

基于深度学习的电子信息材料导热性研究与模拟优化方案

罗玉霖

中国矿业大学徐海学院, 江苏 徐州 221008

摘要: 随着电子器件的集成度提升和半导体技术的发展, 散热问题已成为高功率密度应用领域的关键挑战, 而传统热管理方案在高效性、稳定性和材料优化方面存在局限, 难以满足 5G、人工智能、新能源汽车等领域的需求。本文创新性地提出一种深度学习驱动的材料导热性预测与优化方法, 将物理约束深度学习模型与跨模态数据相融合, 显著提升了材料导热性能预测精度, 并加速了优化设计进程。该方法在芯片封装散热、高导热聚合物开发及热界面材料筛选等应用中展现出了卓越性能。本研究为突破电子信息材料散热瓶颈提供了智能化解决方案, 具有重要的科学意义和工程应用价值。

关键词: 深度学习; 电子信息材料; 导热性; 模拟优化

Research on Thermal Conductivity of Electronic Information Materials Based on Deep Learning and Simulation Optimization Scheme

Luo, Yulin

Xuhai College, China University of Mining and Technology, Xuzhou, Jiangsu, 221008, China

Abstract: With the improvement of the integration of electronic devices and the development of semiconductor technology, heat dissipation has become a key challenge in the field of high power density applications. However, the traditional thermal management scheme has limitations in efficiency, stability and material optimization, and it is difficult to meet the needs of 5G, artificial intelligence, new energy vehicles and other fields. In this paper, a deep learning-driven thermal conductivity prediction and optimization method of materials is innovatively proposed, which combines the physical constraint deep learning model with cross-modal data, significantly improving the prediction accuracy of thermal conductivity of materials and accelerating the optimization design process. This method has shown excellent performance in chip package heat dissipation, high thermal conductivity polymer development, thermal interface materials screening and other applications. This study provides an intelligent solution to break through the bottleneck of heat dissipation of electronic information materials, which has important scientific significance and engineering application value.

Keywords: Deep learning; Electronic information materials; Thermal conductivity; Simulation optimization

DOI: 10.62639/sspis20.20250203

随着半导体技术的发展和电子器件集成度的提升, 散热问题已成为电子信息领域面临的核心挑战。5G、人工智能、新能源汽车等高功率密度应用对高导热材料提出更高要求, 传统散热方案难以满足高效散热需求, 而碳化硅、氮化镓等新型宽禁带半导体的应用进一步加剧了这一问题。由于材料研发长期依赖经验试错, 周期长、成本高, 许多潜在高导热材料难以被及时发现^[1]。现有方法在多尺度建模和微结构优化方面难以兼顾精度与效率, 成为制约材料研发的关键瓶颈。近年来, 深度学习技术凭借数据驱动方法, 在材料科学领域展现出巨大潜力, 可精准预测导热率, 并通过生成模型优化微结构设计, 加速新材料筛选。本文聚焦数据驱动的高通量筛选、图像识别预测、热学超材料优化及物理约束深度学习模型, 结合芯片封装散热、高导热聚合物等应用, 旨在突破电子信息材料散热瓶颈, 提供高效、智能化的解决方案。本研究首次融合物理约束深度学习与跨模态数据, 构建了高效的材料导热性预测与优化框架, 克服了传统方法的局限, 为高导热材料的快速研发开辟了新路径。

一、深度学习在导热材料研究中的应用现状

(一) 数据驱动的高通量材料筛选

深度学习在电子信息材料导热性研究中的应用离不开海量数据的支持, 而传统的实验试错法效率低下, 难以满足高效筛选需求。因此, 高通量计算和材料数据库的构建成为研究的核心趋势。结合密度泛函理论 (DFT)、分子动力学模拟和有限元分析等手段, 可快速生成并验证大量材料的热导率数据^[2]。研究人员通过采集材料的晶体结构、电子结构和键合方式, 并结合机器学习方法训练模型, 能够高效预测材料的导热性能。例如, 鞠生宏团队利用迁移学习构建了高导热材料筛选模型, 能够准确预测六方 BAs、BC₂N 等高导热材料, 并评估其异质界面导热性能。这种方法可显著缩短研发周期, 减少实验依赖, 提高筛选效率。关键技术在于建立完备的材料特征描述符, 并结合特征工程、降维处理等手段优化模型输入, 最终通过实验或高精度计算反馈修正, 形成高效的数据驱动材料发现流程。

(二) 基于图像识别的快速热导率预测

近年来, 图像识别技术在材料科学中的应用

(稿件编号: IS-25-3-1021)

作者简介: 罗玉霖 (1988-), 男, 汉, 江苏徐州人, 硕士, 助理实验师, 主要研究方向为半导体器件物理。

取得突破性进展,尤其是在材料微观结构与导热性能之间的关联建模方面。清华大学刘磊团队提出了一种基于卷积神经网络(CNN)的方法,通过分析材料的截面或微观结构图像,在秒级时间内快速预测其等效热导率。该方法依赖于有限元模拟或分子动力学计算生成大规模“结构-热导率”数据对,并以此训练CNN模型。推断阶段,仅需输入材料微观结构图像,即可获得热导率预测值,误差控制在5%以内(R^2 高达0.987)。例如,纳米银键合层的孔隙结构会显著影响导热性能,而CNN方法可快速评估其热导率,为材料设计和封装优化提供直接指导^[3]。该技术的核心在于高质量数据的生成与标注,通过有限元方法精确求解热流分布,建立稳定可靠的训练数据集,使CNN网络能普适性地适用于不同微结构的材料快速评估。

(三) 热学超材料的结构优化设计

热学超材料通过微纳结构设计,可实现传统材料难以达到的特殊热学效应,如热隐身和热集中。传统方法依赖有限元计算进行多轮迭代优化,而基于生成对抗网络(GAN)等深度生成模型的方法,可极大提高设计效率。华中科技大学高亮团队利用GAN构建了超材料拓扑结构的隐空间映射,并基于目标热功能进行约束优化,从而实现高效的热学超材料设计^[4]。例如,为实现热透镜效应,需要材料内部形成特定的温度梯度,而GAN模型可自动生成符合热传导和能量守恒约束的微结构布局。该方法可结合3D打印或微纳加工技术进行材料制备,并通过实验验证其热学性能。相较于传统方法,GAN生成的结构设计更加灵活,能够适应不同应用场景,提高热学超材料在散热和能量管理中的应用潜力。

(四) 多尺度模拟与物理约束融合

材料的导热特性涉及多尺度效应,从原子尺度的声子传输,到微观结构对热流的散射,再到宏观热流分布,每个层次都影响最终的导热性能。深圳先进院团队采用基于快速傅里叶变换(FFT)的数值模拟方法,结合蒙特卡洛模型生成不同填充率和颗粒形貌的微观结构,并通过机器学习分析界面热阻对宏观热导率的影响。该方法不仅能模拟材料填充结构的变化,还能结合深度学习提升预测精度。更重要的是,该方法并非简单拟合数据,而是融入了能量守恒、热流连续和相界面热阻等物理约束,使得预测结果更具物理合理性。此外,可解释性分析(如SHAP值分析)可定量评估孔隙率、颗粒形状等因素对热导率的贡献,指导配方优化。这种方法不仅能减少实验周期,还能在微观结构与宏观导热性能之间建立透明的关联,为新型高导热材料的开发提供科学依据。

二、深度学习在导热材料研究中的核心方法

(一) 跨模态数据融合

在材料热学研究中,需要同时处理来自实验、模拟和理论计算的多源异质数据,例如显微图片、分子动力学轨迹、拉曼光谱数据及热传递模拟结

果等。这些数据形式多样且存在维度差异,传统单一模态的深度学习算法难以兼顾。为此,跨模态数据融合成为关键方向之一。典型做法是通过自监督学习或多任务学习,将高通量模拟数据与小样本的实验数据进行融合,既保证了训练规模足够庞大,又能在关键参数上保持与真实材料系统的一致性。

与此同时,迁移学习技术也可充分利用已有大规模数据库(例如金刚石、氮化物等的热导率数据),将其学习到的结构特征或材料表现形式迁移到目标材料体系。这样做不仅能够缓解数据不足的问题,还能提升模型的泛化能力。与之配合的特征工程,需要研究者仔细筛选对热导率敏感的微观或宏观描述符,以确保模型在面对不同材料类型时能保持一定的预测准确度。

(二) 物理引导的神经网络设计

深度学习模型在处理高维度数据上具有优势,但也面临“黑箱”问题:模型在做出预测时,是否真正遵循了物理规律?为此,“物理引导的神经网络”(Physics-Informed Neural Networks, PINNs)或带物理约束的CNN、GNN模型越来越受关注。它们在网络结构中嵌入或软约束了热传导方程、能量守恒定律等,使得训练过程不仅要最小化预测误差,还要最小化违反物理规律的损失。

清华大学刘磊团队在CNN训练过程中引入了热流分布的仿真结果,使得网络在学习图像与热导率关系的同时,也要保证热流连续、散热路径通畅等物理条件。这样一来,即使在数据稀疏或干扰较大的场景下,模型也能通过内在的物理约束来增强鲁棒性,避免出现明显违背热力学常识的预测结果。随着可解释性AI方法(如Grad-CAM、注意力机制)的发展,研究者可以对深度模型中最关键的激活区域进行可视化,从而识别哪些微结构特征对热导率预测起着主导作用,进一步为材料设计提供指导。

(三) 分布式计算与异构资源调度

在大规模深度学习任务中,模型参数量可能达到数百万甚至数亿级别,且需要在海量材料数据上进行训练。为提升训练效率与速度,分布式计算和异构资源调度势在必行。张书晴团队提出的集群资源调度优化方法,基于GPU、CPU和TPU的混合集群,将整个训练过程拆分为多个并行子任务。通过对通信开销、节点负载平衡及存储带宽的综合管理,使得训练时长缩短40%,资源利用率提升30%。

在材料导热性模拟与深度学习结合的应用中,往往还需要结合多尺度仿真,比如在原子尺度运行分子动力学模拟(适合GPU加速),在微观尺度运行FFT或有限元方法(CPU协同加速),最后将这些结果融合到一个高层次深度学习模型中进行综合评估。若无高效的异构资源调度,研究者将会在数据传输和模型同步上浪费大量时间。因此,硬件层面的加速与管理是保证深度学习在材料领域顺利落地的重要保障。

三、应用场景与典型案例

(一) 芯片封装散热优化

在高性能芯片的封装中, 纳米银键合层是一种常见的导热材料。然而, 其多孔结构往往导致热导率不稳定, 传统建模方式需反复进行有限元计算或实验测量, 耗费大量时间。清华大学团队提出的“图片-热导率”预测模型, 可通过对显微截面图像进行卷积神经网络处理, 在极短时间内得到热导率值, 从而指导工艺改进和配方调控。华为和中科大等机构已经将该方法应用于部分新型芯片封装的散热设计中, 有效缩短了研发周期并降低了试错成本^[5]。

(二) 高导热聚合物开发

聚合物材料由于其优异的力学性能和易加工性, 越来越多地被应用于电子器件散热中。但传统聚合物的热导率通常较低。基于深度学习的高通量分子动力学模拟能够加速挖掘具有高声子传输效率的聚合物链结构, 进而通过机器学习模型揭示链段排列与热导率之间的定量关系。已有研究报道, 采用此类方法设计出的聚合物单体, 其热导率可超过 20 W/mK, 远高于同类传统材料。这些高导热聚合物在柔性电子、可穿戴设备等领域拥有巨大潜力。

(三) 热界面材料的高通量筛选

热界面材料广泛应用于芯片与散热器、动力电池模块间的传热连接。其性能关键在于填料类型、填充率以及黏结基体等多个因素协同作用。深圳先进院研发了利用蒙特卡洛与 FFT 耦合的多尺度建模平台, 通过机器学习进行界面热阻分析, 从而实现对不同填料(陶瓷颗粒、碳纳米管、石墨烯等)以及不同基体材料配方的高通量筛选。该方法特别适用于相变材料、导热胶和封装胶等多相体系, 为大规模工业生产提供了具有针对性的指导建议。

(四) 极端环境下的热管理

在航空航天、军工装备和深海探测等极端环境中, 热管理的难度显著提升, 材料需在高温、强辐射或腐蚀介质下长期保持可靠的导热性能。比如, 宽禁带半导体(碳化硅、氮化镓等)在高温下工作, 对热界面材料的稳定性提出了苛刻要求。通过深度学习对材料在高温下的微结构演化及性能衰减进行预测, 可快速筛选更能耐受 200℃ 以上环境的候选材料, 并评估其长寿命服役能力。对这些材料的高通量与多尺度建模研究, 为解决极端条件下的散热难题带来了新的突破口。

四、挑战与未来方向

(一) 数据质量与标注瓶颈

深度学习的方法依赖于大规模、准确且多样性良好的数据。然而, 材料热学领域的数据往往存在稀缺、分散与不标准化的问题。不同实验室的测量手段、样品制备工艺和数据采集方法存在差异, 导致数据缺乏可比性。部分高导热材料的相关测试需要在极端环境下进行, 数据获取难度更大。此外, 仿真数据虽可快速生成, 但仍需高

精度理论模型校正。如果数据本身存在偏差, 深度学习模型就会积累并放大这些误差。未来需要更多跨机构、跨学科的协同合作, 建设开放共享的数据平台, 并引入自监督或弱监督学习手段减轻高质量标注的依赖。

(二) 跨尺度建模的精度平衡

导热过程涉及多个时空尺度, 从原子层面的声子散射到宏观范围的热流分布, 尺度跨度极大。虽然图神经网络(GNN)可以很好地处理分子级结构, 但将其结果直接迁移到宏观有限元模型却并非易事。如何在跨尺度建模中兼顾计算效率与预测精度, 是该领域的长期挑战。可能的方向包括: 将基于物理引导的 GNN 输出作为中尺度的“材料本构参数”, 再通过快速傅里叶变换或有限元进行宏观模拟, 或者在深度学习模型中显式嵌入多尺度嵌套网络, 使得不同尺度的数据能够分工协作、互相补充。

(三) 可解释性与工业落地

工业界在应用 AI 模型时往往对可解释性有较高要求: 为何模型得出某一材料热导率特别突出? 关键影响因素有哪些? 深度学习若能给出面向材料设计或工艺改进的可操作建议, 将大大提升企业的接受度与投资意愿。在此方面, 可解释性 AI 方法(如注意力机制、特征重要度分析、因果推断等)将帮助研究者识别最显著的微观结构特征或分子片段, 指导精细化合成与改性。此外, 工业落地还依赖于模型在复杂工况或量产线上的鲁棒性, 需要构建从研发到生产的完整闭环, 包括数据采集、在线监测与实时校正等环节。

五、结论

本文综述了基于深度学习的电子信息材料导热性研究及模拟优化方案, 分析了数据驱动高通量筛选、图像识别预测、热学超材料设计及多尺度模拟等关键技术。深度学习加速了高导热材料的筛选和优化, 结合物理约束使预测更具可靠性, 并在芯片封装、高导热聚合物、热界面材料等领域展现出显著潜力。然而, 该领域仍面临数据标准化、跨尺度建模、可解释性及绿色计算等挑战, 需推进材料数据共享、物理模型融合与多学科交叉, 以实现更精准、高效的导热材料研发。展望未来, 人工智能驱动的热学超材料设计、智能热管理方案及分布式计算平台将在航空航天、5G 通信、新能源等领域发挥更大作用, 推动高导热材料的产业化发展, 为极端环境散热难题提供创新解决方案。

参考文献:

- [1] 徐上. 高分子聚合物材料的导热性能及其微观构型优化的分子模拟研究 [D]. 东南大学, 2017.
- [2] 潘鹏程. 孔隙率、晶粒度对纯 W 导热导电性能的影响及 W 基材料导热性能模拟 [D]. 合肥工业大学, 2023.
- [3] 杨绍丁. 界面氢键作用对石墨烯/聚乙烯醇复合材料导热性能影响的分子模拟研究 [D]. 北京化工大学, 2023.
- [4] 张浙豪. 聚乙烯基导热绝缘复合材料的制备及性能研究 [D]. 重庆大学, 2023.
- [5] 高目. 氧化石墨烯-水泥复合材料导热性能的分子动力学模拟 [D]. 中原工学院, 2023.