

研究论文

DOI: 10.11949/0438-1157.

基于分子动力学模拟与机器学习的固液界面热阻研究

杨蝶¹, 冯毅波¹, 李海洋², 王军¹, 夏国栋¹

(¹ 北京工业大学传热与能源利用北京市重点实验室, 北京 100124; ² 河南理工大学机械与动力工程学院, 河南 焦作 454003)

摘要: 随着微纳电子器件等高新技术领域的快速发展, 器件与系统正向微型化、集成化方向演进, 单位面积热流密度和散热需求急剧升高。鉴于微纳通道液体冷却被认为是最有效的散热方式之一, 热阻是阻碍热量高效传递的关键因素, 因此微纳尺度下的固液界面热阻已成为制约相关领域技术突破的核心瓶颈。结合分子动力学模拟方法和机器学习方法, 计算并分析了纳米尺度下固液界面热阻。基于分子动力学模拟方法, 建立固-液-固纳米受限系统的界面模型, 模拟计算得到热阻数据。考虑到模拟计算成本高昂, 机器学习方法成本效益高且预测准确, 因此引入机器学习方法分析研究热阻, 构建反向传播神经网络模型和基于遗传算法优化的反向传播神经网络模型。模型选取界面结合强度、系统温度、两侧固体温度与系统温度的比值作为输入参数, 界面热阻作为输出参数。评估结果表明: 遗传算法优化后的反向传播神经网络具有较小的误差, 预测精度相对较高, 其中均方根误差、平均绝对相对误差和决定系数分别为 1.204×10^{-9} $\text{K m}^2/\text{W}$ 、2.2995 和 0.9989。

关键词: 固液界面; 界面热阻; 微纳尺度; 分子动力学模拟; 机器学习

中图分类号: TK124

文献标志码: A

文章编号: 0438-1157 (XXXX) XX-0001-13

Investigation of solid-liquid thermal resistance based on molecular dynamics simulation and machine learning

YANG Die¹, FENG Yibo¹, LI Haiyang², WANG Jun¹, XIA Guodong¹

(¹ Beijing Key Laboratory of Heat Transfer and Energy Conversion, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China; ² School of Mechanical and Power Engineering, Henan Polytechnic University, Jiaozuo 454000, Henan, China)

Abstract: The cooling technology for micro-electronic devices has attached much attention in recent decades because of the dramatic increase in heat dissipation demands. Considering that micro-nano channel liquid cooling is one of the most potential methods for thermal dissipation, it is necessary to study the solid-liquid interfacial thermal resistance, which plays an important role in micro-nano channel liquid cooling. In this work, molecular dynamic (MD) simulation and machine learning are used to calculate and analyze the solid-liquid interfacial thermal resistance at the nanoscale. A MD simulation model for solid-liquid-solid sandwiched structure is established, wherein the solid-liquid interfacial thermal resistance can be obtained. Because of the time-consuming MD simulations, machine learning methods are adopted for thermal resistance analysis. Accordingly, a back propagation neural network and a genetic algorithm-optimized back propagation neural network are established in

收稿日期: 2026-05-18 修回日期: 2026-06-02

通信作者: 李海洋 (1997—), 男, 博士, 副教授, lihy@hpu.edu.cn; 王军 (1984—), 男, 博士, 教授, jwang@bjut.edu.cn

第一作者: 杨蝶 (2001—), 女, 硕士研究生, yangdie@emails.bjut.edu.cn

基金项目: 国家自然科学基金项目 (52506184)

引用本文: 杨蝶, 冯毅波, 李海洋, 王军, 夏国栋. 基于分子动力学模拟与机器学习的固液界面热阻研究[J]. 化工学报, XXXX, XX(XX): 1–13

Citation: YANG Die, FENG Yibo, LI Haiyang, WANG Jun, XIA Guodong. Investigation of solid-liquid thermal resistance based on molecular dynamics simulation and machine learning[J]. CIESC Journal, XXXX, XX(XX): 1–13

this study. The interfacial coupling strength parameter, system temperature, and the ratio of solid temperatures on both sides to the system temperature are selected as input parameters, while the interfacial thermal resistance is the output parameter. The performance of the models are evaluated by comparing the errors and prediction results of the two models. In conclusion, the back propagation neural network optimized by genetic algorithms has smaller errors and relatively high prediction accuracy, with a root mean square error of 1.204×10^{-9} Km^2/W , an average absolute relative deviation of 2.2995, and a coefficient of determination of 0.9989.

Keywords: solid-liquid interface; interfacial thermal resistance; micro-nano scale; molecular dynamics simulation; machine learning

引 言

近年来,随着微纳电子器件等高新技术领域的快速发展,器件与系统正向微型化、集成化方向演进,单位面积热流密度和散热需求急剧升高。鉴于微纳通道液体冷却被认为是最有效的散热方式之一,热阻是阻碍热量高效传递的关键因素,因此国内外众多学者对微纳尺度体系中固液界面传热特性进行了大量的研究^[1-8]。在实际应用中,固液界面传热在微尺度领域系统热管理中得到广泛应用,如电子元件的有效散热^[9,10]、工业热回收^[11]和航空动力^[12]等等。因此,关于微纳尺度下固液界面传热具有重要的意义。

当热量在固液界面间传递时,界面处存在温度跳跃,即存在界面热阻,又称为 Kapitza 热阻。其计算公式如下:

$$R_k = \frac{\Delta T}{q} \quad (1)$$

式中, R_k 为界面热阻, ΔT 为固液界面温差, q 为界面间传递的热量。自1941年在液氦和铜表面之间发现界面热阻以来^[13],国内外学者已经对固液界面热阻进行了大量研究^[14-19]。研究表明,纳米尺度下界面热阻受到固液界面结合强度、界面粗糙度、界面结构等多个因素的影响:一般研究表明,固体表面亲水性越强,其吸附液体原子的能力越强,壁面处的液体分子越容易发生“固化现象”,从而使界面处的热阻越小^[15];界面粗糙度通过改变界面有效接触面积而影响界面热阻的变化;纳米结构的存在增加了固液界面的接触面积,同时,也可以在凹槽处长时间困住液体分子,从而增强界面传热。微纳尺度的热量传递规律不同于宏观尺度。在宏观尺度下,热量输运过程的固液界面热阻可以忽略,但是在微观尺度下界面热阻可能占据主导地位。受限纳米空间内的流体在一定温度梯度下具有不同的动力学行为,这是由于温度梯度和流固原子间的

相互作用对受限流体的性质有着很大的影响。因此,关于固液界面传热特性的研究对认识微观尺度下的传热现象具有重要意义。考虑到在纳米尺度下实验研究较为困难且误差较大,关于微纳尺度传热特性的研究一般采用模拟方法进行研究^[20-24],其中分子动力学模拟(Molecular Dynamic, MD)是一种常见的研究方法,它通过数值求解分子体系经典力学运动方程的方法得到体系的相轨迹,并统计体系的结构特征与性质。然而,长时间的计算过程和性能的高要求及对原子间势能的过度依赖,严重制约了其在微观下研究固液界面热阻。鉴于传统工具的局限性,开发新型界面热阻计算方法具有迫切需求。

机器学习方法可用于分析固液界面传热特性,相关模型可以通过训练数据学习规律,实现快速预测,展现出良好的准确性。因此,本文将分子动力学模拟与机器学习相结合,拟研究固液界面结合强度、系统温度、两侧固体温度与固液界面热阻之间的依赖性关系。即通过分子动力学模拟方法,建立固-液-固纳米受限空间系统模型,模拟计算界面热阻,将其作为构建机器学习模型所需的原始数据,构建反向传播神经网络(Back Propagation Neural Network, BP)模型,考虑到遗传算法可能会优化BP神经网络,因此构建了基于遗传算法优化的反向传播神经网络(Genetic Algorithms Back Propagation Neural Network, GA-BP)模型,通过评价指标均方根误差(Root Mean Squared Error, RMSE)、平均绝对相对偏差(Average Absolute Relative Deviation, AARD)、决定系数(Coefficient of Determination, R^2)和残差来评估模型性能,模型在面对新的四个参数时,预测给出对应的界面热阻,将预测数据与MD模拟数据对比,验证模型的精度和可行性。由BP和GA-BP两种模型的指标对比结果发现,遗传算法对BP神经网络进行了很好的优化,各项性能指标都更

优异,预测数据更加接近于模拟数据。通过结合两种方法,实现对固液界面传热特性更高效地研究,为其在微纳米科学与技术领域的应用提供理论依据。

1 原理

1.1 分子动力学模拟

本文采用开源软件 Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) 构建了固液界面传热的分子动力学模型,如图1所示,两侧固体分子选用银原子(Ag),具有面心立方结构,晶格常数为0.406 nm,流体采用液氩(Ar)。系统在 x 和 y 方向采用周期性边界条件, z 方向采用固定边界条件。 x 、 y 方向上长度均为5.8 nm, z 方向上长度为7.0 nm,其中,两侧固体原子宽度相同,均为1.2 nm,中间液体部分长度为4.6 nm。

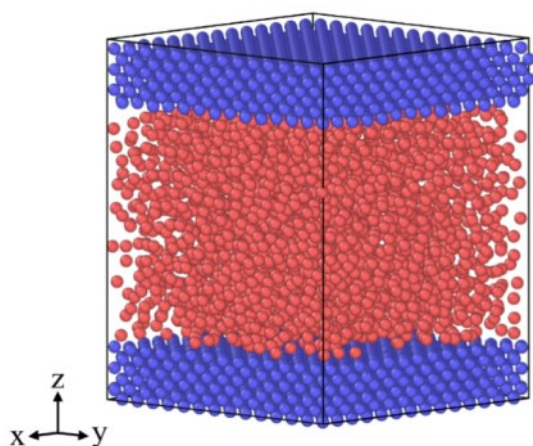


图1 固液界面传热的分子动力学模型图

Fig.1 Snapshot of the simulation model of heat transfer at the solid-liquid interface

模拟中所有分子之间的相互作用势选用 Lennard-Jones 势函数,该势函数公式如下:

$$U_{ij}(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2)$$

式中, U_{ij} 为两个原子间的势能,参数 ε 和 σ 分别代表原子间相互作用势阱深度和势能为零时的距离, r_{ij} 为原子 i 和 j 之间的距离。Ag原子和Ar原子之间的初始势能参数由 Lorentz-Berthelot 原则得到:

$$\sigma_{Ag-Ar} = \frac{1}{2}(\sigma_{Ag} + \sigma_{Ar}) \quad (3)$$

$$\varepsilon_{Ag-Ar} = \sqrt{\varepsilon_{Ag}\varepsilon_{Ar}} \quad (4)$$

在模拟过程中,为了改变固液原子之间势函数

的能量参数,引入参数 c 来改变固液界面结合强度:

$$\varepsilon_2 = c\varepsilon_1 \quad (5)$$

其中, ε_1 为初始设置值, ε_2 为实际设置值。本文中,所采用的LJ势能参数见表1。

表1 L-J势函数参数值^[25, 26]

Table 1 Lennard-Jones potential parameters^[25, 26]

原子名称	$\sigma/\text{\AA}$	ε/eV
Ar-Ar	3.405	0.0098
Ag-Ag	2.574	0.3505
Ag-Ar	2.551	0.05869

模拟中,时间步长取1 fs。系统首先在系统温度为 $T_0=(T_H+T_L)/2$ 的NVT系综下进行弛豫1 ns。然后,在NVE系综下运行0.5 ns后,采用Berendsen热浴对固体壁面靠近最外层的两层银原子进行控温,其中两侧固体高低温端温度分别维持在 T_H 和 T_L ,在高低温热源间建立稳定的温度梯度,得到系统的温度分布、宏观热流量及原子尺度下的局部热流量。为了增加模拟结果的准确度,同样参数条件下的模拟需在不同初始条件(即原子的初始速度不同,但需都满足同一个Maxwell速度分布律)下分别进行,然后以多次数值模拟结果的平均值作为最终的计算结果,同时得到模拟计算的误差棒。

1.2 机器学习模型

在本研究中,将固液结合强度 c 、系统温度 T_0 、两侧固体温度 T_H 和 T_L 与系统温度 T_0 的比值(T_H/T_0 和 T_L/T_0)与对应热阻的192组数据按组打乱顺序,选取144组数据和48组数据分别作为训练集和测试集,构建BP模型和GA-BP模型。

1.2.1 BP神经网络 1974年美国研究员 Paul J. Werbos 在其博士论文 Beyond Regression: New Tools for Prediction and Analysis in the Behavioral Sciences 中提出反向传播算法思想,为反向传播神经网络的产生和发展奠定了基础。到了1986年,以 David E. Rumelhart^[27]为首的科学家小组对这一方法进行了深入研究,极大促进了BP神经网络的发展,后续在许多领域得到了广泛应用^[28-31]。它是一种多层的神经网络,通常为三层结构,分别为输入层、隐含层和输出层,在每个层级拥有多个神经元,各个层级的神经元结构基本相同,激活函数可以相同,也可以有不同的选择。它具有两个特点:信息前向传播,即输入数据样本,设置网络结构及权值、阈值,从第一层向后逐层计算各层神经元的输出;误差修正后向传播,即从输出层开始,逐层计算各权值、阈值对整

个网络误差的影响,然后根据计算结果对各层神经元的权值、阈值进行修正。其基本结构如图2所示。图中,固液界面结合强度 c 、系统温度 T_0 、两侧热源温度 T_H 和 T_L 与系统温度 T_0 的比值(T_H/T_0 和 T_L/T_0)是BP神经网络的输入参数, R 是BP神经网络的输出参数, ω_{ij} 和 ω_{jk} 为BP神经网络权值。从图中看出,BP神经网络可以看成是一个非线性函数,网络输入值和预测值分别为该函数的自变量和因变量。当输入节点数为4、输出节点数为1时,BP神经网络就表达了从4个自变量到1个因变量的函数映射关系。

1.2.2 基于遗传算法优化的BP神经网络 遗传算法 (Genetic Algorithms, GA) 是 1962 年由美国 Michigan 大学 Holland 教授提出的模拟自然界遗传机制和生物进化论而成的一种并行随机搜索最优化方法。它把自然界“优胜劣汰,适者生存”的生物进化原理引入优化参数形成的编码串联群体中,按照所选择的适应度函数并通过遗传中的选择、交叉和变异对个体进行筛选,使适应度值好的个体被保留,适应度差的个体被淘汰,新的群体即继承了上一代的信息,又优于上一代^[32, 33]。这样反复循环,直至满足条件。

遗传算法与神经网络相结合对其进行优化,因

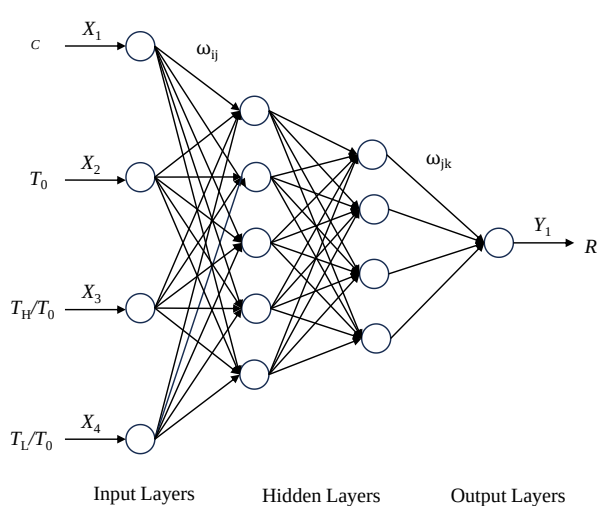


图2 BP神经网络基本结构图

Fig.2 BP neural network basic structure

此越来越多的研究采用GA-BP网络进行建模预测^[34-38]。它对BP神经网络参数进行全局搜索,避免神经网络陷入局部最优解、出现过拟合现象和泛化能力差等问题^[39, 40]。其核心逻辑是通过模拟生物自然选择、交叉、变异的遗传算法,筛选出最优参数组合,再将该组合作为BP神经网络的初始配置,见图3及表3。

1.2.3 评价指标 将数据集按照式(6)进行0到1

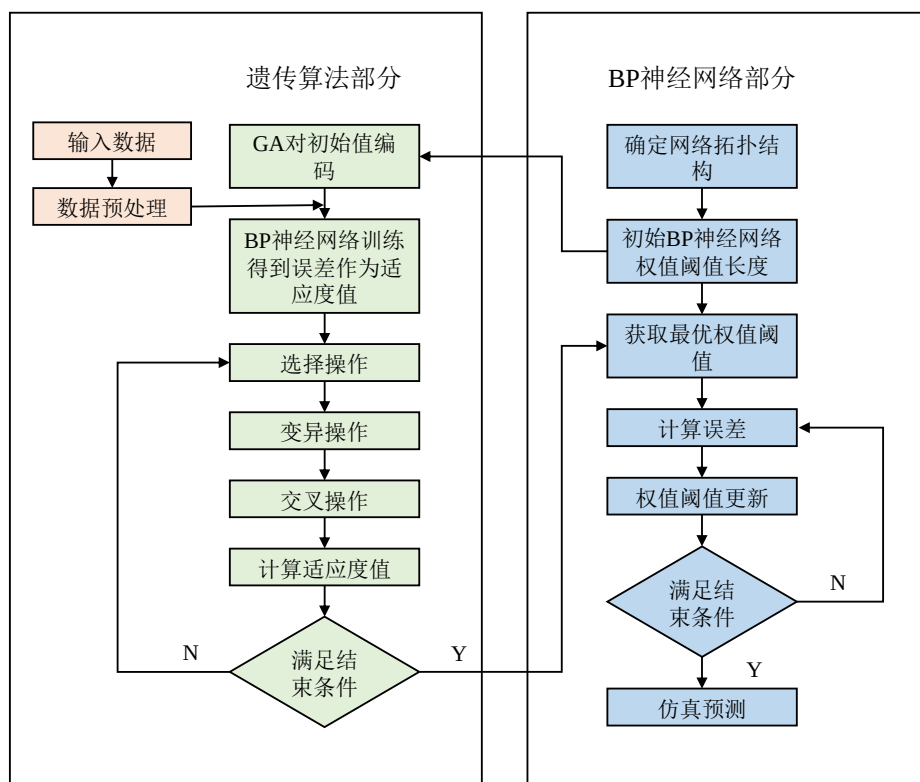


图3 GA-BP神经网络流程图

Fig.3 GA-BP neural network flowchart

表2 BP神经网络模型参数

Table 2 BP neural network model parameters

参数名称	参数值
输入层节点数	4
隐含层层数	2
输出层节点数	1
隐含层结构	[5 4]
激活函数	Tanh激活函数
学习函数	SGD with momentum 优化器

表3 GA-BP神经网络模型参数

Table 3 GA-BP neural network model parameters

参数名称	参数值
输入层节点数	4
隐含层节点数	7
输出层节点数	1
交叉概率	0.7
变异概率	0.04
精英保留数量	2
种群规模	60
最大迭代步数	400

范围内的归一化处理,模型训练与测试完成后,将输出结果反归一化至实际范围。本文引入评价指标均方根误差(RMSE)、平均绝对相对偏差(AARD)、决定系数(R^2)和残差来评估机器学习模型性能。其中RMSE反映预测值和真实值之间的绝对误差大小,单位与真实值一致,其取值越小,表明预测值与模拟真实值的误差越小,模型的预测精度越高;AARD反映预测值相对于真实值的相对误差大小,其数值越小,说明模型的相对预测偏差越小; R^2 衡量模型能够解释真实值数据变异的比例,反映预测值对真实值的拟合程度,其越接近1,说明模型能解释的真实值变异越多,预测值与真实值的拟合程度越高;残差反映的是单个样本的预测偏差,用于判断模型的拟合缺陷,残差随机分布在 $y=0$ 两侧,没有明显趋势,说明残差独立,无自相关性,残差分布越服从正态分布,说明该样本的预测值与真实值越接近,模型对该样本的拟合效果越好。各指标公式如下:

$$Y = \frac{X - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}} \quad (6)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_{\text{sim},i} - y_{\text{pre},i})^2} \quad (7)$$

$$AARD(\%) = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_{\text{sim},i} - y_{\text{pre},i}}{y_{\text{sim},i}} \right| \quad (8)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_{\text{sim},i} - y_{\text{pre},i})^2}{\sum_{i=1}^n (y_{\text{sim},i} - \bar{y})^2} \quad (9)$$

$$e_i = y_{\text{sim},i} - y_{\text{pre},i} \quad (10)$$

式中, Y 、 X 、 $X_{\max}$ 和 $X_{\min}$ 分别是某一变量归一化后的数据、某一变量的原始输入数据、某一变量在原始数据集中的最大值和最小值。 $y_{\text{sim},i}$ 、 $y_{\text{pre},i}$ 和 $\bar{y}$ 分别是模拟值、预测值和所有模拟值的平均值。

2 结果与讨论

2.1 固液界面热阻模拟计算

图4示出在两侧固体不同温差 ΔT_1 下,界面热阻 R 随系统温度 T_0 的变化,图中界面热阻值为左右界面热阻的平均值。由图可知,热阻均随着固液界面结合强度 c 的增大而逐渐减小,且随着系统温度 T_0 的增大而降低。

图5为两侧固体温差为50 K时固液界面热阻随着结合强度的变化。由图可得,随着结合强度的增加,热阻均呈现降低的趋势。图6为两侧固体温差为50 K且系统温度为120 K时,不同结合强度下的一维密度分布图,发现随着结合强度的增加,界面对液体分子的束缚增加,界面处液体分子数量增加,数密度增大。

2.2 基于机器学习的固液界面热阻分析

为了直观地了解神经网络预测值与真实值差距的局部问题,即哪些范围预测值与真实值拟合效果好,哪些范围拟合效果差,选择以散点图的形式将分子动力学模拟计算的真实数据与模型训练集和测试集预测的数据进行对比,如图7所示。由图7可知,对于训练集和测试集GA-BP模型相较于BP模型各数据点都更紧密地分布在对角线周围,无明显趋势偏差,而BP模型在高温区域存在少量离散点,这说明GA-BP神经网络模型测试集有更强的模型拟合与泛化能力,更高的预测精度,能将训练中学习到的数据规律更好地运用到测试集新数据上,预测值与真实值更接近。

为进一步比较BP神经网络和GA-BP神经网络模型预测误差,引入RMSE、AARD和 R^2 作为评估指标来比较两种模型性能,三者从绝对误差、相对误差、拟合优度三个核心维度形成互补,共同为模型性能的量化评估提供科学依据:RMSE衡量两种模型预测值和真实值之间的绝对误差大小,AARD反

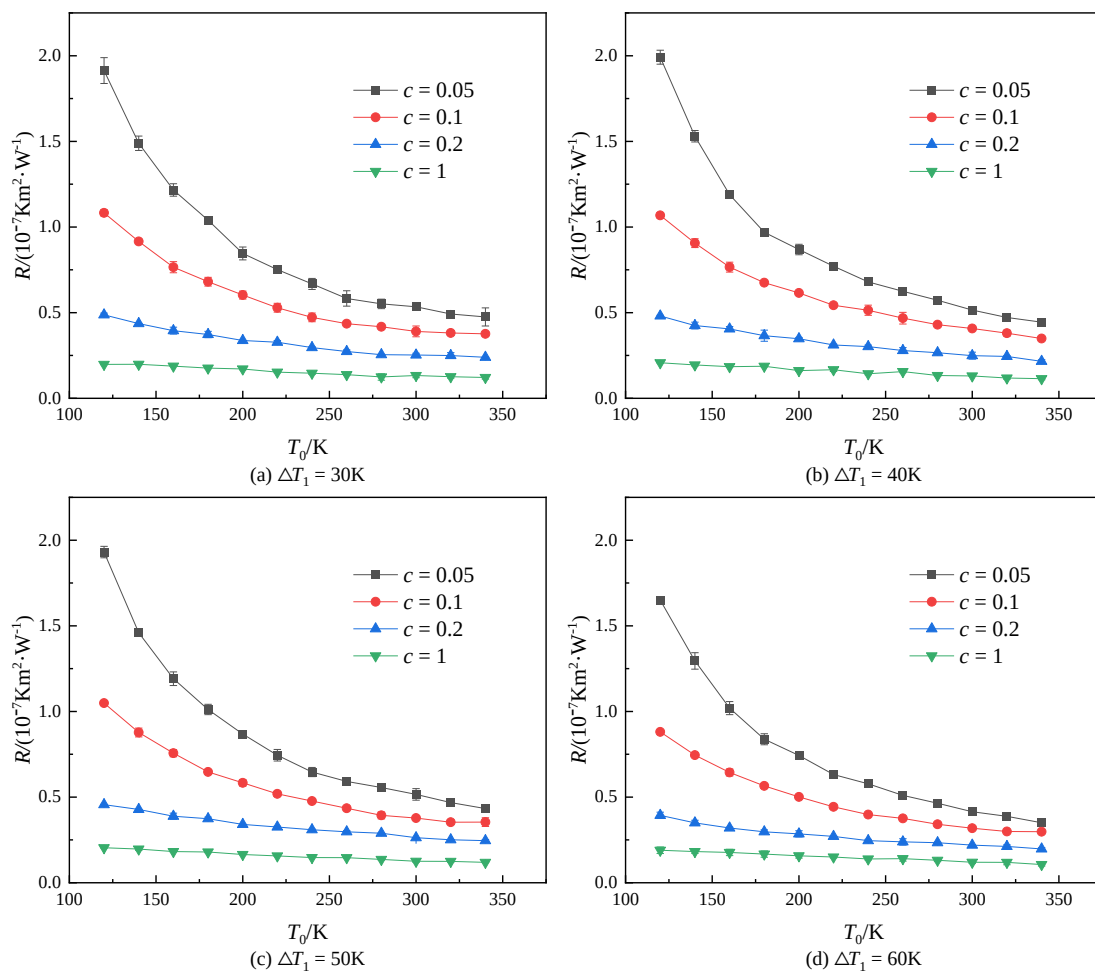


图4 两侧固体不同温差下,界面热阻随系统温度的变化

Fig.4 Interfacial thermal resistance versus system temperature for different interfacial coupling strength parameter c and different solid temperature differences on both sides

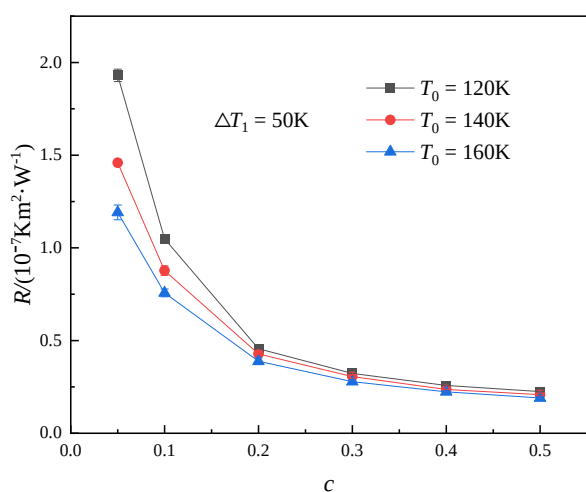


图5 界面热阻随固液结合强度的变化

Fig.5 Interfacial thermal resistance versus interfacial coupling strength parameter c

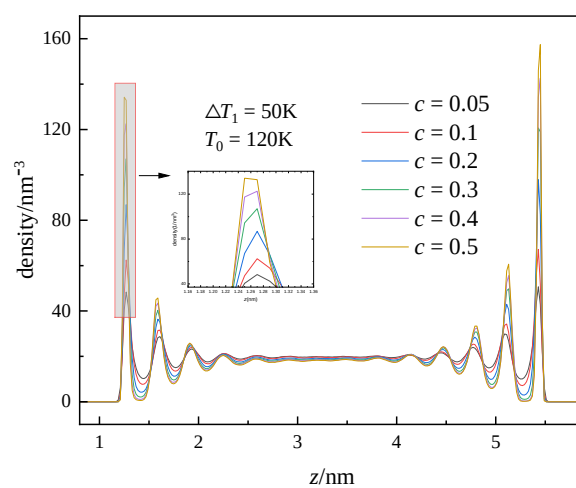


图6 不同结合强度下固体表面附近液体分子的一维密度分布

Fig.6 The density profiles of the liquid at the solid-liquid interface for different interfacial coupling strength parameters

映预测值相对于真实值的相对误差大小, R^2 反映模型能够解释真实值数据变异的的比例和预测值对真实值的拟合程度。表4统计了BP模型和GA-BP模型不同数据集的平均误差。结果表明,预测固液界

面热阻整体性能表现上GA-BP模型显著优于BP模型,展现出更高的准确性,遗传算法对BP神经网络进行了很好的优化。

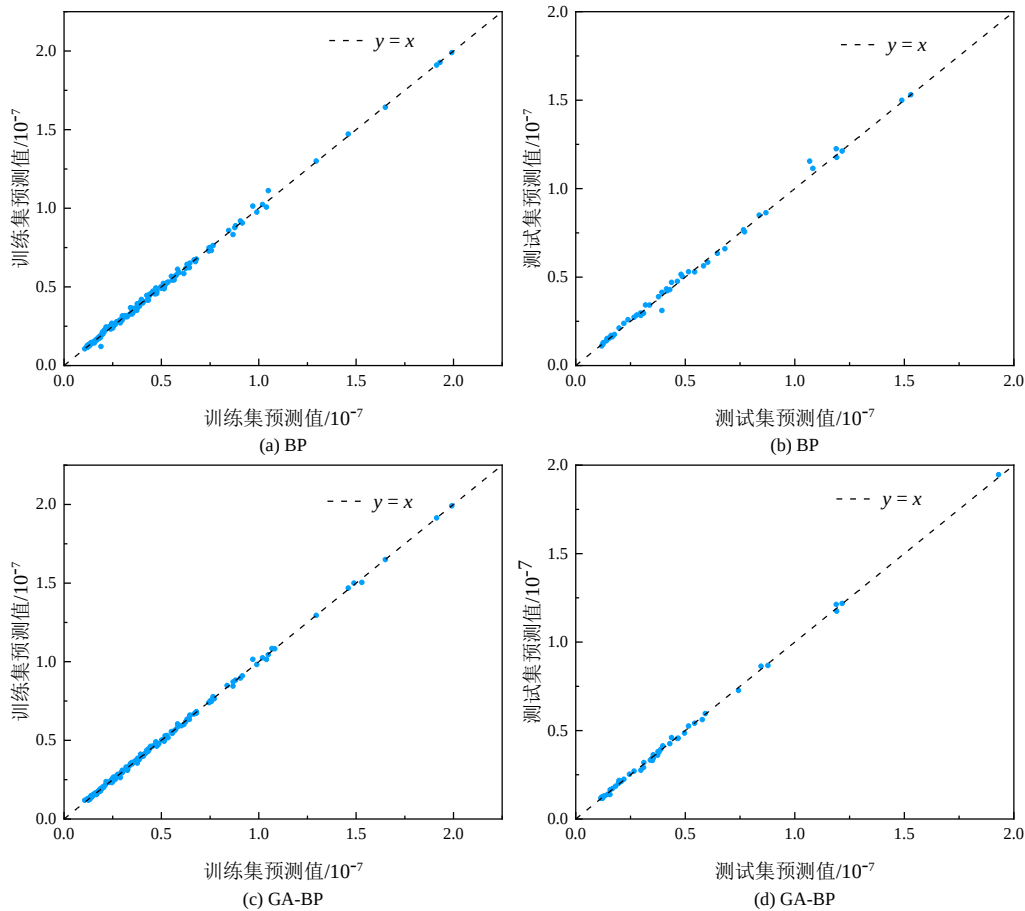


图7 机器学习模型训练集和测试集的散点图

Fig.7 Scatter plots of machine learning models training and testing sets

表4 模型统计误差分析

Table 4 Statistical error analysis of model

评价指标	BP			GA-BP		
	train	test	all	train	test	all
RMSE	0.0194	0.0266	0.0218	0.0095	0.0173	0.0120
AARD	3.0451	3.9779	3.2783	1.9875	3.2356	2.2995
R^2	0.9967	0.9949	0.9961	0.9993	0.9974	0.9989

图8为两种模型的RMSE、AARD和 R^2 对比图,结果表明,GA-BP模型的综合预测性能显著优于传统BP模型:GA-BP神经网络模型的RMSE为 $1.204 \times 10^{-9} \text{ Km}^2/\text{W}$,相较于BP模型降低了 $0.9744 \times 10^{-9} \text{ Km}^2/\text{W}$,遗传算法通过全局搜索优化初始权重与阈值,避免了BP模型因初始参数随机化陷入局部最优导致的预测偏差,绝对预测误差得到有效减小;GA-BP

模型的AARD为2.2995,较BP模型降低了0.9788,相对预测误差得到有效控制,精度提升显著;GA-BP模型决定系数 R^2 更接近于1,数值可达到0.9989,说明GA-BP模型能更充分地捕捉到界面热阻与四个输入参数之间的复杂非线性关系,能解释的真实值变异越多,预测值与真实值的拟合程度越高。

机器学习超参数本质上依赖于数据的统计特征(如样本量和特征分布),基于小样本机器学习模型的常见配置,对参数进行大量的调整对比,筛选得到各机器学习模型的最优超参数,其中,针对各关键超参数,在预设合理取值区间内采用单因素变量法逐一调参,依据模型性能变化确定最优参数取值。以对比BP神经网络不同神经元数量和GA-BP神经网络不同最大迭代次数和种群规模下的性能

指标RMSE、AARD和 R^2 为例,选择能够获得最优整体性能的参数组合。由图9和图10结果图可知,神经元数量为9时,BP神经网络模型的各项性能指标

最优;最大迭代次数为400和种群规模为60时,GA-BP神经网络模型整体性能最优。

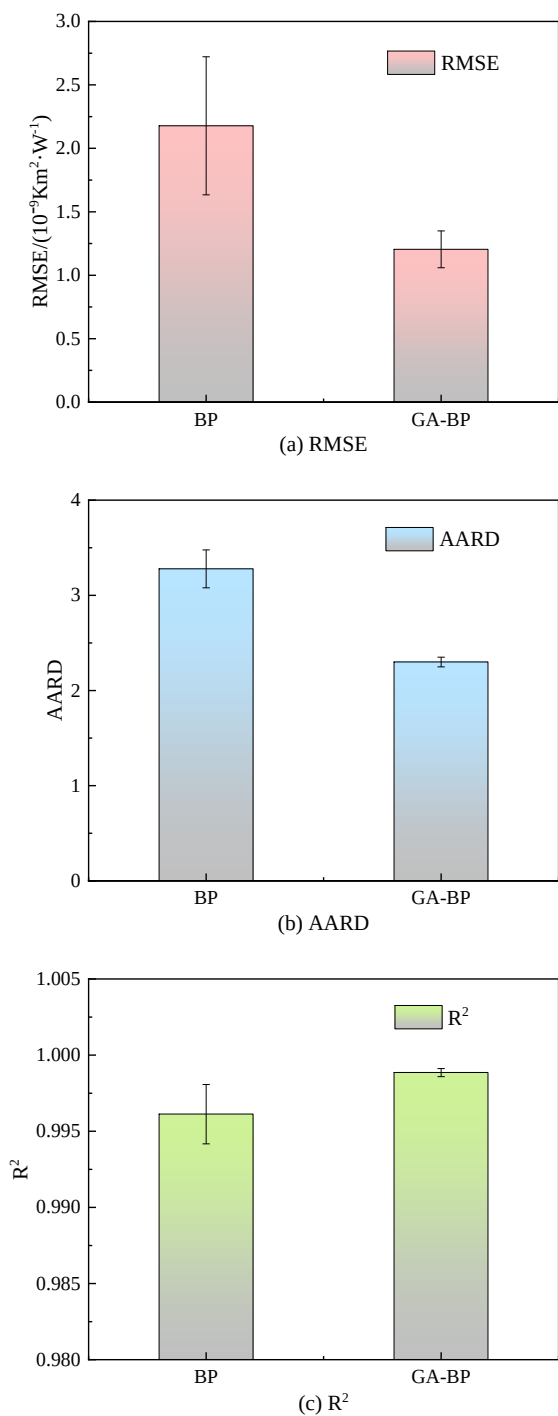


图8 机器学习模型的RMSE、AARD和 R^2

Fig.8 RMSE、AARD和 R^2 of machine learning models

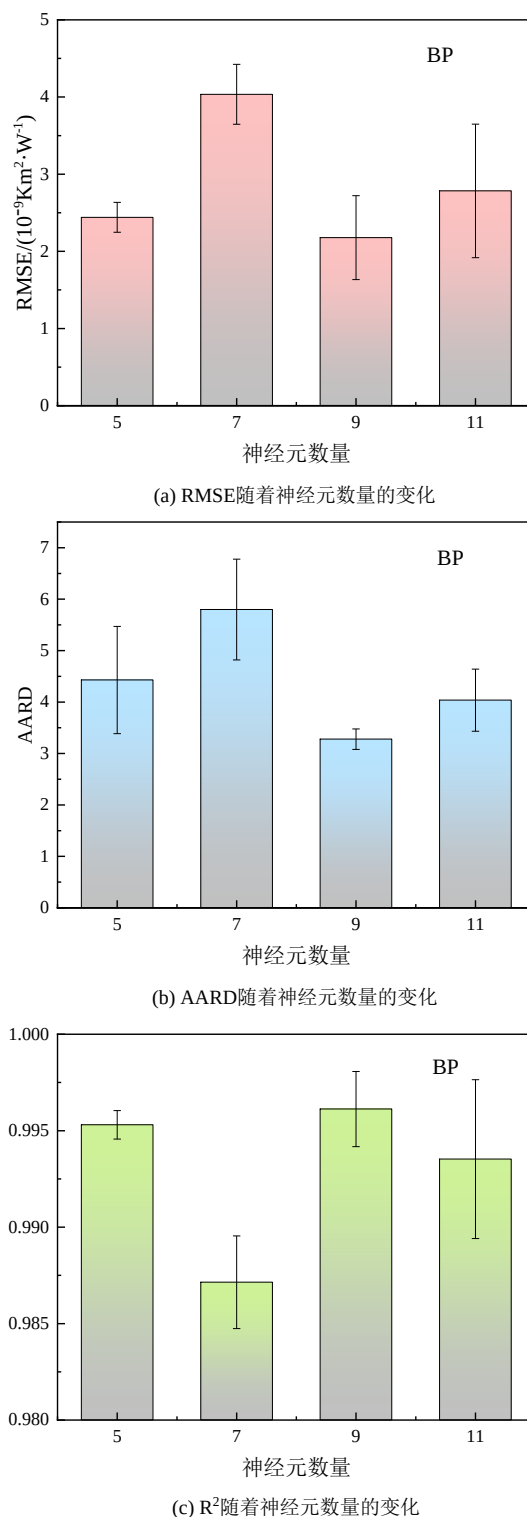
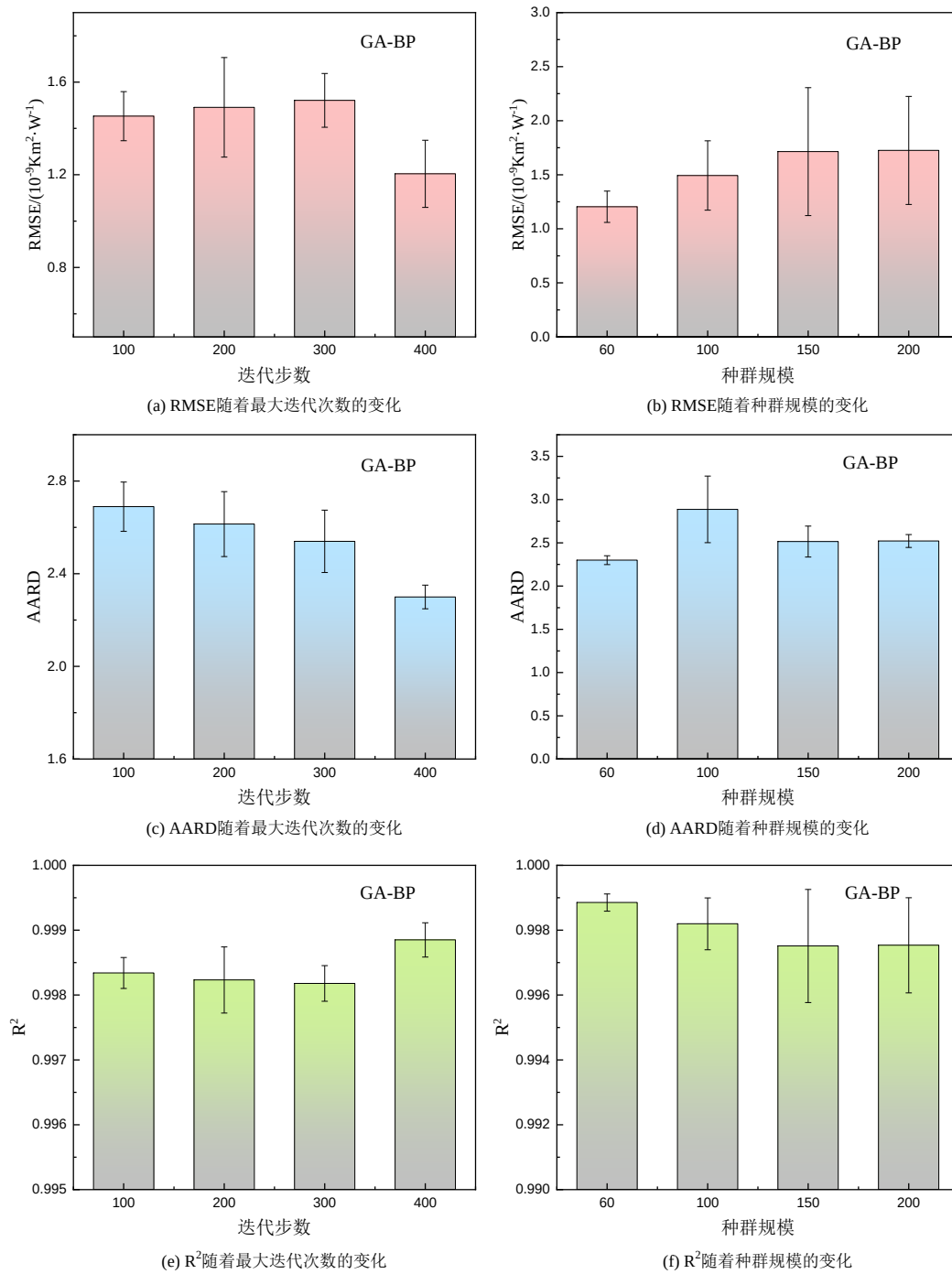


图9 不同神经元数量下BP神经网络的RMSE、AARD和 R^2

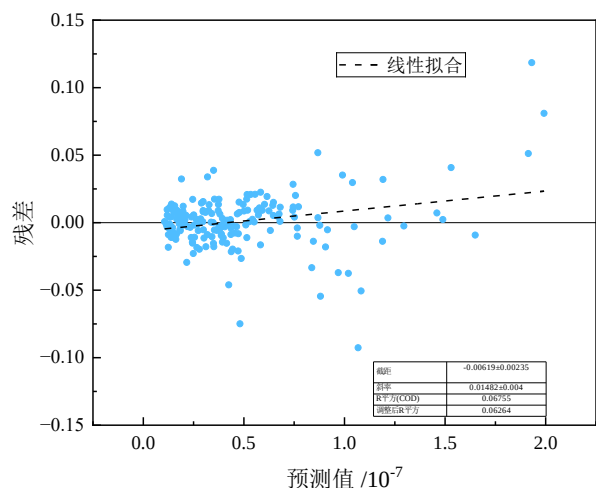
Fig.9 RMSE, AARD, and R^2 for BP neural networks under the different number of neurons

图10 不同超参数下GA-BP神经网络的RMSE、AARD和 R^2 Fig.10 RMSE, AARD, and R^2 for GA-BP neural networks under different hyperparameters

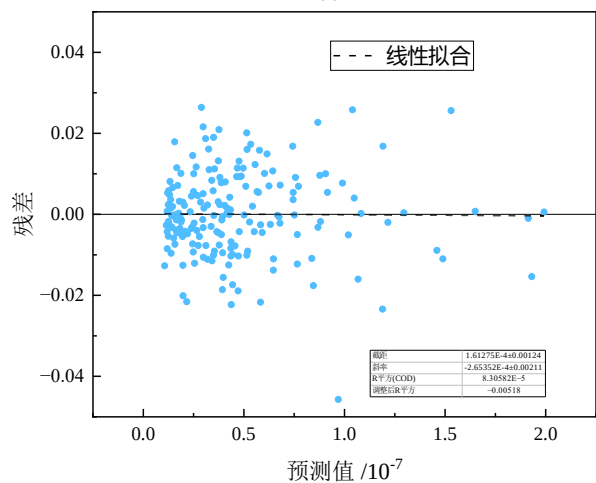
为进一步验证遗传算法对BP神经网络的优化效果,从残差分布特征角度对比分析BP神经网络与GA-BP神经网络模型的预测可靠性与稳定性,重点结合残差散点分布图展开讨论,如图11所示。由残差分布图可知,BP模型残差数据散点图分布趋于零线上方,预测存在系统性低估偏差,GA-BP模型均

匀散乱地分布在零线两侧,无明显偏离趋势,误差分布更随机,说明GA-BP模型对不同预测值区间的样本误差分布均衡,无系统性偏差,预测稳定性好。

为了评估模型预测能力,将结合强度 c 为0.5和两侧固体温差 ΔT_1 为50 K(对应的 T_H/T_0 与 T_L/T_0 以及



(a) BP



(b) GA-BP

图 11 机器学习模型残差

Fig.11 Model residuals of machine learning models

0.5的结合强度在训练参数分布范围内)时,随着系统温度变化的界面热阻预测数据与分子动力学模拟结果对比,其对比结果如图12所示。当系统温度在350 K到390 K之间(300 K到340 K之间的系统温度在训练参数分布范围内,但350 K到390 K之间的系统温度在训练参数分布范围外),BP模型预测数据值相较于GA-BP模型更偏离MD模拟计算结果,其预测能力较差,不能对热阻进行很好的预测,而GA-BP模型的预测结果与模拟结果很接近。这表明该模型的预测性能良好,适用于研究固液界面热阻,遗传算法对BP神经网络进行了很好的优化。

分别模拟和预测了模型对 T_0 、 T_H/T_0 与 T_L/T_0 超出训练集以外未知情况下的固液界面热阻,进一步验证GA-BP模型的泛化能力,即系统温度在350 K到400 K范围内,固液结合强度为0.3和两侧固体温差

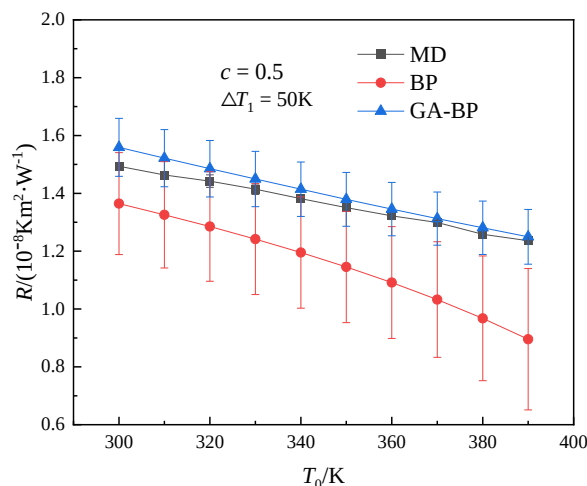


图 12 机器学习模型预测结果与MD模拟结果对比

Fig.12 Comparison between machine learning models prediction results and MD simulation results

为20 K(两侧固体温差为20 K时对应的 T_H/T_0 与 T_L/T_0 超出模型训练参数范围),随后将两组结果进行对比,结果如图13所示。由对比结果可知,预测的界面热阻与MD模拟结果的误差整体偏低,说明GA-BP神经网络具备良好的泛化能力。

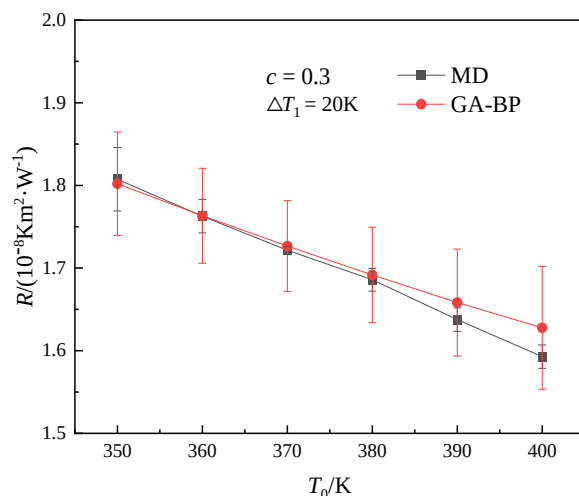


图 13 GA-BP神经网络模型预测结果与MD模拟结果对比

Fig.13 Comparison between GA-BP neural network model prediction results and MD simulation result

输入参数在一定程度上会影响机器学习模型的预测精度,为了研究在机器学习模型中预测固液界面热阻中各输入参数的影响程度,明晰各输入物理参数对预测目标的差异化影响程度,引入合作博弈论 Shapley 值的 SHAP (SHapley Additive exPlanations) 框架进行可解释性分析,量化各输入参数对预测结果的贡献程度,对不同输入参数的特征重要性进行排序,直观揭示不同输入参数对模型

输出结果的驱动作用强弱。结果如图14所示。

分析图14可知,在机器学习预测固液界面热阻中,四个参数的特征重要性排序为; $c > T_0 > T_H/T_0 > T_L/T_0$ 。其中,固液结合强度 c 和系统温度 T_0 对界面热阻的影响程度较大。随着结合强度的增大,固体表面的润湿性从疏水性逐渐转变为亲水性,吸附在固体壁面的液体分子数量逐渐增加,固液界面间传热特性增强,界面热阻降低^[17]。温度改变引发体系压力变化,影响界面处液相分子吸附量;改变液体分子无规则热运动剧烈程度,改变分子与固体壁面间的吸附强度。两类微观机制相互作用,是决定固液界面的热量输运过程的主要因素。

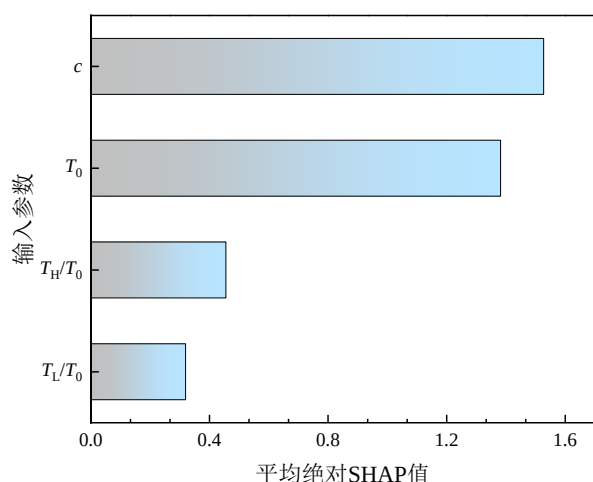


图14 不同输入参数对应的SHAP绝对值均值

Fig.14 mean absolute SHAP values corresponding to different input parameters

3 结论

本文基于分子动力学模拟方法,模拟界面热阻在不同固液结合强度、系统温度和两侧固体温度下的变化。将模拟结果作为数据集,构建反向传播神经网络模型和基于遗传算法优化的反向传播神经网络模型,分析两种模型误差,评估模型性能,并研究了结合强度、系统温度、两侧固体温度与系统温度的比值对固液界面热阻的重要性。综合分析,发现遗传算法优化了反向传播神经网络,其中RMSE、AARD和 R^2 分别为 1.204×10^{-9} Km²/W、2.2995和0.9989,在误差允许范围内展现出优异的预测精度。这表明了GA-BP模型适用于研究固液界面热阻。

符号说明:

ΔT ——固液界面温差,K

q ——热流密度,W/m²

U_{ij} ——原子 i 和 j 之间的势能,eV

ε ——相互作用势能能量参数,eV

σ ——相互作用是能长度参数,Å

r_{ij} ——原子 i 和 j 之间的距离,m

c ——势能参数

R ——固液界面热阻,Km²/W

T_0 ——系统温度,K

ΔT_1 ——系统两端热源温差,K

T_H ——系统高温端热源温度,K

T_L ——系统低温端热源温度,K

ω_{ij} ——输入层第 i 个神经元与隐含层第 j 个神经元之间的权值

ω_{jk} ——隐含层第 j 个神经元与输出层第 k 个神经元之间的权值

e_i ——第 i 组预测误差

参考文献

- [1] Yin X Y, Li C Z, Kou Z H, et al. Effect of depositional nanoparticles on heat transfer at the solid - liquid interface using molecular dynamics simulations[J]. Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics, 2025, **50**(3): 391-402.
- [2] Ma D K, Xing Y H, Zhang L F. Reducing interfacial thermal resistance by interlayer[J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2023, **35**(5): 053001.
- [3] 宋善鹏, 于志家, 刘兴华, 等. 超疏水表面微通道内水的传热特性[J]. 化工学报, 2008, **59**(10): 2465-2469.
Song S P, Yu Z J, Liu X H, et al. Heat transfer characteristics of water flowing in microchannels with super-hydrophobic inner surface[J]. Journal of Chemical Industry and Engineering (China), 2008, **59**(10): 2465-2469.
- [4] Klochko L, Mandrolko V, Castanet G, et al. Molecular dynamics simulation of thermal transport across a solid/liquid interface created by a meniscus[J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2023, **25**(4): 3298-3308.
- [5] 齐凯, 朱星光, 王军, 等. 外电场作用下纳米结构表面的固-液界面传热特性[J]. 物理学报, 2024, **73**(15): 118-125.
Qi K, Zhu X G, Wang J, et al. Heat transfer characteristics of solid-liquid interface on nanostructure surface under external electric field[J]. Acta Physica Sinica, 2024, **73**(15): 118-125.
- [6] 马学虎, 陈晓峰. 固液界面接触角对膜状冷凝传热强化的初步分析[J]. 化工学报, 2003, **54**(6): 850-853.
Ma X H, Chen X F. Analysis of effect of solid-liquid contact angle on heat transfer enhancement of filmwise condensation[J]. CIESC Journal, 2003, **54**(6): 850-853.
- [7] Wang Z Y, Sun F Y, Liu Z H, et al. Regulated thermal boundary conductance between copper and diamond through nanoscale interfacial rough structures[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2023, **15**(12): 16162-16176.
- [8] 李海洋, 李凡, 王军, 等. 固液界面中热整流效应及其翻转[J]. 工程热物理学报, 2020, **41**(11): 2813-2817.
Li H Y, Li F, Wang J, et al. Reversed thermal Rectification effect in solid-liquid interface[J]. Journal of Engineering

- Thermophysics, 2020, **41**(11): 2813–2817.
- [9] Giri A, Hopkins P E. A review of experimental and computational advances in thermal boundary conductance and nanoscale thermal transport across solid interfaces[J]. Advanced Functional Materials, 2020, **30**(8): 1903857.
- [10] Li D C, Wang J H, Ding Y L, et al. Dynamic thermal management for industrial waste heat recovery based on phase change material thermal storage[J]. Applied Energy, 2019, **236**: 1168–1182.
- [11] Pop E. Energy dissipation and transport in nanoscale devices[J]. Nano Research, 2010, **3**(3): 147–169.
- [12] Roy A K, Farmer B L, Varshney V, et al. Importance of interfaces in governing thermal transport in composite materials: modeling and experimental perspectives[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2012, **4**(2): 545–563.
- [13] Kapitza P L. The study of heat transfer in helium II [M]//Helium 4. Amsterdam: Elsevier, 1971: 114–153.
- [14] 毕丽森, 刘斌, 胡恒祥, 等. 粗糙界面上纳米液滴蒸发模式的分子动力学研究[J]. 化工学报, 2023, **74**(S1): 172–178.
- Bi L S, Liu B, Hu H X, et al. Molecular dynamics study on evaporation modes of nanodroplets at rough interfaces[J]. CIESC Journal, 2023, **74**(S1): 172–178.
- [15] Jabbari F, Rajabpour A, Saedodin S, et al. Effect of water/carbon interaction strength on interfacial thermal resistance and the surrounding molecular nanolayer of CNT and graphene flake[J]. Journal of Molecular Liquids, 2019, **282**: 197–204.
- [16] Li F, Wang J, Xia G D, et al. Negative differential thermal resistance through nanoscale solid – fluid – solid sandwiched structures[J]. Nanoscale, 2019, **11**(27): 13051–13057.
- [17] 王军, 李海洋, 夏国栋. 固液界面热阻的温度依赖特性模拟研究[J]. 北京工业大学学报, 2024, **50**(7): 864–871.
- Wang J, Li H Y, Xia G D. Numerical study of the effects of system temperature on heat transfer at the solid–liquid interface[J]. Journal of Beijing University of Technology, 2024, **50**(7): 864–871.
- [18] Vo T Q, Kim B. Interface thermal resistance between liquid water and various metallic surfaces[J]. International Journal of Precision Engineering and Manufacturing, 2015, **16**(7): 1341–1346.
- [19] He Q X, Qin M M, Zhang H, et al. Encapsulated solid–liquid dual continuous pathways with low modulus and high thermal conductivity for dynamic target autonomous thermal management [J]. Nano Today, 2024, **59**: 102549.
- [20] Zeng Z Y, Zeng L, Wang R Z, et al. Molecular understanding of heat transfer in ionic–liquid–based electric double layers[J]. Journal of Thermal Science, 2023, **32**(1): 192–205.
- [21] Li H Y, Wang J, Xia G D. Thermal rectification induced by Wenzel – Cassie wetting state transition on nano–structured solid – liquid interfaces[J]. Chinese Physics B, 2023, **32**(5): 054401.
- [22] 张程宾, 许兆林, 陈永平. 粗糙纳通道内流体流动与传热的分子动力学模拟研究[J]. 物理学报, 2014, **63**(21): 263–270.
- Zhang C B, Xu Z L, Chen Y P. Molecular dynamics simulation on fluid flow and heat transfer in rough nano channels[J]. Acta Physica Sinica, 2014, **63**(21): 263–270.
- [23] Li H Y, Wang J, Xia G D. Negative differential thermal resistance effect in a nanoscale sandwiched system with nanostructured surfaces[J]. International Communications in Heat and Mass Transfer, 2023, **142**: 106605.
- [24] Dong M, Xu J L, Wang Y, et al. Effect of pressure and surface wettability on thermal resistance across solid – liquid interface in supercritical regime[J]. The Journal of Physical Chemistry C, 2024, **128**(9): 4024–4037.
- [25] Li Z G. Surface effects on friction–induced fluid heating in nanochannel flows[J]. Physical Review E, 2009, **79**(2): 026312.
- [26] Liu C, Fan H B, Zhang K, et al. Flow dependence of interfacial thermal resistance in nanochannels[J]. The Journal of Chemical Physics, 2010, **132**(9): 094703.
- [27] Rumelhart D E, Hinton G E, Williams R J. Learning representations by back–propagating errors[J]. Nature, 1986, **323** (6088): 533–536.
- [28] Deng C C, Qiu T, Liu P, et al. BP neural network regularized by wall temperature characteristics to reduce the ill–posedness of two–dimensional inverse heat transfer problems in rotating disk cavities[J]. International Journal of Thermal Sciences, 2024, **203**: 109145.
- [29] Zheng C M, Zhao C Y, Xiao W, et al. Falling film heat transfer from sensible convection to boiling on horizontal tubes: Database construction and machine learning–based heat transfer prediction [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2025, **245**: 127020.
- [30] Ma D L, Zhou T, Chen J, et al. Supercritical water heat transfer coefficient prediction analysis based on BP neural network[J]. Nuclear Engineering and Design, 2017, **320**: 400–408.
- [31] Yang Y T, Chen L H, Xiong Y, et al. Global sensitivity analysis based on BP neural network for thermal design parameters[J]. Journal of Thermophysics and Heat Transfer, 2021, **35**(1): 187–199.
- [32] Gu J H, Wang J, Qi C Y, et al. Medium–term heat load prediction for an existing residential building based on a wireless on–off control system[J]. Energy, 2018, **152**: 709–718.
- [33] Lee H W, Azid I H A. Neuro–genetic optimization of the diffuser elements for applications in a valveless diaphragm micropumps system[J]. Sensors, 2009, **9**(9): 7481–7497.
- [34] Zhang Q L, Ma H R, Yu Z Y, et al. Study on heat transfer characteristics of supercritical R134a in square microchannel based on GA–BP neural network[J]. Thermal Science and Engineering Progress, 2024, **51**: 102654.
- [35] Qin D, Su F H, Li Y C, et al. Radiator performance prediction based on multi–scale method and GA–BP neural network[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2026, **256**: 127922.
- [36] 颜建国, 郑书闽, 郭鹏程, 等. 基于GA–BP神经网络的超临界CO₂传热特性预测研究[J]. 化工学报, 2021, **72**(9): 4649–4657.
- Yan J G, Zheng S M, Guo P C, et al. Prediction of heat transfer characteristics for supercritical CO₂ based on GA–BP neural network[J]. CIESC Journal, 2021, **72**(9): 4649–4657.
- [37] Ma W W, Feng T, Su C Q, et al. Performance optimization of phase change energy storage combined cooling, heating and power system based on GA + BP neural network algorithm[J]. Journal of Energy Storage, 2024, **88**: 111653.
- [38] Xi L, Gao J M, Xu L, et al. Study on heat transfer performance of steam–cooled ribbed channel using neural networks and genetic algorithms[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2018, **127**: 1110–1123.
- [39] Liu D W, Liu C, Tang Y, et al. A GA–BP neural network regression model for predicting soil moisture in slope ecological protection[J]. Sustainability, 2022, **14**(3): 1386.

- [40] Li F, Sun P, Wu J L, et al. GA – BP prediction model for generator[J]. Processes, 2023, **11**(5): 1498.
automobile exhaust waste heat recovery using thermoelectric