

人工智能赋能的跨尺度热设计：以机器学习为主线的从原子到器件综述*

田骐琨¹⁾ 张恩博¹⁾ 蒋雨婷¹⁾ 秦真真²⁾ 王慧敏³⁾ 秦光照^{1†)}

1) (湖南大学, 机械与运载工程学院, 整车先进设计制造技术全国重点实验室, 长沙 410082)

2) (郑州大学, 物理学院, 河南省材料物理教育部重点实验室, 郑州 450001)

3) (湘潭大学, 物理与光电工程学院, 湘潭 411105)

摘 要

随着高功率电子器件、宽禁带半导体、异质集成与先进封装技术的快速发展, 热输运研究正由单一热物性表征转向贯穿材料、界面、结构与器件的跨尺度协同热设计。本文以人工智能赋能的跨尺度热设计为核心, 系统综述机器学习在从原子到器件热传导研究中的应用进展。首先, 介绍机器学习辅助的热物性预测与目标导向材料设计, 重点讨论热物性数据生成、模型构建、高通量筛选、反向搜索及约束验证; 其次, 阐述基于机器学习势函数与通用预训练原子势的界面热输运原子级设计, 分析异质固固界面、二维范德华界面和固液界面中的热输运机制、适用边界及界面热边界参数桥接; 进一步总结机器学习代理模型、多目标优化和拓扑优化在先进封装、热点抑制、冷板/微通道散热器及器件可靠性设计中的应用。最后, 讨论该领域在数据质量、物理约束、模型泛化、跨尺度参数传递与实验闭环验证等方面面临的挑战, 并展望其在高功率电子、先进封装和智能热管理器件中的发展前景。

关键词: 人工智能, 原子级热设计, 芯片散热, 跨尺度热管理

PACS: 44.10.+i; 07.05.Mh; 02.70.Ns; 44.15.+a

基金: 国家重点研发计划(批准号: 2023YFB2408100), 湖南省研究生科研创新项目(批准号: CX20250532), 国家科技重大专项(批准号: 2025ZD0717301), 广东省基础与应用基础研究基金(批准号: 2025A1515012237), 哈尔滨工业大学机器人技术与系统国家重点实验室开放基金(批准号: SKLRS-2025-KF-10), 陕西省齿轮传动重点实验室

（批准号：SKLGT-2024-005）和国家自然科学基金（批准号：12274374）资助的课题。
感谢湖南大学整车先进设计制造技术全国重点实验室为本研究提供的支持。

† 通信作者.E-mail: gzqin@hnu.edu.cn
第一作者.E-mail: tianqk@hnu.edu.cn

1 引言

随着高功率芯片、宽禁带/超宽禁带半导体、热电转换器件、异质集成与先进封装技术的快速发展，热输运问题已不再局限于单一材料热导率或热容等参数的测定，而逐步演化为贯穿“材料—界面—结构—器件”的跨尺度热设计问题。对于实际电子与能源器件而言，热量首先在原子尺度上表现为声子、电子及其相互作用所决定的本征热物性，随后在异质界面、缺陷区域、键合层和热界面材料中受到热边界阻力、振动谱匹配和局域结构重构的调制，最终在芯片、封装、冷板和散热系统中表现为热点温升、温度非均匀性、热失配应力和服役可靠性等宏观问题^[1]。因此，现代热传导研究的关键已由“获得某一热参数”转向“理解热参数如何产生、如何跨尺度传递并如何服务器件级热设计”。

传统基于密度泛函理论（Density Functional Theory, DFT）、声子玻尔兹曼输运方程（Phonon Boltzmann Transport Equation, BTE）、分子动力学（Molecular Dynamics, MD）、有限元和计算流体力学（Computational Fluid Dynamics, CFD）等方法，能够在各自尺度上提供较高精度的物理描述，但也面临计算代价高、可探索材料和结构空间有限、不同尺度之间参数传递不充分等问题^[2-5]。特别是在复杂异质界面、非均匀热源、多层封装和液冷热管理结构中，仅依赖单一尺度的计算或经验修正，已难以满足快速筛选、机理解析和工程优化协同推进的需求。

人工智能尤其是机器学习（Machine Learning, ML）为跨尺度热设计提供了新的信息处理与决策机制，但并不取代 DFT、BTE、MD、FEM 或 CFD 等物理求解器。机器学习可从实验和高保真计算数据中学习结构—性质或结构—场响应映射，用于高通量预测、机器学习势函数构建、代理建模与不确定度估计；主动学习、贝叶斯优化和生成式模型则可进一步决定新增样本的优先级或提出满足目标约束的候选。相反，NSGA-II、MOEA/D 和经典拓扑优化本质上属于搜索或物理约束优化方法，只有在与学习型代理模型、获取函数、生成模型或数据驱动决策模块耦合时，才构成本文所称的“AI 赋能”流程。

与按照预设顺序传递少量确定性参数的传统串行多尺度建模相比，AI 赋能

跨尺度热设计的本质区别不在于每个尺度都使用神经网络，而在于四类可学习环节：其一，利用主动学习自适应选择最有信息增益的计算或实验样本；其二，将原子轨迹、局域结构和频率分辨热流等高维信息压缩为带状态标签的低维参数或潜在表示；其三，把材料和界面参数的不确定度继续传播至器件热点、热阻和可靠性指标，而不是在尺度切换时将其丢弃；其四，根据器件级目标和实验偏差反向更新候选空间、训练数据与参数模型。只有当上述至少一个环节形成数据驱动的自适应闭环时，AI 才不仅是“更快的计算器”，而是尺度间信息组织和设计决策的组成部分。

为避免概念泛化，本文按照“物理求解—学习建模—搜索决策—实验校准”四类功能组织相关方法。表 1 明确区分各类方法是否天然属于 AI、在跨尺度链条中的输入输出以及必须保留的物理约束。此后各章均以该分类为准：高保真物理模型负责生成可信数据和守恒约束，机器学习负责表示、预测与不确定度建模，优化算法负责搜索，实验负责校准和闭环验证。

表 1 跨尺度热设计中 AI 方法与传统物理/优化方法的角色边界

Table 1. Role boundaries between AI methods and conventional physical/optimization

methods in cross-scale thermal design.				
方法类别	是否天然属于 AI	跨尺度主要作用	典型输入/输出	适用边界与验证要求
DFT/BTE/MD、FEM/CFD	否	生成高保真标签，求解微观输运或连续体守恒方程	结构/边界条件→能量、力、热物性或温度场	精度受模型假设、尺度与计算成本限制；需收敛和实验校验
监督学习、图网络与代理模型	是	学习结构—性质或设计—响应映射，压缩高成本求解	描述符/结构/工况→热物性、场变量及预测区间	仅在训练适用域内可信；需外部测试与不确定度评估
机器学习势函数与原子基础模型	是	学习势能面并扩展原子模拟时空尺度	原子构型→能量、力、应力与热输运轨迹	能量/力误差不足以证明输运可信；需声子、热导和界面量验证
主动学习、贝叶斯优化、生成式模型与强	是	自适应选择、目标导向候选生成和序贯决策	目标/约束/不确定度→下一样本或候选结	需满足物理稳定性、可制造性和实验可验证性

NSGA-II、 MOEA/D 等 进化优化	否	搜索多目标非支 配解并展示工程 权衡	目标函数与约 束→Pareto 解 集	不自动提供物理知识或不确 定度；与学习模型耦合后才 属于 AI 赋能
经典拓扑优化	否	在守恒方程约束 下生成材料/流体 分布	设计域、方程 与目标→拓扑 结构	需网格、正则化与制造约 束；AI 可用于代理评估和 生成搜索
实验测量与数 字孪生校准	实验本身 否；学习 校准可属 于 AI	校准参数、验证 模型并驱动数据 回流	测试数据→参 数后验、模型 修正与设计更 新	需报告测量不确定度、样品 状态和工况一致性

为进一步避免多层级内容之间的割裂，本文将“人工智能赋能跨尺度热设计”的主线概括为“数据—模型—参数传递—器件优化—实验验证”的闭环链条，如图 1 所示：在数据层，实验测量、第一性原理计算、声子 BTE、分子动力学和高通量数据库共同提供热导率、热容、声子谱、界面结构、界面热导和器件温度场等多源信息；在模型层，描述符模型、图神经网络、机器学习势函数、代理模型和多目标优化算法分别承担快速预测、原子级采样和器件级搜索任务；在参数传递层，材料热导率、热容、热膨胀系数和声子谱等体相参数为界面模型提供基础输入，界面热导、界面热阻、频率分辨热流和温度依赖关系进一步转化为连续介质模型中的边界条件或等效热阻，最终服务于器件级热点抑制、热路径重构、冷却结构优化和实验验证。由此，材料、界面与器件三个层级不再是并列展开的综述对象，而是由“基础热物性—界面热边界参数—器件热管理指标”串联起来的连续设计链条。

基于这一认识，本文以“人工智能赋能的跨尺度热设计”为核心，围绕从原子到器件的热设计参数生成、传递与优化过程展开综述。第 2 章首先讨论先进热功能材料的人工智能辅助设计，重点介绍热物性高通量数据生成、机器学习模型构建、模型优化控制及其在热传导材料筛选中的应用，强调材料层级热导率、热容、热膨胀和声子谱等参数是后续界面分析与器件仿真的基础输入。第 3 章进一步聚焦基于机器学习势函数的界面热输运原子级设计，讨论面向异质固固界面、二维范德华界面和固液界面的势函数构建、验证与机理解析，并阐明界面热导、

界面热阻、频率分辨热流和各向异性热参数如何作为跨尺度桥接量传递至连续介质和器件模型。第4章则面向器件层级热设计与优化，综述机器学习在先进封装热路径协同设计、冷板/微通道散热器代理建模、多目标优化、拓扑生成、可制造性约束和实验闭环验证中的应用，突出人工智能方法在复杂结构空间搜索与工程热管理决策中的作用。

总体而言，本文希望说明人工智能赋能热传导研究的核心价值，不仅在于提高单个热物性预测或单次仿真的效率，更在于推动热设计范式由孤立尺度上的计算分析，转向材料筛选、界面调控、结构优化与器件验证相互贯通的跨尺度协同设计。通过梳理现有研究进展、适用边界和关键瓶颈，本文旨在为面向高功率电子、宽禁带半导体、先进封装和智能热管理系统的“从原子到器件”热设计提供参考。

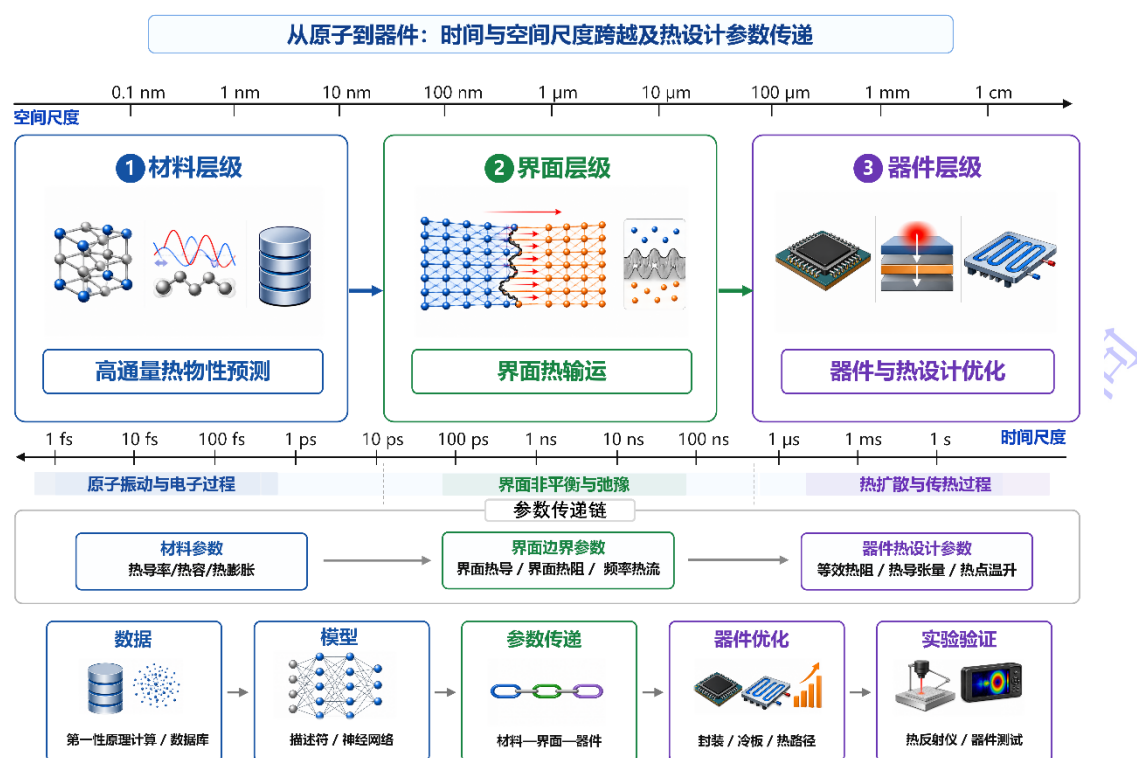


图1 人工智能赋能跨尺度热设计的统一框架：从材料参数、界面热边界参数到器件热设计参数的传递及“数据-模型-参数传递-器件优化-实验验证”闭环逻辑

Fig. 1 Unified framework of AI-enabled cross-scale thermal design, showing the transfer from material parameters and interfacial thermal-boundary parameters to device-level thermal-design parameters, together with the closed-loop workflow of

data, models, parameter transfer, device optimization, and experimental validation.

2 机器学习辅助的热物性预测与目标导向材料设计

跨尺度热设计的材料层级既包括热物性的准确获取,也包括围绕目标性能与工程约束开展候选生成和验证。晶格热导率、热容、热膨胀系数、弹性参数、德拜温度、Grüneisen 参数以及声子谱特征是界面与器件模型的基础输入^[6,7]; 但当这些预测量进一步参与目标函数定义、候选搜索、多目标筛选和高保真回验时,正向预测才转化为完整意义上的材料设计。因此,本章首先梳理热物性数据与预测模型,随后专门讨论从正向预测走向目标导向设计的实现路径。

需要指出的是,材料层级的人工智能辅助设计并不等同于对单一热导率数值的快速预测。对于跨尺度热设计而言,更有价值的输出应是包含晶格热导率张量、温度依赖热容、热膨胀系数、弹性参数、声子谱特征及其不确定度在内的材料热设计参数集合。这些参数既可用于界面热输运模型中的材料侧输入,也可进一步转化为器件级有限元、CFD 或机器学习代理模型中的边界条件和本构参数。因此,本章讨论的重点不仅是机器学习如何提高热物性预测效率,还包括其预测结果如何经过物理一致性检验并可靠传递至后续界面与器件层级。

在全文框架中,本章承担“数据生成—性质预测—候选生成—约束筛选—参数输出”的前端功能。其输出不再局限于室温标量热导率,而是包含温度、晶向、尺寸、缺陷状态和不确定度标签的材料参数包,并为第 3 章的界面组合选择及第 4 章的器件模型提供可追溯输入。

2.1 基于机器学习的热物性高通量计算

在现代科学与工程诸多场景中,材料热物性的准确预测正变得愈发关键,尤其是对非金属固体中由晶格振动主导的晶格热导率 κ ,以及与声子热输运紧密

相关的热容 (C_v/C_p)、德拜温度与 Grüneisen 参数等^[1,8]，这些物理量共同决定了材料从原子尺度声子动力学到器件热管理模型的基础输入，因此其可靠预测是支撑材料在不同热管理场景中实现定向设计与性能优化的核心前提。一方面，在航空发动机、燃气轮机等高温热防护领域，热障涂层与隔热材料需要尽可能抑制热量向基体传递，因此低热导率及其相关热物性是决定隔热性能与服役可靠性的关键指标^[9,10]；另一方面，在高功率半导体领域，余热高效扩散亟需高热导材料与结构作为支撑。对于这些非金属固体，传热过程主要由声子主导^[11]；基于声子气体模型的经典动力学理论虽为热导率提供了初步估算方法^[12]，但仅能给出粗略结果，难以满足当前高功率、高精度器件的设计要求。作为材料传导热能的核心固有属性， κ 等材料热物性的精准表征与深度理解，已成为现代科学研究、先进工程研发及能源技术创新的核心诉求^[13-21]。

尽管理解并调控材料热传输能力至关重要，但仅凭晶体结构准确预测热物性仍极具挑战。以热导率为例，早期研究多依赖经验模型进行理论估算，如 Debye-Callaway 模型^[22-24]与 Slack 模型^[25]等；这类模型计算高效，却难以充分刻画声子散射与传输的微观细节，因而精度受限。与此同时，基于经验势并结合牛顿运动方程的平衡与非平衡分子动力学 (Equilibrium Molecular Dynamics/Nonequilibrium Molecular Dynamics, EMD/NEMD) 模拟被广泛用于表征多类材料的热输运性质，但其可靠性在很大程度上取决于经验势对原子间相互作用的描述能力^[26]。更高精度的路径是将第一性原理计算与声子玻尔兹曼输运方程结合，从原子结构出发数值求解 κ ，近年来基于第一性原理的 BTE 方法逐渐成熟^[5]，并成为构建高可信热输运标签的重要手段。然而，即便对于原胞并不复杂的体系，该类计算通常仍涉及大量力常数与高密度 q 点采样，流程繁琐且计算代价高昂^[27-29]，因而难以支撑面向大材料空间的高通量筛选。尽管已有少量高通量

筛选低 κ 材料的成功探索^[8,30]，但面向目标导热性能的快速、稳健设计仍受到两方面因素制约：一是 κ 与原子结构之间存在高度非线性且多因素耦合的复杂映射关系，二是高精度计算成本难以承受。基于此，亟需发展兼具效率与精度的预测模型，以支持热材料的高通量筛选与定向设计。

机器学习通过从已有样本中学习“结构—性质”的统计映射关系，能够在保持可接受精度的同时将单次预测成本显著降至远低于 DFT/BTE/MD，从而把热物性评估从“逐个材料求解”转变为面向大材料空间的快速筛选与迭代优化^[2]。伴随开放材料数据库持续积累可追溯的第一性原理数据，ML 模型获得了跨化学空间训练与迁移的基础^[3]，尤其是以晶体图卷积神经网络 (Crystal Graph Convolutional Neural Network, CGCNN) 为代表的深度学习方法，可直接从晶体结构层面构建通用表征，并端到端预测多类材料性质，减少对手工特征的依赖并提升泛化能力^[31]。因此，将 ML 作为连接高精度计算与大材料空间探索的“加速层”，非常适合支撑材料热物性的高通量研究与面向应用的定向设计^[32]。

2.2 面向热物性预测的高通量数据生成与机器学习建模方法

2.2.1 高通量数据来源与处理

在面向热物性的机器学习高通量研究中，数据体系的构建与规范化整理是决定模型上限与筛选可信度的关键环节。传统的 EMD/NEMD 计算精度大大依赖经验势，而 BTE 方法计算代价对大规模材料空间而言仍较高，从而难以直接承担高通量筛选的主力任务；相较之下，基于机器学习的数据驱动方法通过“样本—标签”范式构建材料结构与热物性之间的映射模型，在保证预测精度处于可接受范围的前提下，可大幅降低单次热物性评估的时间与计算成本；但其规模化应用的前提是具备可扩展、可追溯的数据底座作为支撑^[4]，而该数据底座的高效构建，核心

在于实现大量高质量数据的获取与处理。

从数据来源看，热物性标注通常由实验数据与计算数据两条路径互补获得。实验数据最贴近应用场景，但受制于测试条件（温度、样品形貌、缺陷与晶界等）差异，往往呈现离散与噪声并存的特点，因此需要通过文献与数据库汇编形成统一口径的数据集，并对测量条件与样品信息进行结构化记录。例如，Qin 等人^[33]开发的用于预测材料热导率的机器学习模型，就是从公开文献与数据库汇总建立了数百种材料的实验晶格热导率数据集，展示了以基础材料性质为输入实现快速预测的可行性。计算数据可对实验数据稀缺的区间形成有效补充：一方面，基于第一性原理结合声子 BTE 的高精度计算能够充当可靠的“锚点标签”，典型实现如 ShengBTE 等求解器，其在众多体系的热输运研究中已形成较为成熟的软件框架与计算流程^[5]；同时面向无机材料开展的高通量声子数据发布工作，也为构建可复用的声子相关标签提供了重要支撑^[34]；另一方面，低成本近似模型可用于预筛或构建弱标注先验，例如准谐德拜模型结合弹性与体积信息实现热导率、德拜温度与 Grüneisen 参数的快速估算，已被用于高通量筛选任务并作为经验参照体系^[35]。在高通量场景中，实践上更常采用“分层数据策略”，即以少量高可信标签（实验或高精 DFT/BTE）校准模型偏差，再结合大规模结构库与低成本近似标签扩展覆盖面，从而在成本与精度之间取得平衡^[33,35]。

在数据整理与质量控制方面，高通量热物性数据需要从“可获得”转化为“可学习”，要实现这一目标，需要从标准化、可追溯性与工程化管理等多个维度系统推进。首先，应当完成统一的单位与温度口径对齐，并明确样本的结构状态与相信息（稳定相/亚稳相、单晶/多晶、是否存在显著微结构效应）；对 κ 这类跨数量级分布的性质，采用对数尺度存储与建模通常更利于稳定训练并降低长尾样本对损失函数的主导作用^[33,36]。其次，应当以元数据形式记录数据来源、测试或计算方

法、温度点、材料类型标签（例如晶体结构族、是否含重元素、是否为半导体/绝缘体等），以支持后续分组评估与外推风险识别；对于明显的离群值，宜保留可追溯的剔除规则或单独标记，以避免训练过程将异常噪声误学为规律。再次，高通量数据体系需要具备持续增量更新能力：当高精度标签昂贵时，可通过主动学习或贝叶斯优化^[37]等策略优先选择最具信息增益的候选样本进行补算或补测，以更少的标注成本提升模型泛化能力并加速筛选闭环^[36]。最后，数据生产与入库过程本身也应工程化与可审计。面向大规模计算与多源数据融合，AFLOW 等自动化框架与数据库实践证明了标准化工作流在材料大数据构建中的价值^[4]；而 AiiDA 等可复现 workflow 基础设施通过 *provenance* 记录、自动化执行与错误恢复机制，使得热物性数据从一次性结果转变为可复用、可扩展的研究资产，为后续模型迭代与跨团队复核提供了可靠保障^[38]，由数据构建、特征表征到机器学习预测的整体关系概括于图 2(a)。综上，实验与多层级计算协同的数据获取、标准化清洗与元信息对齐、以及面向增量更新与可复现的工程化管理，共同构成了热物性机器学习高通量研究中数据来源与处理的关键方法学基础。

2.2.2 机器学习模型建立与评估

在完成热物性数据的对齐、清洗与入库之后，机器学习建模便成为高通量研究从“数据可用”走向“筛选可用”的核心环节。与直接依赖高代价声子输运计算不同，数据驱动方法通过学习材料表征与热物性标签之间的统计映射，使热物性参数能够以接近常数的推理成本被快速评估，并为后续机理归因与闭环验证提供统一的技术框架。材料机器学习的系统性综述与最佳实践工作普遍强调，模型需要与明确的任务定义、可复现实验流程以及可度量的评估准则绑定，才能真正服务于材料发现与工程设计^[2]。

模型构建通常遵循一条相对稳定的流程，其逻辑可以概括为：确定预测任务与标签形式、选择学习器并训练、再用误差分析推动迭代改进。已有量化研究表明，不同模型的优势与数据规模、表征方式和预测对象密切相关。以实验小样本热导率预测为例，Chen 等基于 100 种无机化合物的实验晶格热导率数据建立了高斯过程回归—递归特征消除模型（Gaussian Process Regression-Recursive Feature Elimination, GPR-RFE），其中 95 个样本用于训练、5 个样本用于外部测试；当训练集扩大到约全部数据的 80% 时，测试均方根误差（Root Mean Square Error, RMSE）收敛至 0.28，测试集决定系数（Coefficient of Determination, R^2 ）达到 0.93 以上，而去除空间群这一关键结构特征后，5 个外部样本的 RMSE 又会由 0.12 升高到 0.39，表明 GPR 类方法在小样本条件下更适合兼顾预测精度与外推风险识别^[39]。在更大规模筛选任务中，Qin 等比较了 15 种机器学习算法，发现深度学习结合半监督策略能够处理跨 4 个数量级的热导率预测，并进一步对 3716 种新材料进行外推筛选^[33]；Zhu 等则结合 CGCNN 与随机森林，对约 10^5 种已知无机晶体开展热导率制图，在留出 20% 测试集时两类模型均达到平均绝对误差（Mean Absolute Error, MAE） < 0.15 、 $R^2 > 0.85$ ，并且在 132 个已有实验值中，随机森林和 CGCNN 分别有 63 个和 66 个样本落在 2 倍误差范围内，说明树集成模型和图神经网络更适合承担大材料空间中的候选排序与高通量制图任务^[40]。对于声子谱及其派生热力学量这类更复杂输出，Gurunathan 等利用超过 14000 个声子态密度数据训练原子线图神经网络（Atomistic Line Graph Neural Network, ALIGNN）模型，并进一步扩展到约 40000 种材料的声子谱与相关性质预测，显示出谱学习模型在“结构—声子谱—热物性”链条上的更强表达能力^[41]。

除端到端预测外，将深度结构表征与可解释模型分阶段耦合，是兼顾预测能力与物理解释性的另一类重要路线。Hu 等提出了两阶段可解释机器学习框架：

第一阶段利用晶体图卷积神经网络从晶体结构中预测与晶格热输运相关的基础物理参数，第二阶段再将这些中间物理量输入可解释模型，建立基础材料参数与晶格热导率之间的显式映射关系。该方法将传统的“晶体结构—热导率”黑箱预测转化为“晶体结构—中间物理参数—晶格热导率”的分层建模过程，在保留图神经网络结构表征能力的同时，提高了模型结果的可追溯性与物理可解释性^[42]。这类分阶段建模策略尤其适合用于高通量候选筛选，因为其不仅能够给出热导率预测结果，还可以进一步分析哪些弹性、热力学或声子相关参数主导模型判断。

在具体算法层面，线性回归与岭回归常被用作可解释基线，用于快速建立热物性与若干基础材料量之间的一阶关系，并形成可复核的经验参照^[33]；核方法如支持向量回归 (Support Vector Regression, SVR) 在中小数据规模下常用于捕捉非线性耦合，并已在晶格热导率预测任务中得到应用；高斯过程回归则因能够同时输出预测与不确定度，在热物性稀缺或噪声较强的情形下，更适合开展可信度筛选和后续主动学习^[39]，训练样本规模对模型误差的影响及代表性预测结果分别如图 2(b)和图 2(c)所示。另一方面，基于树的集成模型如随机森林与梯度提升类方法在材料性质预测中应用广泛，常用于建立强基线并提供特征重要性以辅助物理解释；已有工作利用此类模型或其与深度表示的组合，实现了对大规模无机晶体库的热导率制图并用于筛选热电候选^[40]。近年来，深度学习进一步扩展了可建模的热物性类型与表征粒度。以晶体图神经网络为代表的结构端到端方法，能够直接从晶体结构学习表示，在多类材料性质预测中体现出强泛化潜力^[31]。更重要的是，热物性并不必局限于单一参数，基于声子谱学习的路线提供了更直接的“中间物理量”桥梁。例如，ALIGNN 被用于预测声子态密度并由此导出热容、振动熵等热力学量，为热物性高通量提供了从“结构到谱再到性质”的可复用范式。因此，在实际筛选任务中常见的策略是分层建模，先以稳健的传统模型完成大范围预筛，

再用结构深度模型或谱学习模型对重点候选进行高置信复核与机理侧证，从而兼顾吞吐量与可靠性^[43]，为更清晰地展示不同机器学习模型在热物性高通量预测中的方法特点与适用定位，表 2 对相关典型模型进行了归纳总结。

表 2 面向热物性高通量预测的典型机器学习模型、适用场景及主要局限

Table 2. Typical machine learning models for high-throughput prediction of thermophysical properties, their applicable scenarios, and main limitations.

算法模型	输入表征方式	核心特点	典型任务	典型数据规模与评价侧重	适用边界与主要局限
线性回归/岭回归 ^[33]	人工描述符	简单、快速、可解释性强	一阶关系检验、经验基线构建	小样本 (10^2 以内); 侧重 MAE/RMSE 与可解释性	适合建立基线和识别主导描述符，但难以刻画复杂非线性声子散射关系
支持向量回归 ^[39]	人工特征/低维特征	适合中小样本非线性建模	标量热物性预测	中小样本 (10^2 量级); 侧重非线性拟合精度	适合数据量有限的标量预测，但对特征选择和核函数参数较敏感，外推能力有限
高斯过程回归 ^[39]	人工特征+特征工程	可输出不确定度	小样本热导率/热容预测、主动学习选择	小样本 (10^2 以内); 侧重 RMSE、 R^2 与不确定度	适合高成本标签和主动学习场景，但难以直接扩展到超大规模数据集
树集成模型 ^[40]	表格型描述符	鲁棒、精度较高、可解释性较好	大规模预筛、候选排序、热导率制图	中大规模 (10^3 - 10^5); 侧重 MAE、 R^2 与排序能力	适合候选筛选和特征重要性分析，但依赖描述符质量，对结构细节和谱信息表达不足
晶体图神经网络 ^[31]	晶体结构图	端到端结构学习	多性质统一预测、大规模结构库筛选	大规模 (10^4 及以上); 侧重泛化能力与测试集误差	适合跨材料空间预测，但训练成本较高，外推到新结构

					族时需谨慎验证
原子线图神经网络 ^[41]	结构+局域拓扑/声子谱关联信息	可连接结构与谱学信息	声子态密度、热容、振动熵等谱相关热物性预测	大规模谱数据 (10^4 量级); 侧重谱预测与派生性质精度	适合谱学相关热物性预测, 但依赖高质量声子谱数据, 模型解释性和实验闭环仍需加强

机器学习模型构建完成后, 为保障其预测准确性, 需对模型的预测性能开展系统性评估; 而面向高通量筛选场景的模型评估, 不应仅止步于单次随机划分的误差统计, 还需同时明确三个核心问题: 数值精度是否具备稳定性、外推风险是否处于可控范围、筛选结果是否能经受外部验证。实践上, 除平均绝对误差、均方根误差和决定系数等常规指标外, 还应采用交叉验证与按化学体系或结构族分组的划分方式来检验模型在“未知材料”上的泛化能力, 并在任务允许时引入标准化基准测试以降低不同工作之间的比较偏差。**Matbench** 等基准套件为材料性质预测提供了统一评估语境, 也凸显了数据划分与数据泄漏控制对结论可靠性的决定性作用^[44]。对热物性预测而言, 不确定度评估同样关键, 它既可用于识别适用域、避免过度外推, 也可为后续增量标注提供依据; 以不确定度为核心的主动学习策略已在材料领域形成成熟方法学总结, 并用于指导计算与实验资源的高效投入^[45]。更具说服力的评估往往来自“预测—筛选—验证”的闭环证据链, 例如基于机器学习的热导率制图工作将筛选结果推进到实验热电性能验证, 而热容预测研究则在模型训练后用实验测量进行一致性检验, 从而把统计意义上的准确性转化为应用意义上的可信度^[40]。随着可预测对象从标量热物性扩展到声子谱与色散关系, 面向可变维度输出的图神经网络方法也已被提出, 并用于快速构建大规模声子数据库, 为热物性高通量奠定了新的验证与应用场景^[46]。虚拟节点方法的基本思想及

其代表性声子能带预测结果分别如图 2(d)和图 2(e)所示。

2.2.3 机器学习模型优化与控制

在上述可信度评估的基础上，面向热物性高通量筛选的机器学习模型还需通过持续优化与迭代，进一步降低标注成本、扩大适用域并提升预测结果的鲁棒性与可复现性。其核心优化方向在于：利用半监督学习、主动学习、集成模型和不确定度引导策略，在有限高质量标签条件下增强模型的跨域外推能力，并在大规模材料空间中降低误选与漏选风险。

面向热物性高通量筛选的机器学习模型，在完成数据集构建与初步性能验证后，仍需持续优化与迭代，其核心优化方向在于：以更低的标注成本增强模型的跨域外推能力，同时在大规模材料空间中维持预测结果的鲁棒性与可复现性。由于高质量热物性标签（无论来自高精度计算还是实验测量）通常难以逐一获得，单纯依赖完全监督学习容易受限于标注集规模与分布覆盖。为此，不完全监督策略逐渐成为热物性高通量中的重要组成，包括半监督学习与主动学习等，通过引入大量未标注样本或以不确定度引导补标注，以实现模型泛化能力的持续增强。例如 Qin 等人的研究表明，将半监督与主动学习框架结合交叉验证，可在多个结构类型材料集合上获得更稳健的预测表现，原因在于半监督方法能够有效利用未标注数据中的分布信息，从而降低对标注数量的依赖并提升了外推性能^[33]。

在鲁棒性控制层面，高通量筛选的风险主要来自两类情形，即分布漂移导致的外推失真，以及长尾区间（超高或超低热参数）候选的误报或漏报。实践中，集成模型与不确定度估计常被用作“稳态器件”，以降低单一模型偶然误差对筛选结论的放大效应。深度集成通过多模型平均或分歧度刻画，可以实现对预测波动的压缩与置信排序的生成，在工程可用性与实现复杂度之间具有良好平衡^[47]。在

热物性预测任务中，多模型集成不仅有助于提高整体误差稳定性，也有利于在尾部分布区间降低误选风险，使模型更适用于先大规模扫描、再小规模验证的筛选逻辑^[48]。此外，基于不确定度的贝叶斯优化被证明能够显著提升目标导向搜索效率，在热输运材料发现中，可通过预测值与不确定度联合的准则，快速锁定候选并减少昂贵标注的冗余投入^[36]。与此相配合，物理启发的近似模型可作为外部参照与一致性检查手段，例如准谐德拜或优化的 Slack 形式在热物性筛选中常用于提供可解释的先验尺度；当经验模型与机器学习预测在部分材料上出现数量级偏差时，这类差异既提示经验模型适用域的局限，也为后续的高精度验证提供了优先级线索，从而形成模型对比—异常定位—重点补算的稳健策略^[35]。

在此基础上，数据驱动方法还可进一步由黑箱预测转向具有明确物理量纲和解析形式的公式提炼。Wang 等以 Slack 模型及声子输运物理为基础，结合相关性分析筛选关键描述符，建立了一个面向无机二元和三元晶体的可解释晶格热导率公式。该公式将剪切模量、体积模量、声速和 Grüneisen 参数等与晶格热输运密切相关的物理量纳入统一表达，在测试数据上的平均相对误差约为 8.97%，且能够在较低计算成本下完成大规模材料预测^[49]。作者进一步利用该公式预测了 Materials Project 数据库中 4601 种二元材料和 6995 种三元材料的晶格热导率，并识别出潜在高热导 AlBN_2 和低热导 Cs_2Se 候选，表明具有物理约束的显式公式能够同时服务于机理解释和高通量材料筛选。需要指出的是，这类公式虽然较黑箱模型具有更好的可解释性和计算效率，但其可靠性仍受训练数据库、输入参数精度及适用假设制约，对于强非简谐、缺陷丰富或存在相变的复杂体系，仍需通过高精度声子计算或实验结果进行验证。

除精度与鲁棒性外，高通量模型能否真正服务筛选任务，还取决于效率与复现能力。一方面，推理效率需要达到秒级或亚分钟级，以支撑对成千上万乃至更

大规模候选库的快速评估；比如 Zhu 等人的工作不仅展示了模型在单个测试集上的快速预测能力，并且进一步实现了对数千新材料的外推预测与候选扩展，体现了机器学习对高通量热物性筛选的现实支撑^[40]。另一方面，复现能力要求将数据版本、特征计算、模型配置与评测协议固化为可追溯的工作流，避免“同一任务不同脚本得到不同结论”的不可控风险。高通量材料平台与自动化框架的长期实践表明，将计算流程模块化并记录 *provenance*，可显著提升跨团队复核与长期迭代的可靠性^[4,38,44]。进一步地，标准化基准与统一划分协议有助于在不同模型与不同数据集之间建立可比性，为“模型是否真正更稳、更能外推”提供清晰证据链，并推动热物性预测从一次性结果走向可持续的筛选引擎^[44]。

综上，面向热物性高通量筛选的机器学习方法并不存在脱离任务情境的“最优模型”，其有效性首先取决于数据条件与目标需求的匹配。总体而言，基于人工描述符的线性模型、核方法和树集成模型更适合样本规模有限、可解释性优先的快速预筛任务；引入不确定度量化的高斯过程、深度集成和主动学习策略，则更适合高成本标签条件下的增量优化与候选排序；结构端到端模型和谱学习模型则更适用于结构复杂、输出维度更高的统一预测问题。当前这类方法的主要瓶颈并不只在于模型精度本身，更在于跨温度、跨结构族和跨来源口径的数据仍然稀缺，不同研究之间的数据划分方式、评价指标与外部验证标准也尚未统一，导致模型性能仍难进行严格横向比较。未来更具潜力的突破方向，应是构建包含温度、缺陷、微结构与不确定度信息的多保真数据体系，并将物理约束、标准化基准测试和可复现实验流程进一步嵌入建模闭环之中，使热物性机器学习模型由“能够预测”进一步走向“能够比较、能够外推、能够支撑筛选决策”。

2.3 机器学习高通量热物性预测在热传导领域的典型应用

机器学习高通量范式之所以能够在热物性研究中生根发芽乃至快速发展，根

本原因就在于它把昂贵的声子 BTE、DFT、MD 等计算或实验测量转化为可快速调用的替代模型，使单次评估从数小时到数天压缩到数秒乃至毫秒，从而把筛选的主战场从少量候选扩展到大规模材料空间。更重要的是，机器学习不仅提供点预测，还可以与不确定度估计、集成学习和主动学习结合，形成“预测—校准—再学习”的闭环，在给定计算预算下持续提升覆盖面与可信度，并以数据驱动的方式实现对目标热物性的反向搜索与结构建议^[50]。然而，机器学习高通量预测在热传导领域中的作用并不应被理解为直接给出最终可用材料或最优结构，而应被定位为在大规模候选空间中完成快速制图、候选压缩和参数初筛；其结果仍需结合物理一致性检验、高精度输运计算、界面兼容性分析和实验验证，才能进一步进入界面调控与器件热设计环节。

在具体应用层面，机器学习高通量对热传导研究的助力作用主要体现在三类场景中。其一是热管理与散热材料的快速筛选与定向选材，既包括面向高导热散热基底、封装与界面材料的高 κ 候选与识别，也包括面向热隔离与热整流器件的低 κ 发掘。以无机晶体的晶格热导率制图为代表，Zhu 等结合随机森林与晶体图神经网络，对 Inorganic Crystal Structure Database 中约 10^5 种已知无机晶体进行了 κ 预测，而当时原先具有 κ 数据记录的材料不足 5%。以 132 个实验值作为外部参照时，随机森林和晶体图神经网络分别有 63 个和 66 个样本落在 2 倍误差范围内；若放宽到 3 倍误差，对应样本数则分别增至 88 个和 86 个。基于该制图结果，作者进一步锁定了稀土硫属化合物候选，并通过实验获得了 $ZT > 1.0$ 的结果，表明高通量热导率预测已能够从大规模材料制图推进到候选验证^[40]。进一步地，热物性高通量也已由单一标量 κ 预测扩展至声子谱及其派生热力学量。Gurunathan 等利用超过 1.4 万条第一性原理声子态密度数据训练 ALIGNN 模型，并进一步将其外推至约 4 万种材料的声子谱与相关性预测；相关统计表明，约 78% 的样本

其声子态密度预测 MAE 低于 0.086，由此可进一步导出热容、振动熵和同位素散射率等性质^[41]。与此同时，Moosavi 等基于量子力学计算与实验数据构建了多孔材料热容预测框架，并完成实验校验，说明热物性高通量正在从单一热导率筛选拓展为可直接服务热设计与仿真的多参数数据底座^[51]。面向聚合物体系，数据驱动策略同样被用于探索超高导热聚合物的分子结构设计与筛选路径。图 2(f)展示了由化学片段生成、分子动力学数据获取、机器学习预测到结构—性质解释的完整流程，体现了机器学习对传统经验难以覆盖空间的补位价值^[52]。需要注意的是，这类高 κ /低 κ 材料筛选通常只能作为候选排序和材料空间压缩的依据，并不能直接等同于工程可用材料。对于散热材料而言，高热导率还需与热膨胀匹配、力学稳定性、界面结合强度、加工可行性和长期服役可靠性共同满足；对于隔热或热电材料而言，低热导率也需要与相稳定性、电输运性能、服役温度窗口和结构耐久性协同考虑。因此，材料层级的机器学习筛选更适合作为后续高精度 BTE/MD 计算、界面建模和实验验证的前端入口，而不是最终判据。

其二是热电材料与热功能材料的加速发现，其核心任务往往是系统性搜索超低晶格热导率与可接受电输运的组合；如 Seko 等人利用贝叶斯优化等策略实现在数万量级化合物空间中高效定位低 κ 候选，证明了搜索策略结合代理模型对筛选效率的决定性作用^[36]。近期也有以尺度不敏感建模等思路实现对超低 κ 候选的加速发现，展示了将模型偏差压缩到可工程使用范围后开展全空间筛选的可行性^[53]。但对于热电材料而言，超低晶格热导率本身并不足以决定材料性能，还必须与载流子迁移率、Seebeck 系数、功率因子、热稳定性和掺杂可调性等因素共同评价。因此，机器学习在该类任务中的主要优势并非替代热电性能的完整计算，而是通过低成本模型快速缩小候选范围，并为后续多物性耦合计算和实验制备提供优先级排序。

其三是纳米结构、超晶格与界面热输运等交叉领域的结构搜索与优化，机器学习尤其擅长处理“组合爆炸”的结构空间。以非周期超晶格为例，主动学习能够在有限标注下，迭代探索结构分布并锁定热输运异常的构型，而机器学习优化的非周期超晶格也展示了对结构序列设计空间的高效压缩能力^[54]。在界面热阻与界面热导工程方面，贝叶斯优化等方法已被用于在多参数空间中快速寻优界面热输运响应，体现了其与器件封装和热界面材料设计的直接连接^[55]，进一步将其与热超材料、热场调控等方向耦合，数据驱动的反问题与逆向设计框架也正在形成系统化方法学储备^[56]。然而，在超晶格、界面和热超材料等问题中，机器学习优化得到的结构序列或界面参数往往仍停留在候选生成和趋势判断层面。真实界面热输运还受到界面成键、粗糙度、缺陷、应变、声子谱匹配和非平衡声子分布等因素影响，单纯依赖代理模型难以完整描述这些原子级机制。因此，该类机器学习方法更适合与机器学习势函数、非平衡分子动力学、频率分辨热流分析和实验热反射测量相结合，将结构搜索结果进一步转化为可验证的界面热导或界面热阻参数。

基于上述应用可以看出，机器学习高通量热物性预测的核心价值并不止于材料候选的初步筛选，而在于将筛选结果进一步转化为可被界面热输运模型和器件级热设计模型调用的参数起点。对于原子尺度界面问题，高通量模型给出的晶格热导率、热容、德拜温度和热膨胀系数等体材料参数，可先用于缩小高导热基底、过渡层和潜在匹配材料的搜索范围，再结合机器学习势函数对界面成键、晶向、应变及缺陷效应进行精细求解，从而把材料筛选进一步推进为界面优化；近期关于 AlN/Diamond^[57] 与 Cu/Diamond^[58] 异质界面的机器学习势研究，以及面向 GaN/BAs 器件^[59] 的深度势跨尺度模拟，已经显示出数据驱动方法由原子级界面建模延伸到器件热管理问题的可行路径。对器件尺度问题而言，高通量阶段获得的

κ 、体积热容和热膨胀系数等体参数，连同界面研究得到的界面热阻及其温度依赖关系，可进一步转化为计算流体力学模拟/有限元模拟方法（Finite Element Method, FEM）与代理模型中的关键输入，用于冷板或微通道结构在热阻、压降与温度均匀性之间的多目标权衡；近期关于液冷冷板分层热建模、深度学习辅助液冷板设计以及微通道散热器替代模型的研究表明，机器学习能够显著降低全场热流体仿真的计算代价，并提高结构搜索效率^[60–62]。由此，热物性高通量预测所形成的参数体系，得以在材料筛选、界面热输运调控和器件热设计之间连续传递，并推动热传导研究由单一尺度分析走向跨尺度协同优化。

2.4 从正向热物性预测到目标导向材料设计

严格意义上的材料设计应从目标与约束出发，而不是止于对既有结构进行性质回归。可将设计任务写为：在候选结构或成分空间中，寻找满足目标热性能的材料，同时约束动力学/热力学稳定性、力学可靠性、元素可获得性、界面兼容性和可制备性。对于散热材料，目标通常不是单纯最大化 κ ，而是联合考虑 $\kappa(T)$ 、热膨胀失配、弹性和界面结合；对于热电材料，则需要在低晶格热导率、功率因子、稳定性和掺杂窗口之间进行多目标权衡。目标函数和约束条件的显式化，是“热物性预测”转化为“材料设计”的第一步。

在候选产生阶段，可采用三种互补路径：对既有数据库进行目标导向筛选；利用贝叶斯优化或主动学习在成分、缺陷、应变和超晶格序列空间中序贯选择下一批高价值候选；或者使用生成式模型与连续潜在空间搜索直接提出新结构。生成模型的价值在于扩大候选空间，而非绕过物理约束；候选仍需通过结构有效性、相稳定性和输运可计算性筛查。反向设计文献已形成“目标性质—潜在表示—候选生成—性质评价”的通用范式，但将其用于热功能材料时必须增加声子稳定性、温度依赖和界面可集成性等热输运特有约束^[63]。

在评价与更新阶段，代理模型应同时输出预测值和置信信息。若候选处于训练分布之外，或多个模型对结果存在明显分歧，则应优先调用 DFT/BTE/MD 或实验补充标签；新增数据再回流训练集，更新模型和候选排序。由此形成的闭环不是一次性的“预测—挑选”，而是“生成—筛选—高保真验证—不确定度更新—再生成”。对于最终进入界面或器件设计的候选，还应输出完整状态标签和误差范围，避免把统计预测直接当作确定性工程参数。

因此，本章所称“目标导向材料设计”有明确边界：机器学习负责压缩搜索空间、提出候选和分配验证预算，高保真输运计算与实验负责判定候选是否真正满足热学及工程约束。若研究只报告随机划分测试误差，而没有目标函数、候选生成、外部分布验证或闭环回验，则更准确的定位仍是热物性预测，而不是完整材料设计。

综上，材料层级方法可分为正向预测与目标导向设计两类任务。前者适合热物性制图和候选压缩，后者还必须包含目标/约束定义、候选生成、序贯验证和不确定度更新。其可向后续尺度传递的结果应为带温度、晶向、尺寸、微结构和置信区间标签的参数包，而不是孤立的室温标量。

在跨尺度链条中，AI 在材料层的真实作用是自适应分配昂贵标签、压缩候选空间并生成可传递的参数后验；高精度 BTE/MD 和实验仍承担最终物理验证。第 3 章将在此基础上进一步判断这些材料参数如何参与界面构型筛选与界面热边界参数提取。

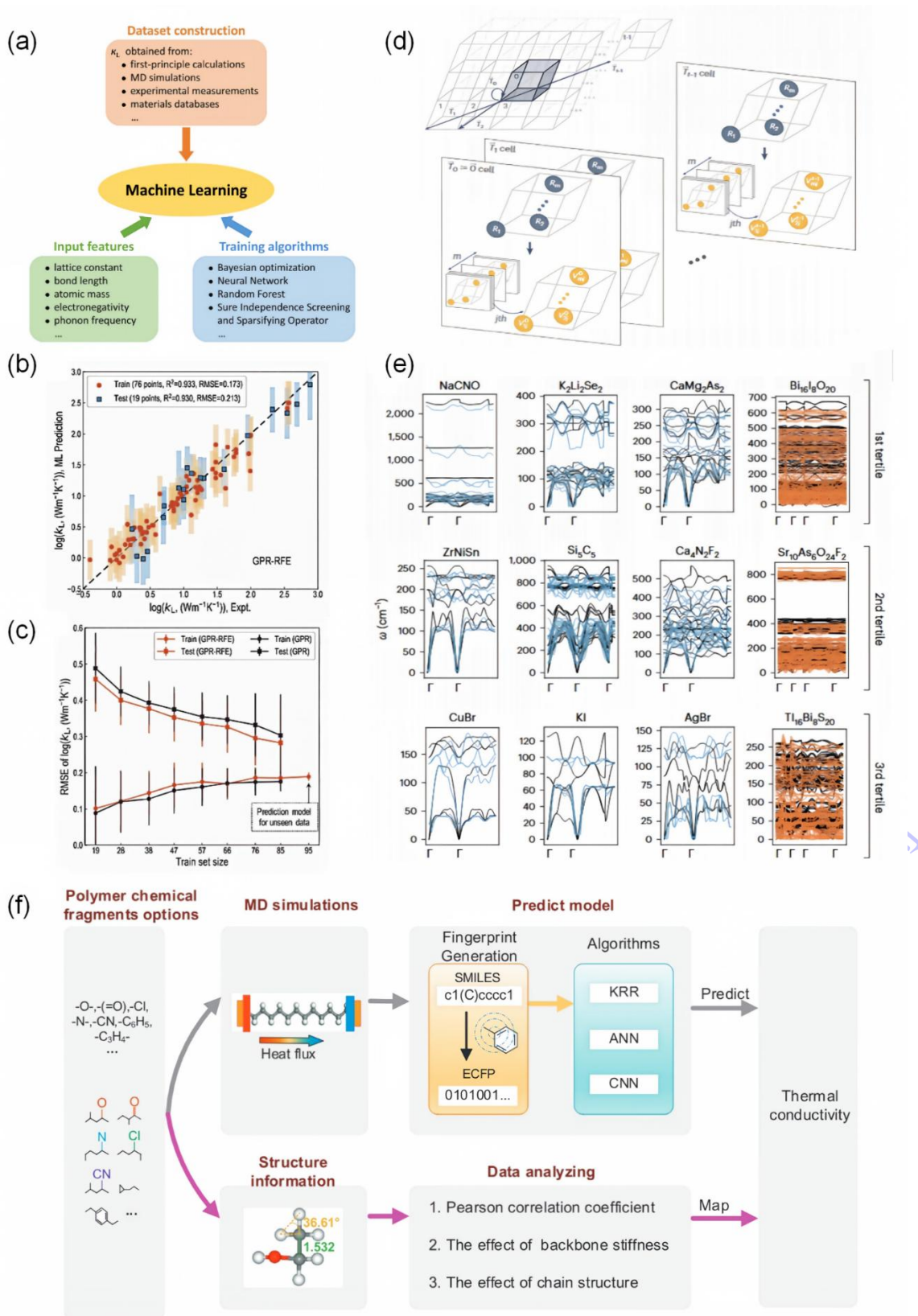


图2 机器学习辅助热物性高通量预测、声子谱建模与材料设计的代表性流程和结果。(a) 机器学习高通量预测晶格热导率的总体流程，包括数据集构建、材料表征与模型训练^[32]；(b) 训练样本量对高斯过程回归模型误差的影响；(c)

GPR-RFE 模型的代表性晶格热导率预测结果^[39]; (d) 基于虚拟节点图神经网络预测完整声子谱的方法示意; (e) 基于高质量 DFT 数据训练和额外测试集获得的代表性声子能带预测结果^[46]; (f) 聚合物链化学结构生成、分子动力学数据获取、热导率预测及结构—性质分析流程^[52]

Fig. 2. Representative workflows and results of machine-learning-assisted high-throughput thermophysical-property prediction, phonon-spectrum modeling, and material design. (a) General workflow for high-throughput prediction of lattice thermal conductivity, including dataset construction, material representation, and model training^[32]; (b) Dependence of Gaussian-process-regression error on training-set size; (c) Representative lattice-thermal-conductivity predictions obtained using the GPR-RFE model^[39]; (d) Virtual-node graph-neural-network framework for full phonon-spectrum prediction; (e) Representative phonon-band predictions obtained using high-quality DFT training data and an additional test set^[46]; (f) Workflow combining polymer chemical-fragment generation, molecular-dynamics data acquisition, thermal-conductivity prediction, and structure–property analysis^[52].

3 基于机器学习势函数的界面热输运机理解析与跨尺度参数桥接

前述热物性高通量研究的核心任务，是在大材料空间内快速获得晶格热导率、热容及相关热参数，并据此完成候选材料的初步筛选与热设计参数的前端准备。然而，对真实热管理体系而言，热流传递通常并不发生在理想均匀的单一材料内部，而更常跨越异质界面、层状堆叠界面与固液接触边界等复杂区域。此时，体材料热参数虽然仍是不可缺少的基础输入，但它们已不足以单独决定热量能否高效穿越材料边界，界面成键方式、局域结构演化、振动谱匹配以及非平衡能量交换过程开始主导热传递效率。因此，在由“材料—界面—器件”构成的跨尺度热设

计链条中，界面尺度既是高通量参数向器件模型传递的关键中间层，也是理解热阻来源、开展结构调控与实现性能优化的核心环节。因此，第3章在组织上遵循“势函数构建→界面机制解析→跨尺度参数提取”的逻辑，确保界面层级的研究产出能够以界面热导、热阻、频率分辨热流等参数形式，系统地向第4章器件级热设计传递。

3.1 面向界面热输运的机器学习势函数构建与验证

与体材料热物性的高通量预测不同，界面热输运面对的是一个由异质成键、局域重构、缺陷扰动以及强非简谐相互作用共同构成的原子级过渡区域，其复杂性显著高于均匀晶体内部的热传递问题。对于这类问题，第一性原理分子动力学虽然能够提供较高精度的能量与原子力信息，但其可达体系尺度和演化时间通常难以覆盖真实界面中的长时间热涨落、长平均自由程声子输运以及稳态非平衡传热过程^[64]。经典经验势在计算效率上具有明显优势，却往往受限于固定函数形式和参数化假设，在异质成键、表面终止变化、缺陷畸变和复杂局域环境下难以保持足够的可转移性，从而影响界面结构弛豫、振动耦合和热输运预测的可靠性^[65]。机器学习势函数通过学习第一性原理数据构建高维势能面，在接近第一性原理精度的同时显著扩展了可计算的时空尺度，因此成为界面热输运原子级研究的重要方法基础^[66–68]。

近年来，等变图神经网络势函数进一步推动了这一方向的发展。Batzner^[69]等提出的神经等变原子间势（Neural Equivariant Interatomic Potentials, NequIP）表明，基于E(3)等变卷积的模型可在少于1000甚至100个参考构型的条件下实现高精度势能面学习，并在部分体系中以高达3个数量级更少的训练数据获得与已有方法相当甚至更优的精度，说明面向复杂界面问题的机器学习势函数正在由“可用”走向“高数据效率与高表达能力并重”的阶段。相应的机器学习势函数主动学习构

建流程如图 3(a) 所示。

与块体材料相比，界面势函数的构建更依赖训练集对关键构型空间的有效覆盖。不同界面间距、原子配位环境、堆垛关系、取向失配、表面终止、缺陷构型、局域应变以及不同温度下的热涨落结构，都可能改变界面附近的局域键合和振动耦合特征；对于固液界面，还应进一步覆盖液体分层、吸附状态和分子取向等动态环境^[65,70]。只有当这些代表性局域环境被充分采样时，势函数才可能对界面附近的能量传递和热流响应作出可靠描述。由此可见，面向界面问题的势函数训练并不是对块体势函数的简单外推，而是围绕异质局域环境进行的定向数据构建与迭代校正。典型训练构型空间分布及其代表性局域结构如图 3(b) 所示。在训练集构建方面，Chang^[71]等针对界面燃烧体系指出，单纯依赖大规模采样并不一定带来更高的训练效率；通过平滑原子位置重叠描述符（Smooth Overlap of Atomic Positions, SOAP）结合主成分分析（Principal Component Analysis, PCA）选择代表性构型后，原始构型空间可被压缩到11251个代表性数据点，并且在仅保留331个构型的极小数据集条件下，模型对反应过程仍保持稳定预测能力；对于网格大小为10的代表性数据集，能量预测的MAE仅为 $6.15 \text{ meV} \cdot \text{atom}^{-1}$ ，而全数据集模型对应值为 $5.54 \text{ meV} \cdot \text{atom}^{-1}$ ，两者差异约10%，说明界面势函数训练的关键并不只是数据规模，更在于代表性局域环境的有效覆盖。与此类似，Guo^[72]等人在石墨烯晶界体系中提出基于结构单元模型的小数据训练策略，仅从21个对称倾斜晶界中筛选出3个代表性晶界，即可覆盖整个晶界构型空间；在此基础上训练得到的高斯近似势（Gaussian Approximation Potential, GAP）模型对训练集和测试集的能量RMSE分别约为 $0.003 \text{ eV} \cdot \text{atom}^{-1}$ 和 $0.002\text{-}0.003 \text{ eV} \cdot \text{atom}^{-1}$ ，力的RMSE约为 $0.065\text{-}0.092 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^{-1}$ ，并且对未知线缺陷结构仍保持 $0.007 \text{ eV} \cdot \text{atom}^{-1}$ 和 $0.186 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^{-1}$ 的误差水平，表明对于界面和晶界问题，只要结构单元覆盖合理，小数据训练同

样可以获得较高的可转移性。

界面势函数的有效性评价也不能停留在能量、力和应力的回归误差层面，而应进一步考察其对界面弛豫结构、振动态密度或声子谱特征、界面热导及其温度依赖关系以及长时间非平衡分子动力学/均匀非平衡态分子动力学 (Homogeneous Non-equilibrium Molecular Dynamics, HNEMD) 计算稳定性的再现能力^[66,73,74]。Fujii和Seko^[75]等人在硅晶界体系中的研究进一步表明，机器学习势函数的验证应延伸到真正与热输运相关的物理量：其模型不仅能够预测晶界结构和晶界能，还可进一步再现晶界声子性质和晶格热导率；特别是在仅向原始训练集中补入4个晶界结构的DFT能量后，晶界能预测的RMSE可降至 $52 \text{ mJ} \cdot \text{m}^{-2}$ ，并且对单晶硅热导率和晶界声子态密度 (Phonon Density of States, DOS) 的预测明显优于传统经验势。这说明，面向界面热输运的势函数验证应当从“静态拟合准确”进一步走向“结构—振动—输运”多维一致性检验。对于热设计问题，更有意义的判据是势函数能否同时保证结构演化的动力学可信性与目标输运量的预测精度，并在主动学习或并发学习框架下持续扩展训练分布在高能态、非平衡态和复杂界面构型下的覆盖范围^[70,76]。面向真实界面热设计时，这种多维验证还需要进一步落实到输运量与实验结果的一致性上。Khot^[77]等人构建的神经网络势函数对块体Al、块体Si和Al/Si界面测试集的能量RMSE分别为0.55、0.21和 $0.53 \text{ meV} \cdot \text{atom}^{-1}$ ，力的RMSE分别为0.028、0.020和 $0.047 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^{-1}$ ；相比之下，经典势在Al/Si测试集上的能量和力误差分别高达 $783.39 \text{ meV} \cdot \text{atom}^{-1}$ 和 $1.59 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^{-1}$ 。在此基础上得到的Al/Si界面热导为 $380 \pm 33 \text{ MW} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$ ，与实验共识值及 $379 \text{ MW} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$ 的时域热反射 (Time-Domain Thermoreflectance, TDTR) 结果接近。这说明界面势函数的有效性最终仍需落实到输运量本身及其与实验的一致性上。因此，机器学习势函数的价值并不只是替代经验势完成更大规模模拟，更在于为界面热输运机理解析

和热设计参数提取提供兼具精度与效率的原子级基础。

需要指出的是，机器学习势函数并非对所有热输运问题都具有同等适用性，其更适合处理第一性原理难以覆盖而经验势又难以可靠描述的复杂异质界面热输运问题。该方法的主要局限在于对训练分布高度敏感，当界面构型、温度区间、应变状态或化学环境超出样本覆盖范围时，模型外推误差可能迅速放大，并影响界面热导及频率分辨热流等结果的可信度。因而，在实际热设计中，机器学习势函数更适合作为连接高精度计算与大尺度热动力学采样的中间层工具，对于强反应、强电荷转移或极端非平衡界面仍需结合实验或更高精度计算加以校验。

3.1.1 典型机器学习势函数类型及其适用边界

机器学习势函数并非单一方法。除GAP、MTP/ACE、DP/NEP和NequIP等主要面向特定材料体系训练的模型外，近年来还出现了在大规模多元素数据集上预训练的通用原子势或原子基础模型。CHGNet通过对能量、原子力、应力和磁矩等信息进行联合学习，增强了模型对电荷相关固体化学环境的表征能力^[78]；SevenNet在等变图神经网络基础上强化了多GPU并行能力，以支持更大体系和更长时间尺度的分子动力学模拟^[79]；MACE-MP-0 则采用MACE架构在大规模无机晶体数据上进行预训练，可直接应用于多类原子模拟任务，也可通过少量目标体系数据进行微调^[80]。Orb进一步体现了通用原子势对推理效率和体系规模扩展能力的重视。其原始方法通过扩散预训练构建通用神经网络势，并在结构优化、Monte Carlo采样和分子动力学模拟等任务中验证模型性能；相较于当时参与比较的其他通用原子势，Orb表现出更高的推理速度，并展示了在多种分布外材料体系中维持稳定模拟的潜力^[81]。上述发展表明，原子基础模型正在将机器学习势函数的构建方式由“针对单一体系从头训练”推进至“通用预训练—目标任务适配—

下游物理量验证”的新范式^[82]。

通用预训练模型的优势是降低从零构建势函数的数据和人力门槛，并可作为界面任务微调的初始模型；但“通用”不等于可直接用于界面热输运。预训练数据通常以近平衡晶体构型为主，界面终止、欠配位原子、高温非平衡结构和强局域重构可能处于分布外。已有研究在M3GNet、CHGNet和MACE-MP-0 中观察到势能面曲率系统性偏软，涉及表面、缺陷、迁移势垒和声子振动等高能或高曲率区域^[83]；针对约一万组声子数据的基准也表明，部分通用模型即使能量和力误差较低，谐振动性质仍可能明显失准^[84]。因此，用于界面传热时应至少完成体系特定微调，并依次验证界面弛豫、声子/振动态密度、非简谐响应、长时间MD稳定性以及 G 和频率分辨热流。

为避免把“通用预训练”误解为“无需验证”，表 3 在原有体系特定势函数比较的基础上补充了通用原子势/基础模型。表中区分了开箱预测、微调后使用和面向输运量验证三个层级。

表 3 面向界面热输运的体系特定机器学习势函数与通用预训练原子势

Table 3. System-specific machine-learning interatomic potentials and universal pretrained atomistic potentials for interfacial thermal transport.

势函数类型	代表方法	主要特点	适用场景	主要局限
核方法	GAP ^[85]	中小数据集精度较高，可解释性较好	晶界、缺陷、局域能量面拟合	大数据集下训练与推理成本较高

展开方法	MTP ^[74,86] ,ACE ^[87]	形式清晰，训练较稳，推理较快	金属、合金及结构族较明确的固固界面	复杂强非线性界面中表达能力受限
局域神经网络势	DP ^[67] ,NEP ^[88]	精度与效率平衡较好，适合大规模MD	长时间非平衡热输运、复杂异质界面、固液界面	对训练分布覆盖范围较敏感
等变图神经网络势	NequIP ^[69]	数据效率高，复杂局域环境表达能力强	小样本高精度界面建模、显著重构造界面	训练成本较高，对算力要求较高
通用预训练图网络势	CHGNet ^[78]	包含电荷/磁矩关联信息，开箱覆盖多类无机固体	异价材料、缺陷与界面任务的预筛或微调起点	界面高能构型和输运量未必在预训练适用域内
通用预训练等变势	SevenNet ^[79]	等变图网络，多GPU扩展和大体系MD效率突出	大规模界面MD的微调底座	并行效率不等同于输运精度，仍需任务数据和声子验证
原子基础模型	MACE-MP-0 ^[80]	跨元素预训练，可开箱使用并支持少样本微调	复杂界面构型探索 and 训练集启动	可能出现势能面偏软及分布外误差 ^[83]

				界面热运输专项
			候选构型预松弛	验证不足，计算
新兴高速基础模型	Orb ^[81]	强调快速推理与	和大空间探索的	G前需经目标体
		规模化	潜在工具	系微调与输运量
				校验

总体而言，GAP更适合中小规模局域结构问题，MTP和ACE更适合结构族较明确的固固界面，DP和NEP更适合大规模热输运分子动力学模拟，NequIP则更适合样本有限但局域环境复杂、对精度要求更高的界面问题。

3.2 机器学习势函数辅助的界面热输运机理解析

在高精度势函数支撑下，界面热输运通常可借助EMD、NEMD和HNEMD等分子动力学框架进行评估^[66,88]。这些方法不仅能够给出界面热导或热导率等输运参数，还可结合稳态温降、频率分辨热流、振动态密度和局域热流分布等表征结果，揭示界面结构特征与热传输能力之间的内在联系，从而实现由参数提取向机制解析的推进。机器学习势函数的作用并不局限于界面热导等标量参数的计算，更重要的是能够在原子尺度上关联界面局域结构、振动耦合特征与热流传输行为，从而推动界面热输运研究由参数提取向机制解析拓展。

从主导机制看，不同界面对象对机器学习势函数的需求并不相同。三维异质固固界面更强调成键连续性、晶格失配和振动谱匹配；二维/范德华界面更敏感于堆垛、扭转角和层间势能起伏；固液界面则由液体分层、表面吸附和动态振动耦合共同控制。因此，三维界面研究侧重输运参数提取与尺度桥接，二维界面侧重构型空间搜索，固液界面侧重动态结构和统计传热行为的联合描述。

固固界面的热输运调控首先体现在传统三维异质界面中。对于此类界面，界面热导通常同时受晶格失配、原子质量差异、界面成键方式、粗糙度以及缺陷分

布等因素控制。传统声学失配模型和漫散射模型能够对理想界面的弹性传输作出近似估计，但对于真实异质界面中的局域重构、非弹性散射以及缺陷诱导局域化等过程刻画不足^[89,90]。机器学习势函数则可以在更大尺度和更长时间上显式描述界面附近的结构调整与非简谐相互作用，从而提取界面温降、界面热导 G 、界面热阻 R_K 、频率分辨热流、声子态密度匹配以及局域热阻分布等关键量^[59]。以GaN/BAs异质界面为例，相关研究表明，其在300 K下的界面热导约为 $260 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ ，与TDTR实验值 $250 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ 接近，并表现出明显的温度依赖；频率分辨热流分析进一步说明，较好的晶格振动匹配是实现高界面热导的重要原因。相应的器件热扩散路径、界面稳态温度分布及频率分辨热流结果如图 3(c-e) 所示。此外以 $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3/\text{Diamond}$ 、 $\text{AlN}/\text{Diamond}$ 、 $\text{GaN}/\text{Diamond}$ 、 $\text{Cu}/\text{Diamond}$ 及 $\text{Si}/\text{Diamond}$ 等典型高热流密度器件相关界面为代表的研究表明，关注重点已由“计算单一界面热导数值”转向“系统比较界面成键、晶向、界面层调控和结构密度对热边界传输的影响”^[91,57,58,92-97]。这一变化说明，三维异质固固界面的原子级热设计不应仅理解为提高某一界面热导，而应围绕“界面结构如何调控振动匹配、能量注入效率与散射通道”展开。

除传统三维异质界面外，固固界面中还包括以层间弱耦合为特征的二维/范德华异质固固界面。与传统三维异质界面相比，此类界面通常不依赖强共价键连续连接，而更依赖层间弱相互作用和低频振动模态的匹配条件^[98]，因此堆垛方式、扭转角、层间距及界面势能起伏都可能显著改变跨界面热传输行为^[89,99]。Liang^[100]等人围绕Gr/h-BN界面的研究表明，实验与理论报道的界面热导分别分布在 $7 - 52 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ 和 $5 - 442 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ ，反映出二维范德华界面对模型与构型的高度敏感性。基于超过300000个原子的NEMD计算并结合量子统计修正，相关研究给出室温下理想极限界面热导为 $58.4 \pm 11.0 \text{ MW}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-1}$ ，且其堆垛依赖关系为 $\text{ABp} >$

DW > AB > AA，不同堆垛构型下的层间结合能曲线与滑移势能面如图 3(f-g) 所示。机器学习势函数在这一问题中的重要性，一方面体现在其能够高效扫描大量层间构型，比较不同堆垛和取向条件下的热传输差异；另一方面体现在其可在较大尺度上保留界面弛豫与非简谐振动信息，从而揭示低频层间模态耦合、莫尔结构起伏以及取向失配对界面热导的共同调制作用^[100,101]。与三维异质固固界面主要强调界面成键连续性和晶格匹配不同，二维/范德华异质固固界面的热设计更依赖构型自由度调控，即通过堆垛、扭角和层间距优化界面耦合效率^[102]，从而在弱耦合界面中实现对跨界面热流的定向调节^[103-105]。

固液界面热输运则呈现出不同于固固界面的动态耦合特征。界面区域同时受到液体无序性、分子热涨落和表面化学状态演化的影响，其热边界条件具有更强的时间依赖性和构型敏感性。影响固液界面热导的关键因素不仅包括表面终止、吸附和羟基化等固体表面状态，还包括液体在界面附近的分层行为、分子取向、润湿特性以及固体晶格振动与液体分子振动或弛豫模式之间的耦合程度^[89]。对这类问题，第一性原理方法通常难以承担长时间统计采样，而经验势又往往难以同时兼顾异质成键精度与液体统计特征，因此机器学习势函数尤其适合用于固液界面热输运研究^[65,73]。Liu^[106]等人针对Cu-Water固液界面基于 $43.3 \text{ \AA} \times 43.3 \text{ \AA} \times 108.4 \text{ \AA}$ 的纳米通道模型表明，界面热导随纳结构高度单调增加，且在较强固液相互作用下增幅更为显著；其原因在于更强的界面作用可促进水分子吸附并增强固液振动耦合。相应的纳米通道模型及界面热导随纳结构高度的变化关系如图 3(h-i) 所示。这表明，固液界面的原子级热设计本质上是对“表面结构—液体组织—热边界传输”三者耦合关系的调控，也为液冷边界强化传热和表面工程优化提供了更具物理依据的参数支撑^[106]。为便于归纳机器学习势函数辅助下不同界面对象的主要调控因素、关键输出参数及其在热设计中的作用，表 4 总结了第三章涉

及的典型界面类型。

表 4 面向界面热输运原子级设计的典型界面对象及其热设计作用

Table 4. Typical interfacial structures and their functional roles in thermal design for atom-scale oriented interfacial thermal transport regulation.

界面类型	代表体系	主要调控因素	关键输出参数	热设计作用
三维异质固固界面 ^[59,57,58]	GaN/BAs AlN/Diamond Cu/Diamond	成键、失配、粗糙度、缺陷	ΔT 、 G 、 R_K 、频率热流	高功率器件界面散热
二维范德华异质界面 ^[100]	Gr/h-BN 等层状异质结构	堆垛、扭角、层间距、势能起伏	结合能、势能面、模态耦合	层状异质界面热调控
固液界面 ^[107,106]	Cu-Water 金属/水界面	纳结构、润湿性、分层、耦合强度	G 、温度分布、VDOS 耦合	液冷边界强化传热

如表 4 所示，不同界面体系虽然在结构自由度和主导机制上存在差异，但其研究目标最终都指向可向器件级模型传递的界面热边界参数提取，这正是界面尺度在跨尺度热设计链条中的核心作用。

总体而言，机器学习势函数辅助的界面热输运研究更适用于第一性原理方法难以承担、而经验势又难以可靠描述的复杂异质界面问题，尤其适合包含界面重构、缺陷扰动、强非简谐散射以及长时间非平衡热传递过程的体系。其主要优势在于能够在保持较高原子级描述精度的同时扩展分子动力学模拟的可达时空尺度，从而将界面热导计算进一步推进到界面结构、振动耦合与热流传输机制之间的关联分析。然而，该类方法的可靠性仍显著依赖训练样本对界面构型空间、温度区间和局域化学环境的覆盖程度；对于极端温度、复杂化学反应、强电荷转移或明显超出训练分布的界面结构，其预测结果仍需结合高精度计算或实验结果加以验证。当前的关键瓶颈主要体现在高质量界面训练集构建代价较高、可比实验数据不足，以及原子尺度界面参数向器件级模型传递时仍存在等效化与简化误差。未来研究应进一步结合主动学习、物理约束、不确定度评估和实验闭环验证，构

建从界面势函数训练、输运参数提取到连续介质建模和器件热设计的更可靠跨尺度耦合框架。

3.3 从原子尺度界面参数到器件级热设计的传递

跨尺度传递的对象不应是脱离条件的单个数值，而应是带状态标签和不确定度的参数包。材料参数包至少包含热导率张量 $K(T, \ell, s)$ 、体积热容、热膨胀系数、坐标系、特征长度 ℓ 及缺陷/应变状态 s ；界面参数包还应包含界面终止、成键、粗糙度、污染层、热流密度和 $G(T, s)$ 的统计区间，只有当参数定义、状态条件和调用方式相容时，原子尺度结果才可进入器件模型。从原子尺度到器件级热设计的跨尺度参数桥接与器件热设计框架如图 3(j)所示。

体材料参数首先通过各向异性傅里叶定律进入连续体模型。原子或BTE模型给出的晶体坐标系热导率张量 K^{crys} 需用方向余弦矩阵 Q 旋转至器件坐标系，不能以标量平均值替代；当温升或特征尺寸变化明显时， K 还应按温度、长度和微结构状态更新。相应映射为：

$$\begin{aligned} q &= -K^{\text{dev}}(T, \ell, s) \nabla T \\ K^{\text{dev}} &= Q K^{\text{crys}} Q^T \end{aligned}$$

界面热导可在满足局部热平衡和扩散主导的条件下写成FEM中的Robin型热接触边界。设 n 为界面法向， T_1 和 T_2 为两侧外推温度，则热流连续与界面温降之间满足：

$$-n \cdot K_1 \nabla T_1 = -n \cdot K_2 \nabla T_2 = G(T, s)(T_1 - T_2)$$

上述边界可直接使用的前提是材料组合、晶向、表面终止、温度区间、应力状态、接触质量和热流密度与原子模型基本一致，且界面附近不存在显著弹道输运或分支间强非平衡。若仅存在粗糙度、薄污染层、残余应力或宽温区等一阶偏差，应把 G 扩展为 $G(T, s)$ 并以实验或参数反演校准；若发生界面反应、相变、电子—声子非平衡、强弹道—扩散耦合或频谱选择性传输，则单一 G 不再充分，需要

采用谱BTE、蒙特卡罗或多温模型重新定义边界。

对于实际键合层、TIM或多层接触，原子界面本征热阻、有限厚度层热阻和工艺接触热阻应分别建模。以单位面积热阻表示时，可写为：

$$R_{\text{eff}}'' = G_{\text{int}}^{-1} + \sum_j \frac{t_j}{k_j} + R_c''$$

其中 G_{int} 为理想或指定终止条件下的本征界面热导， t_j/k_j 表示第 j 层有限厚度材料的面积热阻， R_c'' 表示空隙、粗糙接触及装配压力等附加贡献。该串联表达只适用于层间热流近似一维且各贡献可分离的情形；若存在显著横向扩散、局域接触斑或相变，应显式建模几何与局部边界。

尺寸效应的处理应依据器件特征长度与主导声子平均自由程的相对大小。薄膜厚度、晶粒尺寸或界面间距接近平均自由程时，块体 κ 和面积平均 G 可能同时失效；应优先传递BTE/MD得到的 $\kappa_{\text{eff}}(T, \ell)$ 、累积热导谱或频率分辨透射信息。对于超快加热和高热流密度工况，还需判断不同声子分支是否具有共同局部温度；若不满足，则应使用分支/频段温度或谱热流边界，而不是强制压缩为单温度常数。

误差传播应与参数传递同步进行。设器件输出 y （峰值温度、总热阻、热应力或寿命指标）由输入参数向量 θ （ K 、 G 、几何、功率和接触状态等）通过模型 F 给出。对局部近线性问题，可用Jacobian J 进行一阶协方差传播；该表达用于误差量级估计，而非替代非线性抽样：

$$y = F(\theta), \quad \Sigma_y \approx J \Sigma_\theta J^T, \quad J = \frac{\partial F}{\partial \theta}$$

当 F 具有明显非线性、参数分布非高斯或存在相关性时，应通过蒙特卡罗、拉丁超立方、稀疏多项式混沌或贝叶斯后验抽样传播完整分布^[108]。报告结果时除给出最优设计，还应给出热点温升和可靠性指标的置信区间，并通过全局敏感度区分“原子势误差”“界面状态不确定性”和“器件边界条件不确定性”的贡献。

数值实现可按五步执行：建立带元数据的材料/界面参数包；完成晶体—器件坐标旋转和单位统一；依据局部温度迭代更新 $K(T)$ 与 $G(T,s)$ ；将输入分布而非单点值传入FEM/CFD或器件代理模型；最后用TDTR、稳态温升、红外热像或可靠性试验校准后验参数。若代理模型参与优化，训练样本必须同时覆盖参数不确定性和工程边界变化，否则它可能把尺度效应、界面效应与工艺误差混为同一统计相关性。

因此，AI在界面层的作用并非仅将MD计算加速，而是把高维原子信息编码为带状态和概率标签的边界参数，并使其能够被器件模型调用、校准和反向更新。跨尺度桥接是否可信，应由映射方程、适用条件、误差传播和实验回标共同判定。

录用稿件，非最终出版稿

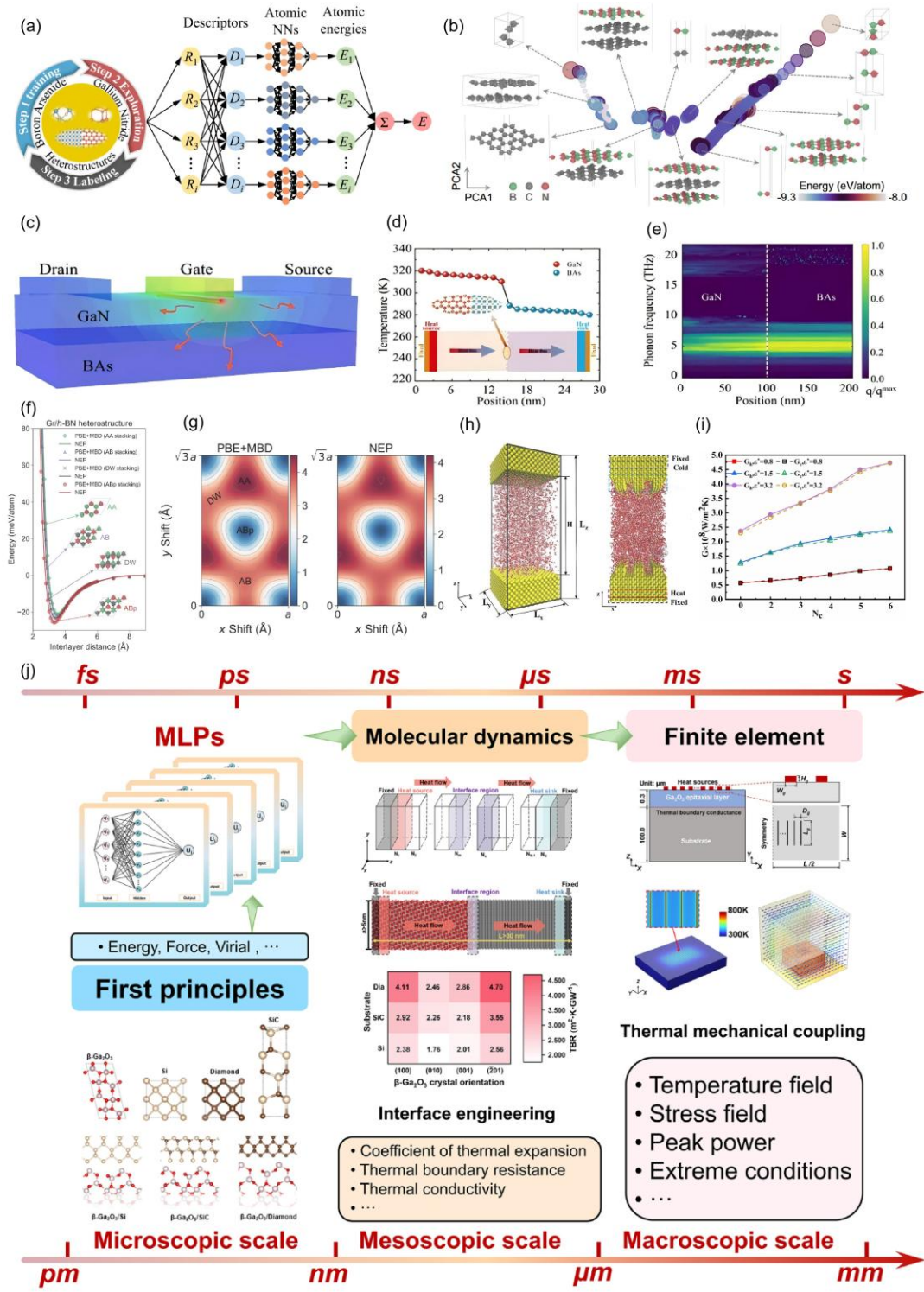


图3 面向界面热运输的机器学习势函数构建、机理解析与跨尺度参数桥接

(a) GaN/BAs异质界面势函数构建流程^[59]; (b) Gr/h-BN界面训练构型空间分布^[100]; (c) GaN/BAs器件热扩散路径; (d) GaN/BAs界面稳态温度分布及温降; (e) GaN/BAs界面频率分辨热流^[59]; (f) Gr/h-BN界面层间结合能曲线; (g) Gr/h-BN 界面滑动势能面^[100]; (h) Cu–Water固液界面纳米通道模型; (i) 界面热导

随纳结构高度的变化关系^[106]; (j) 跨尺度参数桥接与器件热设计框架^[109]

Fig. 3. Machine-learning-potential construction, mechanism analysis, and cross-scale parameter bridging for interfacial heat transport: (a) Workflow for constructing the potential of the GaN/BAs interface^[59]; (b) distribution of training configurations for the Gr/h-BN interface^[100]; (c) heat-spreading pathway in a GaN/BAs device; (d) steady-state temperature profile and interfacial temperature drop across the GaN/BAs interface^[59]; (e) frequency-resolved heat flux across the GaN/BAs interface; (f) interlayer binding-energy curves of the Gr/h-BN interface; (g) sliding potential-energy surface of the Gr/h-BN interface^[100]; (h) Cu–Water solid–liquid nanochannel model; (i) interfacial thermal conductance versus nanostructure height^[106]; (j) cross-scale parameter-bridging framework for device-level thermal design^[109].

不同势函数和桥接策略不存在脱离任务的“最优方法”。体系特定模型往往更容易围绕目标界面构建完整训练分布，通用预训练模型则能降低起步成本并扩大候选探索；但二者都必须经过输运量层面的验证。能量和力误差较低并不自动保证声子谱、 $G(T)$ 、频率分辨热流和分布外界面状态可信。参数只有在明确状态标签、误差范围及直接使用/尺度修正条件后，才具有器件设计价值。

4 机器学习辅助器件层级热设计与优化

承接前文材料高通量热物性筛选、界面热输运机理解析及跨尺度参数提取的讨论，器件层级热设计的关键已不再是将原子尺度或界面尺度获得的结果简单输入有限元模型，而是将材料、界面与结构信息进一步转化为器件模型可直接调用的本构参数、边界条件和等效热路。这一参数转化过程正是前述材料层级热物性预测和界面层级热边界参数提取在器件尺度上的具体落地：材料热导率和热容作为本构关系写入有限元模型，界面热导和界面热阻作为边界条件定义层间热流传

递，而热膨胀系数和残余应力信息则支撑热-力耦合可靠性评估。

对于体材料而言，基于第一性原理、声子玻尔兹曼输运方程以及机器学习势函数分子动力学得到的热导率、比热及其温度依赖关系，可直接写入器件模型的材料属性；当材料存在显著各向异性时，则应采用热导率张量并结合器件坐标系进行方向映射，以更准确表征热量在芯片、有源层、衬底和热扩散层中的传播行为。对于异质界面和封装连接层，跨尺度传递的核心参数主要表现为界面热导、界面热阻及其温度依赖关系，原子模拟获得的界面热输运参数可进一步转化为连续介质模型中的界面边界条件，用于描述热流跨界面传递过程。而在包含硅通孔（Through-Silicon Via, TSV）、微凸点和再布线层等复杂互连的先进封装中，若逐一进行精细建模将显著增加网格规模和求解成本，因此通常需要借助等效热阻网络或等效各向异性热导模型对细尺度导热通道进行“上卷”处理，在保留主要热扩散特征的同时提高全芯片和全封装热分析效率。

除了通过高导热材料、界面热阻调控和封装结构优化实现被动热扩散外，器件级热管理还逐渐由“降低热阻”向“主动调控热流”拓展。声子学的发展表明，热流可借助非线性响应、结构非对称性、时空调制及界面耦合等机制实现方向选择、通断控制和逻辑响应，并由此形成热二极管、热晶体管、热开关及热逻辑器件等功能单元。相关综述系统总结了 2012 - 2022 年声子调控、热整流、拓扑声子学及量子声子学等方向的进展，说明器件热设计的目标已不再局限于提高整体散热能力，而正在进一步发展为对热流方向、传递路径和动态响应的可编程调控^[110]。这类主动热流调控理念能够与前述材料热物性预测、界面热边界参数提取及后续器件结构优化形成互补，为构建热开关、固态制冷和智能热管理器件提供新的功能化路径。

在具体建模层面，有限元模型适合处理复杂几何、非均匀热源以及多层封装

中的三维热扩散问题，而紧凑热模型则更适用于架构级快速评估和动态热管理，前者能够刻画热点温升、层间温差和界面温降分布，后者则通过热阻—热容网络实现芯片—封装体系的快速温度响应预测。近年来，数据驱动方法进一步成为连接高保真模型与快速热设计的重要加速层，可基于有限元样本训练代理模型，实现温度场和关键热指标的快速重建，并结合降阶建模提升多芯片系统和复杂封装结构的热行为预测效率。因此，器件层级热设计并不是与前述材料和界面层面相割裂的独立部分，而是建立在热导率、界面热导及其环境依赖关系等参数化输入基础上的系统级热管理与结构优化问题，下面将围绕先进封装与异质集成、热点抑制、液冷部件优化以及可靠性与实验闭环验证等方面展开讨论。

4.1 面向先进封装与热点抑制的热路径协同设计

在先进封装与异质集成体系中，器件级热设计面对的已不再是单一芯片向外部散热器传热的简单问题，而是芯片、有源层、热界面材料（Thermal Interface Material, TIM）、键合层、微凸点、再布线层（Redistribution Layer, RDL）、TSV、中介层、封装基板与热扩散单元共同参与的多层热路径协同优化问题^[111-115]。尤其在 2.5D/3D 封装、芯粒（Chiplet）和高带宽存储集成中，垂向堆叠和高密度互连虽然显著提升了集成度与通信效率，却同时加剧了层间热堆积、横向热串扰以及局域热点放大效应^[111-113]。因此，器件热设计不能再将复杂封装简单等效为均质块体，而需要显式考虑不同层材料热导率差异、互连网络诱导的有效各向异性，以及界面热阻对热扩散路径重分配的作用^[114,115]。从这一角度看，TIM、键合层与接触界面往往是先进封装中的关键热阻瓶颈，围绕接触界面材料分布优化、低温 Cu-Cu 键合以及异质界面成键增强的研究均表明，界面工程本身已成为器件热设计的重要组成部分^[116-118]；此外，TIM 的功能也开始由被动降低接触热阻向主动热流调控拓展。例如，Luo 等开发的磁响应柔性复合 TIM 可通过可逆形

变切换界面接触状态，实现约 22 的热开关比，并可作为固态制冷系统中的动态热连接单元^[119]。而在 2.5D chiplet 与硅/玻璃中介层封装中，热阻、应力与互连可靠性之间又呈现出明显的耦合关系，使封装热设计进一步演化为热—机械协同优化问题^[120,121]。

与封装级热路径设计相对应，热点抑制则更强调热源分布、热扩散路径与局部强化结构之间的空间匹配。对于多芯片模块和非均匀热流器件，仅依赖后端散热强化往往难以从源头上降低峰值温度，因此需要将热源布局、封装几何和热扩散层设计置于统一框架下协同优化^[122–124]。近年来，基于贝叶斯优化、卷积神经网络、格林函数替代模型和图卷积网络的快速热设计方法，使多芯片布局优化、温度场重建和热点预测由“逐案仿真—人工调参”逐步转向“代理建模—全局搜索”的智能范式^[124–128]。进一步地，热导率分布与热源布局的协同优化、集成热扩散层的非均匀强化以及面向局域热点的微针肋/近结强化结构设计表明，器件级热设计的关键不在于简单提高整体散热能力，而在于使高导热扩散路径、局部强化单元与真实热源版图在空间上精确匹配，从而实现“按需导热”和“定点削峰”^[129–131]。因此，先进封装设计与热点抑制并非彼此分离的两条技术线，而是共同服务于同一目标：在复杂互连和非均匀热流条件下，重构器件内部热路径、降低局域热阻并提升温度均匀性。

除通过材料、界面和结构优化降低静态热阻外，器件级热管理还可通过非互易传热和量热效应实现主动热量抽运。Zhang 等将非互易热传递单元与弹热制冷材料耦合，构建了全固态弹热制冷器，并从理论上建立了热整流比与弹热制冷性能之间的关联。该器件利用超材料型非互易传热单元控制弹热材料在吸热和放热阶段与冷端、热端之间的热交换方向，在热整流比达到 6.5 时获得 174.8 mW 的制冷功率和 242.8 mW·cm⁻² 的制冷热流密度，并在抗屈曲压缩加载下实现超过 200

万次无失效循环^[132]。这一结果表明，方向选择性热传递不仅可用于热流整流和热开关，还能够进一步转化为稳定的固态制冷循环，为无制冷剂、紧凑型和高可靠热管理器件提供新的技术路径。对于此类涉及量热材料性能、非互易传热单元几何、工作频率和疲劳寿命等多参数耦合的器件，机器学习代理模型和多目标优化可进一步用于缩短参数搜索周期，并在制冷功率、温差、结构稳定性和循环寿命之间寻找合理折中。

需要指出的是，上述封装—热源协同设计与全固态主动制冷分别从热路径重构和热量主动抽运角度拓展了器件热管理能力。然而，当器件进一步走向更高热流密度、多热点和高集成工况时，大规模热量排出与冷却均匀性仍通常依赖具有较高换热能力的外部冷却系统。此时，冷板、微通道、喷射冷却及嵌入式液冷结构由于能够提供更短的传热路径、更强的对流换热能力以及更丰富的几何和流动可调自由度，成为器件级热设计中最具代表性的研究对象；同时，这类结构天然适合与代理模型、主动学习和多目标优化结合，因此在现有文献中形成了最系统、最成熟的机器学习辅助设计路径^[133–135]。基于这一原因，下文将进一步聚焦冷板、微通道及液冷部件的智能优化问题。

4.1.1 GaN/BAs异质器件：从原子参数到器件热决策的完整案例

GaN/BAs 研究提供了当前较完整的“材料—界面—器件”证据链^[59]。在材料层，研究以机器学习势函数计算并验证 GaN 和 BAs 的热导率及其尺度依赖；在界面层，非平衡分子动力学得到 300 K 下约 $260 \text{ MW} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$ 的界面热导，并与约 $250 \text{ MW} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-1}$ 的 TDTR 结果相符，同时保留 300–450 K 的温度依赖和频率分辨热流信息；在器件/介观层，材料热导率和界面阻力被写入有限元模型，用于分析 GaN/BAs 比例、晶粒尺度与边界热阻之间的竞争。该案例的关键不是简单串联三种软件，而是每一尺度均有明确的输入、输出和外部验证。

其参数传递可按本节前述方程具体化：GaN 和 BAAs 的 $K(T, \ell)$ 作为体材料本构输入，界面 $G(T)$ 通过热流连续边界进入 FEM；界面附近的频率分辨热流用于判断常数 G 是否足以表征该工况；实验 TDTR 值则用于校准理想原子界面与真实外延层、粗糙度和接触缺陷之间的差异。器件模型中的 BAAs 体积分数、晶粒尺度、衬底厚度和界面质量属于设计变量，而原子模拟误差、界面状态和外部换热条件属于不确定输入，两者不能在优化中混为一类。

从 AI 作用看，主动学习首先决定哪些 GaN、BAAs 和异质界面构型需要追加第一性原理标注；机器学习势函数将高维势能面和长时间原子运动压缩为 $K(T, \ell)$ 、 $G(T)$ 及谱热流；器件级代理模型或贝叶斯优化则可在有限 FEM 预算下学习“参数—温升—可靠性”的响应面，并根据器件目标反向选择值得进一步精化的界面状态。后两步是基于现有多尺度证据链可执行的设计扩展，不应误写成原论文已经完成的全部优化环节。

该案例也揭示了闭环的边界：理想界面的 G 不能无条件代表含外延过渡层、空隙或热应力的实际器件；材料和界面参数的统计误差需要传播到峰值温度与功率能力；当器件结果对 G 或晶粒尺度高度敏感时，应回到原子层补充相应状态的训练构型或实验测量。由此，器件输出不仅是最终评价指标，也成为决定下一轮原子数据采样和界面验证优先级的反馈信号。

4.2 冷板散热器的智能优化设计

4.2.1 冷板散热器设计空间表征与机器学习代理模型构建

随着高热流密度器件向高集成度、小型化和多热点方向持续发展，冷板/微通道散热器的结构设计已由传统的单参数修正问题，转变为几何形貌、流动分配、材料属性与热边界条件共同耦合的高维优化问题。

对于典型冷板系统而言，通道宽高比、歧管布局、肋片或针肋形状、入口流

量、热源位置及其功率分布之间通常存在显著的非线性关联，任一局部参数的变化都可能同时影响峰值温度、总热阻、温度均匀性与压降水平。因此，单纯依赖经验关联式、逐参数扫描或CFD试算的方法，已难以在可接受的时间成本内全面识别设计空间中的优势区域^[136]。

在这一背景下，机器学习代理模型的引入，不仅在于以更低成本近似替代高保真数值计算，更重要的是为冷板设计建立起“参数化表征—样本采集—数据建模—性能预测—变量筛选”的系统化研究框架，如图 4(b) 所示。现有研究通常首先通过设计试验法或拉丁超立方采样在高维变量空间中生成代表性样本，再结合CFD或实验数据构建结构—性能数据库，随后采用克里金模型 (Kriging Model)、高斯过程 (Gaussian Process, GP)、人工神经网络 (Artificial Neural Network, ANN)、随机森林 (Random Forest, RF)、极端梯度提升 (eXtreme Gradient Boosting, XGBoost) 和轻量级梯度提升机 (Light Gradient Boosting Machine, LightGBM) 等方法，建立几何参数与热阻、努塞尔数、压降、峰值温度等指标之间的快速映射关系，从而实现对复杂冷板设计空间的高效逼近与可解释分析^[137,62,138,136]。

从近年来的发展趋势看，冷板代理模型的输入与输出形式均在持续拓展。一方面，代理建模对象已由早期规则直通道和单一几何参数，扩展到微针肋、歧管微通道、异形扰流结构以及非均匀热载荷下的复杂边界条件；另一方面，模型输入也从传统的低维参数向多模态信息融合演进，包括结构图像、两相流动可视化图样及多芯片热源分布等。值得强调的是，代理模型研究已不再停留在“可预测”层面，而是开始通过跨文献大样本数据库和实验数据来验证其泛化能力。Kim等汇总了15篇研究中的906组微针肋热沉数据，比较多种机器学习模型与传统关联式后发现，新建立的回归模型平均绝对误差仅为23.7%，而已有经验关联式的误

差范围为36.7%–123.1%，说明在跨结构、跨工况预测中，数据驱动模型已经明显优于经验公式^[137]。此外，Shanmugam等针对非均匀热载荷微通道热沉构建了包含560组样本、22个输入特征的实验数据库，输入变量同时覆盖几何参数、加热模式和边界条件，表明冷板代理模型正由“几何—性能”单一映射转向“结构—热源—工况”联合建模^[138]。Sikirica等进一步将拉丁超立方采样（Latin Hypercube Sampling, LHS）、代理模型、沙普利可加性解释分析（SHapley Additive exPlanations, SHAP）与多目标优化联结起来，使关键结构变量识别与后续优化决策能够在同一数据框架下完成^[62]。此外，针对非均匀热载荷、多模态输入和复杂流道，Lee等和Yang等分别展示了基于实验数据、多模态机器学习及混合神经网络的快速预测能力，如图 4(c) 所示，而Wang等关于多芯片模块热布置的深度学习—贝叶斯优化研究则说明，数据驱动方法已经不再局限于单一冷板几何参数回归，而是逐渐延伸到更接近实际封装场景的温度场快速推断与设计筛选^[138–141,124]。总体而言，机器学习代理模型在冷板设计中的作用，正在由“降低仿真时间”的辅助工具，转变为抽取结构—性能规律、识别关键设计变量并支撑后续多目标优化的重要基础。

4.2.2 面向热阻、压降、温度均匀性的多目标智能优化

冷板优化的工程实质，在于处理传热增强与流动代价之间不可回避的竞争关系。局部强化结构、流道弯折和扰流单元往往有助于降低峰值温度或总热阻，但同时会带来更高的压降与泵功消耗；而对于多热点器件和非均匀热流边界，平均温度降低也并不必然意味着热点得到有效抑制，局部流量失配甚至可能导致温差进一步扩大。因此，冷板智能设计的目标函数已由早期的单一热阻最小化，逐步扩展为同时兼顾峰值温度、压降/泵功、温度均匀性乃至综合热水力性能的多目标优化问题^[142–145]。在方法上，当前最成熟的技术路线仍然是“代理模型 + 进化算

法”的耦合框架，即先利用CFD或实验数据训练代理模型，再通过非支配排序遗传算法 (Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II, NSGA-II) 、基于分解的多目标进化算法 (Multi-Objective Evolutionary Algorithm based on Decomposition, MOEA/D) 或贝叶斯优化在帕累托 (Pareto) 意义下寻找非支配解集。该类方法的优势在于：一方面，能够显著降低大量高保真仿真的计算负担；另一方面，可以将“热阻优先”“低压降优先”和“折中解优先”等不同工程偏好以Pareto前沿的形式显式呈现，从而提升设计决策的透明度与可迁移性^[142-145]。

进一步看，压降约束应在系统层面转化为泵功和能效约束。对于液冷冷板或微通道散热器，泵功通常由流量和压降共同决定；过高的流速、过密的针肋或过强的扰流结构虽然能够提高局部换热系数，却可能导致泵功急剧增加，并引入噪声、泄漏风险、流量分配失衡和系统能耗上升等问题。因此，面向工程应用的多目标优化不宜仅比较热阻或峰值温度，而应同时引入热阻—压降、温度均匀性—泵功以及局部热点削减—系统能耗之间的综合评价指标。对于受封装空间限制的高功率模块，还应将入口/出口布置、流道高度、密封结构和可维护性纳入约束条件，以避免获得在数值上最优但难以集成的冷却方案。

在具体应用层面，多目标智能优化已从常规矩形通道逐步扩展至锯齿 (zigzag) 通道、波纹通道、针肋/异形肋片以及仿生强化结构。Zhang等利用Kriging与NSGA-II对交错zigzag微通道进行优化，说明复杂折流通道的优势必须在热阻下降与压降惩罚之间综合评价^[143]。Wang等围绕歧管流量失配问题构建代理模型—遗传算法框架，展示了歧管优化在改善热点区温度控制方面的价值^[144]。Shao等关于腔体与纵向涡发生器组合结构的研究，则进一步表明在较低雷诺数下通过局部二次流诱导实现热流协同是可行路径^[145]。对于针肋和异形肋片结构，Polat等、Xie等和Ran等分别采用ANN与多目标算法处理菱形针肋、微针肋和特斯拉阀

(Tesla valve) 启发肋片的参数寻优问题，显示出数据驱动优化在复杂几何下相较于传统响应面方法更高的适应性^[146–149]。其中，一个更具代表性的案例是Polat等对圆形、方形和菱形针肋微通道冷板的多目标比较^[147]。该研究表明，菱形针肋可显著增强传热，但会引入更高的压降惩罚；在不同针肋形状下，最优设计对应的平均努塞尔数约为3–12，压降比约为1–12，直观揭示了“强化换热—增加流阻”之间不可回避的竞争关系。与之相对，圆形针肋在流动阻力控制方面更具优势，因此更适合作为综合性能折中方案，相关参数化设计、网格特征及温度—压力场结果如图 4(d-f) 所示。与此同时，Feng等将混合神经网络引入面向集成微系统的混合针肋式微通道散热器设计，体现出小样本条件下快速构建高精度代理模型的潜力^[150]。更前沿的进展则来自动态学习与强化学习：Zhang等将贝叶斯优化用于收敛波纹冷板的温度均匀性改进，Ravanji等则通过深度强化学习与网格变形技术直接搜索单针肋和多针肋形状，标志着人工智能在冷板设计中的角色正由“快速评估候选结构”进一步转向“主动探索更优几何”^[151–153]。从综述角度看，这一演化意味着多目标智能优化已不仅是CFD计算的加速手段，而是连接性能权衡、几何生成和工程决策的核心方法层。

需要区分的是，NSGA-II或MOEA/D本身属于多目标进化搜索，并不天然等同于AI。AI赋能发生在代理模型学习连续性能地形、贝叶斯获取函数调度高成本样本、偏好模型表达工程决策以及强化学习/生成模型主动提出新结构时。因而，多目标框架中的AI角色是学习Pareto前沿及其不确定度并提高样本效率，而进化算法仍是搜索器。

4.2.3 面向热点抑制与可制造性的拓扑优化—增材制造协同设计

在前述参数化优化框架基础上，拓扑优化进一步将冷板设计推进到以设计域内材料/流体分布为变量的结构生成层面。与传统尺寸优化或形状优化不同，拓扑

优化并不预设直通道、蛇形通道或规则针肋等几何家族，而是直接在满足质量、动量和能量守恒的条件下，以热阻、平均温度、压降或综合热水力指标为目标函数，求解冷板内部流道与导热骨架的最优拓扑分布^[154-156]。这一特征使其尤其适合用于非均匀热源、多入口/多出口以及强共轭传热条件下的冷板设计。Yaji等较早建立了耦合热—流问题的拓扑优化框架，为后续液冷结构生成提供了方法基础^[154]；Zeng和Lee通过实验与数值结合验证了液冷微通道拓扑优化结构的有效性，表明基于拓扑优化生成的流道能够在热管理性能与流动代价之间实现优于经验构型的折中^[155]；Zou等将Pareto前沿进一步引入水冷散热器拓扑设计，使热—流竞争关系能够在多目标框架中被系统处理^[156]。近年来，Sun等将拓扑优化拓展至双固体—单流体复合冷板，Wu等则把非均匀电池生热分布直接纳入冷板求解过程，He等和Xiong等又将研究对象推进到三维集成芯片、多层复合封装及多物理场耦合场景，说明拓扑优化正在由单一换热部件设计逐步走向面向热点抑制、温差控制与结构可靠性的系统级优化^[157-159]。

然而，拓扑优化真正进入工程应用的关键，并不在于能否生成复杂结构，而在于生成结果能否满足制造与验证要求。围绕这一问题，Ozguc等提出的均匀化拓扑优化方法具有代表性：该方法将中间密度解释为可打印微结构，从而避免了传统惩罚型拓扑优化中常见的几何离散化与后处理困难，并天然适配增材制造所允许的亚网格尺度结构表达^[160]。在此基础上，相关研究进一步完成了拓扑优化微通道热沉的增材制造与实验验证，证明所制备样件的压降—热阻表现能够落在理论预测的Pareto前沿附近^[161]；随后，针对多芯片模块等更复杂边界条件，Ozguc等又实现了面向应用场景的液冷冷板拓扑优化、制造与测试闭环^[162]。与此同时，Deng等通过最大/最小长度尺度控制改善了拓扑冷板在实际加工中的通道宽度一致性与可制造性^[163]，而Orakwe等则将热流体拓扑优化与共形最小曲面/晶格结构

相结合,用于面向增材制造的高性能液冷热沉设计,进一步展示了“拓扑骨架—晶格填充—工艺约束”协同设计的潜力^[164],如图 4(g-h) 所示。由此可见,面向热点抑制与可制造性的拓扑优化—增材制造协同设计,正在推动冷板研究由传统参数优化转向“热源分布识别—结构生成—制造约束—实验验证”相互衔接的闭环范式;在人工智能与传热深度融合的背景下,这一路线也将与代理模型、多目标决策和数据驱动评估进一步耦合,成为下一代高性能热管理部件的重要设计框架。

经典拓扑优化是在质量、动量和能量守恒约束下求解材料/流体分布,本身并不属于机器学习。AI可在四个环节提供增量价值:用代理模型减少候选拓扑的 FEM/CFD 评估;以生成模型或强化学习拓展初始结构空间;学习热阻—压降—温度均匀性—可制造性的 Pareto 关系;利用不确定度选择新增仿真或实验样本。因此,准确表述应是“机器学习辅助的拓扑优化”,而不是以黑箱模型替代物理约束求解。

因此,拓扑优化与增材制造协同设计需要在优化阶段前置考虑制造容差和加工误差。具体而言,最小通道宽度、最小壁厚、悬垂角、粉末去除能力、表面粗糙度、打印收缩和后处理偏差都会改变实际流道截面、局部换热面积和流动阻力;对于微通道和针肋结构,微小的几何偏差还可能放大为显著的流量分配不均和局部热点偏移。为降低“仿真最优—制造失配”的风险,代理模型或拓扑优化模型可将几何扰动、材料参数波动和边界条件偏差作为鲁棒性约束,或者在训练集中引入带公差的样本,以评估候选结构在真实加工条件下的性能稳定性。由此,可制造性不再是拓扑生成后的筛选条件,而是与热阻、压降和温度均匀性同等重要的设计变量。

scalar parameters and image information for predicting thermal resistance, temperature, and related performance metrics of cold plates^[139]; (d) Parametric design of cold-plate/microchannel structures for multi-objective optimization^[147]; (e) Representative complex cold-plate microstructures together with local mesh/manufacturing features^[147]; (f) Temperature and pressure distributions within cold plates under different multi-objective optimization designs, illustrating the trade-off between thermal-resistance reduction and flow resistance^[147]; (g) Comparisons of material distribution, temperature field, and flow field among different topology-optimized designs, showing the effects of topology evolution on hotspot suppression and thermo-fluid transport^[164]; (h) General workflow and iterative evolution of thermo-fluid topology optimization^[164].

表 5 冷板/微通道优化代表性工作

Table 5. Representative studies on cold-plate and microchannel optimization.

研究环节	代表性工作	研究对象与方法	关键数据/结论	主要贡献
代理模型泛化	Kim et al., 2022 ^[137]	汇总 15 篇研究、906 组微针肋热沉数据，比较多种机器学习模型与传统关联式	新回归模型 MAE 为 23.7%，已有关联式误差为 36.7% - 123.1%	代理模型已从局部拟合走向跨文献、跨工况泛化预测
非均匀热载荷建模	Shanmugam and Maganti, 2024 ^[138]	面向非均匀热载荷微通道热沉，构建实验数据库并训练多类模型	数据库包含 560 组样本、22 个输入特征，覆盖几何、加热模式与边界条件	输入变量由几何参数扩展到热源与工况信息
可解释代理优化	Sikirica et al., 2023 ^[62]	LHS 采样 + 代理模型 + SHAP + 多目标优化	研究对象包含二次通道与肋片结构，可同时完成变量识别与优化决策	代理模型不仅用于预测，还能识别关键设计变量
多目标针肋优化	Polat et al., 2022 ^[147]	圆形、方形、菱形针肋微通道冷板；CFD + NSGA-II	最优设计下平均 Nu 约 3 - 12、压降比约 1 - 12；菱形针肋传热最强但压降最大	热阻降低与压降惩罚之间存在显著权衡
热点定向强化	Feng et al., 2021 ^[131]	梯度分布空腔微针肋，用于双面非均匀热流 3D 芯片	可处理 700 W·cm ⁻² 局域热点；局部热点温度最多降低 9K，总热阻降低 34.5%	局部强化结构需与热点版图匹配才能体现收益

拓扑优化 实验闭环	Ozguc et al., 2023 ^[161]	均匀化拓扑优化微 通道热沉 + 增材 制造 + 实验测试	实测压降与热阻落在预测的 Pareto 前沿附近	拓扑优化结果可 在真实制造条件 下保持性能
系统级液 冷验证	Ozguc et al., 2025 ^[162]	面向 8 发热器件多 芯片模块冷板的拓 扑优化—制造—测 试闭环	从优化、制造到实验形成完整流程	拓扑优化已由单 热点部件推广到 系统级冷板
面向增材 制造的结构生成	Orakwe et al., 2025 ^[164]	拓扑优化与三周期 极小曲面/晶格结构 耦合设计液冷热沉	构建“拓扑骨架—晶格填充—工艺 约束”一体化设计路径	冷板优化已由参 数调节走向生成 式设计

4.3 工程约束、器件可靠性与实验闭环验证

除了前文对封装内部热路径重构与冷板/微通道智能优化的讨论，器件层级热设计在进入工程应用时所面临的核心问题，已不再只是“温度能否降下来”，而是“优化后的结构能否经受制造过程与长期服役中的热—机械耦合作用，并能否被稳定制造和实验验证”。对于 2.5D/3D 封装、chiplet 和宽禁带功率模块而言，底填固化、EMC 固化、回流焊及键合等制造步骤本身就会引入残余应力与翘曲，因此可靠性问题往往在服役前便已形成。Li 等基于多物理场耦合有限元对 2.5D 封装全过程建模，指出底填、模封和回流焊会共同驱动温度—应力—翘曲演化，且固化后封装整体已呈现明显的 concave 翘曲特征^[165]；面向球栅阵列封装（Ball Grid Array, BGA），Kim 等结合电子背散射衍射（Electron Backscatter Diffraction, EBSD）与 FEM 比较了无底填、玻璃化转变温度为 120 °C 和 165 °C 两类底填材料，表明底填的热—机械参数将直接改变焊点寿命与应力分布^[166]。类似地，Hsu 等指出传统 Cu—Cu 键合通常需要不低于 250 °C 的工艺温度，这会加剧热应力并限制多芯片堆叠，而引入 Ag 钝化层后可显著改善低温键合的热稳定性^[116]。这些结果说明，可制造性不应仅理解为“几何能否加工”，更应包括制造过程中热应力、界面完整性与后续服役稳定性的统一约束。

从工程实现角度看，器件级人工智能热设计中的约束可进一步分解为若干可建模变量。第一，可制造性约束包括最小特征尺寸、通道壁厚、材料兼容性、键合温度、表面粗糙度和装配平整度，它们决定优化结构能否被稳定加工并保持设计性能。第二，加工与装配误差会引起 TIM 厚度不均、微凸点接触面积变化、流道截面偏差和层间错位，从而改变实际接触热阻、局部流阻和温度场分布。第三，接触热阻受界面粗糙度、接触压力、空隙率、填料分布、老化和热循环影响，是芯片—封装—冷却部件热路径中的关键不确定来源。第四，封装空间限制会约束热扩散层厚度、冷板高度、入口/出口位置和流道布置，使散热方案必须在体积、重量、互连布线和热性能之间折中。第五，热—力耦合可靠性要求同步关注温度梯度、热膨胀失配、残余应力、翘曲、界面剥离和焊点疲劳，而实验重复性则要求样品制备、功率加载、边界条件、测温方式和不确定度评估具有一致规范。因此，真实器件场景下的人工智能热设计应由单一热性能优化转向制造容差、界面接触、封装集成、流动代价、可靠性和实验可复现性的多约束协同优化。

进入服役阶段后，温度循环与功率循环会进一步把热设计问题转化为寿命问题。Shao 等在 2.5D 封装研究中通过翘曲测量逐步校验有限元模型，并首次将温度映射用于功率循环寿命预测，表明热点分布本身就是焊点疲劳与板级可靠性分析的关键输入^[167]。对于宽禁带功率器件，这种耦合更为显著：Sun 等研究的一种低寄生电感 GaN 增强型高电子迁移率晶体管功率模块，其寄生电感仅为 2.65 nH，但在热循环试验中仍出现封装热阻分阶段上升，失效主因被定位为直接键合铜基板上铜层的贝壳状分层，而非单纯的器件发热过高^[168]。这说明器件热设计不能只以峰值温度最低为目标，还应同步约束温度波动幅值、局部应变能密度、界面剥离风险和寿命指标。近年来，机器学习开始在这一层面发挥更直接的作用：Fu 等以四芯粒 2.5D 芯片异质集成系统为对象，利用拉丁超立方采样和数据驱动模型

建立热—机械耦合协同设计流程^[120]；Rafiee 等则进一步将高保真有限元分析、代理模型和多目标优化结合，并使用 500 个拉丁超立方设计点同时评估热性能与可靠性之间的权衡^[121]。因此，人工智能在器件级热设计中的角色正在由“加速温度场预测”延伸为“在多约束条件下寻找可制造且可靠的设计解”。

实验闭环验证则是智能热设计从“数值可行”走向“工程可信”的最后一环。一方面，Zeng 等提出了与红外信息耦合的全场翘曲表征方法，可同步测量局部结构的温度与变形，为热—机械模型校核提供了比单点热电偶或静态变形测试更完整的证据链^[169]；另一方面，在液冷热管理结构中，制造约束必须在优化阶段前置嵌入。Ozguc 等对拓扑优化微通道热沉进行增材制造和实验测试，发现实测压降与热阻结果落在预测的 Pareto 曲线附近，证明“优化—制造—测试”链条能够闭合^[161]；随后其又将这一思路推广到具有 8 个发热器件的多芯片模块冷板，完成了拓扑优化、面向制造设计、样件制备与实验测试的完整流程^[162]。更进一步，Sun 等对三维拓扑优化并经增材制造的热沉进行热水力测试，指出其导热能力意义下的热水力性能可达到传统矩形翅片热沉的约 2 倍^[170]。由此可见，器件可靠性、可制造性与实验闭环验证并不是热设计后的附属环节，而是决定机器学习辅助热设计能否真正进入实际器件开发流程的关键组成部分。未来更具代表性的研究，将不再停留于“仿真找到最优结构”，而是发展为“多尺度建模—代理优化—制造约束嵌入—实验反馈修正”的闭环范式，从而使器件级热设计同时具备物理可信性、工艺可实现性和长期服役稳定性。

总体来看，机器学习辅助的器件层级热设计方法更适合解决高维设计变量耦合、强非线性响应、评价代价高且存在多目标权衡的问题，尤其适用于先进封装热路径重构、多热点温度场快速预测、冷板/微通道参数寻优以及拓扑生成与制造约束协同设计等场景。其突出优势在于能够以代理模型或降阶模型替代大量高保

真仿真，从而显著提高设计空间搜索效率，并在热阻、压降、温度均匀性、结构可靠性和可制造性之间实现系统权衡。

然而，这类方法的主要局限性也十分明显：一方面，模型精度仍高度依赖训练数据的覆盖范围与质量，跨工况、跨结构和跨尺度外推时容易失真；另一方面，许多模型本质上仍是“相关性拟合”，对热流分配、局部强化机理和失效演化过程的物理可解释性不足，导致其在真实器件设计中往往更适合作为加速筛选工具，而非完全替代物理模型。

当前面临的关键瓶颈主要包括多源异构数据难以统一、实验数据稀缺且标准不一、热—流—力—制造多物理场耦合代价仍高，以及从原子尺度参数到器件级边界条件的传递链条尚不完备。未来可能的突破方向，一是发展物理约束与数据驱动深度融合的模型框架，将守恒关系、尺度律和失效准则显式嵌入学习过程；二是构建覆盖材料、界面、封装与冷却部件的跨尺度高质量数据库，提升模型泛化与可迁移能力；三是推动“仿真—优化—制造—测试”闭环数据持续回流，实现面向真实工况的在线校正与数字孪生热设计。只有在物理一致性、数据质量与实验闭环三方面同步推进，这类方法才能由“高效设计工具”进一步发展为“可信工程方法”。

表 6 器件层级机器学习热设计方法的角色、适用边界与主要局限

Table 6. Roles, applicability boundaries, and major limitations of device-level machine-learning-assisted thermal design methods.

方法路径	AI 具体角色	适用场景与主要优势	主要局限	方法路径
代理模型/降阶模型	学习几何、热源和边界条件到温度场、热阻、压降等指标的快速映射	适合先进封装温度场预测、冷板/微通道预筛和多芯片布局评估;可显著减少高保真FEM/CFD调用	依赖训练样本覆盖范围，跨结构、跨工况外推时需不确定度评估和物理校验	代理模型/降阶模型
贝叶斯	在代理模型或仿真模型	适合存在明显性能	目标函数和约束定义会	贝叶斯优化/进

优化/进化多目标优化	上搜索热阻、压降、泵功和温度均匀性的 Pareto 前沿	权衡的冷板、微通道和封装热路径优化；有利于展示工程偏好下的折中解	影响结果，若忽略泵功、封装空间或可靠性，可能得到不可用的“数值最优”	化多目标优化
主动学习/强化学习/生成式设计	根据模型不确定度补充样本，或主动探索传统参数化难以覆盖的几何形态	适合非规则流道、复杂针肋、多入口/多出口和多热点结构搜索；有助于拓展设计空间	生成结构仍需守恒方程、可制造性和实验验证约束，不能仅凭黑箱评分判定优劣	主动学习/强化学习/生成式设计
拓扑优化—增材制造协同	用代理模型加速拓扑评估，学习可制造性约束和热—流性能前沿	适合热点抑制、共轭传热冷板和高自由度液冷结构；可从参数调节走向结构生成	后处理、表面粗糙度、打印收缩、粉末去除和流道偏差会削弱仿真收益，必须开展鲁棒性评估	拓扑优化—增材制造协同
物理约束模型/数字孪生闭环	将守恒关系、尺度律和实验反馈嵌入训练与在线校正	适合可靠性评估、长期服役预测和真实工况热管理；有望提升可信度和可迁移性	需要标准化、多保真、可追溯数据支撑，实验闭环成本较高，在线校准机制仍不成熟	物理约束模型/数字孪生闭环

器件级方法应按“物理求解是否保留、学习模型是否报告适用域、工程约束是否完整、实验是否回标”四项标准评价。代理模型可显著降低 FEM/CFD 调用，但训练样本不足会导致多热点、制造偏差和边界变化下的外推失真；多目标算法能展示折中，却不会自动纳入寿命与装配误差；生成式或拓扑设计能扩大结构空间，但若缺少最小特征尺寸、粗糙度、打印收缩和测试校准，仍只能得到仿真候选。

表 6 据此区分了各方法的 AI 角色与非 AI 物理/搜索环节。

5 总结和展望

本文围绕“AI 如何把原子尺度热输运信息转化为器件级设计决策”重构了材料、界面和器件三部分。材料层由正向热物性预测扩展到目标/约束驱动的候选生成和序贯验证；界面层补充通用预训练原子势的机会与分布外风险，并给出热导率张量旋转、界面热流连续、串联面积热阻及参数不确定度传播的具体规则；器件层通过 GaN/BAs 案例说明 $K(T, \ell)$ 、 $G(T)$ 和谱热流如何进入 FEM 并接受实验校准。

由此, AI与传统串行多尺度建模的差异可归结为四点: 自适应选择数据、压缩高维状态、传播参数概率分布以及用器件目标反向更新低尺度模型。

DFT/BTE/MD和FEM/CFD提供物理约束, NSGA-II与拓扑优化提供搜索, 机器学习负责表示、预测、不确定度和决策; 将这些工具全部笼统称为AI是不严谨的。

尚未解决的问题主要集中在: 界面和极端工况数据覆盖不足; 通用原子势对声子、缺陷和高曲率势能面可能存在系统偏差; 非平衡声子信息压缩为单一 G 时会丢失频谱与分支差异; 粗糙度、污染层和接触压力使理想界面参数难以直接用于器件; 多源不确定度向热点、热应力和寿命传播的公开基准仍然缺乏。未来工作的评价重点应从单一误差或最优温度降幅转向参数可追溯性、适用域、置信区间和跨尺度实验闭环。

参考文献

- [1] Cahill D G, Braun P V, Chen G, Clarke D R, Fan S, Goodson K E, Keblinski P, King W P, Mahan G D, Majumdar A, Maris H J, Phillpot S R, Pop E, Shi L 2014 *Appl. Phys. Rev.* **1** 011305
- [2] Butler K T, Davies D W, Cartwright H, Isayev O, Walsh A 2018 *Nature* **559** 547
- [3] Jain A, Ong S P, Hautier G, Chen W, Richards W D, Dacek S, Cholia S, Gunter D, Skinner D, Ceder G, Persson K A 2013 *APL Mater.* **1** 011002
- [4] Curtarolo S, Setyawan W, Hart G L W, Jahnatek M, Chepulskii R V, Taylor R H, Wang S, Xue J, Yang K, Levy O, Mehl M J, Stokes H T, Demchenko D O, Morgan D 2012 *Comput. Mater. Sci.* **58** 218
- [5] Li W, Carrete J, A. Katcho N, Mingo N 2014 *Comput. Phys. Commun.* **185** 1747
- [6] Tian Q, Chen A, Qin H, Li R, Zhang Y, Jiang Y, Zheng X, Qin Z, Qin G 2026 *Materials Today Physics* **62** 102049
- [7] Tian Q, Yang Q, Huang A, Peng B, Zhang J, Zheng X, Zhou J, Qin Z, Qin G 2025 *J. Mater. Chem. a* **13** 35230
- [8] Curtarolo S, Setyawan W, Wang S, Xue J, Yang K, Taylor R H, Nelson L J, Hart G L W, Sanvito S, Buongiorno-Nardelli M, Mingo N, Levy O 2012 *Comput. Mater. Sci.* **58** 227
- [9] Zhang W W, Wei Z Y, Zhang L Y, Xing Y Z, Zhang Q 2020 *Rare Met.* **39** 352
- [10] Mondal K, Nuñez L, Downey C M, Van Rooyen I J 2021 *Ind. Eng. Chem. Res.* **60** 6061
- [11] Qin G, Qin Z, Yue S Y, Yan Q B, Hu M 2017 *Nanoscale* **9** 7227
- [12] Qin G, Qin Z, Wang H, Hu M 2017 *Phys. Rev. B* **95** 195416
- [13] Song Z, He L, Meng F, Zhang H, Wang L 2026 *Rare Metals* **45** e70334
- [14] Wang W, Huo D, Wang X, Ji X, Bo L, Liu X, Zhou W, Zhang Z, Zhao D 2026

- [15] Xiang H, Liu Y, Su E, Su X, Xiong C 2026 *Rare Metals* **45** e70313
- [16] Li G, Yang E, Chen R, Shi X, Kang H, Chen Z, Guo E, Wang T 2025 *Rare Metals* **44** 9010
- [17] Wang W Y, Zhu J L, Bo L, Zhou W Y, Liu X S, Li C C, Zhang Z, Zhao D G 2025 *Rare Metals* **44** 3339
- [18] Wang X Q, Hu X Q, Lin J Y, Li C B, Yu X T, Chen Q Y, Xi L L, Yang Q S, Li H, Zhang J Y, Li S K, Guo K 2024 *Rare Met.* **43** 2784
- [19] Wang M F, Lai H J, Liang J S, Chen J L, Ding W Y, Zhou Q, Peng Y, Liu C Y, Miao L 2024 *Rare Met.* **43** 1167
- [20] Qian X, Guo H R, Lyu J X, Ding B F, San X Y, Zhang X, Wang J L, Wang S F 2024 *Rare Met.* **43** 3232
- [21] Wei D H, Zhou E, Xu J Y, Wang H M, Shen C, Zhang H B, Qin Z Z, Qin G Z 2024 *Rare Met.* **43** 770
- [22] Zhang Y, Skoug E, Cain J, Ozoliņš V, Morelli D, Wolverson C 2012 *Phys. Rev. B* **85** 054306
- [23] Callaway J 1959 *Phys. Rev.* **113** 1046
- [24] Morelli D T, Heremans J P, Slack G A 2002 *Phys. Rev. B* **66** 195304
- [25] Slack G A 1973 *J. Phys. Chem. Solids* **34** 321
- [26] Zhang X, Xie H, Hu M, Bao H, Yue S, Qin G, Su G 2014 *Phys. Rev. B* **89** 054310
- [27] Li S, Yu L, Qi C, Du K, Qin G, Xiong Z 2021 *Front. Mater.* **8**
- [28] Zhou E, Wu J, Shen C, Zhang H, Qin G 2022 *J. Appl. Phys.* **131** 185702
- [29] Shen C, Hadaeghi N, Singh H K, Long T, Fan L, Qin G, Zhang H 2022 *J. Mater. Chem. C* **10** 1436
- [30] Carrete J, Li W, Mingo N, Wang S, Curtarolo S 2014 *Phys. Rev. X* **4** 011019
- [31] Xie T, Grossman J C 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 145301
- [32] Luo Y, Li M, Yuan H, Liu H, Fang Y 2023 *npj Comput. Mater.* **9** 4
- [33] Qin G, Wei Y, Yu L, Xu J, Ojih J, Rodriguez A D, Wang H, Qin Z, Hu M 2023 *J. Mater. Chem. A* **11** 5801
- [34] Petretto G, Dwaraknath S, P.C. Miranda H, Winston D, Giantomassi M, Van Setten M J, Gonze X, Persson K A, Hautier G, Rignanese G M 2018 *Sci. Data* **5** 180065
- [35] Toher C, Plata J J, Levy O, De Jong M, Asta M, Nardelli M B, Curtarolo S 2014 *Phys. Rev. B* **90** 174107
- [36] Seko A, Togo A, Hayashi H, Tsuda K, Chaput L, Tanaka I 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 205901
- [37] Snoek J, Larochelle H, Adams R P 2012 *Advances in Neural Information Processing Systems* **25**, 2012 pp2951–2959
- [38] Huber S P, Zoupanos S, Uhrin M, Talirz L, Kahle L, Häuselmann R, Gresch D, Müller T, Yakutovich A V, Andersen C W, Ramirez F F, Adorf C S, Gargiulo F, Kumbhar S, Passaro E, Johnston C, Merkys A, Cepellotti A, Mounet N, Marzari N, Kozinsky B, Pizzi G 2020 *Sci. Data* **7** 300
- [39] Chen L, Tran H, Batra R, Kim C, Ramprasad R 2019 *Comput. Mater. Sci.* **170** 109155
- [40] Zhu T, He R, Gong S, Xie T, Gorai P, Nielsch K, Grossman J C 2021 *Energy Environ. Sci.* **14** 3559

- [41] Gurunathan R, Choudhary K, Tavazza F 2023 *Phys. Rev. Mater.* **7** 023803
- [42] Hu J, Zuo Y, Hao Y, Shu G, Wang Y, Feng M, Li X, Wang X, Sun J, Ding X, Gao Z, Zhu G, Li B 2023 *Chin. Phys. B* **32** 046301
- [43] Pal K, Park C W, Xia Y, Shen J, Wolverton C 2022 *npj Comput. Mater.* **8** 48
- [44] Dunn A, Wang Q, Ganose A, Dopp D, Jain A 2020 *npj Comput. Mater.* **6** 138
- [45] Lookman T, Balachandran P V, Xue D, Yuan R 2019 *npj Comput. Mater.* **5** 21
- [46] Okabe R, Chotrattanapituk A, Boonkird A, Andrejevic N, Fu X, Jaakkola T S, Song Q, Nguyen T, Drucker N, Mu S, Wang Y, Liao B, Cheng Y, Li M 2024 *Nat. Comput. Sci.* **4** 522
- [47] Lakshminarayanan B, Pritzel A, Blundell C 2017 *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2017 pp6402–6413
- [48] Mamun A, Paul S 2023 *Symmetry* **15** 1905
- [49] Wang X, Shu G, Zhu G, Wang J S, Sun J, Ding X, Li B, Gao Z 2024 *Mater. Today Phys.* **48** 101549
- [50] Wei H, Bao H, Ruan X 2022 *Energy AI* **8** 100153
- [51] Moosavi S M, Novotny B Á, Ongari D, Moubarak E, Asgari M, Kadioglu Ö, Charalambous C, Ortega-Guerrero A, Farmahini A H, Sarkisov L, Garcia S, Noé F, Smit B 2022 *Nat. Mater.* **21** 1419
- [52] Zhu M X, Song H G, Yu Q C, Chen J M, Zhang H Y 2020 *International Journal of Heat and Mass Transfer* **162** 120381
- [53] Roy Chowdhury P, Ruan X 2022 *npj Comput. Mater.* **8** 12
- [54] Hu R, Iwamoto S, Feng L, Ju S, Hu S, Ohnishi M, Nagai N, Hirakawa K, Shiomi J 2020 *Phys. Rev. X* **10** 021050
- [55] Rustam S, Schram M, Lu Z, Chaka A M, Rosenthal W S, Pfaendtner J 2022 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **14** 32590
- [56] Zhu C, Bamidele E A, Shen X, Zhu G, Li B 2024 *Chem. Rev.* **124** 4258
- [57] Sun Z, Sun X, Qi Z, Wang Q, Li R, Li L, Wu G, Shen W, Liu S 2024 *Diamond and Related Materials* **147** 111303
- [58] Sun Z, Shi H, Zhu Y, Li R, Sun X, Wang Q, Qi Z, Li L, Liu S, Shen W, Wu G 2025 *npj Comput. Mater.* **11** 359
- [59] Wu J, Zhou E, Huang A, Zhang H, Hu M, Qin G 2024 *Nat. Commun.* **15** 2540
- [60] Ebbs-Picken T, Da Silva C M, Amon C H 2024 *Appl. Therm. Eng.* **253** 123599
- [61] Zheng A, Gao H, Jia X, Cai Y, Yang X, Zhu Q, Jiang H 2024 *Appl. Energy* **373** 123898
- [62] Sikirica A, Grbčić L, Kranjčević L 2023 *Appl. Therm. Eng.* **222** 119917
- [63] Sanchez-Lengeling B, Aspuru-Guzik A 2018 *Science* **361** 360
- [64] Arabha S, Aghbolagh Z S, Ghorbani K, Hatam-Lee S M, Rajabpour A 2021 *Journal of Applied Physics* **130** 210903
- [65] Unke O T, Chmiela S, Sauceda H E, Gastegger M, Poltavsky I, Schütt K T, Tkatchenko A, Müller K R 2021 *Chem. Rev.* **121** 10142
- [66] Dong H, Shi Y, Ying P, Xu K, Liang T, Wang Y, Zeng Z, Wu X, Zhou W, Xiong S, Chen S, Fan Z 2024 *Journal of Applied Physics* **135** 161101
- [67] Zhang L, Han J, Wang H, Car R, E W 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 143001
- [68] Liu X, Zeng K, Luo Z, Wang Y, Zhao T, Xu Z 2026 *Journal of Applied Physics* **139** 041101
- [69] Batzner S, Musaelian A, Sun L, Geiger M, Mailoa J P, Kornbluth M, Molinari N,

- Smidt T E, Kozinsky B 2022 *Nat Commun* **13** 2453
- [70] Zhang Y, Wang H, Chen W, Zeng J, Zhang L, Wang H, E W 2020 *Computer Physics Communications* **253** 107206
- [71] Chang X, Zhang D, Chu Q, Chen D 2024 *J. Chem. Theory Comput.* **20** 6813
- [72] Guo R, Li G, Tang J, Wang Y, Song X 2023 *Carbon Trends* **11** 100260
- [73] Guo L, Liu Y, Yang L, Cao B 2025 *Journal of Applied Physics* **137** 081101
- [74] Rybin N, Shapeev A 2024 *Journal of Applied Physics* **135** 205108
- [75] Fujii S, Seko A 2022 *Computational Materials Science* **204** 111137
- [76] Wang X, Yang J, Ying P, Fan Z, Zhang J, Sun H 2024 *Journal of Applied Physics* **135** 065104
- [77] Khot K, Xiao B, Han Z, Guo Z, Xiong Z, Ruan X 2025 *Journal of Applied Physics* **137** 115301
- [78] Deng B, Zhong P, Jun K, Riebesell J, Han K, Bartel C J, Ceder G 2023 *Nat Mach Intell* **5** 1031
- [79] Park Y, Kim J, Hwang S, Han S 2024 *J. Chem. Theory Comput.* **20** 4857
- [80] Batatia I, Benner P, Chiang Y, Elena A M, Kovács D P, Riebesell J, Advincula X R, Asta M, Avaylon M, Baldwin W J, Berger F, Bernstein N, Bhowmik A, Bigi F, Blau S M, Cărare V, Ceriotti M, Chong S, Darby J P, De S, Della Pia F, Deringer V L, Elijošius R, El-Machachi Z, Fako E, Falcioni F, Ferrari A C, Gardner J L A, Gawkowski M J, Genreith-Schriever A, George J, Goodall R E A, Grandel J, Grey C P, Grigorev P, Han S, Handley W, Heenen H H, Hermansson K, Ho C H, Hofmann S, Holm C, Jaafar J, Jakob K S, Jung H, Kapil V, Kaplan A D, Karimitari N, Kermode J R, Kourtis P, Kroupa N, Kullgren J, Kuner M C, Kuryla D, Liepuoniute G, Lin C, Margraf J T, Magdău I B, Michaelides A, Moore J H, Naik A A, Niblett S P, Norwood S W, O'Neill N, Ortner C, Persson K A, Reuter K, Rosen A S, Rosset L A M, Schaaf L L, Schran C, Shi B X, Sivonxay E, Stenczel T K, Sutton C, Svahn V, Swinburne T D, Tilly J, Van Der Oord C, Vargas S, Varga-Umbrich E, Vegge T, Vondrák M, Wang Y, Witt W C, Wolf T, Zills F, Csányi G 2025 *The Journal of Chemical Physics* **163** 184110
- [81] Neumann M, Gin J, Rhodes B, Bennett S, Li Z, Choubisa H, Hussey A, Godwin J 2024 Orb: A Fast, Scalable Neural Network Potential (arXiv)
- [82] Yuan E C Y, Liu Y, Chen J, Zhong P, Raja S, Kreiman T, Vargas S, Xu W, Head-Gordon M, Yang C, Blau S M, Cheng B, Krishnapriyan A, Head-Gordon T 2026 *Nat Rev Chem* **10** 212
- [83] Deng B, Choi Y, Zhong P, Riebesell J, Anand S, Li Z, Jun K, Persson K A, Ceder G 2025 *npj Comput Mater* **11** 9
- [84] Loew A, Sun D, Wang H C, Botti S, Marques M A L 2025 *npj Comput Mater* **11** 178
- [85] Bartók A P, Payne M C, Kondor R, Csányi G 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 136403
- [86] Shapeev A V 2016 *Multiscale Model. Simul.* **14** 1153
- [87] Drautz R 2019 *Phys. Rev. B* **99** 014104
- [88] Fan Z, Dong H, Harju A, Ala-Nissila T 2019 *Phys. Rev. B* **99** 064308
- [89] Chen J, Xu X, Zhou J, Li B 2022 *Rev. Mod. Phys.* **94** 025002
- [90] Stanley C M 2023 *Physica Status Solidi (b)* **260** 2300095
- [91] Sun Z, Zhang D, Qi Z, Wang Q, Sun X, Liang K, Dong F, Zhao Y, Zou D, Li L, Wu G, Shen W, Liu S 2024 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **16** 31666

- [92] Rajabpour A, Mortazavi B, Mirchi P, El Hajj J, Guo Y, Zhuang X, Merabia S 2025 *Int. J. Therm. Sci.* **214** 109876
- [93] Sun Z, Song Y, Qi Z, Sun X, Liao M, Li R, Wang Q, Li L, Wu G, Shen W, Liu S 2025 *International Journal of Heat and Mass Transfer* **241** 126724
- [94] Li Y, Li S, Wu J, Liu T, Liu S, Wu M, Yuan C 2026 *Applied Surface Science* **730** 166260
- [95] Xue J, Li F, Fan A, Ma W, Zhang X 2025 *International Journal of Heat and Mass Transfer* **239** 126629
- [96] Luo W, Yin E, Wang L, Lian W, Wang N, Li Q 2025 *International Journal of Heat and Mass Transfer* **244** 126902
- [97] Sabokdast S, Mirchi P, Rajabpour A 2026 *International Journal of Heat and Mass Transfer* **263** 128626
- [98] Wang W, Wu X, Wu Y, Volz S, Takagi T, Nomura M 2026 *Materials Today Physics* **62** 102057
- [99] Yang H, Shen Y, Li L, Pan Y, Yang P 2024 *Applied Thermal Engineering* **238** 121913
- [100] Liang T, Xu K, Ying P, Jiang W, Han M, Wu X, Ouyang W, Yao Y, Zeng X, Ye Z, Fan Z, Xu J 2025 *npj Comput Mater* **12** 11
- [101] Yang H, Gao S, Pan Y, Yang P 2024 *International Communications in Heat and Mass Transfer* **155** 107521
- [102] Shen Y, Yang H, Cao K, Yang P 2025 *International Journal of Thermal Sciences* **210** 109565
- [103] Shen Y, Li D, Cheng Z, Tang Y, Yang P 2024 *Diamond and Related Materials* **147** 111226
- [104] Wu Y, Lin S, Yang P 2024 *Thermal Science and Engineering Progress* **47** 102345
- [105] So S, Lee J H 2024 *Materials Today Physics* **46** 101506
- [106] Liu J, Qing S, Huang X, Ma M, Zhang X 2025 *Chemical Physics* **591** 112577
- [107] Li Z, Tan X, Fu Z, Liu L, Yang J Y 2023 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **25** 6746
- [108] Najm H N 2009 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **41** 35
- [109] Sun Z, Qi Z, Song Y, Li L, Liu S, Shen W, Wu G 2026 *npj Comput Mater* **12** 130
- [110] Ding Y F, Zhu G M, Shen X Y, Bai X, Li B W 2022 *Chin. Phys. B* **31** 126301
- [111] Wang Z, Dong R, Ye R, Singh S S K, Wu S, Chen C 2024 *Int. J. Heat Mass Transfer* **235** 126212
- [112] Kim M, Kim J, Park W, Kang J S 2025 *Microelectron. Reliab.* **170** 115782
- [113] Kiran Sanipini V, Rakesh B, Jyothi Chamanthula A, Santoshi N, Arunkumar Gudivada A, Kumar Panigrahy A 2021 *Materials Today: Proceedings* **45** 1742
- [114] Pi Y, Wang N, Chen J, Miao M, Jin Y, Wang W 2018 *Int. J. Heat Mass Transfer* **120** 361
- [115] Wang C, Xu Q, Nie C, Cao H, Liu J, Li Z 2023 *Microelectron. Reliab.* **146** 115006
- [116] Hsu M P, Lin T Y, Huang H J, Wang C Y, Chung T F, Wu W W, Chen K N 2025 *Commun. Eng.* **4** 216
- [117] Shen Y, Qi X, Li Y, Guo Y, Huang Q, Dai W, Yuan Q, Gu L, Ding C, Chen W J, Yang M, Jia Z, Lin C T, Jiang N, Sun F, Zhang Q J, Ma H P 2025 *Nat. Commun.* **16** 10723
- [118] Wang C, Qiu M, Pan Z, Zhou K, Wang T, Hong J, Lin Q 2025 *Appl. Therm. Eng.* **259** 124936

- [119] Luo W, Zhang X, Luo T, Li B, Wei B, Zhang J, Zhu G 2026 *Adv. Funct. Mater.* **36** e12421
- [120] Fu Y, Li G, Shan G, Chen Z, Zhao H, Yang Y 2025 *Microelectron. J.* **165** 106801
- [121] Rafiee M, Agin F, Kumar K, Murali E 2026 *Microelectron. Reliab.* **176** 115983
- [122] Dang H, Zhang Q, Lu Y, Zhang X, Ma W, Zhang X 2022 *Int. J. Heat Mass Transfer* **197** 123321
- [123] Otaki D, Nonaka H, Yamada N 2022 *International Journal of Heat and Mass Transfer* **184** 122263
- [124] Wang Z Q, Hua Y, Aubry N, Zhou Z F, Feng F, Wu W T 2023 *Int. Commun. Heat Mass Transfer* **141** 106592
- [125] Hua Y, Wang Z Q, Yuan X Y, Bai Li Y, Wu W T, Aubry N 2023 *Thermal Science and Engineering Progress* **40** 101755
- [126] Wang Z Q, Hua Y, Xie H R, Zhou Z F, Li Y B, Wu W T 2024 *Case Stud. Therm. Eng.* **59** 104576
- [127] Xiao C, Zheng W, Tian Q, Rao X, Zhang H 2024 *Int. Commun. Heat Mass Transfer* **153** 107379
- [128] Cheon M J, Kim S, Seo B, Lee J W, Kang L, Kang S, Song J Y, Cho H H 2025 *Case Stud. Therm. Eng.* **75** 107142
- [129] Su C J, Zhao T 2024 *Int. J. Heat Mass Transfer* **224** 125324
- [130] Elliott J W, Lebon M T, Robinson A J 2022 *Case Stud. Therm. Eng.* **38** 102354
- [131] Feng S, Yan Y, Li H, Zhang L, Yang S 2021 *Applied Thermal Engineering* **182** 116132
- [132] Zhang J, Chen M, Luo W, Wei B, Luo T, Shen X, Li B, Zhu G 2025 *Nat. Sustainability* **8** 651
- [133] He W, Zhao Y, Hu D, Li J, Li Q 2025 *International Communications in Heat and Mass Transfer* **165** 109005
- [134] Cho H, Lee I, Kim S, Bang S, Kim J, Nam Y 2025 *Energy Ai* **21** 100587
- [135] Huang B H, Mi C, Gong L, Zhu C Y, Li K 2024 *Case Studies in Thermal Engineering* **54** 103977
- [136] Li Y, Roux S, Castelain C, Fan Y, Luo L 2023 *Energies* **16** 7468
- [137] Kim K, Lee H, Kang M, Lee G, Jung K, Kharangate C R, Asheghi M, Goodson K E, Lee H 2022 *Int. J. Heat Mass Transfer* **194** 123087
- [138] Shanmugam M, Maganti L S 2024 *Appl. Therm. Eng.* **253** 123769
- [139] Lee H, Lee G, Kim K, Kong D, Lee H 2024 *Case Studies in Thermal Engineering* **57** 104331
- [140] Yang J, Cheng K, Zhang K, Huang C, Huai X 2024 *Applied Thermal Engineering* **257** 124446
- [141] Yu C, Yang M, Yao J, Melhi S, Elashiry M, El-Bahy S M, Tan S, Li Z, Huang S, Bao E, Zhang H 2024 *Adv Compos Hybrid Mater* **7** 189
- [142] Husain A, Kim K Y 2010 *Applied Thermal Engineering* **30** 1683
- [143] Zhang X, Yang T, Chang Z, Xu L, Xi L, Gao J, Zheng P, Xu R 2024 *Energies* **17** 818
- [144] Zongyi W, Huaishuang S, Shifeng D, Qinxin Z, Zhiyuan L, Yungang W 2024 *Applied Thermal Engineering* **248** 123345
- [145] Shao J K, Hao Y P, Li Z Y 2024 *International Journal of Heat and Mass Transfer* **220** 125019

- [146] Polat M E, Cadirci S 2022 *International Journal of Heat and Mass Transfer* **194** 123015
- [147] Polat M E, Ulger F, Cadirci S 2022 *International Journal of Thermal Sciences* **174** 107432
- [148] Xie Y, Kumar Nutakki T U, Wang D, Xu X, Li Y, Nadeem Khan M, Deifalla A, Elmasry Y, Chen R 2024 *Case Studies in Thermal Engineering* **53** 103938
- [149] Ran L, Babiker S G, Singh P K, Alghassab M A, Vu-Thi-Minh N, Adnan M M, Knani S, Garalleh H A, Alrawashdeh A I, Alharbi F S, Alotaibi H F, Riaz F 2024 *Case Studies in Thermal Engineering* **61** 104973
- [150] Feng C Y, Zhang P, Wang D W, Zhao W S, Wang J, Christodoulides P 2024 *International Communications in Heat and Mass Transfer* **159** 108137
- [151] Zhang L, Wang H, Cheng Q 2026 *International Journal of Heat and Fluid Flow* **117** 110095
- [152] Ravanji A, Lee A, Mohammadpour J, Cheng S 2024 *Applied Thermal Engineering* **256** 124099
- [153] Ravanji A, Lee A, Mohammadpour J, Cheng S 2025 *International Journal of Heat and Mass Transfer* **236** 126242
- [154] Yaji K, Yamada T, Kubo S, Izui K, Nishiwaki S 2015 *International Journal of Heat and Mass Transfer* **81** 878
- [155] Zeng S, Lee P S 2019 *International Journal of Heat and Mass Transfer* **142** 118401
- [156] Zou A, Chuan R, Qian F, Zhang W, Wang Q, Zhao C 2022 *Applied Thermal Engineering* **207** 118128
- [157] Sun C, Wang W, Tian X W, Zeng X, Qian S H, Cai Y Z, Wang X H 2023 *International Journal of Mechanical Sciences* **259** 108594
- [158] Wu J peng, Liu H ling, Li C chong, Li C hui, Xie G 2024 *Applied Thermal Engineering* **254** 123922
- [159] He W, Zhou J, Chen X, Li J, Li Q 2024 *Applied Thermal Engineering* **248** 123218
- [160] Ozguc S, Pan L, Weibel J A 2021 *International Journal of Heat and Mass Transfer* **169** 120896
- [161] Ozguc S, Teague T F G, Pan L, Weibel J A 2023 *Int. J. Heat Mass Transfer* **209** 124108
- [162] Ozguc S, Dionne P, Thorsell M, Blennius M, Nilsson T, Pan L, Weibel J A 2025 *Appl. Therm. Eng.* **258** 124741
- [163] Deng N, Huang Q, Li Y, Hou P, Gu L, Wang G, Ma F, Zhao J 2025 *International Journal of Heat and Mass Transfer* **251** 127378
- [164] Orakwe J N, Shahabad S I, Ibadode O, Bonakdar A, Toyserkani E 2025 *Addit. Manuf.* **107** 104814
- [165] Li W, Wang X, Zheng R, Zhao X, Zheng H, Zhao Z, Cheng M, Jiang Y, Jia Y 2024 *Microelectron. Reliab.* **163** 115530
- [166] Kim D, Park J, Jang J, Yang H, Kim K, Oh C, Kim D 2023 *Microelectron. Reliab.* **150** 115113
- [167] Shao S, Niu Y, Wang J, Liu R, Park S, Lee H, Yip L, Refai-Ahmed G 2020 *Microelectron. Reliab.* **111** 113701
- [168] Sun Z, Takahashi M, Guo W, Munk-Nielsen S, Jørgensen A B 2024 *Microelectronics Reliability* **161** 115482

- [169] Zeng B, Gao Y, Xiong C, Lei X, Lv W, Zhu F 2023 *Microelectron. Reliab.* **149** 115237
- [170] Sun S, Rankouhi B, Thoma D J, Cheadle M J, Maples G D, Anderson M H, Nellis G, Qian X 2024 *Int. J. Heat Mass Transfer* **224** 125281

Artificial Intelligence-Enabled Cross-Scale Thermal Design: A Machine-Learning-Centered Review from Atoms to Devices*

TIAN Qikun¹⁾ ZHANG Enbo¹⁾ JIANG Yuting¹⁾ QIN Zhenzhen²⁾ WANG
Huimin³⁾ QIN Guangzhao¹⁾†

1) (State Key Laboratory of Advanced Design and Manufacturing Technology for Vehicle, College
of Mechanical and Vehicle Engineering, Hunan University, Changsha, 410082, PR China)

2) (Key Laboratory of Materials Physics, Ministry of Education, School of Physics, Zhengzhou
University, Zhengzhou, 450001, PR China)

3) (Hunan Key Laboratory for Micro-Nano Energy Materials & Device and School of Physics and
Optoelectronics, Xiangtan University, Xiangtan 411105, Hunan, China)

Abstract

With the rapid development of high-power electronics, wide-bandgap semiconductors, heterogeneous integration, and advanced packaging technologies, heat transport research is shifting from the characterization of individual thermophysical properties toward cross-scale thermal design across materials, interfaces, structures, and devices. Heat conduction involves atomic interactions, interfacial thermal transfer, heat-flow regulation, and device-level heat dissipation. Conventional high-fidelity calculations, empirical models, and case-by-case simulations are often limited by high computational cost, restricted design-space exploration, and insufficient parameter transfer across scales. Artificial intelligence, especially machine learning, provides new methodological support for thermal transport research and high-performance thermal management

through data mining, surrogate modeling, and optimization.

This review focuses on artificial-intelligence-enabled cross-scale thermal design, with machine learning as the central thread. Organized around a chain of data, models, parameter transfer, device optimization, and experimental validation, it first clarifies the boundaries of AI/ML methods, physical solvers, and optimization algorithms. It then reviews thermophysical-property prediction and target-oriented materials design, covering data generation, model construction, candidate generation, inverse design, uncertainty quantification, and validation. Atomistic interfacial design using system-specific machine-learning interatomic potentials and universal pretrained atomistic models is discussed for heterogeneous solid–solid interfaces, van der Waals interfaces involving two-dimensional materials, and solid–liquid interfaces. Attention is paid to cross-scale parameter bridging, including rotation of anisotropic thermal-conductivity tensors, interfacial thermal-conductance boundary conditions, combination of intrinsic and process-induced thermal resistances, and propagation of parameter uncertainty to device-level outputs. Applications of surrogate modeling, multi-objective optimization, and machine-learning-assisted topology optimization are reviewed for advanced packaging, hotspot mitigation, cold-plate and microchannel design, manufacturability, and reliability. A GaN/BAs heterostructure serves as an end-to-end case study of transferring material and interfacial parameters into finite-element models with experimental benchmarking.

Taken together, AI-enabled cross-scale thermal design is moving beyond isolated prediction and optimization toward an integrated framework linking data generation, parameter transfer, device-level decision making, and experimental feedback. However, realizing this vision requires addressing key challenges in data quality and standardization, physical consistency, out-of-distribution generalization of atomistic models, coarse-graining of nonequilibrium phonon information, cross-scale uncertainty propagation, and closed-loop experimental validation. Future progress will depend on the deeper integration of multiscale simulation, physics-informed machine learning, data-driven optimization, additive manufacturing, and digital twins, ultimately advancing heat transport research toward reliable and intelligent thermal design from atoms to devices under realistic operating conditions.

Keywords: artificial intelligence, atomistic thermal design, chip cooling, cross-scale thermal management

* Project supported by the National Key R&D Program of China (Grant No.2023YFB2408100), the Postgraduate Research and Innovation Project of Hunan Province (Grant No.CX20250532), the National Science and Technology Major Project of the Ministry of Science and Technology of China (Grant No. 2025ZD0717301), the Guangdong Basic and Applied Basic Research Foundation (Grant No.2025A1515012237), the State Key Laboratory of Robotics and Systems at Harbin Institute of Technology (Grant No.SKLRs-2025-KF-10), the Shaanxi Key Laboratory of Gear Transmission (Grant No. SKLGT-2024-005), and the National Natural Science Foundation of China (Grant No.12274374). The authors gratefully acknowledge the support provided by the State Key Laboratory of Advanced Design and Manufacturing Technology for Vehicle, Hunan University.

† Corresponding author. E-mail: gzqin@hnu.edu.cn

First author. E-mail: tianqk@hnu.edu.cn

录用稿件，非最终出版稿