这一变化由平均体积力 ρf_i、由平均压力场 $-\bar{p}\delta_{ij}$产生的各向同性应力、黏性应力 $\mu\left(\frac{\partial\bar{u}_i}{\partial x_j}+\frac{\partial\bar{u}_j}{\partial x_i}\right)$以及由脉动速度场引起的表观应力$\rho u_i'u_j'$ 共同平衡，后者通常称为雷诺应力。这里， f_i 表示外力， $\bar{p}$ 是平均压力， u_i' 表示速度脉动分量的平均值。为模拟湍流，采用 SST $k-\omega$ 公式 [15]。

本研究未来的目标之一是开展优化研究，在针肋阵列中同时最小化压降并最大化传热。因此，在本研究中还求解了能量守恒方程。热能的输运采用以下方程计算：

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t}+\nabla\cdot[\mathbf{V}(\rho E+p)]=\nabla\cdot[k_{eff}\nabla T+\tau_{eff}\cdot\mathbf{V}] \tag{4}$$

其中， E 为单位质量能量，$\mathbf{V}$ 为速度矢量， p 为压力， k_{eff} 为有效导热系数，τ_{eff} 为有效剪切应力。

2.2.3 模型实现

采用基于有限体积法的 ANSYS® Fluent 2020 R2 软件对流体流动和热演化进行模拟。控制方程在对仿真域进行网格划分的一组有限四边形控制体上进行积分。网格的详细信息如图 4 所示。采用单元中心离散后，数值求解器在控制体中心计算连续速度场和压力场的离散值。在需要时，其他位置的数值均由这些离散值插值得到。数值格式计算动量通过所有控制体面的对流通量和扩散通量。随后，根据净通量更新每个控制体内累积的动量。由于流体不可压缩，压力场由连续性约束确定。根据质量守恒定律推导出压力方程。

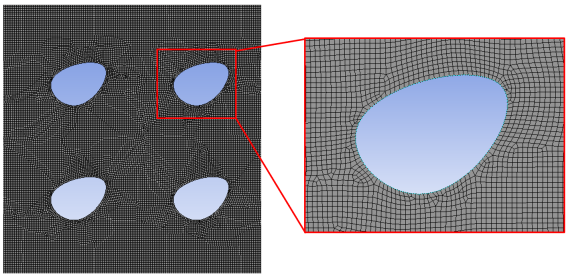


图 4：鳍片边界附近的网格分布。

系统的演化通过采用伪瞬态设置的自动时间步进方法逐步求解。模拟运行 200 次迭代，经观察，这一时长足以使模型收敛。在仿真中，最大单元尺寸保持为 0.05 mm。所有残差的收敛条件均设为 $1e-6$。采用隐式求解器求解相对于控制体集合离散化的动量方程和压力方程，以确保数值格式的稳定性。在每个增量时间步，数值算法都会计算主要离散变量的新值，即局部速度、压力和温度。次要结果，例如流动的流线、剪切速率、黏性应力或通量，则根据主变量计算得出。

例如流动的流线、剪切速率、黏性应力或通量，均根据主变量计算得出。本研究优化的关键目标——压降（ΔP）——通过在模拟结束时记录入口压力来计算（因为出口压力保持为 $P_{gauge} = 0$ Pa）。

2.3 优化框架

2.3.1 基于高斯过程的代理模型

该代理模型开发策略基于一类称为高斯过程（GP）的随机过程，该类过程假定任意有限个随机变量服从多元联合高斯分布。对于有限个n 设计 Ω，相应的函数输出 ϕ 假定服从多元联合高斯分布，

$$\underline{\phi} \sim \mathcal{N}(\underline{m}(\underline{\Omega}) \, , \underline{K}(\underline{\Omega}, \underline{\Omega}')) \tag{5}$$

这里， $\mathcal{N}$ 表示高斯分布。底层高斯过程由均值函数： $m(\Omega) = E[\phi]$和协方差函数： $K(\Omega,\Omega') = E[\phi - m(\Omega))(\phi' - m(\Omega'))]$ [16]完全表征。这里， $E[\star]$表示 $\star$的期望。Ω' 和 ϕ' 分别表示一组不同于 Ω 的有限设计及其对应的函数输出。

为了理解代理建模的应用，考虑这样一种情况：对 n 个以 Ω 表示的设计进行计算评估，以生成输出 ϕ。利用这些数据，可以通过多元高斯形式建立代理模型。随后，可使用以下条件分布公式，利用该代理模型估算新设计 Ω^{n+1} 的输出：

$$\phi^{n+1} | \underline{\phi}, \phi^{n+1}, \Omega \sim \mathcal{N}(m^{n+1}, K^{n+1}) \tag{6}$$

其中，

$$m^{n+1} = \underline{K}(\Omega^{n+1}, \underline{\Omega}) \underline{K}(\underline{\Omega}, \underline{\Omega})^{-1} \underline{\phi} \tag{7}$$

$$K^{n+1} = \underline{K}(\Omega^{n+1}, \Omega^{n+1}) - \underline{K}(\Omega^{n+1}, \underline{\Omega}) \underline{K}(\underline{\Omega}, \underline{\Omega})^{-1} \underline{K}(\underline{\Omega}, \Omega^{n+1}) \tag{8}$$

其中， $\underline{K}$ 是协方差矩阵。因此，每个测试数据点处输出的预测后验分布也是高斯分布，其特征由均值 m^{n+1} 和协方差 K^{n+1} 描述。关于高斯过程的详细数学介绍可参见 [16]。

2.3.2 贝叶斯优化

术语优化 用于表示对目标函数进行最小化。通过取目标函数 ϕ 的相反数，也可以类似地构造最大化问题。要在其定义域内最小化 ϕ ，求解器需要找到：

$$\hat{\Omega} = \underset{\Omega \in \Omega^*}{\operatorname{argmin}} \, \phi(\Omega) \tag{9}$$

其中，“argmin”用于找出使 ϕ 取得最小值的自变量。 ϕ 的函数形式通常未知，因此常采用无梯度或黑箱 优化。贝叶斯优化（BO）是一种黑箱 优化技术 [17] ，它利用代理模型的预测进行序贯主动学习 ，以寻找目标函数的全局最优解。在可能存在噪声的情况下，主动学习策略通过采集函数，在探索 与利用 之间权衡，从而兼顾全局搜索与局部优化。贝叶斯优化中一种常用的采集函数是期望改进（*EI*）。

目标函数 ϕ以高斯过程（GP）表示，可得出后验预测高斯分布，其由均值 $m(\Omega)$ 和标准差 $K(\Omega)$ 表征，其中 $\Omega \in \Omega^*$，Ω^* 是该优化问题的搜索空间。优化算法按顺序推进，在迭代过程的每一步对 $\Omega = argmax_{\Omega} EI(\Omega)$ 进行采样并将结果添加到数据集中，随后利用新数据集重新训练高斯过程代理模型，以预测下一次迭代的采集函数值。此过程持续

直至达到最优解，或计算预算耗尽。由于代理模型会对整个搜索空间内的采集函数值进行预测，贝叶斯优化无需在搜索空间中进行大量函数调用（即无需运行仿真来获取所有搜索位置处的目标值），即可实现快速预测。否则，当搜索空间维度较高且仿真成本高昂时，这一过程可能在计算上难以实现。

2.4 高斯过程与贝叶斯优化的迭代式自动化实现

所提出的优化框架依赖于代理模型的训练与更新。图5展示了算法在训练和更新阶段的工作流程。在训练阶段，使用通过基于拉丁超立方抽样（LHS）的试验设计（DOE）生成的初始设计样本集来训练代理模型。对于样本集中的每个设计，先在 MATLAB 中生成 CAD模型，再进行 ANSYS 仿真。基于这些输出，训练一个基于高斯过程的代理模型。该代理模型构成贝叶斯优化框架的基础，而该框架还包含三个需要迭代同步运行的主要计算环节：(i) 数值化生成针肋形状并将其转换为 CAD几何模型；(ii) 设置计算流体力学模型并进行仿真；(iii) 使用步骤 (i)–(ii) 进行迭代式贝叶斯优化。为完成这些步骤，通过 Python 主脚本运行多个软件。使用 MATLAB 中的样条工具箱生成针肋形状。随后，使用开源库 DXFLib 在 MATLAB 中将形状转换为 AutoCAD 文件（.dxf）。将几何模型导入 ANSYS，并使用预先录制的 journal 文件设置仿真。Python 主脚本从仿真备份文件中读取仿真输出，并据此更新贝叶斯优化器，直至收敛或达到指定的最大迭代次数。贝叶斯优化算法通过 GPyOpt工具箱实现。整个框架无需任何人工干预即可运行。

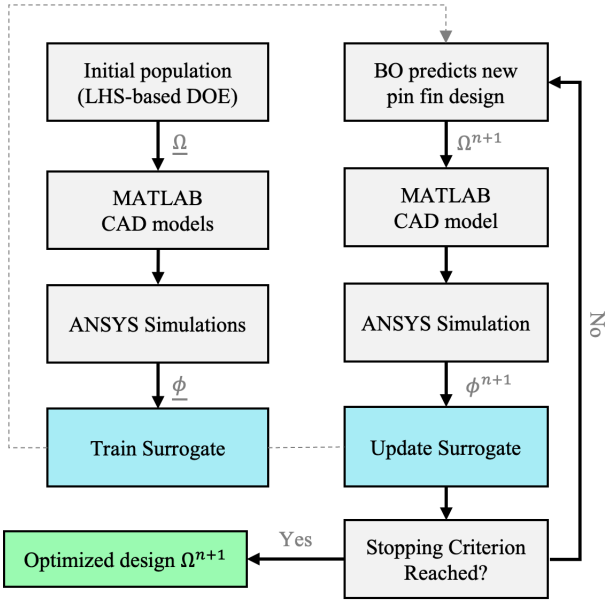


图5：优化框架流程图。

3 结果与讨论

3.1 CFD模型验证

网格收敛是计算流体力学模拟中的必要测试。在本研究中，通过将单元尺寸从 0.5 mm 调整至 0.03 mm，考察性能参数（例如 ΔP）的变化。这使节点数量从 3,471 个变化至 80 万个。除单元尺寸外，所有模拟的参数均保持一致。当单元尺寸小于 0.05 mm 后，压降变化并不显著（2%）。因此，所有分析均选用 0.05 mm 的单元尺寸。为验证 Fluent 模块的设置，研究将尾流长度和分离点与已发表的类似研究进行比较 [18]。比较结果如图6所示，表明 Fluent 模块的设置足够准确。

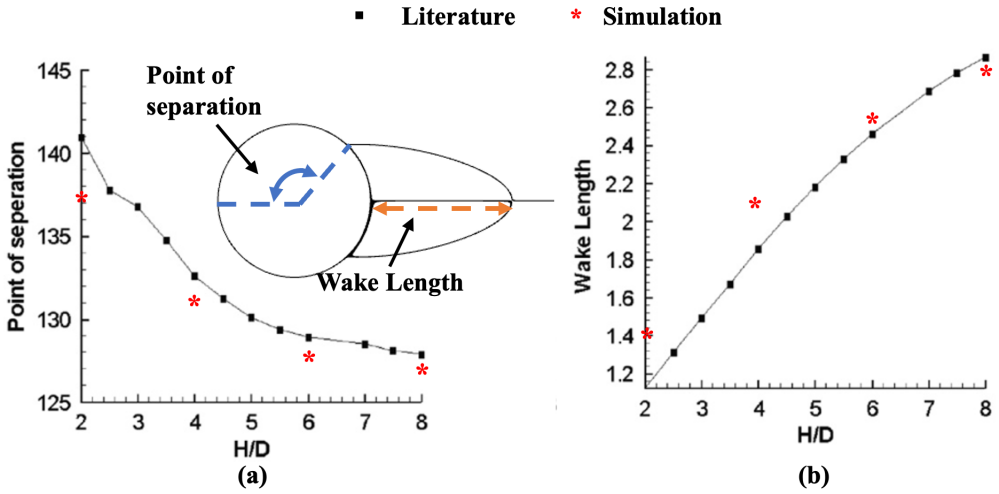


图 6：对　　比文献中已发表结果的（a）分离点和（b）尾流长度 [18　　]

3.2 高斯过程（GP）代理模型的性能

在进行优化之前，先基于拉丁超立方抽样的试验设计开展包含 100 个设计的研究，以构建代理模型。该代理模型构成贝叶斯优化框架的基础，而最优设计的高效搜索取决于该模型的构建。因此，在深入开展优化之前，通常建议使用一些回归指标检查代理模型的准确性。本研究中，为测试代理模型，将现有数据按 75%-25% 的比例随机划分为训练集和测试集。训练集用于构建代理模型，测试集用于评估模型。预测结果与实际数据的对比如图7所示。模型对 92% 的测试数据的预测落在 95% 置信区间内，这表明代理模型能够模拟实际物理过程。然而，皮尔逊相关系数（R平方）较低，仅为 0.67。数据中有一个明显的离群值，其 ΔP 为 6 千帕。移除该离群值后，模型几乎能够达到完美的准确度。不过，由于该离群值产生的原因与系统的物理过程密切相关，因此在优化计算中不会将其移除。高斯过程还需要包含一些较差设计的数据，这有助于在后续优化中避开这些设计组合。用于构建代理模型的 100 个初始设计是随机选取的。对于计算成本高昂的优化问题，100 次初始模拟已构成挑战，因此，要使所提算法成功应用，也必须解决其数据需求问题。为此，第 3.4 节将对此进行讨论。

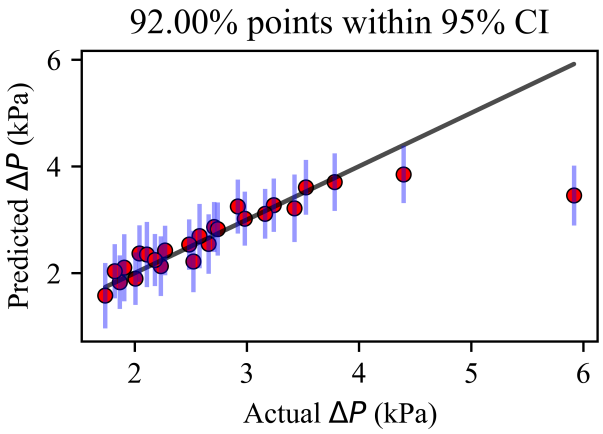


图 7：GP 模型预测与实际数据之间的 ΔP 比较。

3.3 贝叶斯优化（BO）的性能

图 8(a) 展示了贝叶斯优化算法的收敛情况与迭代次数及初始试验设计信息之间的关系。该算法使用 100 个初始设计构建代理模型，在几次迭代内便找到了最优解；随后偶尔会对设计空间进行（未成功的）利用，这一点可从收敛曲线中的峰值看出。初始试验设计提供的最佳设计（图 8(b)）及其对应的压力场和速度场（图 8(c) 和 (d)）的 ΔP 为 1.46 千帕。优化算法通过图 8(d)、(e) 和 (f) 所示的设计（及其压力场、速度场），将其进一步降低至 1.3 千帕。对比图 8(b) 和 (e) 中的两种设计，可以看出贝叶斯优化如何打造出气动性能更佳的设计，从而改善了 ΔP。

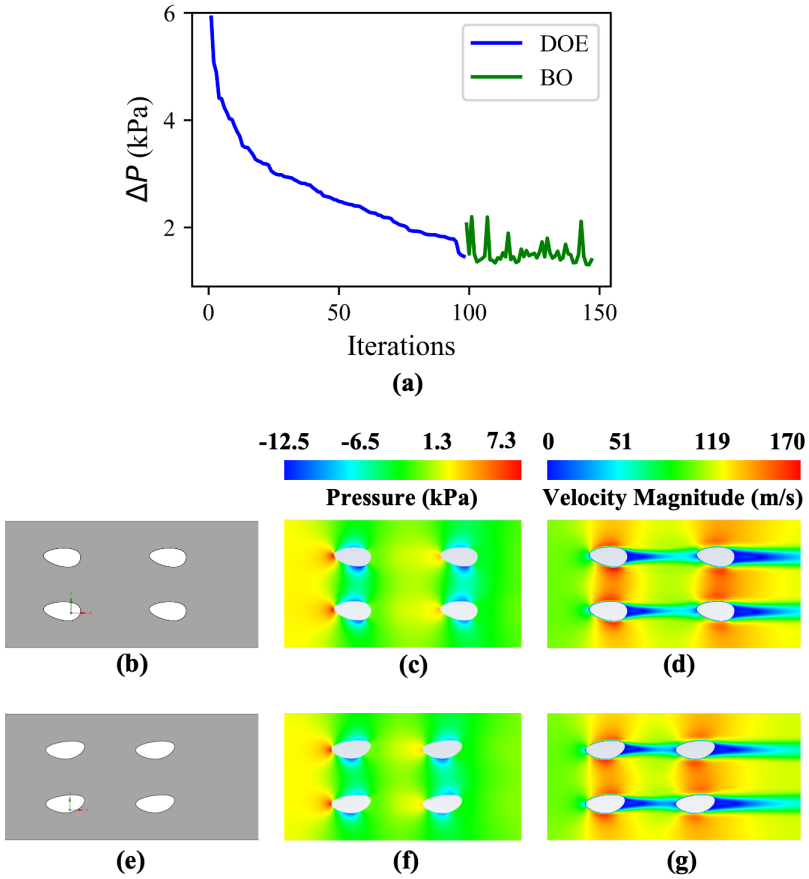


图8：（a）贝叶斯优化算法的收敛情况。（b）、（c）和（d）分别为通过试验设计得到的最佳设计及其对应的压力和速度场。（d）、（e）和（f）分别为优化设计及其对应的压力和速度场。

3.4 优化算法的评估

上一节的优化结果利用100个初始设计的信息，将压降降低了0.1千帕。在某些实际场景中，评估100次仿真可能并不可行。因此，需要研究贝叶斯优化算法在信息较少时的工作能力。为此，现使用四组较少的初始数据进行优化，分别测试贝叶斯优化算法在75、50、25和0个初始设计下的功能。每组实验中省略的设计均为最佳设计，从而逐步减少提供给贝叶斯优化算法的最优解信息。通过这些仿真得到的最佳设计如图9所示，收敛率如图10所示。所有优化设计的特征列于表1中。

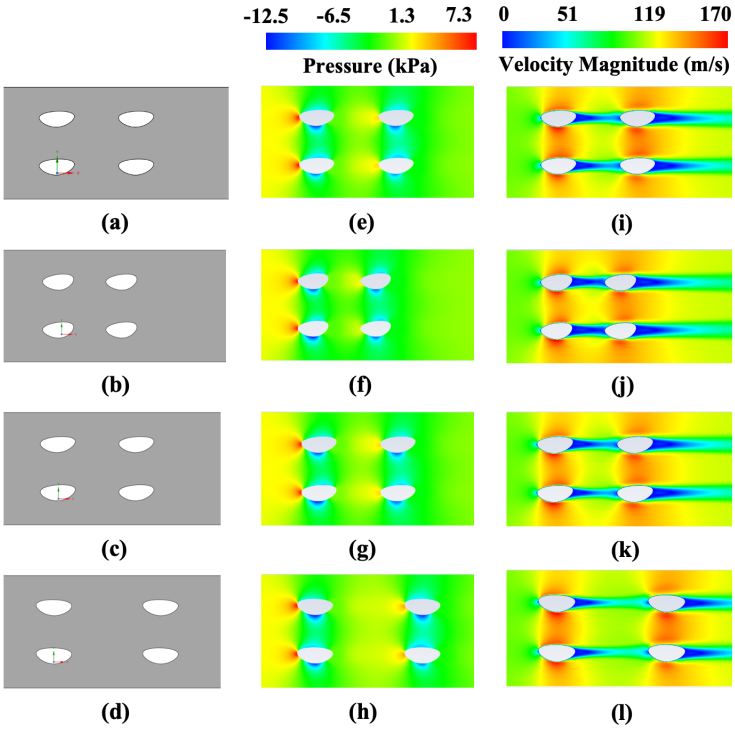
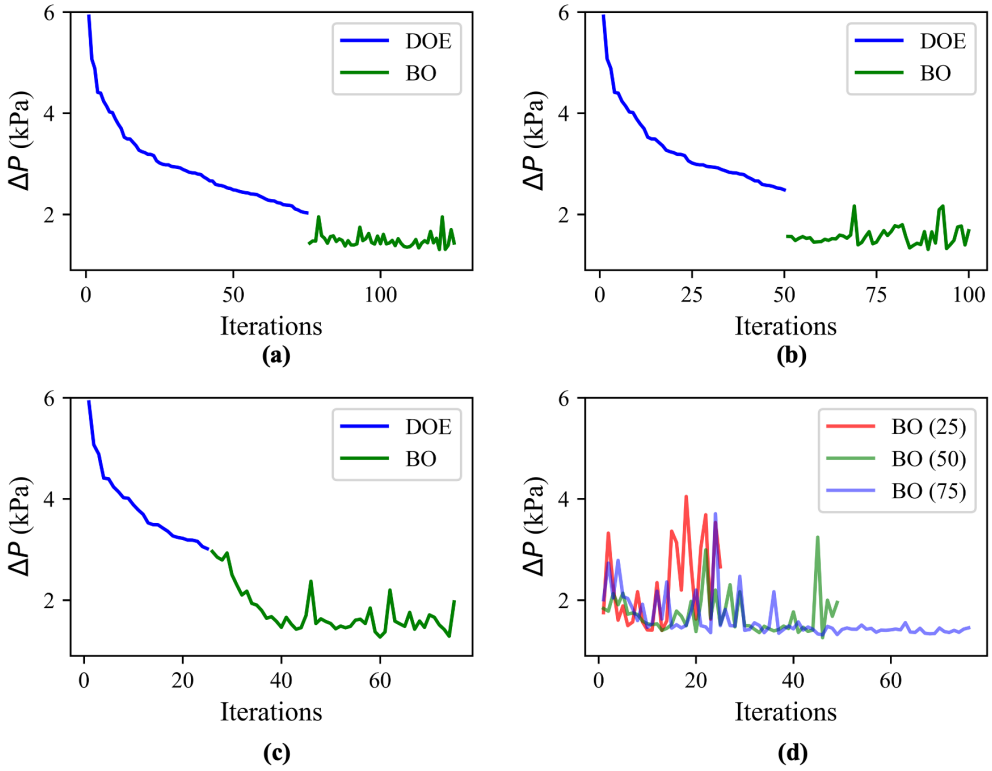


图9：优化前分别采用（a）75、（b）50、（c）25 和（d）0 个初始设计时的优化设计，以及对应的（e）、（f）、（g）和（h）压力场，以及（i）、（j）、（k）和（l）速度场。



Fi图10：采用（a）75、（b）50、（c）25 和（d）0 个初始设计时贝叶斯优化的收敛图。

表1：不同初始设计和BO步骤组合下优化设计的特征

# DOE设计（BO步骤）	r_2 (mm)	r_3 (mm)	θ^* （弧度）	S/D_y	X/D_x	ΔP （千帕）
100 (50)	0.1	0.74	2.8	3	2.3	1.3
75 (50)	0.1	1.0	2.6	3	2.26	1.3
50 (50)	0.17	0.75	2.8	3	2.04	1.3
25 (50)	0.1	1.0	2.7	3	2.24	1.27
0 (75)	1.0	0.1	0.49	3	3	1.25
0 (50)	1.0	0.1	0.49	3	3	1.25
0（25）	0.62	1.0	2.86	3	2	1.4

优化设计（图 9(a)–(d)）在所有实例中都趋向于相似的形状，表明对于这一特定问题存在全局最优解。这些设计在性能上的相似性还可通过图 9(e)–(l) 中的压力场和速度场进行进一步比较。它们之间的细微差异可以通过表1中的数值加以研究。然而，这些设计并未揭示算法趋近最优解的具体过程。图 10 中的收敛率更好地体现了这一行为。采用 75 个初始设计时（图 10(a)），贝叶斯优化的行为与包含全部信息的前一种情况（图 8(a)）几乎相同。采用 50 个设计时（图 10(b)），可以进一步了解贝叶斯优化。比较图 10(a) 和 (b) 可以发现，即使移除 25 个最佳设计，贝叶斯优化算法的第一次预测在两种情况下也几乎相同。这意味着，贝叶斯优化基于 75 个和 50 个设计学习得到的底层高斯过程在函数形式上是相似的。

通过与图 10(c) 进行比较，可以进一步凸显这一解释：在图 10(c) 中，贝叶斯优化逐渐朝着最优设计移动，直到迭代 40 次，这表明高斯过程需要超过 25 个设计才能做出更明智的决策。对于初始设计数量为 0 的最终情况（图 10(d)），其收敛过程不像前几种情况那样稳定。由于该情况下没有初始数据，因此针对最大允许迭代次数设置不同限制，进行了多次试验。图 10(d) 中贝叶斯优化（25）、贝叶斯优化（50）和贝叶斯优化（75）的结果体现了这些仿真的随机收敛特性。此外， ΔP 在优化开发阶段所对应的间歇性峰值，其方差也因缺乏数据而大于前几种情况。然而，预测得到的最优解仍然接近前几种情况，这表明贝叶斯优化具备智能采样过程。不过，这类优化得到的预测结果很可能会探索局部最优解，因此并不可靠。总体而言，在所有情况下，与试验设计提供的最佳设计相比，贝叶斯优化算法都能够使 ΔP 提高超过 1 千帕。

3.5 敏感性分析

从设计与制造的角度来看，了解各特征对性能的相对影响至关重要。此外，探究高斯过程所学习到的函数形式，也有助于进一步了解系统行为。因此，本文进行全局和局部敏感性分析。全局分析对于了解各特征的影响至关重要；而由于问题具有多参数特性，高斯过程的函数形式只能在局部情境下加以理解。为了解各特征的全局敏感性，本文采用 SHAP（Shapley加性解释）进行分析。SHAP 是一种源自合作博弈论的方法，旨在了解所有特征对某项预测的个体影响 [19]。从可视化角度来看，该分析结果可通过两种形式呈现，即：（i）使用图 11(a) 所示的条形图；（ii）使用图 11(b) 所示的汇总图。这两幅图均揭示了有关特征行为的重要信息。

条形图显示了各特征对 ΔP的相对影响。图中的X轴显示平均 SHAP 值，表示各特征对 ΔP的平均贡献。例如，对于 S/D_y，平均 SHAP 值为 0.48，表明 S/D_y 对高斯过程代理模型预测的总 ΔP 贡献了 0.48 千帕。图 11(a)显示， S/D_y 是影响 ΔP的最主要因素，而 X/D_x 的影响最小。在 r_2、 r_3和 θ^* （共同构成形状的三个特征）中， θ^* 对ΔP的影响最大。尽管这些信息很有用，但仅凭图 11(a)中的条形图，无法解读这些特征如何

影响结果。例如，条形图无法说明增加还是减小 S/D_y有利。图 11(b)中的汇总图弥补了这一不足。汇总图显示了不同特征对应的彩色编码小提琴图散点，沿X轴分布。颜色表示特征的相对大小，X轴表示 SHAP 值。散点的长度表示相对影响。例如，对于 S/D_y，散点分布最宽，表明其对输出的影响最大。并且，较高的 S/D_y 值（红色）位于分布的左端，这表明较高的 S/D_y 会降低 ΔP。这一解读也与优化特征（表1）一致：所有设计都趋于采用最大可能的 S/D_y ，以降低 ΔP。

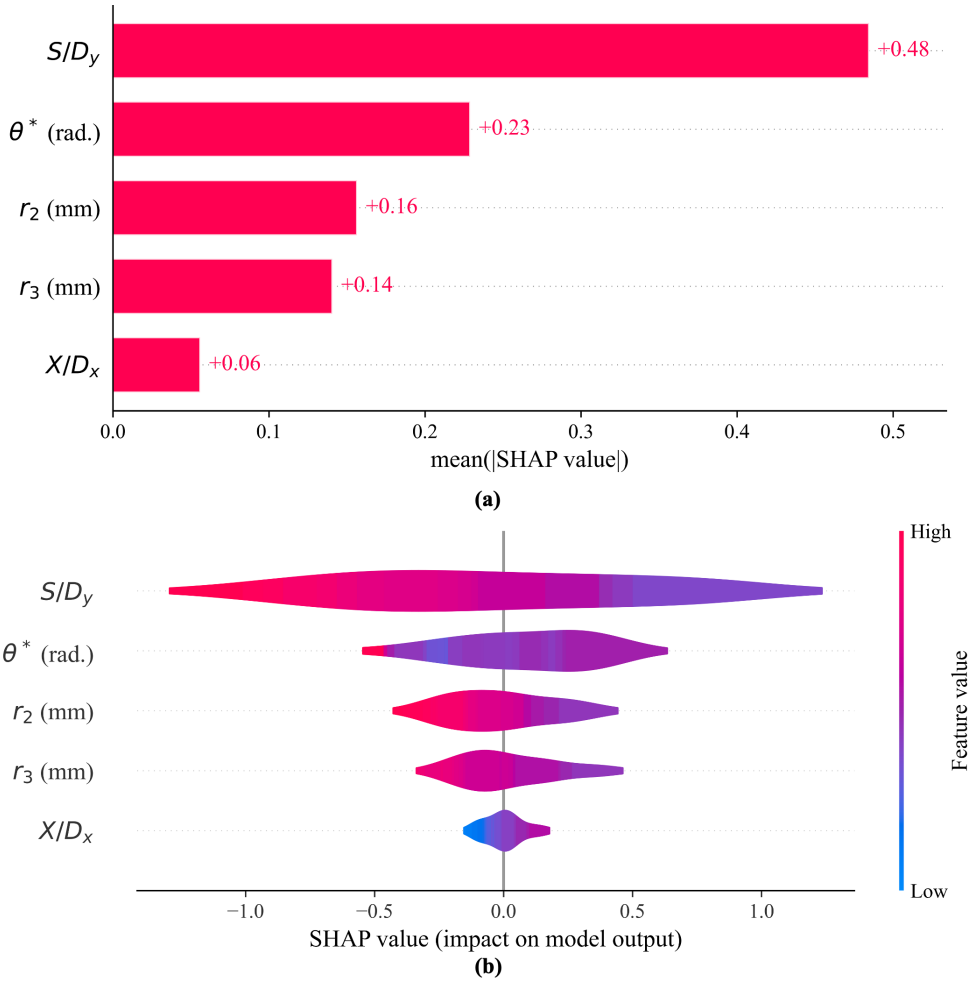


图11：(a) 显示特征相对绝对影响的条形图。(b) 汇总图，展示特征幅值变化对输出的影响。

为了解局部敏感性，本文研究了具有 100 个初始点的优化设计中代理模型的行为。图 12 显示了 GP 学习得到的各特征随 ΔP 的变化情况。为计算每个特征的变化，将所有其他特征固定在 BO 指示的优化值上。因此，函数形式在很大程度上受这些固定特征值的影响，因此该分析被称为局部分析。即便如此，这些变化仍有助于了解其对优化设计的影响。除 θ^* 外，所有特征均随 ΔP 单调变化。 θ^* 中的周期性变化暗示 CFD 模型中可能存在对称性。在所有特征中， ΔP 中的相对总变异反映了该特征对结果的影响。正如 SHAP 分析所揭示的， S/D_y 再次导致 ΔP 的变化最大，表明其影响占主导地位。星形标记表示优化设计中的特征值。因此，敏感性分析全面揭示了目标与特征之间的关系，最终有助于设计与制造阶段。SHAP 分析提供了一套工具，可用于调整特征以满足目标；在本例中，即将 S/D_y 设为较高值。

选定最优设计后，局部敏感性分析有助于识别哪些特征需要比其他特征受到更严格的监测（或控制），具体取决于它们对结果的影响。

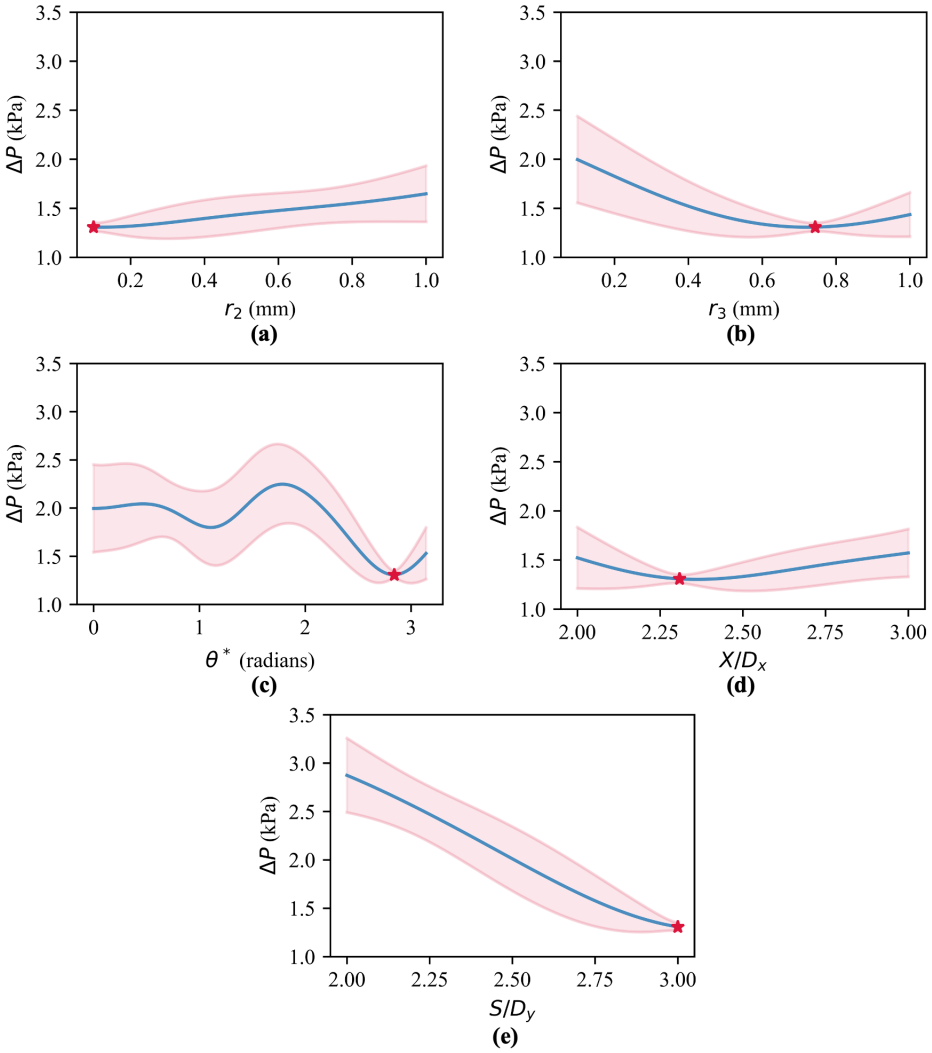


图1　　2：　ΔP 上的局部特征敏感性，针对 (a) r_2、(b) r_3、(c) θ^*、(d) X/D_x 和 (e) S/D_y。

4 结论与未来工作

本文提出了一种基于分段三次样条的独特框架，用于针肋特征化。本文结合CFD模型与基于代理模型的贝叶斯优化方法，建立了一个旨在计算压降最小的针肋阵列的优化问题。结果表明，优化设计呈现出空气动力学形状，从而降低了压降。本文还在初始信息较少的情况下进一步测试了贝叶斯优化框架的能力。结果显示，利用25–50个初始数据点，优化方法即可高效地找到最优设计。此外，本文进行了敏感性分析，发现 S/D_y 是影响压降的最主要特征。了解优化所需的最少设计数量，并结合敏感性分析，可为设计工程师提供有价值的信息。

采用分段三次样条逼近空气动力学形状的方案前景可期，后续将进一步探索，以检验该方法的能力。增加样条数量后，可以生成更复杂的形状，以模拟部分已测试的原型 [5] 。针肋设计的数学设置也为纳入增材制造试样 [6]中观察到的形状畸变提供了可能。后续还将研究这类形状畸变的建模及其影响，并将其纳入优化。用于补偿这些影响的几何约束将使这一方法更具

影响力，并更贴近实际应用。此外，未来还将进一步把该方法扩展至三维。目前方法的一个关键部分是 CFD 模型中的对称条件；从理论上讲，这意味着针肋构成无限阵列，且计算域为无界域。为进一步改进预测，在确定最优针肋形状后，将开展有界模拟，以模拟实际测试环境。此外，当前方法仅针对压降最小化问题。未来还将开展研究，进行多目标优化，以在降低压降的同时增强传热。届时将开展实验研究，验证这一新开发框架的有效性，并将采用多保真建模 [20] ，以智能地融合实验数据与数值数据。

作者贡献

概念化：A.B.、K.A.T.、R.A.B.和S.D.；方法论：S.D.；软件：S.D.；验证：S.D.；形式分析：S.D.；研究：S.D.、A.B.、K.A.T.和R.A.B.；资源：A.B.；数据整理：S.D.；初稿撰写：S.D.和A.B.；审阅与编辑：A.B.、K.A.T.、R.A.B.和S.D.；可视化：S.D.；监督：A.B.、K.A.T.和R.A.B.；项目管理：K.A.T.和A.B.；经费获取：K.A.T.、A.B.和R.A.B.。所有作者均已阅读并同意发表的稿件版本。

致谢

作者谨向宾夕法尼亚州立大学机械工程系博士生Ritam Pal和Nandana Menon致谢，感谢他们分别协助进行CFD建模和贝叶斯优化；并感谢宾夕法尼亚州立大学机械工程系博士生Evan Mihalko为稿件校对。

基金信息

本研究由NASA大学领导力倡议计划通过资助编号80NSSC21M0068提供资助。本文中的任何观点、研究结果和结论均为作者的观点、研究结果和结论，不一定代表资助机构的看法。

数据可用性声明

如有合理请求，可向通讯作者获取相关数据。

利益冲突

作者声明不存在利益冲突。

参考文献

[1] Jason Town、Douglas Straub、James Black、Karen A Thole 和 Tom IP Shih。涡轮转子叶片的最先进冷却技术。《涡轮机械期刊》，140(7):071007，2018。[2] ME Taslim、L Setayeshgar 和 SD Spring。先进前缘冲击冷却概念的实验评估。涡轮机械期刊，123(1):147–153，2001。[3] Marcel Otto、Justin Hodges、Gaurav Gupta 和 Jayanta S Kapat。用于涡轮冷却的针肋阵列中的涡旋结构。载于涡轮博览会：陆地、海洋与空中动力，第58646卷，第V05AT16A003页。美国机械工程师学会，2019。[4] MK Chyu、CH Yen 和 S Siw。比较圆形、立方形和菱形元件错列针肋阵列的传热。载于涡轮博览会：陆地、海洋与空中动力，第47934卷，第991–999页，2007。[5] Katharine K Ferster、Kathryn L Kirsch 和 Karen A Thole。几何形状、间距和针肋数量对增材制造微通道针肋阵列的影响。《涡轮机械期刊》，140(1)，2018。

[6] Thomas M Corbett、Karen A Thole 和 Sudhakar Bollapragada。针肋形状和间距对传热及压力损失的影响。《涡轮机械期刊》，145(5):051014，2023。[7] Shinjan Ghosh、Sudeepta Mondal、Jayanta S Kapat 和 Asok Ray。在设计约束下，利用高斯过程代理模型优化针肋阵列形状。载于涡轮博览会：陆地、海洋与空中动力，第84164卷，第V07AT15A021页。美国机械工程师学会，2020。[8] Sinan Eyi、Kyle M Hanquist 和 Iain D Boyd。高超声速飞行器的气动热力设计优化。《热物理与传热期刊》，33(2):392–406，2019。[9] Sinan Eyi、Kyle M Hanquist 和 Iain D Boyd。通过优化再入飞行器形状以降低热负荷。《热物理与传热期刊》，33(3):785–796，2019。[10] Sebastian Willeke 和 Tom Verstraete。内部冷却通道U形弯管的伴随优化。载于涡轮博览会：陆地、海洋与空中动力，第56710卷，第V05AT11A029页。美国机械工程师学会，2015。[11] Shinjan Ghosh 和 Jayanta S Kapat。蛇形通道的拓扑优化：最大化传热性能并最小化压力损失，适用于增材制造。载于涡轮博览会：陆地、海洋与空中动力，第58653卷，第V05BT21A006页。美国机械工程师学会，2019。[12] Sumer B Dilgen、Cetin B Dilgen、David R Fuhrman、Ole Sigmund 和 Boyan S Lazarov。湍流传热系统的基于密度的拓扑优化。《结构与多学科优化》，57(5):1905–1918，2018。[13] Giampietro Fabbri。用于翅片轮廓优化的遗传算法。《国际传热与传质期刊》，40(9):2165–2172，1997。[14] Nawaf Hamadneh、Waqar A Khan、Saratha Sathasivam 和 Hong Choon Ong。利用粒子群优化算法优化针肋几何形状。《公共科学图书馆·综合》，8(5):e66080，2013。[15] Stephen P Lynch、Karen A Thole、Atul Kohli 和 Christopher Lehane。采用非轴对称端壁造型的涡轮叶片传热与气膜冷却的计算预测。《涡轮机械期刊》，133(4)，2011。[16] Carl Edward Rasmussen。机器学习中的高斯过程。载于机器学习暑期学校，第63–71页。施普林格，2003。[17] Peter I Frazier。贝叶斯优化教程。*arXiv*预印本 *arXiv:1807.02811*，2018。[18] Sintu Singha 和 KP Sinhamahapatra。低雷诺数下平行壁面间绕圆柱体的流动。《海洋工程》，37(8-9):757–769，2010。[19] Christoph Molnar。可解释机器学习。Lulu.com，2020。[20] Nandana Menon、Sudeepta Mondal 和 Amrita Basak。激光定向能量沉积中结合不确定性量化的多保真代理模型过程映射。《材料》，15(8):2902，2022。