

专题: 热传导及其相关交叉领域研究

基于分子动力学模拟与机器学习的 Janus 纳米流体导热特性分析*

冯毅波 齐凯 王军† 夏国栋

(北京工业大学机械与能源工程学院, 传热与能源利用北京重点实验室, 北京 100124)

(2025 年 12 月 19 日收到; 2026 年 2 月 27 日收到修改稿)

在悬浮液中添加纳米尺寸的金属、金属氧化物或非金属颗粒, 可制备具有较高导热性能的纳米流体. Janus 纳米流体是将表面性质经不对称修饰的 Janus 纳米颗粒添加到基础流体中所形成的纳米流体. 相较于普通纳米流体, Janus 纳米流体具有更高的热导率. 本文将平衡分子动力学模拟方法与机器学习方法相结合, 计算并分析了银、铜或铁的 Janus 纳米流体热导率. 基于分子动力学模拟计算所得 Janus 纳米流体热导率数据, 分别采用反向传播神经网络、支持向量回归、数据分组处理方法以及随机森林 4 种机器学习模型, 用于预测 Janus 纳米流体的热导率. 机器学习模型的输入参数包括纳米颗粒粒径、体积分数、Janus 纳米颗粒差异性参数、纳米流体密度、纳米颗粒质量以及颗粒材料的热导率. 通过对比各机器学习模型的预测结果与误差, 验证了机器学习预测 Janus 纳米流体热导率的可行性. 综合分析表明, 数据分组处理方法在预测 Janus 纳米流体的热导率中表现最优, 均方根误差为 $0.0058 \text{ W}/(\text{m}\cdot\text{K})$, 决定系数为 0.9844 , 具有较高的预测精度. 分析表明, 各参数对 Janus 纳米流体热导率的正向影响规律与已有研究结论相符合, 并得到了各影响参数的重要性排序.

关键词: 纳米流体, 机器学习, Janus 颗粒, 热导率, 分子动力学模拟

DOI: [10.7498/aps.75.20251743](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251743)CSTR: [32037.14.aps.75.20251743](https://cstr.net.cn/32037.14.aps.75.20251743)

1 引言

通过在基液中添加 $0\text{--}100 \text{ nm}$ 的非金属、金属或金属氧化物颗粒, 可制备出具有较高热导率的纳米流体^[1-5]. 即便在较低的体积分数下纳米流体也能实现较高的热导率提升, 在水基中添加粒径分别为 21 nm 的 TiO_2 颗粒或 120 nm 的 Al_2O_3 颗粒, 当体积分数为 8% 时纳米流体的热导率较纯水可分别提升 30% 和 20% ^[6]. 向乙二醇中添加体积分数为 1% 的 SiC 纳米颗粒, 在 $20 \text{ }^\circ\text{C}$ 条件下其热导率较基液乙二醇提升了 16.21% ^[7]. 由于具备较高的热导率, 纳米流体在太阳能系统、微通道冷却、电子设备冷却以及工业余热回收等多个领域都具有广

阔的应用前景^[8-13].

影响纳米流体热物性的因素主要包括纳米颗粒的粒径、体积分数以及纳米颗粒与基液本身的热物性等^[14-16]. 纳米流体的热导率随体积分数的增加而显著提高. 这是因为更高比例的纳米颗粒增强了颗粒与基液以及颗粒与颗粒之间的传热, 从而促进了热量传递^[17]. 此外, 当纳米颗粒的比表面积 (表面积与体积之比) 增大, 颗粒与基液之间的接触面积也对应增大, 增强了固-液界面的相互作用并形成更有序、更密集的界面层, 从而进一步提高纳米流体的热导率^[18-20]. 另一方面, 选用本身具有较高热导率的纳米颗粒, 也是制备具有优良导热性能纳米流体的有效途径之一^[21].

传统纳米流体中所使用的纳米颗粒通常为对

* 国家自然科学基金 (批准号: 12472268) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: jwang@bjut.edu.cn

称的球形结构. 若使纳米颗粒在形状或表面性质上呈现不对称性, 可构成 Janus 纳米颗粒. 由于这种非对称表面特性, 在基液中 Janus 颗粒展现出更优异的扩散性能, 增强了颗粒的布朗运动, 进而显著提高纳米流体的热导率. 随着颗粒形状或表面性质的不对称性增强, Janus 纳米流体的热导率提高更显著 [22-24]. 研究表明, 在相同体积分数条件下, 采用锥形或球形 Janus 纳米颗粒的纳米流体, 其热导率较基础液体分别提高 43.4% 和 33.7% [25].

纳米流体的热物性受到多种因素的复杂影响, 传统的实验与模拟方法难以高效地分析多参数大范围的耦合作用及其对纳米流体导热性能的影响机制, 从而限制了新材料的设计与优化过程. 机器学习算法凭借其强大的非线性拟合与高维数据处理能力, 已在材料发现、性能预测及结构分析等领域得到广泛应用 [26-35]. 近年来, 越来越多的研究采用不同的机器学习算法对金属及金属氧化物纳米流体的热物性进行预测, 常用的输入参数包括温度、纳米颗粒粒径、体积分数以及基液性质等, 这些研究验证了机器学习算法在该类问题中的可行性与准确性 [27-30]. 有研究以普朗特数、纳米颗粒粒径和温度作为输入参数, 可以精确预测螺旋管换热器中 CNT/水纳米流体的努塞尔数 [31]. 此外, 也有研究将基于多种纳米流体热物性数据训练的人工神经网络与商业仿真软件集成, 用于设计和评估以纳米流体为工质的板式换热器性能 [32].

鉴于机器学习方法在预测纳米流体热物性方面展现出良好的准确性, 本文结合分子动力学与机器学习对 Janus 纳米流体的热导率进行预测与分析研究. 首先, 基于平衡分子动力学模拟方法, 模拟计算了在不同粒径和体积分数条件下银、铜或铁的 Janus 纳米流体热导率. 随后, 将模拟计算结果作为机器学习的数据集, 选取纳米颗粒粒径 (d)、体积分数 (φ)、Janus 纳米颗粒差异性参数 (δ)、纳米流体密度 (ρ)、纳米颗粒质量 (m_p) 以及颗粒热导率 (κ_p) 作为输入参数, 分别采用反向传播神经网络 (back propagation neural network, BP)、支持向量回归 (support vector regression, SVR)、数据分组处理方法 (group method of data handling, GMDH) 以及随机森林 (random forest, RF) 4 种机器学习模型. 通过对比各模型对 Janus 纳米流体热导率的预测结果, 验证了机器学习方法在预测 Janus 纳米流体热导率的可行性与准确性, 筛选出

性能最优的预测模型, 并对不同输入参数在预测 Janus 纳米流体热导率的重要性和影响方向进行分析.

2 原理

2.1 分子动力学模拟

本文基于 LAMMPS (large-scale atomic/molecular massively parallel simulator) 软件, 建立了如图 1 所示的纳米流体分子动力学 (molecular dynamics, MD) 模拟系统. 该 MD 系统以纯氩作为基液, 中间悬浮一个球形 Janus 纳米颗粒. 纯氩的密度设定为 1418 kg/m^3 . 研究中分别选用银、铜或铁 3 种材质构建 Janus 纳米颗粒. 在 MD 系统中, Janus 纳米颗粒的半径 (r) 分别设置为 1 nm, 1.3 nm 和 1.5 nm. 通过调整液体体积可以实现纳米流体的不同体积分数. 当 r 为 1 nm 时, 在 φ 分别为 1%, 2% 和 5% 的条件下, 模拟盒子在 x , y 和 z 方向的长度尺寸 L 分别为 7.482 nm, 5.938 nm 和 4.375 nm, 系统中氩原子数量分别为 8944, 4471 和 1788 个. 当 r 为 1.3 nm 时, 在 φ 分别为 2%, 3.5% 和 5% 的条件下, 模拟盒子的长度尺寸 L 分别为 7.72 nm, 6.406 nm 和 5.688 nm, 氩原子数量分别为 9825, 5613 和 3929 个. 当 r 增至 1.5 nm 时, 在 φ 分别为 2%, 3.5% 和 5% 的条件下, 模拟盒子的长度尺寸 L 分别为 8.908 nm, 7.392 nm 和 6.563 nm, 氩原子数量分别为 15095, 8626 和 6037 个.

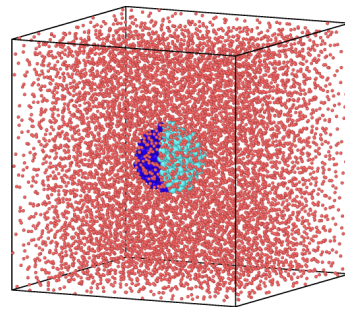


图 1 Janus 纳米流体系统模型

Fig. 1. Simulation system of Janus nanofluids.

在上述 MD 模拟系统中, 原子间的相互作用力由 L-J (Lennard-Jones) 势能函数进行描述 [36]:

$$U_{ij}(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (1)$$

式中, U_{ij} 为势函数, r_{ij} 为原子 i 和 j 之间的距离,

参数 ε 和 σ 分别代表相互作用势阱深度和势能为零时的距离. 固-液原子之间的势能参数 σ 和 ε 的选取遵循 L-B(Lorentz-Berthelot) 原则^[36]:

$$\sigma_{sl} = \frac{1}{2}(\sigma_{ss} + \sigma_{ll}), \quad (2)$$

$$\varepsilon_{sl} = \sqrt{\varepsilon_{ss}\varepsilon_{ll}}. \quad (3)$$

液体与液体、固体与固体和固体与液体所用到的势能参数如表 1 所示.

球形 Janus 纳米颗粒是由两个具有不同固液相互作用强度的半球体合成. 氩原子与 Janus 颗粒两侧球体的结合强度分别用 $\varepsilon_{sl, left} = c_{left}\varepsilon_{sl}$ 和 $\varepsilon_{sl, right} = c_{right}\varepsilon_{sl}$ 来表示. 本文借鉴参考文献^[22]中 Janus 纳米流体模型以确保本文模型的可靠性以及热导率计算结果的对比性. 在满足颗粒表面的平均固液结合强度不变的情况下, 通过改变参数 c_{left} 和 c_{right} 的大小, 即可构造出不同类型的 Janus 颗粒. 本文引入差异性参数 δ 来表示 Janus 颗粒的左右半球体与氩原子结合强度的差异. 其中, $\delta = (c_{right} - c_{left}) / (c_{right} + c_{left})$. 随着差异性参数的增大, 氩原子与 Janus 颗粒两侧半球体的结合强度差异更加明显, 结构的不对称性也随之增强. 本文考虑了如表 2 所示的 5 种类型 Janus 颗粒. 对于类型 I, Janus 颗粒的差异性参数 δ 为 0, 即该纳米颗粒是一个各向同性的颗粒^[22].

表 1 L-J 势函数的具体参数^[16]

Table 1. The specific parameters of Lennard-Jones potential function^[16].

原子类型	σ/nm	$\varepsilon/(\text{kcal}\cdot\text{mol}^{-1})$
Ar-Ar	0.3405	0.238
Cu-Ar	0.2871	1.499
Ag-Ar	0.3025	1.376
Fe-Ar	0.2863	1.710
Cu-Cu	0.2338	9.438
Ag-Ag	0.2644	7.954
Fe-Fe	0.2321	12.14

表 2 Janus 纳米流体参数^[22]

Table 2. The parameters for Janus nanofluids^[22].

Type	I	II	III	IV	V
c_{left}	1	0.8	0.6	0.4	0.2
c_{right}	1	1.2	1.4	1.6	1.8
δ	0	0.2	0.4	0.6	0.8

本文采用平衡分子动力学 (equilibrium molecular dynamics, EMD) 方法, 通过统计原子之间

的微观热流来计算 Janus 纳米流体的宏观热导率, 可由 Green-Kubo 公式计算:

$$\kappa(t) = \frac{1}{3Vk_B T^2} \int_0^t \langle J_q(0) J_q(t) \rangle dt, \quad (4)$$

式中, κ 是热导率, $\langle \rangle$ 表示系综平均, k_B 是玻尔兹曼常数, T 是系统温度, V 是系统盒子的体积, J_q 是微观热流矢量.

该模型在 x , y 和 z 三个方向均采用周期性边界条件, 时间步长设置为 4 fs 截断半径 R_c 设置为 2.8σ . 首先初始系统采用 NVT 系综运行 0.4 ns, 使用 Nose-Hoover 热浴使得系统的温度保持在 86 K, 从而使纯氩基液处于稳定的液态. 然后采用 NVE 系综运行 4 ns 进行数据采集, 通过长时间的平均来得到纳米流体的物性参数. 为提高模拟计算结果的准确性, 对同一数据点进行多次独立计算并对结果取算术平均值, 每一次运行之前改变系统中原子的初始速度. 在模拟计算 Janus 纳米流体的热导率之前, 为对本文所采用的模拟方法进行验证, 建立了一个具有 2048 个原子的纯氩流体, 使用方程 (4) 计算纯氩流体的热导率. 热流自相关函数和瞬时热导率如图 2(a), (b) 所示, 通过 MD 模拟计算的纯氩流体的热导率为 0.1341 W/(m·K), 这与实验值 (0.1320 W/(m·K))^[37] 和已有 MD 模拟结果 (0.1302 W/(m·K))^[22] 非常一致. 图 2(c), (d) 是采用分子动力学模拟计算具有普通铜纳米颗粒的纳米流体的热流自相关函数和瞬时热导率. 计算结果为 0.1436 W/(m·K), 该结果与已有分子动力学模拟结果 (0.1440 W/(m·K))^[38] 非常符合. 因此, 该模拟模型可以用于计算 Janus 纳米流体的热导率.

2.2 机器学习模型

2.2.1 反向传播神经网络

反向传播神经网络是一种基于误差反向传播算法训练的多层前馈神经网络, 其结构由输入层、隐藏层以及输出层组成^[39]. 输入层接收外部输入数据, 其神经元数量由输入参数的特征维度决定. 隐藏层可由单层或多层组成, 其位于输入层与输出层之间, 负责对输入数据进行特征提取和变换. 每个隐藏层包含一个非线性激活函数, 其输入为前一层所有神经元输出的加权并加上阈值项, 输出为该神经元的激活值. 输出层负责输出神经网络的最终结果, 其神经元数量取决于预测目标的维度. 在训

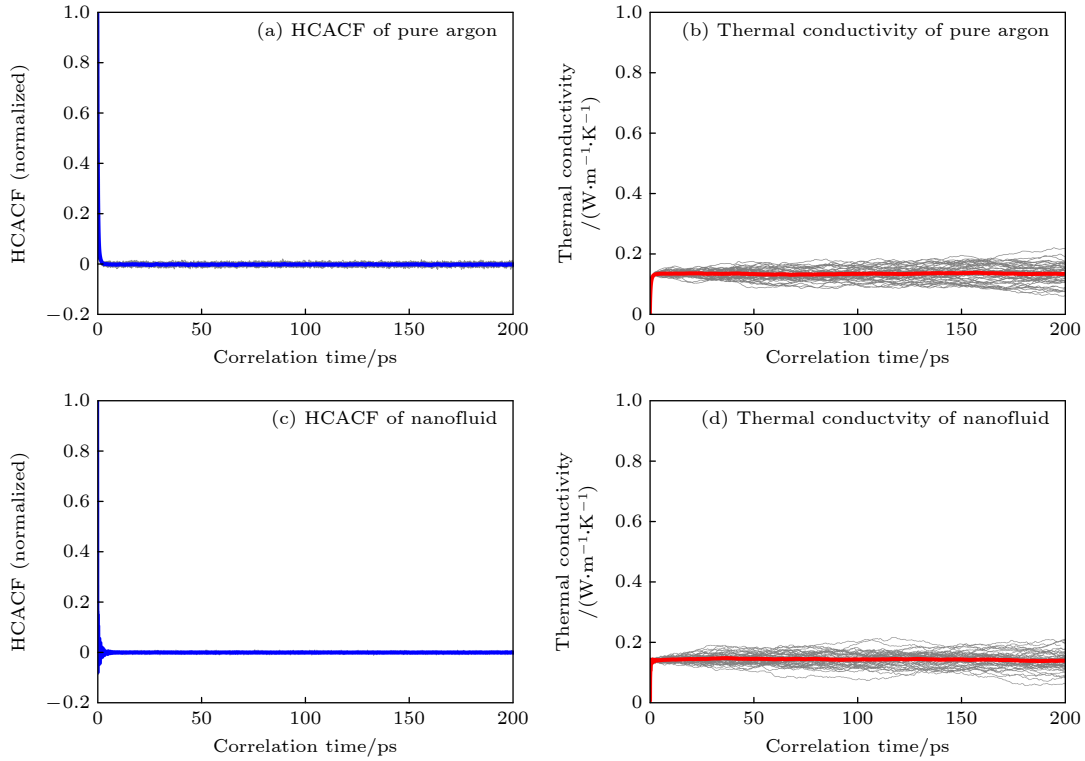


图 2 随时间变化的热流自相关函数图和瞬时热导率图 (a), (b) 纯氩; (c), (d) 纳米流体

Fig. 2. Heat flux autocorrelation function diagram and running thermal conductivity diagram with correlation time: (a), (b) Pure argon; (c), (d) nanofluids.

练过程中, 首先初始化神经网络结构、权值与阈值, 随后基于训练样本数据从第 1 层向后逐层计算各层神经元的输出. 网络通过将误差从输出层反向传播至输入层, 逐层计算各权值与阈值对总体误差的贡献, 并据此采用梯度下降等方法对权值和阈值进行迭代修正, 以逐步降低预测误差.

2.2.2 支持向量回归

支持向量机是一种基于结构风险最小化原则的监督学习模型^[40], 而支持向量回归是支持向量机在回归问题中的扩展形式. SVR 的核心思想是: 通过某种非线性映射将输入向量从低维空间映射到高维特征空间, 使得原本在低维空间中难以用线性模型拟合的复杂关系, 在高维空间中能够通过一个最优的线性回归超平面进行表达. 这种非线性映射通常是通过定义适当的内积函数(核函数)来实现的, 而常见的核函数有线性核、多项式核以及径向基核等^[41]. 因此, SVR 不仅在处理小样本、高维数据方面具有优势, 而且通过引入核函数和不敏感带参数, 使得 SVR 在回归任务中表现出良好的拟合能力和泛化性能.

2.2.3 数据分组处理方法

数据分组处理方法是一种面向复杂系统建模和预测的自组织算法, 其核心思想源于对生物神经元自组织机制的模拟, 该算法通过生成、筛选和组合多个简单初始模型, 逐步演化出结构更优的复杂模型^[42,43]. 与传统的神经网络相比, GMDH 具备自调节能力, 无需预先设定隐藏层和神经元数量, 从而降低了模型结构设计的主观性. GMDH 网络由多个层级组成, 每层包含若干个神经元, 每个神经元接收两个输入, 并通过二阶多项式传递函数建立输入变量之间的局部关系. 通过逐层组合前一层的输出作为新层的输入, GMDH 实现了对变量间复杂全局关系的自动化挖掘与建模.

2.2.4 随机森林

随机森林是由 Leo Breiman 提出的一种集成学习算法, 通过构建多棵决策树并集成它们的预测结果, 从而显著提升模型的泛化能力和预测鲁棒性^[44,45]. 基于原始数据集, RF 有放回地抽取样本并生成多个不同的训练子集, 每棵决策树随机选取一个子集进行训练. 未被抽样的样本构成袋外数据

集, 用于提供模型性能的无偏估计. 在决策树的节点分裂过程中, RF 随机抽取一个特征子集, 并按照方差最小化原则确定该子集的最佳分裂点. 该机制不仅增强了模型多样性, 也降低了模型过拟合的风险. 对于回归任务, RF 的最终输出为所有决策树预测值的算术平均值, 使模型在保持较低偏差的同时显著降低方差, 从而获得优异的泛化性能.

2.3 误差评估指标

为系统评估各机器学习模型在 Janus 纳米流体热导率预测的准确性, 本文采用决定系数 (R^2)、均方根误差 (RMSE)、平均绝对值偏差 (AARD, %)、平均绝对误差 (MAE) 作为预测模型的评价指标. 各项评价指标公式如下:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_{\text{exp},i} - y_{\text{pre},i})^2}, \quad (5)$$

$$\text{AARD} = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{(y_{\text{exp},i} - y_{\text{pre},i})}{y_{\text{exp},i}} \right|, \quad (6)$$

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_{\text{exp},i} - y_{\text{pre},i}|, \quad (7)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_{\text{exp},i} - y_{\text{pre},i})^2}{\sum_{i=1}^n (y_{\text{exp},i} - \bar{y})^2}, \quad (8)$$

式中, n 是样本量, $y_{\text{exp},i}$ 是真实值, $y_{\text{pre},i}$ 是预测值, \bar{y} 是所有真实值的平均值.

3 结果与讨论

基于 MD 模拟方法, 本文分别对银、铜或铁的 Janus 纳米流体热导率进行模拟计算, 结果如图 3

所示. 为方便与 Janus 纳米流体的热导率进行比较, 在图 3 中用虚线表示了纯氩基液的热导率参考值. 在固定纳米颗粒粒径的条件下, 纳米流体的热导率随体积分数的增大而逐渐增大, 该趋势与已有研究结论一致 [36]. 在给定纳米颗粒粒径和体积分数条件下, 随着差异性参数 δ 的增大, 三种 Janus 纳米流体的热导率均呈现增大趋势. 结果表明, 将 Janus 纳米颗粒引入纳米流体可以显著增强纳米流体的导热性能, 且增强效应与颗粒材料种类无关. 同时, 研究结果也证实, 较高热导率的纳米颗粒更有利于提升纳米流体的传热性能. 与普通纳米流体 ($\delta = 0$) 相比, 在 $r = 1 \text{ nm}$, $\varphi = 1\%$ 的条件下, 银、铜或铁的 Janus 纳米流体热导率最大分别提高 39.37%, 27.89% 和 23.49%.

径向分布函数 (RDF) 描述了粒子密度随距离的变化, 图 4 分别展示不同类型的 Janus 纳米流体中液体原子间 (Ar-Ar) 以及银纳米颗粒周围液体原子 (Ag-Ar) 的径向分布函数. 对图 4 分析可知, Ar-Ar 原子对与 Ag-Ar 原子对径向分布函数的第一个峰值分别位于 0.36 nm 和 0.33 nm 处, 且 Ar-Ar 的径向分布函数随着距离增大逐渐趋近于 1. 同时, 随着参数 δ 的增大, Ag-Ar 径向分布函数的第 1 个峰值略有下降, 这是由于 Janus 颗粒中固液结合强度较弱的一侧会削弱了其颗粒周围液体的吸附作用. 因此, Janus 颗粒的不对称表面性质对径向分布函数的影响可以忽略不计.

本文以图 3 的模拟计算结果为基础构建数据集, 并按不同比例划分为训练集与测试集, 分析训练集比例对 BP 预测性能的影响. 图 5(a), (c), (e) 分别是训练集比例在 50%, 60% 和 75% 时 BP 预

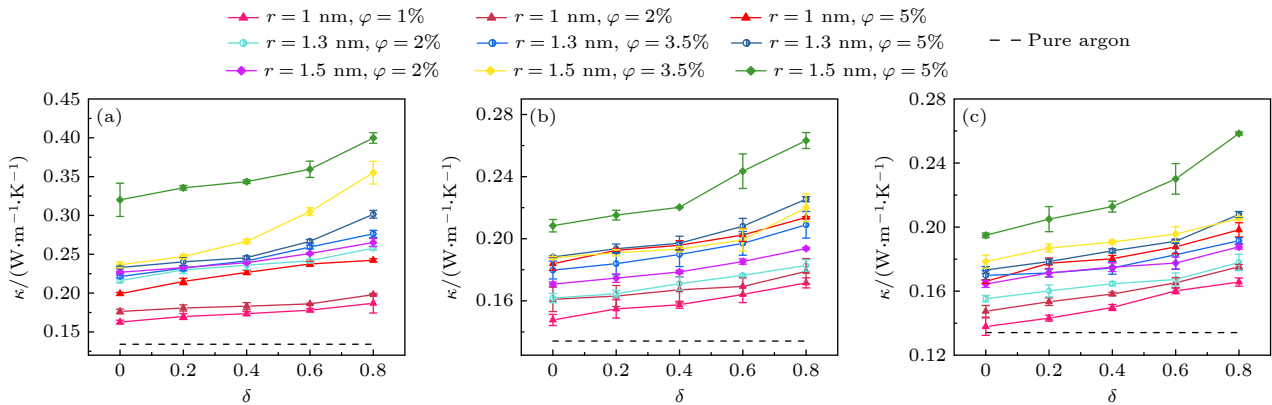


图 3 Janus 纳米流体热导率随差异性参数 δ 的变化 (a) 银纳米颗粒; (b) 铜纳米颗粒; (c) 铁纳米颗粒

Fig. 3. Variation of thermal conductivity of Janus nanofluids with the asymmetry parameter δ : (a) Silver nanoparticles; (b) copper nanoparticles; (c) iron nanoparticles.

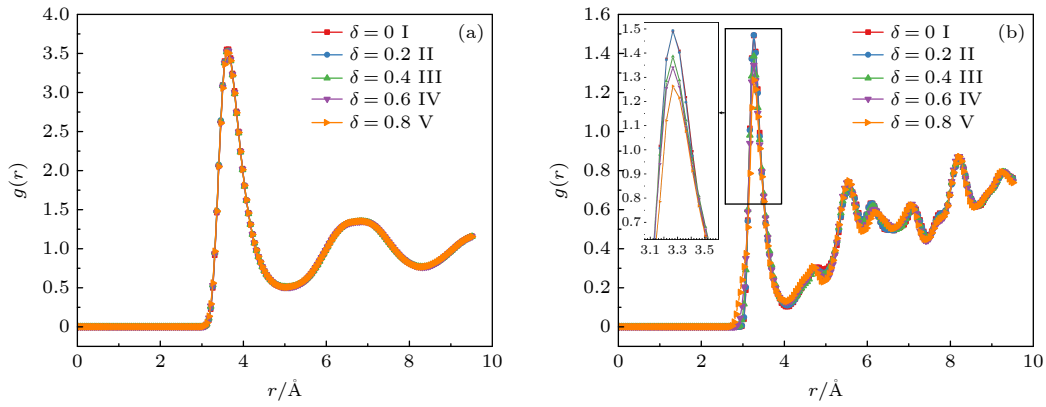


图 4 Janus 纳米流体中径向分布函数 (a) 氩-氩; (b) 银-氩

Fig. 4. Radial distribution function for different types of Janus nanofluids: (a) Argon-argon atoms; (b) silver-argon atoms.

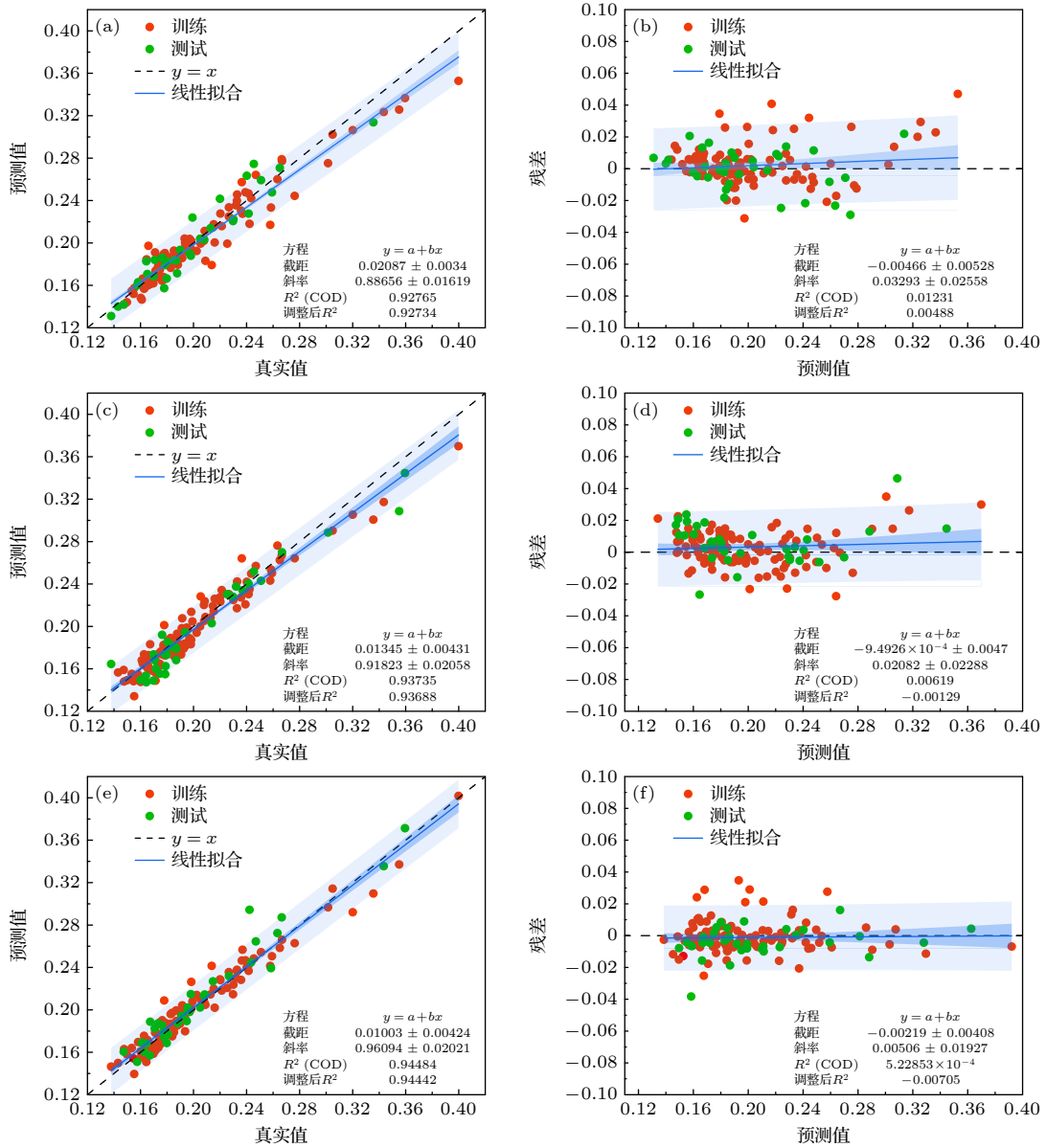


图 5 在不同训练集比例下 BP 预测结果的回归分析图与残差分布图 (a), (b) 50%; (c), (d) 60%; (e), (f) 75%

Fig. 5. Regression analysis plots and residual distribution plots of BP predicted result under different proportions of training sets:

(a), (b) 50%; (c), (d) 60%; (e), (f) 75%.

测结果的回归分析图. 在回归分析图中, 数据拟合直线越贴近 $y = x$ (理想回归线), 表明模型的预测精确度越高. 若数据点分布于回归线上方或下方, 则说明模型在相应数值区间存在高估或低估的偏差. 图 5(b), (d), (f) 分别是训练集比例分别在 50%, 60% 和 75% 时预测结果的残差分布图. 在残差分布图中, 数据拟合直线越接近 $y = 0$ (理想残差线), 且拟合直线的决定系数 R^2 值越接近 0 时, 则表明该模型拟合状态良好. 对残差分布图分析可知, 随着训练集比例的增大, 拟合直线的斜率与截距均逐渐趋近于 0, 表明预测偏差逐渐减小. 表 3 汇总了在 3 种训练集比例下 BP 预测结果的各项评价指标. 综合考虑预测准确性与模型拟合状态, 为保证预测结果可靠且避免过拟合, 本文选取以数据集的 75% 作为训练集, 其余 25% 作为测试集, 用以评估模型的预测精度与拟合状态.

机器学习预测精度与稳定性也受其超参数设置影响. 为确定各模型在预测 Janus 纳米流体热导率时的最佳超参数设置值, 本文采用 R^2 和 RMSE 作为评估指标, 综合分析在不同超参数组合下各模型的预测性能. 针对不同模型, 本文在不同超参数

组合条件下分别独立运行 300 次预测, 从中筛选出在所有数据集上 R^2 最高的 20 次结果, 分别计算其在训练集和测试集上的 R^2 值, 并取算术平均值作为该模型性能的综合表征. 同时, 基于全部数据的预测结果计算 RMSE, 并取其算术平均值, 以全面评估模型的预测准确性. 图 6 和图 7 分别展示了各模型在不同超参数下的 R^2 值和 RMSE 值. 需要说明的是, 对于 BP 神经网络, 图中标注“[m]”表示网

表 3 在不同训练集比例下 BP 统计误差分析
Table 3. Statistical error analysis of BP under different proportion of training sets.

比例		RMSE	AARD/%	MAE	R^2
50%	train	0.0139	4.3689	0.0097	0.9287
	test	0.0121	4.4955	0.0089	0.9044
	all	0.0130	4.4327	0.0093	0.9218
60%	train	0.0102	4.0402	0.0083	0.9492
	test	0.0145	5.7941	0.0110	0.9095
	all	0.0121	4.7417	0.0094	0.9321
75%	train	0.0101	3.8570	0.0078	0.9510
	test	0.0135	4.4646	0.0097	0.9215
	all	0.0111	4.0100	0.0083	0.9431

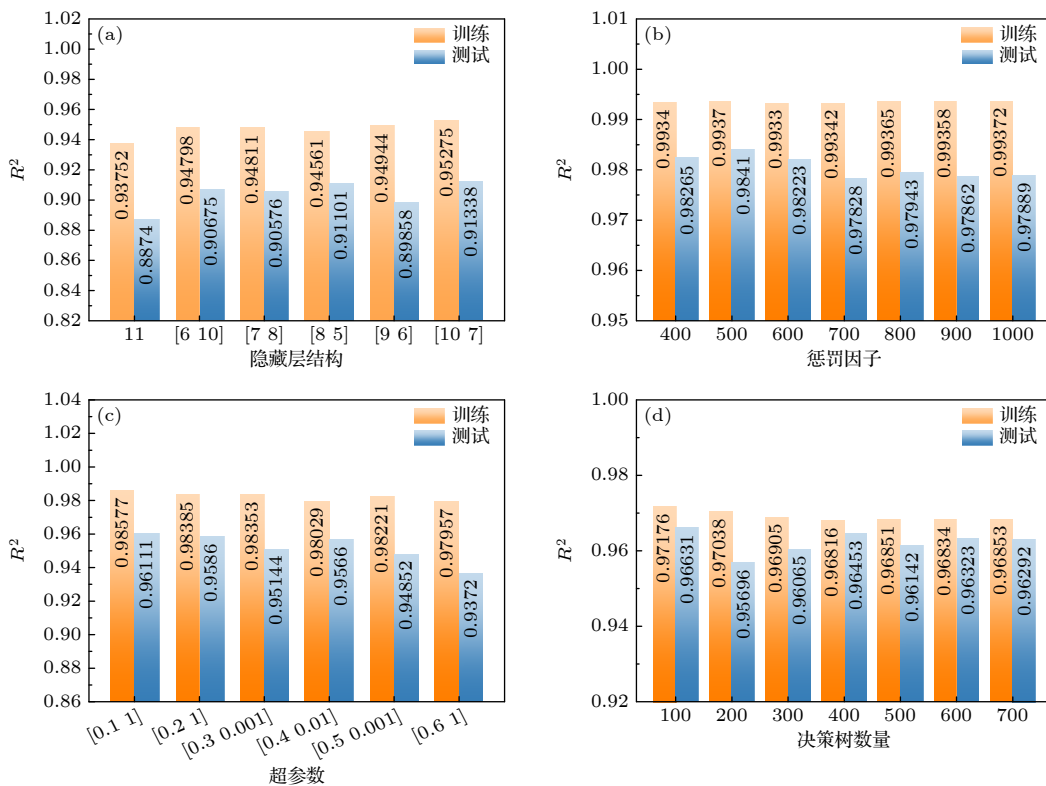


图 6 在不同超参数下各机器学习算法在训练集与测试集上的 R^2 值 (a) BP; (b) SVR; (c) GMDH; (d) RF

Fig. 6. The R^2 values of each machine learning algorithm on the training set and test set under different hyperparameters: (a) BP; (b) SVR; (c) GMDH; (d) RF.

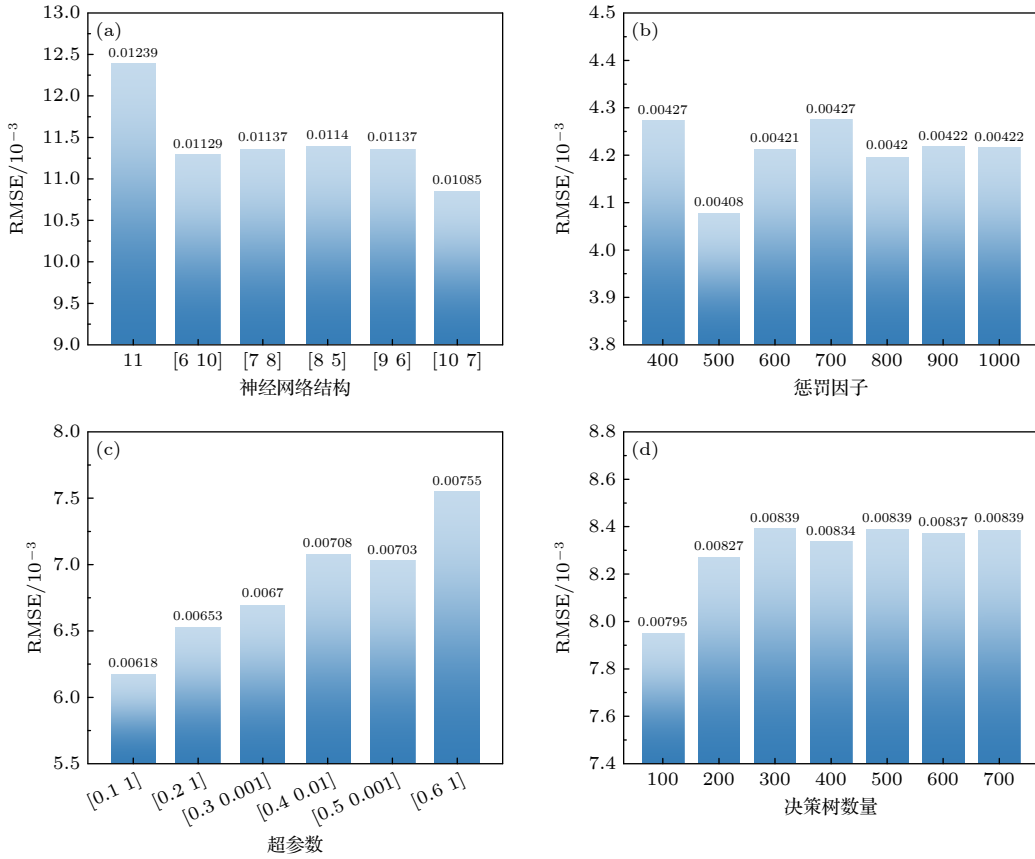


图 7 在不同超参数下各机器学习算法在所有集上的 RMSE 值 (a) BP; (b) SVR; (c) GMDH; (d) RF

Fig. 7. The RMSE values of each machine learning algorithm on all sets under different hyperparameters: (a) BP; (b) SVR; (c) GMDH; (d) RF.

表 4 机器学习的模型参数

Table 4. Model parameters for machine learning.

BP		SVR		GMDH		RF	
类型	参数	类型	参数	类型	参数	类型	参数
隐藏层结构	[10 7]	惩罚因子	500	每层最大神经元数	60	决策树数目	100
激活函数	tansig	核参数	2.2	最大层数	8	最小叶子数	1
训练函数	trainlm	不敏感损失参数	0.005	选择压力	0.1		
学习函数	learngdm	核函数	RBF	正则化参数	1		

络结构为单隐藏层, 隐藏层神经元的数量为 m ; “[p q]”表示双隐藏层, 其中第 1 隐藏层和第 2 隐藏层的神经元数量分别为 p 和 q ^[46]. 而对于 GMDH, 标注 “[w e]”中的 w 与 e 分别代表选择压力与正则化参数两个关键超参数. 通过对在不同超参数组合下 4 种模型的预测结果进行对比分析, 发现超参数取以下组合时, 各模型达到最佳预测精度与性能: BP 神经网络采用双隐藏层结构, 且神经元数量分别为 10 和 7; SVR 惩罚因子设置值为 500; GMDH 的选择压力与正则化参数分别为 0.1 和 1; RF 包含有 100 颗决策树. 本文所构建的 4 种机器学习算法的具体模型参数设置值如表 4 所示.

图 8 展示了 4 种模型在训练集与测试集上的最佳预测结果, 并与 MD 模拟计算结果进行对比. 图 9 进一步给出了模拟计算结果与各模型预测值之间的回归分析图. 结合图 8 与图 9 的综合分析可知, 4 种预测模型在训练集和测试集的预测结果与模拟值较为接近, 表现出良好的预测准确性. 为进一步评估各模型是否存在过拟合或欠拟合状态, 本文计算了真实值与预测值之间的残差, 结果如图 10 所示. 综合图 9 和图 10 分析可知, BP, SVR 和 GMDH 在预测 Janus 纳米流体热导率时未表现出明显的过拟合或欠拟合状态, 而 RF 模型有可能存在轻微过拟合状态.

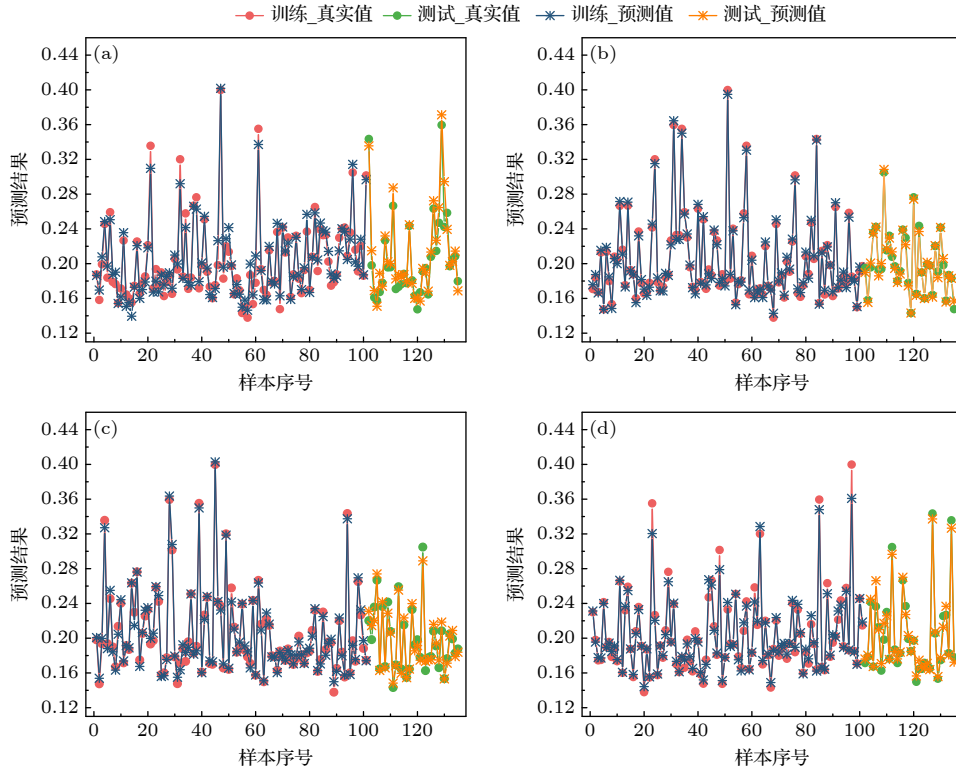


图 8 模拟计算结果与预测结果的数据对比 (a) BP; (b) SVR; (c) GMDH; (d) RF

Fig. 8. Comparison of simulation calculation results and predicted results: (a) BP; (b) SVR; (c) GMDH; (d) RF.

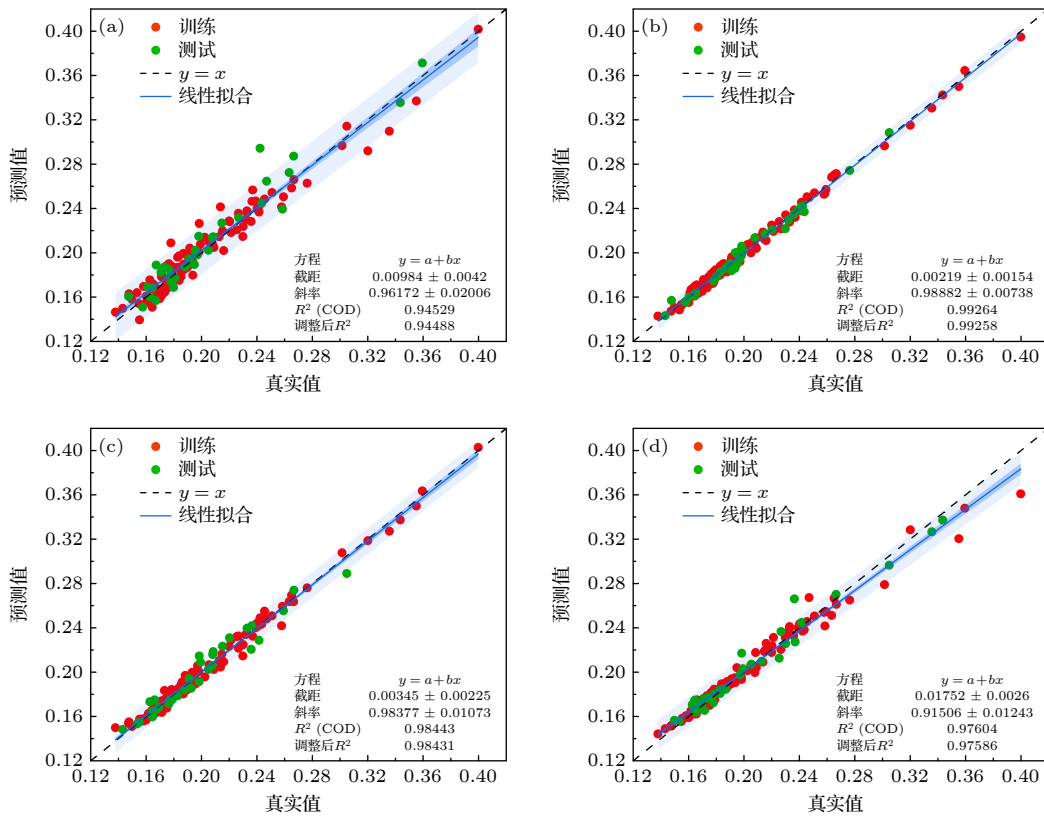


图 9 模拟计算结果与预测热导率的回归分析图 (a) BP; (b) SVR; (c) GMDH; (d) RF

Fig. 9. Regression analysis plots between simulated calculation results and predicted thermal conductivity: (a) BP; (b) SVR; (c) GMDH; (d) RF.

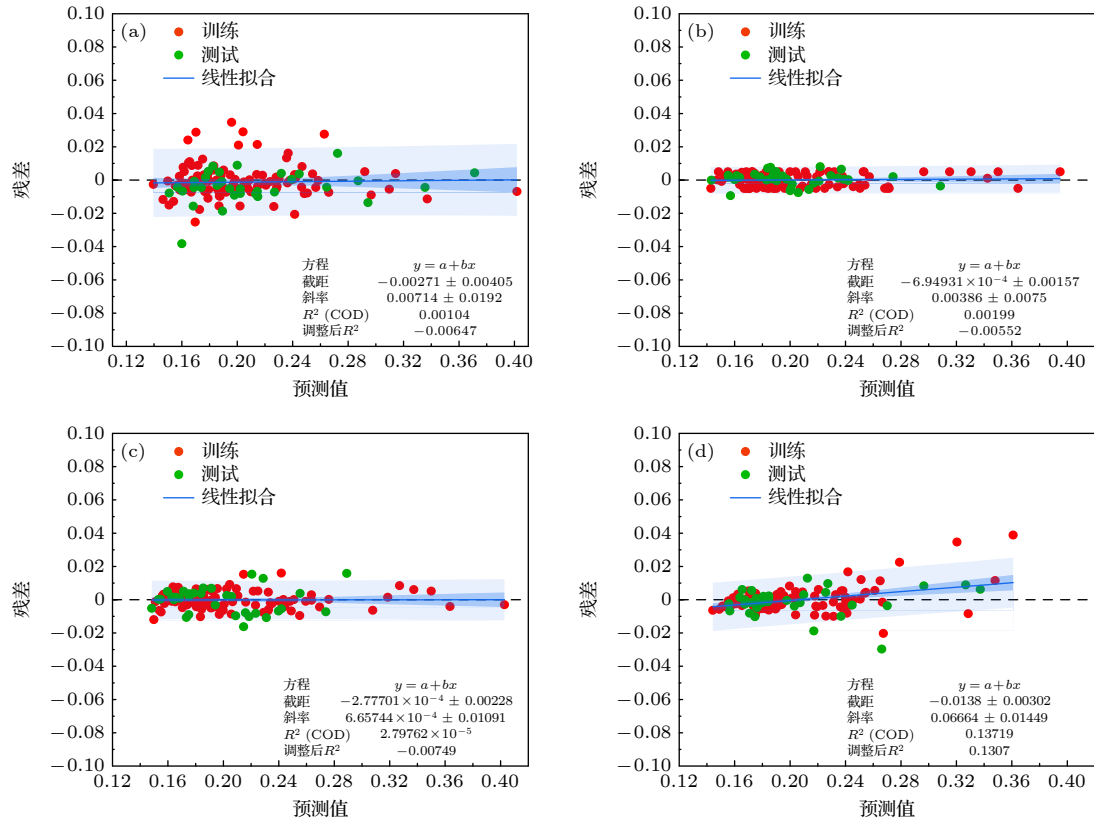


图 10 预测热导率的残差分布图 (a) BP; (b) SVR; (c) GMDH; (d) RF

Fig. 10. Residual distribution plots of predicted thermal conductivity: (a) BP; (b) SVR; (c) GMDH; (d) RF.

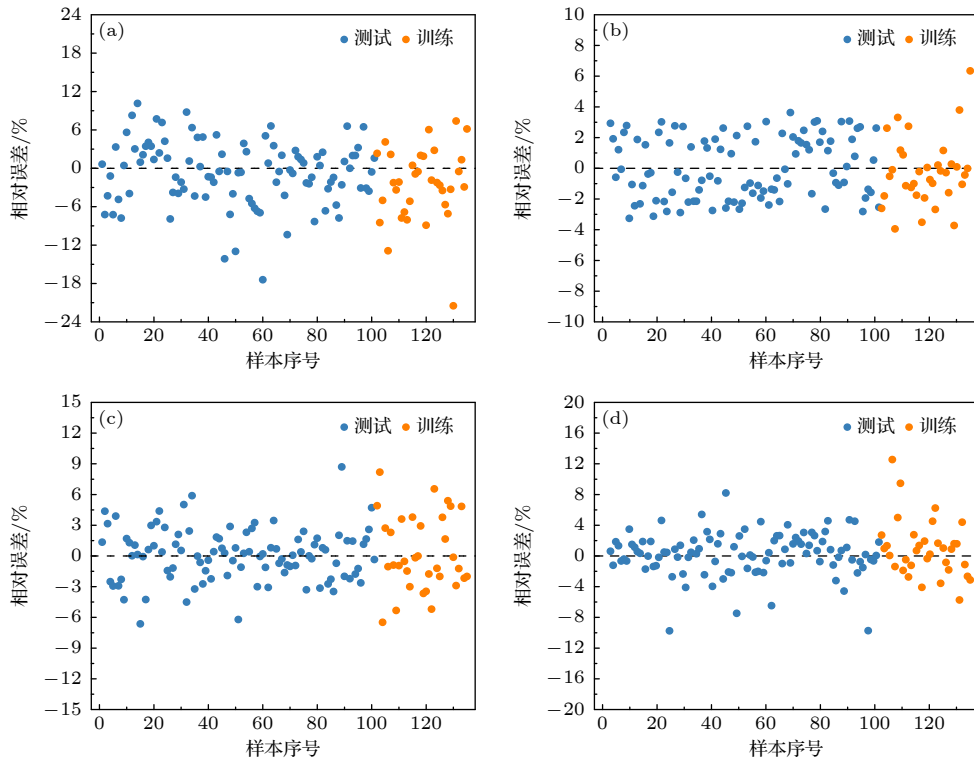


图 11 模拟计算结果与预测值的相对误差 (a) BP; (b) SVR; (c) GMDH; (d) RF

Fig. 11. Relative error between simulated calculation results and predicted values: (a) BP; (b) SVR; (c) GMDH; (d) RF.

图 11 展示了 4 种模型在训练集和测试集上预测热导率与模拟计算结果的相对误差分布. BP, SVR, GMDH 和 RF 预测结果的最大相对误差分别为 21.49%, 6.34%, 8.70% 和 12.55%. 表 5 进一步统计了各模型在训练集、测试集及全部数据集上的误差指标.

表 5 模型统计误差分析

Table 5. Statistical error analysis of models.

Model		RMSE	AARD/%	MAE	R^2
BP	train	0.0101	3.8570	0.0078	0.9510
	test	0.0135	4.4646	0.0097	0.9215
	all	0.0111	4.0100	0.0083	0.9431
SVR	train	0.0039	1.8070	0.0036	0.9937
	test	0.0041	1.5897	0.0031	0.9866
	all	0.0040	1.7523	0.0035	0.9926
GMDH	train	0.0051	1.9681	0.0040	0.9895
	test	0.0076	2.9481	0.0061	0.9551
	all	0.0058	2.2149	0.0045	0.9844
RF	train	0.0076	2.0645	0.0046	0.9724
	test	0.0081	2.6325	0.0056	0.9716
	all	0.0077	2.2075	0.0049	0.9722

为进一步评估机器学习算法预测 Janus 纳米流体热导率的准确性与泛化能力, 采用 4 种预测模型分别对银、铜和铁的 Janus 纳米流体在 $r = 1 \text{ nm}$, $\varphi = 3\%$ 以及 $r = 1 \text{ nm}$, $\varphi = 6\%$ 的条件下的热导率进行预测, 并将预测结果与 MD 模拟计算结果进行对比. 机器学习预测与模拟计算的对比图和评价指标如图 12 所示. 对比结果显示, GMDH 在验证集中表现出良好的预测稳定性. 综合分析表明, 在预测 Janus 纳米流体热导率中 GMDH 表现出良好的预测准确性.

在机器学习模型中, 预测目标参数的准确性不仅取决于模型结构及其超参数设置, 输入参数的选择也对预测精度具有重要影响. 为分析在机器学习预测 Janus 纳米流体热导率中不同输入参数的影响机制, 本文采用基于合作博弈论 Shapley 值的 SHAP(SHapley Additive exPlanations) 框架进行可解释性分析, 以量化各输入参数对预测结果的贡献程度. SHAP 框架能够在保持可加性与一致性的基础上, 从全局与局部两个层面为模型预测提供可解释的特征重要性度量 [47]. 经 300 次独立模拟,

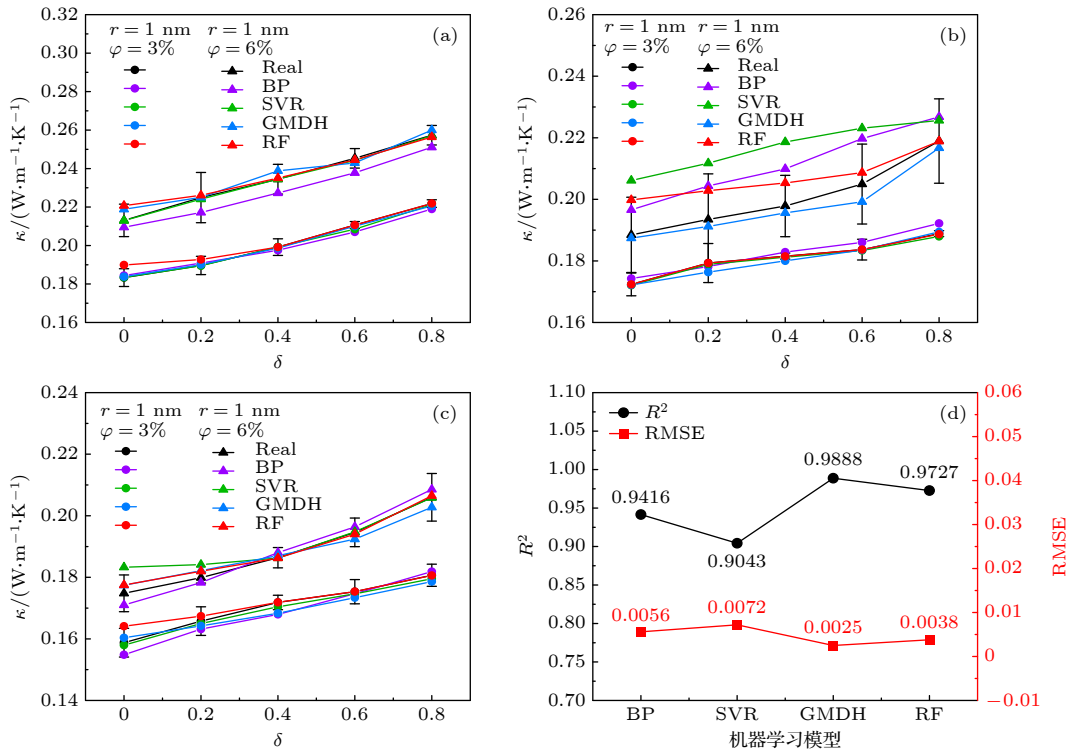


图 12 各机器学习算法的验证结果以及评价指标 (a) 银 Janus 纳米流体热导率真实值与预测值; (b) 铜 Janus 纳米流体热导率真实值与预测值; (c) 铁 Janus 纳米流体热导率真实值与预测值; (d) 机器学习在验证集上 R^2 值与 RMSE 值

Fig. 12. Validation results and evaluation metrics for each machine learning algorithm: (a) True vs. predicted thermal conductivity values for Ag Janus nanofluid; (b) true vs. predicted thermal conductivity values for Cu Janus nanofluid; (c) true vs. predicted thermal conductivity values for Fe Janus nanofluid; (d) R^2 values and RMSE values of each machine learning models on the validation.

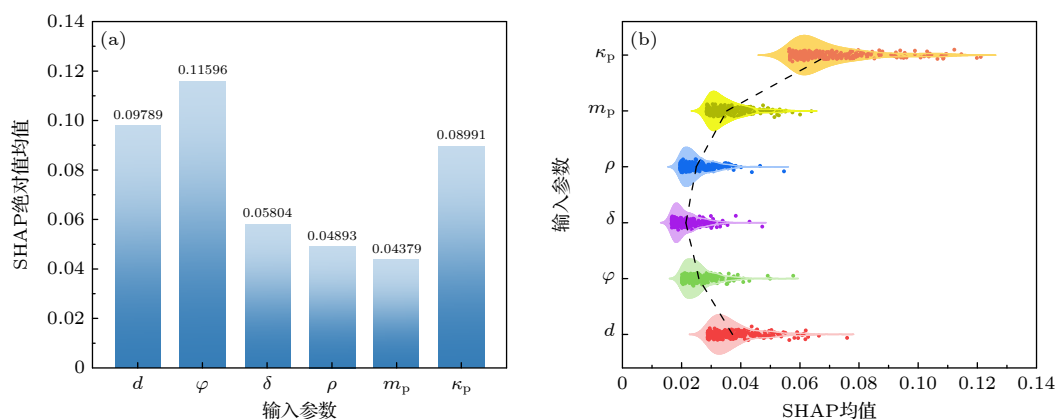


图 13 采用 SHAP 框架对不同输入参数在热导率预测中的重要性及影响方向分析 (a) 不同输入参数对应的 SHAP 绝对值均值; (b) 不同输入参数对应的 SHAP 均值

Fig. 13. Analysis of the importance and direction of influence of different input parameters in thermal conductivity prediction using the SHAP framework: (a) Mean absolute SHAP values corresponding to different input parameters; (b) mean SHAP values corresponding to different input parameters.

各输入参数的 SHAP 计算结果如图 13 所示, 分析表明各输入参数对 Janus 纳米流体热导率预测的影响在重要性上存在差异. 由图 13(a) 中各输入参数的 SHAP 绝对值均值分析可知, 在机器学习预测 Janus 纳米流体热导率中输入参数特征重要性的排序依次为: $\varphi > d > \kappa_p > \delta > \rho > m_p$. 同时, 各参数 SHAP 均值分布表明, 机器学习在预测 Janus 纳米流体热导率时各参数均呈现正向促进作用. 其中, 纳米颗粒体积分数、颗粒粒径以及纳米颗粒材料热导率等参数对纳米流体导热性能的促进作用比较明显. 提高纳米流体的体积分数能够增强颗粒与基液以及颗粒与颗粒之间的传热作用, 促进热量在体系内的传递^[36]; 在一定尺寸范围内, 增大金属纳米颗粒的尺寸有助于其本征导热性能, 并减弱界面散射效应, 从而对纳米流体热导率产生正向影响^[48]; 高热导率纳米颗粒通过增强纳米颗粒的布朗运动及促进固液界面吸附层形成, 在基液中形成有效导热网络, 从而显著提高纳米流体热导率^[21]; Janus 纳米颗粒差异性参数的增加会强化其非对称表面特性, 进一步增强布朗运动并提高颗粒与基液分子的碰撞频率, 进而增强热传导性能^[22,25]. 本研究通过 SHAP 分析所揭示的各参数对 Janus 纳米流体热导率的正向影响规律, 与上述多物理参数影响的已有研究结论一致.

4 结 论

本文基于平衡分子动力学模拟方法, 模拟了 Janus 纳米流体在不同粒径和体积分数条件下的

热导率. 以分子动力学模拟计算结果作为数据集, 分别采用反向传播神经网络、支持向量回归、分组数据处理方法和随机森林 4 种机器学习模型, 用于预测 Janus 纳米流体的热导率. 对比在不同训练集比例下反向传播神经网络的预测性能, 选取以数据集的 75% 作为训练集, 以确保预测结果的准确性以及模型拟合状态良好. 综合分析 4 种预测模型的预测效果, 发现 GMDH 模型表现出最优的预测性能, 其 R^2 值和 RMSE 值分别为 0.9844 和 0.0058 W/(m·K), 在误差允许范围内表现出优异的精度与泛化能力. 最后, 本文采用 SHAP 框架对不同输入参数的特征重要性进行分析, 结果表明各参数对 Janus 纳米流体热导率的正向影响规律与已有研究结论相符合, 并得到了各影响参数的重要性排序. 本研究不仅验证了机器学习方法在 Janus 纳米流体热导率预测中的可行性与稳定性, 也为复杂结构纳米流体材料的性能建模与快速评估提供了思路和方法支持.

参考文献

- [1] Choi S U S, Zhang Z G, Yu W, Lockwood F E, Grulke E A 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 2252
- [2] Liu M S, Lin M C, Tsai C Y, Wang C C 2006 *Int. J. Heat Mass Transf.* **49** 3028
- [3] Han X F, Lu L W, Yan S Y, Yang X H, Tian R, Zhao X Y 2021 *J. Therm. Sci.* **30** 1581
- [4] Ishii K, Ogiyama T, Fumoto K, Nishina Y 2024 *Appl. Phys. Lett.* **125** 23104
- [5] Hou X, Wang M J, Fu L, Chen Y P, Jiang N, Lin C, Wang Z W, Yu J H 2018 *Nanoscale* **10** 13004
- [6] Yiamsawasd T, Dalkilic A S, Wongwiswes S 2012 *Thermochim. Acta* **545** 48

- [7] Li X K, Zou C J, Lei X Y, Li W L 2015 *Int. J. Heat Mass Transf.* **89** 613
- [8] Elsheikh A H, Sharshir S W, Mostafa M E, Essa F A, Ahmed Ali M K 2018 *Renew. Sust. Energ. Rev.* **82** 3483
- [9] Rapp B, Hussam A 2023 *J. Appl. Phys.* **133** 134302
- [10] Dai J H, Zhai Y L, Li Z H, Wang H 2024 *J. Mol. Liq.* **400** 124518
- [11] Liu W W, Wang J, Xia G D, Li Z G 2023 *Phys. Fluids* **35** 083316
- [12] Liu W W, Cui J, Wang J, Xia G D, Li Z G 2023 *Phys. Fluids* **35** 032004
- [13] Tong M 2025 *Appl. Therm. Eng.* **278** 127035
- [14] Kamalvand M, Karami M 2013 *Int. J. Therm. Sci.* **65** 189
- [15] Jabbari F, Rajabpour A, Saedodin S 2017 *Chem. Eng. Sci.* **174** 67
- [16] Cui W Z, Shen Z J, Yang J G, Wu S H, Bai M L 2014 *RSC Adv.* **4** 55580
- [17] Lu W Q, Fan Q M 2008 *Eng. Anal. Bound. Elem.* **32** 282
- [18] Mirmohammadi S A, Behi M, Gan Y X, Shen L M 2019 *Phys. Rev. E* **99** 43109
- [19] Zhang R H, Zhang X H, Qing S, Luo Z M, Liu Y Q 2023 *Int. J. Heat Mass Transf.* **207** 124031
- [20] Wang J, Cui X, Xia G D 2023 *J. Beijing Univ. Tech.* **49** 1116 (in Chinese) [王军, 崔鑫, 夏国栋 2023 北京工业大学学报 **49** 1116]
- [21] Hwang Y J, Ahn Y C, Shin H S, Lee C G, Kim G T, Park H S, Lee J K 2006 *Curr. Appl. Phys.* **6** 1068
- [22] Cui X, Wang J, Xia G D 2022 *Nanoscale* **14** 99
- [23] Hou J M, Shao C, Huang L Z, Du J Y, Wang R J 2023 *Powder Technol.* **430** 119005
- [24] Li K R, Wang J, Xia G D 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 064701 (in Chinese) [李康睿, 王军, 夏国栋 2025 物理学报 **74** 064701]
- [25] Li K R, Wang J, Xia G D 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 174 (in Chinese) [李康睿, 王军, 夏国栋 2025 物理学报 **74** 174]
- [26] Wang H L, Chen X Y 2022 *Ind. Eng. Chem. Res.* **61** 14711
- [27] Barati-Harooni A, Najafi-Marghmaleki A, Mohebbi A, Mohammadi A H 2017 *J. Mol. Liq.* **241** 1079
- [28] Godasiaei S H, Kamali H A 2025 *Microgravity Sci. Technol.* **37** 6
- [29] Alade I O, Abd Rahman M A, Saleh T A 2019 *Nano-Struct. Nano-Objects* **17** 103
- [30] Fadhl B M, Makhdoum B M, Ma'arif A, Suwarno I, Hamzah H, Salem M 2023 *Energy Rep.* **9** 5397
- [31] Baghban A, Kahani M, Nazari M A, Ahmadi M H, Yan W 2019 *Int. J. Heat Mass Transf.* **128** 825
- [32] Kamsuwan C, Wang X L, Piumsomboon P, Pratumwal Y, Otarawanna S, Chalermssinsuwan B 2023 *Int. J. Therm. Sci.* **184** 107995
- [33] Shan Q R, Ding Y, Wang H W, Zhou X Z, Xu Y Y, Wang J, Xia G D 2025 *J. Eng. Thermophys.* **46** 982 (in Chinese) [单庆茹, 丁宇, 王鹤文, 周欣智, 许云宇, 王军, 夏国栋 2025 工程热物理学报 **46** 982]
- [34] Zhang Q, Tan W, Ning Y Q, Nie G Z, Cai M Q, Wang J N, Zhu H P, Zhao Y Q 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 230201 (in Chinese) [张桥, 谭薇, 宁勇祺, 聂国政, 蔡孟秋, 王俊年, 朱慧平, 赵宇清 2024 物理学报 **73** 230201]
- [35] Liu H L, He H X, Zeng C, Wu K, Cheng Y H, Xiao B 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 198201 (in Chinese) [刘浩良, 何骅轩, 曾超, 吴锴, 成永红, 肖冰 2025 物理学报 **74** 198201]
- [36] Sarkar S, Selvam R P 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 074302
- [37] Müller-Plathe F 1997 *J. Chem. Phys.* **106** 6082
- [38] Li L, Zhang Y W, Ma H B, Yang M 2010 *J. Nanopart. Res.* **12** 811
- [39] Rumelhart D E, Hinton G E, Williams R J 1986 *Nature* **323** 533
- [40] Burges C J C 1998 *Data Min. Knowl. Discov.* **2** 121
- [41] Alade I O, Oyehan T A, Popoola I K, Olatunji S O, Bagudu A 2018 *Adv. Powder Technol.* **29** 157
- [42] Ivakhnenko A G 1978 *Technol. Forecast. Soc. Chang.* **12** 213
- [43] Ramezanizadeh M, Alhuyi Nazari M 2019 *Int. J. Low-Carbon Technol.* **14** 468
- [44] Breiman L 2001 *Mach. Learn.* **45** 5
- [45] Gholizadeh M, Jamei M, Ahmadianfar I, Pourrajab R 2020 *Chemometrics Intell. Lab. Syst.* **201** 104010
- [46] Tafarroj M M, Mahian O, Kasaeian A, Sakamatapan K, Dalkilic A S, Wongwises S 2017 *Int. Commun. Heat Mass Transf.* **86** 25
- [47] Chen H, Lundberg S M, Lee SI 2022 *Nat. Commun.* **13** 4512
- [48] Warriar P, Teja A 2011 *Nanoscale Res. Lett.* **6** 247

SPECIAL TOPIC—Heat conduction and its related interdisciplinary areas

Predicting the thermal conductivity of Janus nanofluids based on molecular dynamics simulation and machine learning*

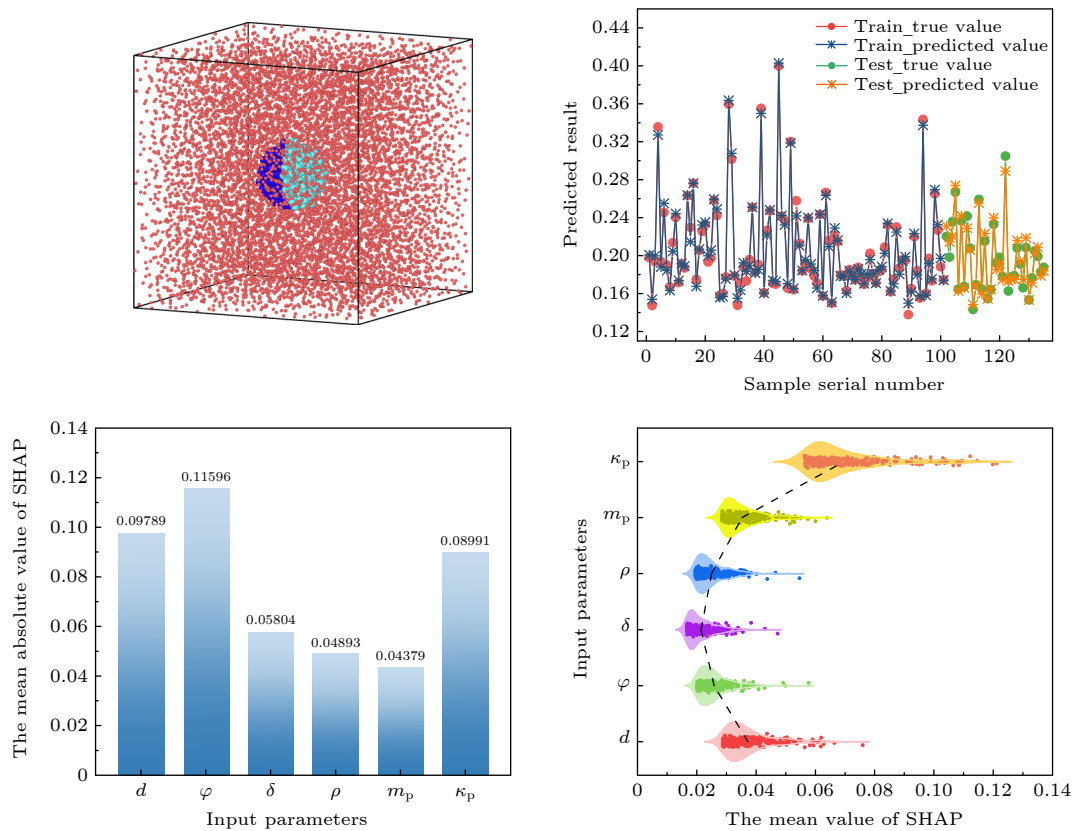
FENG Yibo QI Kai WANG Jun[†] XIA Guodong

(Beijing Key Laboratory of Heat Transfer and Energy Conservation, College of Mechanical and Energy Engineering, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China)

(Received 19 December 2025; revised manuscript received 27 February 2026)

Abstract

Janus nanofluids are formed by dispersing Janus nanoparticles (particles with asymmetrically modified surface properties) into a base fluid, which is reported to have a high thermal conductivity owing to excellent diffusion properties of the Janus particles. The thermal conductivity of nanofluids can be influenced by multiple parameters, including nanoparticle size, density, volume fraction, and others. It is a significant challenge to analyze the influence of these parameters on the thermal conductivity of nanofluids using traditional experimental and simulation approaches. Machine learning offers a powerful approach to handling nonlinear relationships and high-dimensional data. In this work, equilibrium molecular dynamics simulations are employed



* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12472268).

[†] Corresponding author. E-mail: jwang@bjut.edu.cn

to calculate the thermal conductivity of Janus nanofluids containing silver, copper, or iron Janus nanoparticles. Based on the molecular dynamics simulation results, four machine learning models—Backpropagation Neural Network, Support Vector Regression, Group Method of Data Handling, and Random Forest—are applied to predict and analyze the thermal conductivity of Janus nanofluids. The input parameters for the machine learning models include nanoparticle size, nanofluid density, volume fraction, Janus nanoparticle asymmetry parameter, nanoparticle mass, and the thermal conductivity of the bulk nanoparticle material. It is found that the machine learning methods can effectively predict the thermal conductivity of Janus nanofluids. Among these machine learning models, Group Method of Data Handling has the most accurate predictions, with a root mean square error of 0.0058 W/(m·K) and a coefficient of determination of 0.9844. Feature importance analysis using SHAP for different input parameters indicates that the positive effects of each parameter are consistent with existing findings in open literature. This work validates the feasibility and robustness of the machine learning approach for predicting the thermal conductivity of Janus nanofluids and provides a valuable methodology for investigating and rapidly assessing Janus nanofluid thermal conductivity.

Keywords: nanofluids, machine learning, Janus particle, thermal conductivity, molecular dynamics simulation

DOI: [10.7498/aps.75.20251743](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251743)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251743](https://cstr.net.cn/result.do?cid=32037.14.aps.75.20251743)

基于分子动力学模拟与机器学习的Janus纳米流体导热特性分析

冯毅波 齐凯 王军 夏国栋

Predicting the thermal conductivity of Janus nanofluids based on molecular dynamics simulation and machine learning

FENG Yibo QI Kai WANG Jun XIA Guodong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 110001 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251743

CSTR: 32037.14.aps.75.20251743

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251743>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

锥形Janus颗粒强化纳米流体导热特性的模拟

Simulation study on thermal conductivity of conical Janus particles reinforced nanofluids

物理学报. 2025, 74(19): 194701 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250759>

基于羟基化Janus碳纳米管的纳米流体导热特性

Thermal conductivity of nanofluids based on hydroxylated Janus carbon nanotubes

物理学报. 2025, 74(6): 064701 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241657>

生物分子模拟中的机器学习方法

Machine learning in molecular simulations of biomolecules

物理学报. 2023, 72(24): 248708 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20231624>

机器学习的量子动力学

Quantum dynamics of machine learning

物理学报. 2025, 74(6): 060701 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20240999>

蛋白质计算中的机器学习

Machine learning for *in silico* protein research

物理学报. 2024, 73(6): 069301 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231618>

金刚石/环氧树脂复合物热导率的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of thermal conductivity of diamond/epoxy resin composites

物理学报. 2023, 72(16): 168102 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222270>