

基于混合机器学习模型的固废基回填材料导热性能预测研究

赵宇乐^{1,2}, 孙悦¹, 夏学敏^{1,2*}

¹上海理工大学环境与建筑学院, 上海

²吉林大学地下水资源与环境教育部重点实验室, 吉林 长春

收稿日期: 2026年3月27日; 录用日期: 2026年4月22日; 发布日期: 2026年4月27日

摘要

本研究针对地源热泵固废基回填材料导热性能优化中传统实验方法存在的局限性, 提出了融合双向长短期记忆网络与智能优化算法的混合机器学习模型。通过系统分析多种固废材料与石墨掺量的耦合影响, 利用双向传播机制同步捕捉材料组分的导热衰减与补偿效应, 结合智能算法实现模型参数自适应优化, 建立了高精度的导热性能预测模型。研究表明, 该模型在预测精度和泛化能力方面均表现出显著优势, 同时通过可解释性分析清晰揭示了各组分对导热性能的影响规律, 为固废基回填材料的性能预测与优化设计提供了有效的预测模型, 对推动工业固废资源化利用和地源热泵技术发展具有重要价值。

关键词

地源热泵, 固废基回填材料, 导热系数, 双向长短期记忆网络, 智能优化算法

Prediction of Thermal Conductivity in Solid Waste-Based Backfill Materials Using a Hybrid Machine Learning Model

Yule Zhao^{1,2}, Yue Sun¹, Xuemin Xia^{1,2*}

¹School of Environment and Architecture, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai

²Key Laboratory of Groundwater Resources and Environment (Jilin University), Ministry of Education, Changchun Jilin

Received: March 27, 2026; accepted: April 22, 2026; published: April 27, 2026

*通讯作者。

文章引用: 赵宇乐, 孙悦, 夏学敏. 基于混合机器学习模型的固废基回填材料导热性能预测研究[J]. 建模与仿真, 2026, 15(4): 159-171. DOI: 10.12677/mos.2026.154061

Abstract

To address the limitations of traditional experimental methods in optimizing the thermal conductivity of solid waste-based backfill materials for ground source heat pumps, this study proposes a hybrid machine learning model integrating Bidirectional Long Short-Term Memory (BiLSTM) networks with intelligent optimization algorithms. By systematically analyzing the coupling effects of various solid waste materials and graphite content, the model utilizes bidirectional propagation to simultaneously capture the thermal attenuation induced by solid waste components and the compensation effects of graphite. Through intelligent optimization algorithms, adaptive tuning of model parameters is achieved, resulting in a high-precision predictive model for thermal performance. The results demonstrate that the proposed model exhibits significant advantages in both prediction accuracy and generalization capability. Furthermore, interpretability analysis clearly reveals the influence patterns of different components on thermal conductivity. This study provides an effective predictive model for the performance prediction and optimal design of solid waste-based backfill materials, contributing significantly to the resource utilization of industrial solid waste and the advancement of ground source heat pump technology.

Keywords

Ground Source Heat Pump, Solid Waste-Based Backfill Materials, Thermal Conductivity, Bidirectional Long Short-Term Memory (BiLSTM), Intelligent Optimization Algorithms

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

地源热泵系统的热交换效率本质上受地下传热过程的制约。作为钻孔换热器与周围岩土体间的关键传热介质，回填材料的热物理性质，尤其是导热系数，直接决定了系统与地质环境间的能量传递效率。在导热性能的预测与评估方面，传统数值方法(如有限元法[1])与解析模型(如线源理论[2])已得到广泛应用，并通过热响应测试[3]等手段验证了回填材料热物性对模型精度的重要影响。然而，这些方法难以精确刻画材料配比与性能间复杂的非线性关系。尽管基于反问题算法(如遗传算法[4]、共轭梯度法[5])的导热系数辨识方法取得了进展，并展现了较高的可靠性，但其计算成本高昂且严重依赖于特定的边界条件与实验数据。

近年来，机器学习技术为材料性能预测提供了新方法。研究表明，智能算法在处理此类高维非线性问题上具有显著优势。例如，BP神经网络在预测混凝土等复合材料的热导率与力学性能时，已展现出高精度与强泛化能力[6][7]。这些成功案例验证了数据驱动模型在解决复杂材料体系性能预测方面的巨大潜力，为地源热泵回填材料的优化设计指明了方向。

本研究引入机器学习方法，利用其处理高维非线性关系的强大能力，构建了双向长短期记忆网络模型，该模型能够通过正向传播学习固废累积替代引发的热传导衰减，并通过逆向传播解析石墨掺入带来的非线性补偿效应，从而实现了对多参数作用的精准预测。为进一步优化模型性能，本研究分别集成两种先进的元启发式算法：灰狼优化算法模拟了灰狼群体的社会等级与协作捕食机制，能在参数空间中进行高效的全局搜索，有效避免陷入局部最优；星鸦优化算法则借鉴了星鸦的觅食策略，以期获得更快的收

敛速度与更高的优化精度，用于优化 BiLSTM 模型的关键超参数。通过构建 GWO-BiLSTM 与 NOA-BiLSTM 混合智能模型，突破传统实验研究的固有局限，显著降低研发过程中的重复性试验消耗，为实现回填材料配比的快速、精准优化提供新思路。

2. 数据集准备及预处理

数据预处理是确保模型性能的关键步骤，本研究的数据来源于 65 组回填材料导热系数实验，在膨润土 - 石英粉基准体系(质量比 2:8)基础上，采用等质量替代法分别用钢渣粉、矿粉和废玻璃粉三种固体废弃物替代石英粉，替代率设置为 0%、10%、20%、30%、40% 五个梯度；同时为补偿固废掺入导致的导热性能损失，引入石墨以 0%、1%、2%、3%、4% 的比例替代膨润土，每组试样通过严格的配比设计和实验测试获得。在数据采集过程中，确保每组试样在标准条件下养护，并使用 TPS 2500S 热常数分析仪进行导热系数测量。每组试样重复测量 3 次，取平均值作为最终结果，以确保数据的稳定性和可靠性。图 1 为导热系数的分布情况的 violin 图，可以直观展现数据分布的密度及形状。其中，横坐标表示导热系数的分布密度，纵坐标为导热系数的范围，导热数据范围从 1.4~2.7 W/m·K 之间，集中在 1.7~2.1 W/m·K。

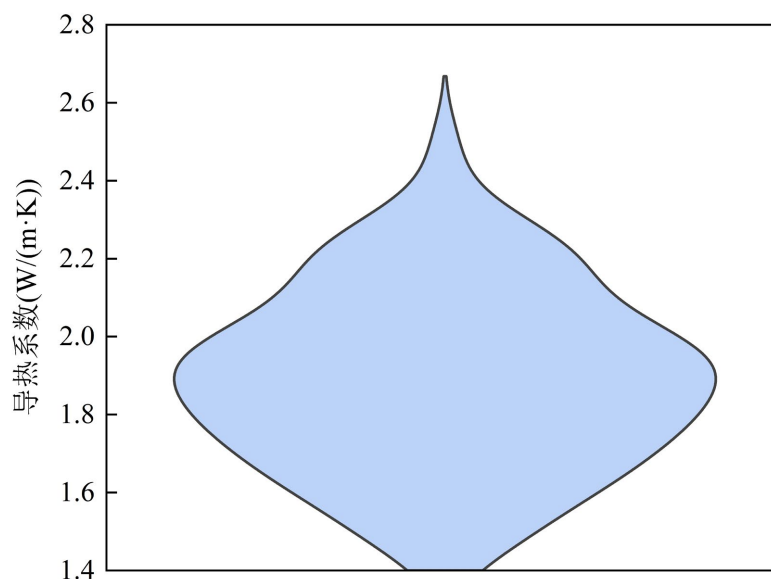


Figure 1. Distribution diagram of thermal conductivity data
图 1. 导热系数数据分布图

由于实验过程中可能受到环境波动或操作误差的影响，可能存在数据偏离的情况，为提升数据质量，采用 3σ 准则进行异常值检测与剔除，以保证数据的可靠性。

为了消除各特征变量间的量纲差异对模型的干扰，对数据集进行了归一化处理，采用最小 - 最大归一化方法将输入特征，包括固废替代率、石墨添加量等 6 维参数，与导热系数这个输出目标映射至 [0,1] 区间，以消除特征尺度对模型训练的影响，提高模型训练的效果和预测性能。

本文采用归一化公式如(1)所示。

$$X_i = \frac{X_j - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}} \quad (1)$$

其中， X_i 表示归一化后参数， X_j 表示待归一化的参数， X_{\max} 和 X_{\min} 分别表示参数的最大值和最小值。

本研究通过随机分层抽样将数据集按 8:2 比例划分为训练集(52 组)与测试集(13 组)，确保各替代梯

度在子集中均匀分布,避免参数空间覆盖偏差。对所有机器学习算法都结合 5 折交叉验证进行性能评估,它的基本思路如图 2 所示,将原始数据划分为 k 个互斥的子集,轮流将其中一份作为测试集,其余部分作为训练集进行模型训练与评估,确保每个子集都用于验证数据集,汇总各次的评估结果以获得对模型性能的综合估计[8]。这种技术的优势在于最大化利用了有限的的数据资源,通过数据重复利用有效缓解了本研究数据稀疏问题,在有限样本条件下实现更可靠的性能评估,降低了评估结果的随机性,使评估结果比原单次划分更具统计意义。

3. 模型的构建与优化

3.1. BiLSTM 模型结构设计

为充分挖掘固废基回填材料各组分(如钢渣粉、矿粉、废玻璃粉与石墨)特征间深层的、非加和的相互作用,本研究引入了双向长短期记忆网络(BiLSTM)。BiLSTM 的强大之处在于其能够模拟特征间复杂的非线性交互。其双向传播机制在本文中并非用于处理时间序列,而是作为一种高级特征学习策略,其“双向”结构在本研究中可以被理解作为一种全局上下文感知机制:通过前向与反向的信息流动,模型能够为配比中的对应组分构建一个融合了所有组分信息的丰富上下文表征。从不同“方向”分析相应组合,从而全局性地评估任一组分在特定固废基回填材料组合下的导热贡献,最终实现对导热系数的精准预测。

BiLSTM 网络模型如图 2 所示,正向 LSTM 层从前向后处理时间序列,捕捉历史依赖信息;反向 LSTM 层从后向前处理时间序列,解析未来潜在影响。双向隐藏状态在每一时间步进行融合,通常采用拼接或加权求和的方法。

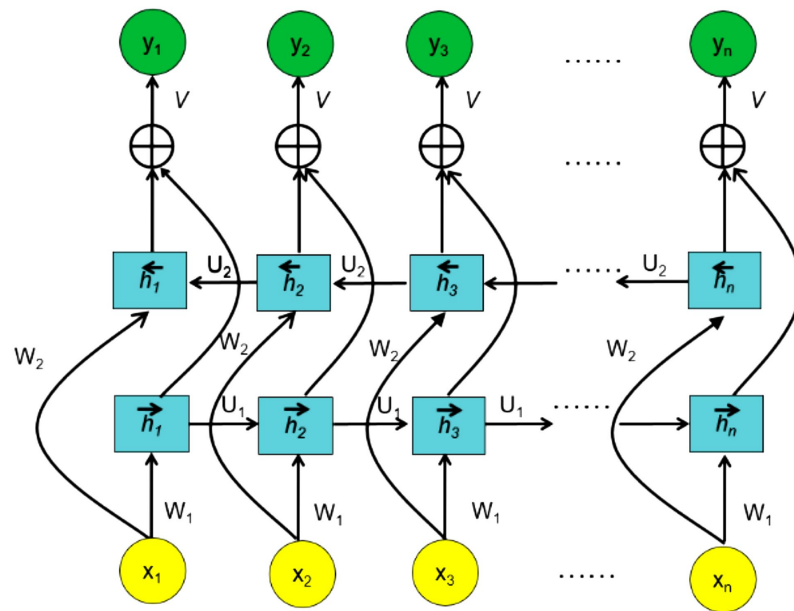


Figure 2. Schematic diagram of the BiLSTM model

图 2. BiLSTM 模型示意图

BiLSTM 的超参数设置决定了网络结构和效能,学习率、隐含层神经元数、迭代次数和批处理数等超参数对 BiLSTM 模型有较大影响,例如学习率设置过低会导致代价函数陷入局部极小值陷阱,过高则会诱发损失函数表面上的振荡发散现象;神经元数量过多则会减低训练效率,过少则可能损害网络性能[9]。如果采用传统的人工调试方法优化参数,不仅存在较大的随机性,还会面临效率问题[10],所以,采

用智能优化算法来自适应寻找网络的最优超参数配置成为提升模型预测精度的关键突破口。

3.2. 灰狼优化(GWO-BiLSTM)算法

GWO 算法具有全局寻优能力强、收敛速度快、参数少等优势，并且在初始搜索中不需要推导信息，具有在搜索期间在探索和利用之间取得适当平衡的特殊能力，在很短的时间内获得了来自多个领域的巨大受众的极大研究兴趣。

GWO 的核心思想在于模拟灰狼群体通过合作搜索与追击猎物的过程，克服传统优化算法在高维、非线性问题中易陷入局部最优的缺陷[11]。算法根据适应度将狼分为四个等级： α （最优解）、 β （次优解）、 δ （第三优解）和 ω （候选解）。 α 、 β 和 δ 引导群体搜索， ω 跟随其更新位置。算法通过协同系数向量 A 和 C 实现全局探索与局部开发的平衡。灰狼的行动距离和方向取决于猎物的位置，灰狼多次接近猎物的过程，就是寻找最优解的过程。在狩猎过程中，保持最优适应度的灰狼位置 X_α 、 X_β 和 X_δ 为最优搜索位置，更新其余狼的位置。

在回填材料导热性能预测中，GWO 通过对 BiLSTM 的网络参数的优化，可以提升模型在小样本回填材料导热性能预测中下的泛化能力与预测精度，为复杂时间序列建模提供了有效的优化策略。

3.3. 星鸦优化(NoA-BiLSTM)算法

星鸦优化算法(Nutcracker Optimization Algorithm, NOA)可能是一种基于群体智能的优化方法，由 Evangeline 等人于 2024 年提出[12]，其设计灵感来源于北美洲及加拿大山区星鸦的觅食与储存行为，通过模拟星鸦在自然环境中的两种典型行为模式——全局探索与局部开发，NOA 实现了在复杂优化问题中勘探与开发的动态平衡。相较于传统优化算法，NOA 具有更强的全局搜索能力与更高的收敛精度，适用于高维、多峰的优化问题。

该算法通过模拟星鸦的两种典型行为模式——觅食与储存策略以及储藏区搜寻与找回策略，实现了在复杂优化问题中勘探与开发的动态平衡。两种行为模式的协同作用使 NOA 能够在复杂优化问题中表现出优异的性能，由于其具有参数少、灵活性高、易于实现等特点，被广泛应用于机器学习模型优化、工程设计和资源调度等领域。在本研究中，NOA 可应用于 BiLSTM 模型的超参数优化中。其全局探索能力能够在超参数搜索空间中广泛采样，避免因初始化不当导致的局部最优问题；而其局部开发策略则能精细化调整 BiLSTM 的隐藏层神经元数和学习率，使模型性能进一步提升。NOA 的储藏区搜索与找回策略通过模拟星鸦的空间记忆特性，能够有效捕捉数据中的长期依赖关系；而长步长随机跳跃机制则增强了模型对异常值或噪声的鲁棒性，从而提升了预测的准确性。

3.4. 模型训练流程

从数学优化的角度来看，预测模型的训练本质上是在预设的模型假设空间内，通过迭代计算寻找能够最小化损失函数的参数组合[13]。本研究提出两种优化算法对 BiLSTM 预测模型的关键超参数(包括学习率、隐含层神经元数量、训练迭代次数和批处理大小)进行协同优化，以下为结合两种优化算法的模型训练流程：

(1) GWO-BiLSTM 流程，如图 3 所示：

① 数据预处理。将样本数据归一化，并按照 8:2 划分为训练集和测试集。

② 灰狼种群初始化。设置狼群规模；参数设置，GWO 对 BiLSTM 模型的学习率、隐含层神经元个数、训练迭代次数和批处理数寻优范围分别为 $[1e^{-3}, 1e^{-1}]$ 、 $[3, 200]$ 、 $[1, 200]$ 和 $[8, 256]$ ；定义适应度函数为测试集均方根误差(RMSE)；随机生成初始狼群位置，计算初始适应度并确定 α 、 β 、 δ 狼；模拟狼群狩猎行为，更新狼群与参数优化。

- ③ 狼群位置更新与参数优化。模拟狼群狩猎行为，更新狼群位置，将 α 狼位置转换为 BiLSTM 参数。
- ④ 判断终止条件若达到最大迭代次数或测试集 RMSE < 阈值跳转步骤⑤；否则，返回步骤③继续迭代。
- ⑤ 最优模型输出。输出 α 狼对应的 BiLSTM 超参数组合及测试集性能指标(MAE/RMSE/R²)。

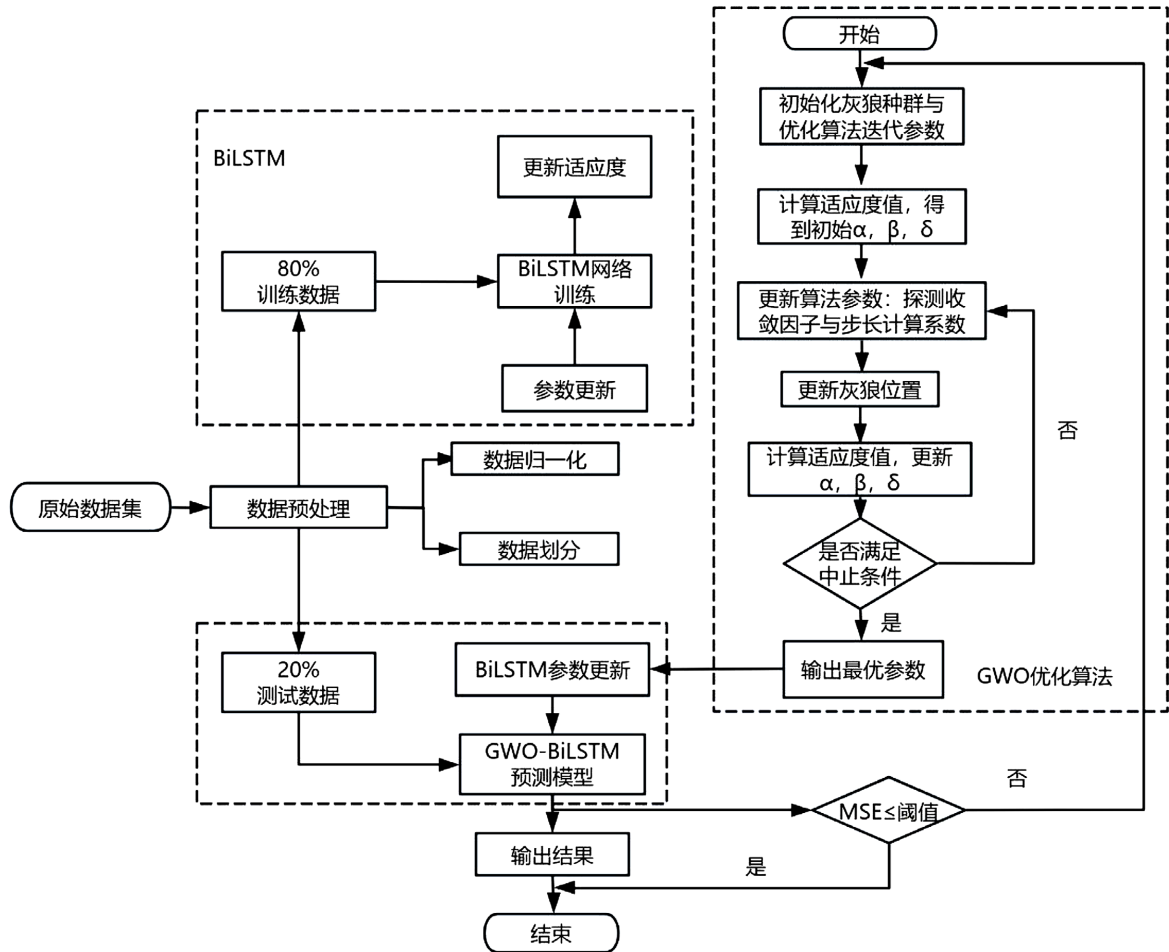


Figure 3. Parameter optimization algorithm flowchart of the GWO-BiLSTM prediction model

图 3. GWO-BiLSTM 预测模型参数寻优算法流程

(2) NOA-BiLSTM 流程，如图 4 所示：

- ① 数据预处理。将样本数据归一化，并按照 8:2 划分为训练集和测试集。
- ② 星鸦种群初始化。设置星鸦数量、记忆库容量(每只星鸦可存储的历史最优解数量)；搜索半径衰减系数；参数设置，GWO 对 BiLSTM 模型的学习率、隐含层神经元个数、训练迭代次数和批处理数寻优范围分别为 $[1e^{-3}, 1e^{-1}]$ 、 $[3, 200]$ 、 $[1, 200]$ 和 $[8, 256]$ ；定义适应度函数为测试集均方根误差(RMSE)；随机初始化星鸦位置，初始化空记忆库。
- ③ 记忆库更新与探索。在觅食与储存策略下，在储藏区搜寻与找回策略下，
- ④ 适应性飞行。对每只星鸦执行以莱维飞行调整搜索方向(避免早熟收敛)，更新记忆库并重新排序。
- ⑤ 最优参数输出。输出全局记忆库中适应度最优的 BiLSTM 参数组合。

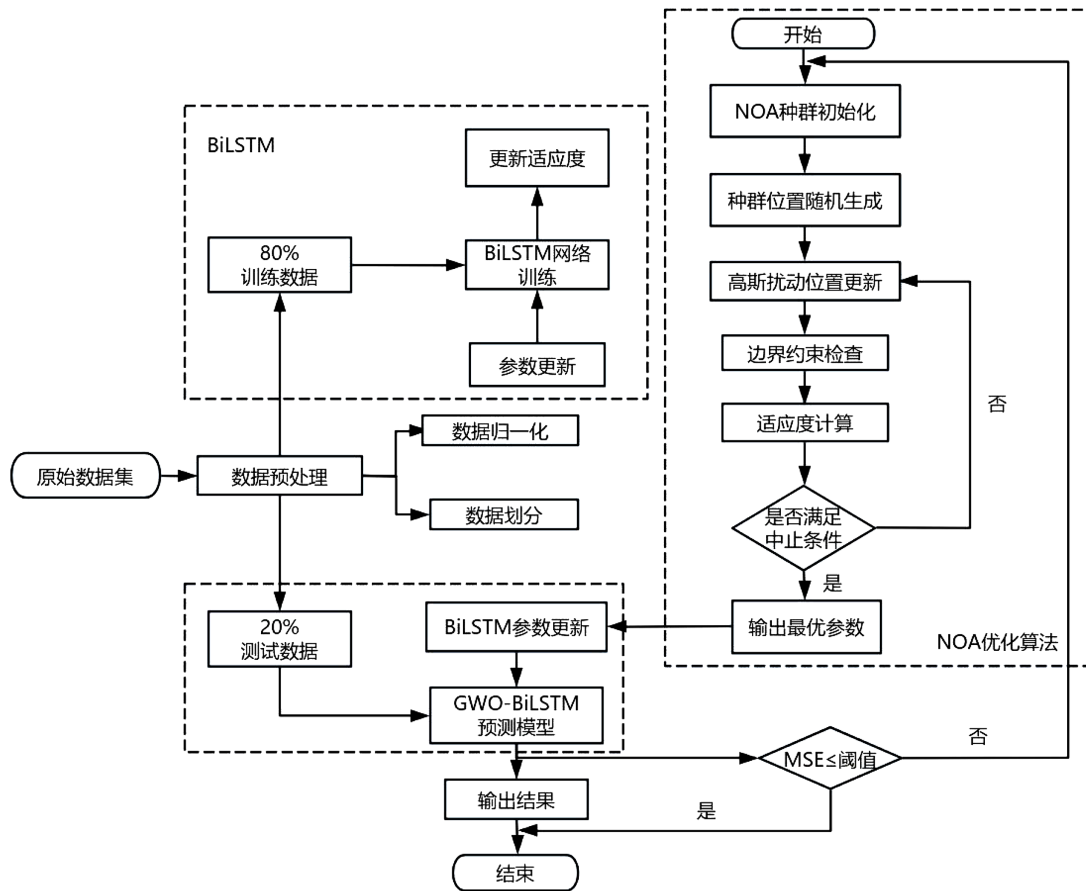


Figure 4. Parameter optimization algorithm flowchart of the NOA-BiLSTM prediction model
图 4. NOA-BiLSTM 预测模型参数寻优算法流程

4. 基于 SHAP 可视化方法的模型分析

SHAP (Shapley Additive Explanations)是一种基于博弈论 Shapley 值的模型可解释性分析方法，其核心原理是通过量化每个特征对模型预测结果的边际贡献度，公平地分配预测结果的收益[14]。在 SHAP 分析中，模型在所有样本上的预测平均值为模型的基值，模型的输出为每个特征的贡献与基值的线性组合，如公式(2)所示：

$$g(z) = \varphi_0 + \sum_{j=1}^M \varphi_j z_j \quad (2)$$

其中， $g(z)$ 表示模型的预测值； φ_0 表示预测平均值； M 表示输入的特征数量； φ_j 表示第 j 个特征的 SHAP 值； z_j 表示第 j 个特征对预测结果的影响(取 0 或 1)。

本研究中，SHAP 分析通过计算每个输入特征的 Shapley 值，构建了固废替代率、石墨掺量等参数与导热系数之间的全局解释模型。在训练完成的 BiLSTM 模型基础上，SHAP 值能够逐样本解析不同特征对导热系数预测值的贡献程度，从而识别出主导导热性能的关键控制因素，为材料研发提供了数据驱动的决策支持。

图 5 展示了基于 SHAP 分析的全局特征重要性结果，用于量化地源热泵回填材料导热系数预测模型中各输入参数对模型输出的平均影响强度。从图中可以看出，石英粉的平均 SHAP 值最高，约为 0.14，

说明它在所有材料中对模型预测结果的影响最大，这可能是因为石英粉作为主要骨料，占回填材料配比的大部分。其次是石墨，石墨高导热特性被模型有效捕获，印证了它在回填材料导热系数上的有效增益。由于三种固废替代对导热的保持效果：钢渣粉 > 矿粉 > 废玻璃粉，即废玻璃粉对导热削减的能力最高，对导热效果的影响最大，因此平均 SHAP 绝对值：废玻璃粉 > 矿粉 > 钢渣粉，尽管废玻璃粉在 SHAP 分析中表现出更高的模型敏感性，但实际应用中钢渣粉的低导热衰减性更符合可持续发展目标。这一分析结果揭示了不同固废材料在回填体系中的功能差异，为材料配比优化提供了量化依据。

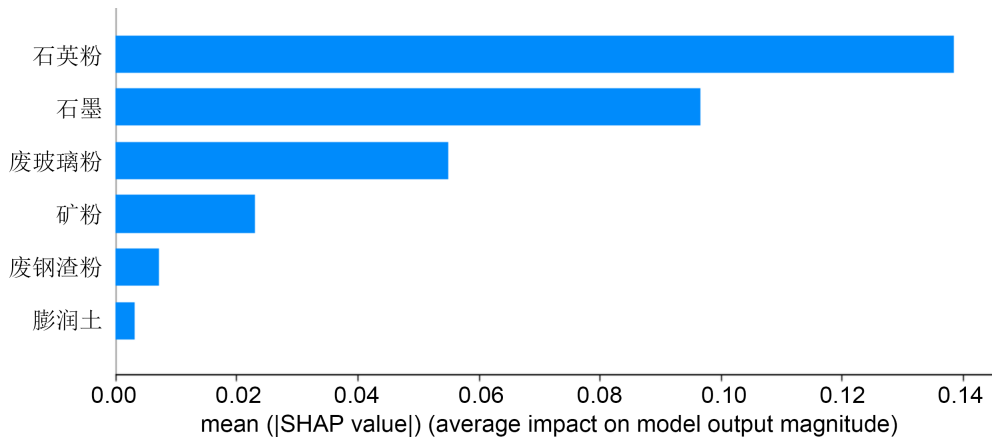


Figure 5. Global feature importance based on SHAP analysis
图 5. 基于 SHAP 分析的全局特征重要性

图 6 是基于 SHAP 方法生成的特征影响分布蜂群图，用于可视化不同材料特征对模型输出的贡献程度及其作用方向。该图通过 SHAP 值与材料特征组合，结合颜色编码，直观揭示了石英粉、石墨、废玻璃粉、矿粉、膨润土和钢渣粉六种固废材料对地源热泵回填材料性能预测模型的影响权重及方向。横轴的 SHAP 值范围从 -0.2 到 0.3，正值代表该特征对模型输出有正向促进作用，负值则表明其可能抑制模型预测结果，蓝色点表示较低的特征值，对模型影响较小，粉色点对应较高的特征值，影响显著。

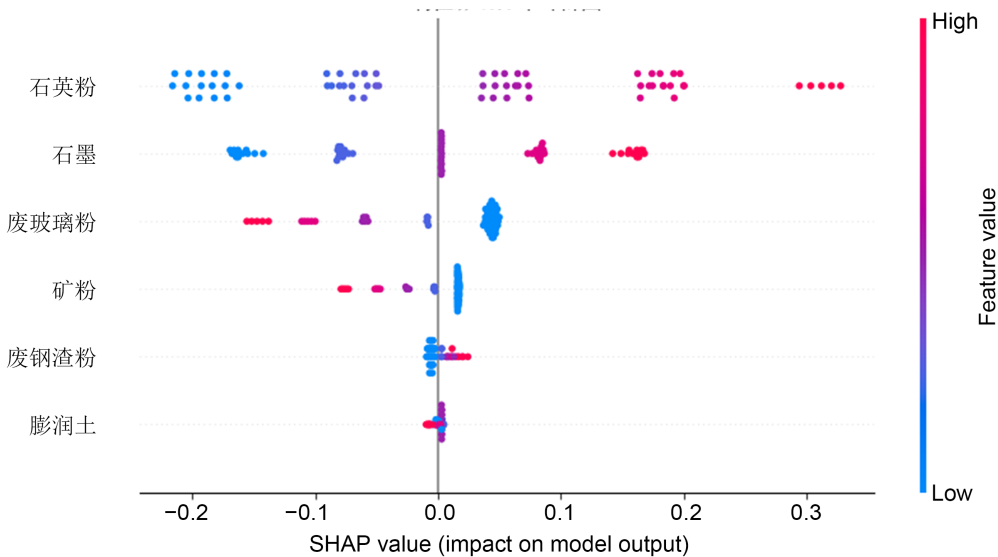


Figure 6. Beeswarm plot of feature impact distribution
图 6. 特征影响分布蜂群图

从图中可以看出, 石英粉和石墨的数据点分散在横轴两侧(-0.2 至 0.3 之间), 且粉色点占比较高, 说明其对模型输出的影响较为显著, 石英粉的高 SHAP 值(粉色点)可能源于其作为骨料对导热系数的基础支撑作用, 石墨的 SHAP 值分布则与其高导热特性一致。膨润土和钢渣粉的 SHAP 值高度集中在 0 附近(蓝色点密集分布), 表明其在当前配比体系中对模型输出的贡献微弱, 不能有效提升回填材料的导热系数, 对导热系数的削减影响较小。废玻璃粉和矿粉的 SHAP 值分布相对分散, 粉色点集中在负轴, 表示高含量替代比会显著抑制导热系数, 与前文试验结论一致。

5. 模型预测性能评估

5.1. 评价指标

为了全面评估模型的预测准确性, 本研究采用平均绝对误差(MAE)、均方根误差(RMSE)及决定系数(R^2) 3 个指标进行综合衡量。

下式为模型评估标准等式, MAE 是预测值与实际值之间差异的绝对值的平均值, 对异常值影响较小, 能够全面地反映模型的准确性。MAPE 通过计算预测值与实际值之间绝对误差的百分比的平均值来评估预测的准确性, 这两个参数值越小, 表明预测模型的精度越高, 预测效果越好。 R^2 指标衡量的是预测值与实际值之间的线性关系强度, 其值越接近 1, 表示模型的拟合度越好。

$$MAE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |y_f - y_a| \quad (3)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_f - y_a)^2} \quad (4)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_f - y_a)^2}{\sum_{i=1}^N (y_f - \bar{y})^2} \quad (5)$$

其中: N 是样本数, y_f 是预测值, y_a 是实际值, \bar{y} 是真实值的样本均值。

5.2. 算法对比

为了系统地评估优化算法对导热系数预测的增强效果, 如表 1 所示, 本研究基于预测精度与泛化性对七类建模方法进行对比分析, 除了 BiLSTM、GWO-BiLSTM 和 NOA-BiLSTM, 还包括 4 种具有代表性经典机器学习模型: K 近邻算法(KNN)、支持向量机(SVM)、决策树(DT)、随机森林(RF)。通过对比分析这些模型在相同数据集上的预测表现, 揭示了传统方法在本研究场景中的局限性。

KNN 的核心思想是通过测量不同特征值之间的距离进行分类或回归。在导热系数预测中, KNN 通过搜索训练集中与新样本特征最接近的 K 个邻居, 取其平均导热系数作为预测值, 如图 7(a)所示, 其预测值与真实值拟合度较低($R^2 = 0.8562$), MAE(0.061)与 RMSE(0.073)显著低于其他算法模型。

SVM 通过核函数将低维非线性数据映射到高维空间, 寻找最优分类超平面, 预测结果如图 7(b)所示, 其 MAE 和 RMSE 分别为 0.052 和 0.078, $R^2 = 0.8388$ 较低, SVM 的稀疏解特性可能忽略部分关键样本信息, 导致预测偏差。

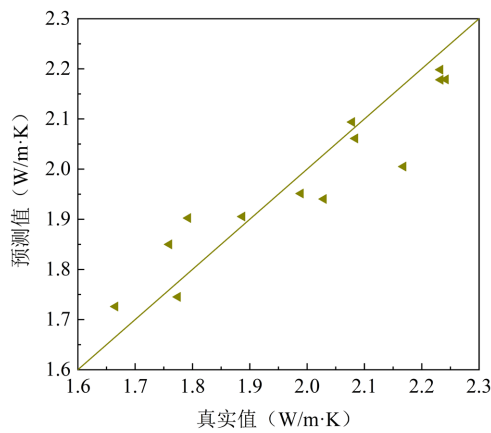
DT 通过递归分割特征空间构建树状结构, 具有直观可解释性。但是 DT 模型容易过拟合, 尤其在特征间存在强相关性时, 树的深度急剧增加导致泛化能力下降, 在本研究中, 其预测性能最差(MAE = 0.099, RMSE = 0.112, $R^2 = 0.6612$), 预测结果如图 7(c)所示, 预测值的离散性显著。

RF 在特征选择时引入随机性, 能有效避免单棵树的过拟合问题, 如图 7(d)所示, 算法显著提升了模型鲁棒性, MAE 降低为 0.037, RMSE 降低为 0.047, R^2 提高到 0.9401。

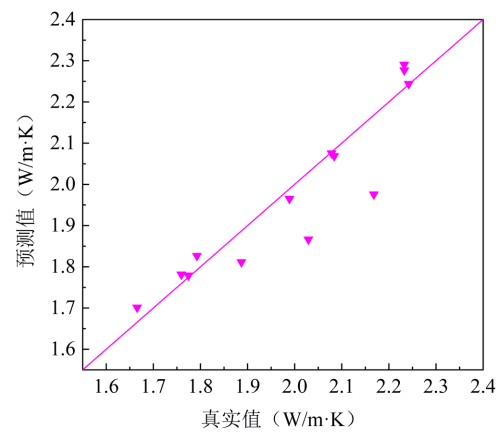
基础 BiLSTM 模型的 MAE 为 0.028, RMSE 为 0.034, 相较于本研究效果最优的经典算法 RF, R^2 提升 4.13%。在经 GWO 与 NOA 算法改进后, 模型性能显著提升, 其中, GWO 算法使 MAE 降低了 50%, RMSE 降低 55.9%, R^2 提升了 1.42%; NOA-BiLSTM 的 MAE 与 RMSE 相较于原 BiLSTM 分别降低 57.1% 和 58.8%, R^2 从 0.9485 提升至 0.9939, 逼近理论极限值 1, 改进后的模型显著提升了 BiLSTM 模型的预测精度、泛化能力与稳定性, 克服了传统 BiLSTM 对人工调参的依赖及易陷入局部最优的缺陷, 其鲁棒性与泛化能力亦适合复杂材料性能的高精度预测任务。

Table 1. Model performance comparison
表 1. 模型性能对比

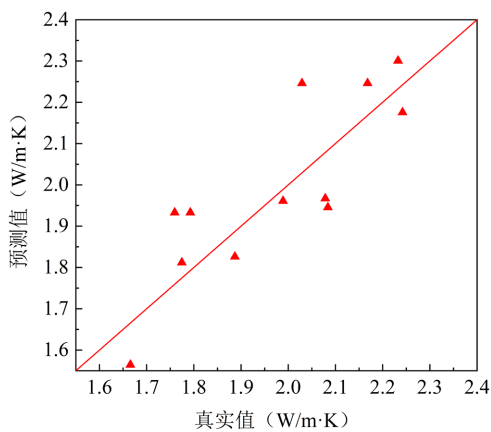
| 模型 | MAE | RMSE | R^2 |
|------------|-------|-------|--------|
| KNN | 0.061 | 0.073 | 0.8562 |
| SVM | 0.052 | 0.078 | 0.8388 |
| DT | 0.099 | 0.112 | 0.6612 |
| RF | 0.037 | 0.047 | 0.9401 |
| BiLSTM | 0.028 | 0.034 | 0.9789 |
| GWO-BiLSTM | 0.014 | 0.015 | 0.9928 |
| NOA-BiLSTM | 0.012 | 0.014 | 0.9939 |



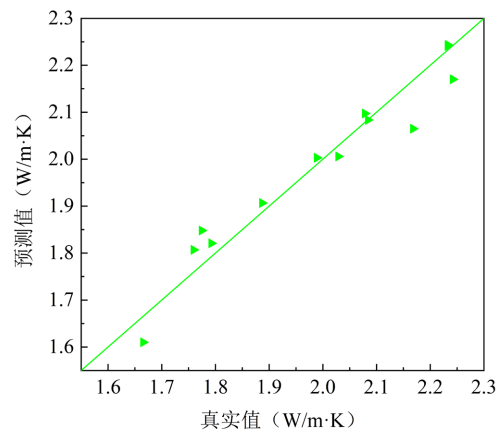
(a) KNN



(b) SVM



(c) DT



(d) RF

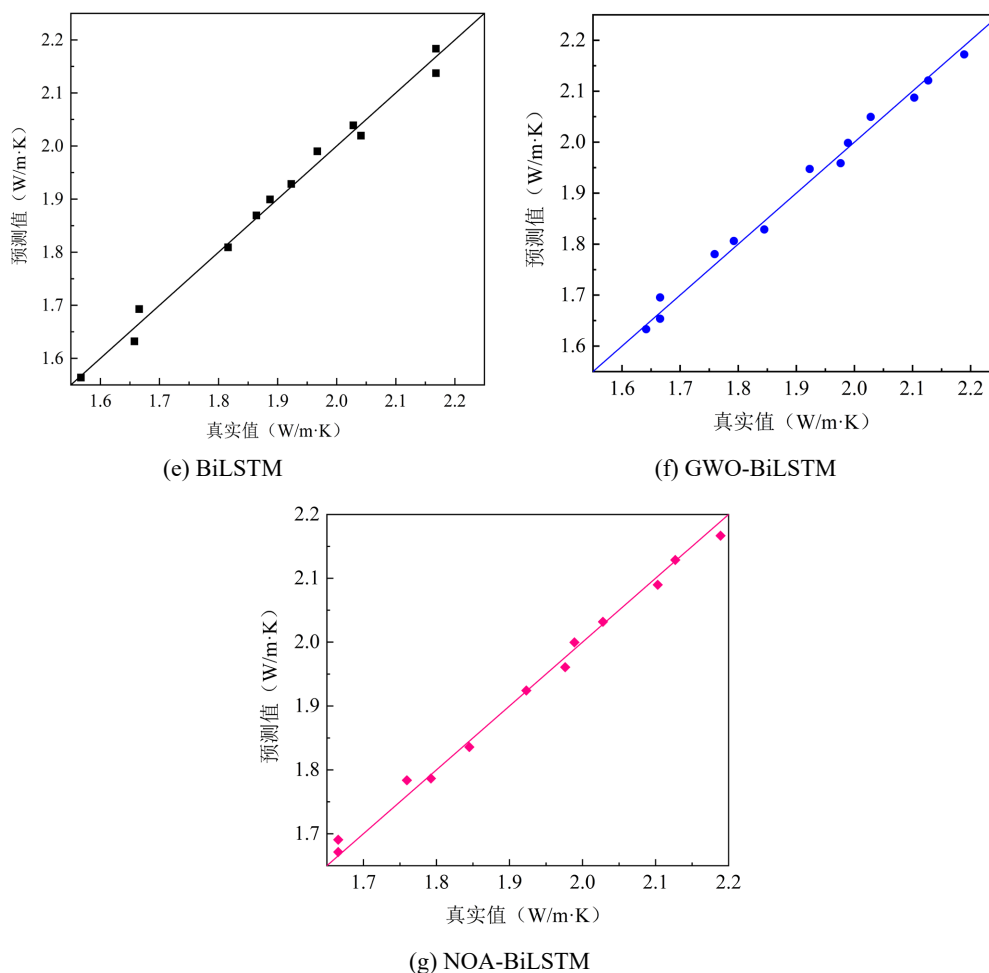


Figure 7. Fitting effect on the validation set
图 7. 验证集拟合效果

5.3. 模型验证

为进一步验证模型的泛化能力,本研究采用了试验测试阶段采集的7组独立测试数据(未参与训练与调优),如表2所示,GWO-BiLSTM在新数据集上的MAE为0.024, RMSE为0.029, R^2 为0.9765,相较于原测试集(MAE = 0.014, R^2 = 0.9928),性能降幅仅为1.64%和1.63%,表明其对数据分布变化具有较强适应性。NOA-BiLSTM表现则更为稳健,其 R^2 (0.9838)与原测试集(R^2 = 0.9939)的偏差为1.02%。如图8所示,两模型在独立测试集上的性能波动幅度较小,印证了优化算法通过参数自适应机制有效抑制了过拟合风险。

Table 2. Comparison of predicted and actual values for the independent test set by GWO-BiLSTM and NOA-BiLSTM
表 2. GWO-BiLSTM 和 NOA-BiLSTM 对独立测试集的预测值与实际值对比

| 样本名称 | 实际测试值 W/(m·K) | GWO-BiLSTM 预测值 W/(m·K) | NOA-BiLSTM 预测值 W/(m·K) |
|--------|------------------|---------------------------|---------------------------|
| G5S1 | 2.3955 | 2.3476 | 2.3441 |
| G5S1.5 | 2.2790 | 2.2716 | 2.2666 |
| G5S2 | 2.1845 | 2.1952 | 2.1883 |

续表

| | | | |
|--------|--------|--------|--------|
| G5S2.5 | 2.1020 | 2.1184 | 2.1094 |
| G5S3 | 2.0221 | 2.0412 | 2.0299 |
| G5S3.5 | 1.9270 | 1.9639 | 1.9500 |
| G5S4 | 1.8605 | 1.8866 | 1.8699 |

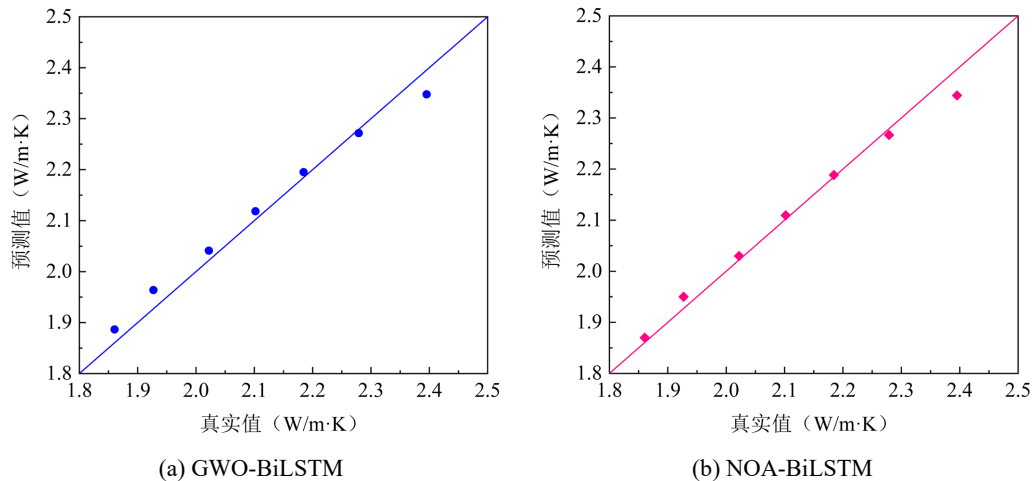


Figure 8. Fitting effect on the test set
图 8. 测试集拟合效果

6. 结论

传统实验方法因高成本、长周期及离散参数梯度等限制，难以系统揭示回填材料配比与导热系数间的连续非线性关联规律。本研究基于实际实验数据，通过分别将 GWO、NOA 两种优化算法与 BiLSTM 进行耦合，结合 5 折交叉验证与 SHAP 可解释性分析，实现了多维参数空间的高效探索，为小样本数据下的材料性能预测提供了高效解决方案。主要研究结论如下：

(1) 本研究建立了基于 BiLSTM 的时间序列建模框架，通过双向传播机制有效捕捉了回填材料中固废的导热削弱效应(正向传播)与石墨补偿效应(反向传播)的协同作用，解决了传统模型因忽略材料组分交互作用而导致的预测偏差问题。在传统机器学习模型中，随机森林表现最优， R^2 达到 0.9401，但其静态特征分割机制难以适配依赖性数据；KNN、SVM 和 DT 受限于高维非线性关系与噪声敏感性，预测误差显著。而 BiLSTM 系列模型凭借双向建模能力，在捕捉固废替代动态效应与石墨补偿机制上具有不可替代优势， R^2 较 RF 提升了 4.13%。

(2) NOA-BiLSTM 实现了最优预测性能，较基础 BiLSTM 误差降低 57% 以上，且 R^2 达 0.9939，显著优于传统方法，大幅提升了参数优化效率，并有效规避局部最优的问题。通过基于 7 组独立测试数据的外部验证再次说明了 GWO ($R^2 = 0.9765$) 与 NOA ($R^2 = 0.9838$) 算法在小样本、高噪声场景下的强适应性，为复杂材料性能的高精度预测提供了可靠方法。

(3) 本研究通过 SHAP 构建了固废替代率、石墨掺量等参数与导热系数之间的全局解释模型，揭示了回填材料对导热性能的影响规律。石英粉作为回填材料配比中的骨料，提供了基础的导热支撑，平均 SHAP 值最高，约为 0.14。石墨的高导热特性被模型有效捕获，虽然添加量最小，但对导热效果的影响较大。固废的添加对回填材料的导热系数属于抑制作用，其中，废玻璃粉的抑制作用最明显，高含量替代比会显著抑制导热系数，钢渣对模型输出的贡献微弱，对导热系数的削减影响较小，与实验测量的热物性排

序(钢渣粉 > 矿粉 > 废玻璃粉)一致。

本研究通过智能算法与材料科学的深度交叉, 相对传统实验方法减少重复试验次数, 节省了实验的时间和成本, 不仅发展了地源热泵回填材料的数字化设计方法, 为工程实践提供可靠工具, 更为建筑固废的资源化利用提供了理论支撑与技术路径。

基金项目

地下水资源与环境教育部重点实验室开放课题(课题编号: 202306ZDKF08)。

参考文献

- [1] Esen, H., Inalli, M. and Esen, Y. (2009) Temperature Distributions in Boreholes of a Vertical Ground-Coupled Heat Pump System. *Renewable Energy*, **34**, 2672-2679. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2009.04.032>
- [2] Mei, V.C. (1991) Heat Transfer of Buried Pipe for Heat Pump Application. *Journal of Solar Energy Engineering*, **113**, 51-55. <https://doi.org/10.1115/1.2929951>
- [3] Piechowski, M. (1999) Heat and Mass Transfer Model of a Ground Heat Exchanger: Theoretical Development. *International Journal of Energy Research*, **23**, 571-588. [https://doi.org/10.1002/\(sici\)1099-114x\(19990610\)23:7<571::aid-er462>3.0.co;2-6](https://doi.org/10.1002/(sici)1099-114x(19990610)23:7<571::aid-er462>3.0.co;2-6)
- [4] Liu, H., Xia, X., Xie, X., Ai, Q. and Li, D. (2017) Experiment and Identification of Thermal Conductivity and Extinction Coefficient of Silica Aerogel Composite. *International Journal of Thermal Sciences*, **121**, 192-203. <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2017.07.014>
- [5] 陈清华, 吴佳乐, 陆育, 等. 基于组合边界条件的固体材料热扩散系数测试方法[J]. 上海交通大学学报, 2024, 58(8): 1201-1210.
- [6] 雷廷, 贾军元, 田福金, 等. 基于 BP 神经网络预测岩石导热系数[J]. 世界地质, 2021, 40(1): 131-139.
- [7] 赵嵩颖, 王梦娜, 陈雷. 神经网络下能量桩桩基混凝土强度及导热预测[J]. 混凝土, 2023(7): 24-27.
- [8] 韩凤歌, 冷成彪, 陈加杰, 等. 基于磷灰石微量元素组成的机器学习方法判别花岗岩成因类型[J]. 岩石学报, 2025, 41(2): 737-50.
- [9] 崔文洁, 赵军龙, 陈家鑫, 等. 基于 GWO-BiLSTM 的岩性识别方法研究与应用[J]. 河北地质大学学报, 2024, 47(5): 30-37.
- [10] 刘相杰. 基于二次模态分解和 IHPO-BiLSTM 的大坝变形预测研究[D]: [硕士学位论文]. 赣州: 江西理工大学, 2024.
- [11] 蔡里批, 李硕, 丁敬国. 基于灰狼算法优化深度极限学习机的钢轨热处理性能预测模型[J]. 材料与冶金学报, 2025, 24(2): 162-170.
- [12] Ida Evangeline, S., Darwin, S., Peter Anandkumar, P. and Sreenivasan, V.S. (2024) Investigating the Performance of a Surrogate-Assisted Nutcracker Optimization Algorithm on Multi-Objective Optimization Problems. *Expert Systems with Applications*, **245**, Article ID: 123044. <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2023.123044>
- [13] 王莲, 简子淋, 张晓斌, 等. 基于 CNN-BiLSTM 和多目标函数优化的省级光伏日内保障出力预测[J]. 高电压技术, 2025, 51(9): 4846-4855.
- [14] Van den Broeck, G., Lykov, A., Schleich, M. and Suci, D. (2022) On the Tractability of SHAP Explanations. *Journal of Artificial Intelligence Research*, **74**, 851-886. <https://doi.org/10.1613/jair.1.13283>