



(12) 发明专利申请

(10) 申请公布号 CN 114117874 A

(43) 申请公布日 2022.03.01

(21) 申请号 202010877095.0

(22) 申请日 2020.08.27

(71) 申请人 中国科学院深圳先进技术研究院
地址 518055 广东省深圳市南山区深圳大学
学城学苑大道1068号

(72) 发明人 鲁济豹 陆晓欣 孙蓉

(74) 专利代理机构 深圳市铭粤知识产权代理有限公司 44304
代理人 孙伟峰

(51) Int. Cl.
G06F 30/25 (2020.01)
G16C 10/00 (2019.01)

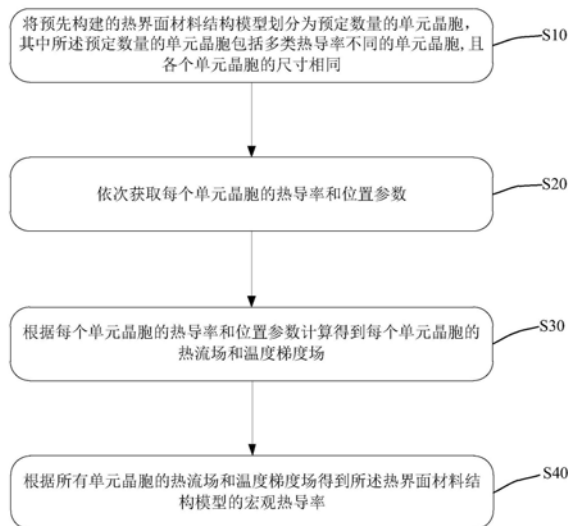
权利要求书2页 说明书8页 附图4页

(54) 发明名称

宏观热导率计算方法及其计算装置、存储介质和设备

(57) 摘要

本发明公开了一种宏观热导率计算方法及其计算装置、存储介质和计算机设备。所述宏观热导率计算方法包括：将预先构建的热界面材料结构模型划分为预定数量的单元晶胞，所述预定数量的单元晶胞包括多类热导率不同的单元晶胞；依次获取每个单元晶胞的热导率和位置参数；根据每个单元晶胞的热导率和位置参数计算得到每个单元晶胞的热流场和温度梯度场；根据所有单元晶胞的热流场和温度梯度场得到所述热界面材料结构模型的宏观热导率。通过将热界面材料结构模型划分为多个单元晶胞，分别对识别各个单元晶胞的属性并赋予相应热导率，从而单独计算各个单元晶胞的热流场和温度梯度场，提高宏观热导率的计算准确率。



1. 一种热界面材料结构模型的宏观热导率计算方法,其特征在于,所述宏观热导率计算方法包括:

将预先构建的热界面材料结构模型划分为预定数量的单元晶胞,其中所述预定数量的单元晶胞包括多类热导率不同的单元晶胞,且各个单元晶胞的尺寸相同;

依次获取每个单元晶胞的热导率和位置参数;

根据每个单元晶胞的热导率和位置参数计算得到每个单元晶胞的热流场和温度梯度场;

根据所有单元晶胞的热流场和温度梯度场得到所述热界面材料结构模型的宏观热导率。

2. 根据权利要求1所述的热界面材料结构模型的宏观热导率计算方法,其特征在于,获取每个单元晶胞的热导率的方法包括:

计算每个所述单元晶胞的判定点与各个填充颗粒的球心之间的距离;

根据每个所述单元晶胞的判定点与各个填充颗粒的球心之间的距离和各个填充颗粒的半径的大小关系确定每个单元晶胞的材料属性;

根据每个单元晶胞的材料属性确定每个单元晶胞的热导率。

3. 根据权利要求2所述的热界面材料结构模型的宏观热导率计算方法,其特征在于,根据每个所述单元晶胞的判定点与各个填充颗粒的球心之间的距离和各个填充颗粒的半径的大小关系确定每个单元晶胞的材料属性的方法包括:

判断所述单元晶胞的判定点与各个填充颗粒的球心之间的距离是否小于或等于所述填充颗粒的半径;

若是,则确定所述单元晶胞的材料属性为颗粒属性;

若否,则判断所述单元晶胞与所述填充颗粒的距离和所述填充颗粒的半径差值是否小于或等于预定值;

若是,则确定所述单元晶胞处于所述填充颗粒的界面区域内,并确定所述单元晶胞的材料属性为界面层属性;

若否,则确定所述单元晶胞的材料属性为基体属性。

4. 根据权利要求3所述的热界面材料结构模型的宏观热导率计算方法,其特征在于,所述宏观热导率计算方法还包括:

判断所述单元晶胞是否同时处于相邻两个所述填充颗粒的界面区域内;

若是,则确定所述单元晶胞的材料属性为接触层属性。

5. 根据权利要求1所述的热界面材料结构模型的宏观热导率计算方法,其特征在于,根据每个单元晶胞的热导率和位置参数计算得到每个单元晶胞的热流场和温度梯度场的方法包括:

步骤一:根据如下变换关系计算所述单元晶胞的温度梯度 $\Theta^i(x)$,其中 $p^i(x)$ 表示极化场, $k(x)$ 表示单元晶胞的热导率, k_0 为常数, x 为单元晶胞的位置参数, i 为迭代次数,

$$\Theta^i(x) = (k(x) - k_0)^{-1} \cdot p^i(x);$$

步骤二:将步骤一中的温度梯度 $\Theta^i(x)$ 和极化场 $p^i(x)$ 转换为傅里叶空间的温度梯度 $\Theta^i(\xi)$ 和傅里叶空间的极化场 $p^i(\xi)$;

步骤三:根据如下变换关系计算得到傅里叶空间的单元晶胞的热流场 $q^i(\xi)$,

$$q^i(\xi) = k_0 \cdot \Theta^i(\xi) + p^i(\xi);$$

步骤四:根据步骤二得到温度梯度 $\Theta^i(\xi)$ 和步骤三得到的热流场 $q^i(\xi)$ 计算得到迭代误差,其中,在迭代误差小于或等于阈值时,停止迭代计算,将步骤二得到温度梯度 $\Theta^i(\xi)$ 和步骤三得到的热流场 $q^i(\xi)$ 作为单元晶胞最终的温度梯度和温度梯度;在迭代误差大于阈值时,执行步骤五;

步骤五:对步骤二中的傅里叶空间的极化场 $p^i(\xi)$ 进行更新,并将更新得到的 $p^{i+1}(\xi)$ 转换为实体空间的极化场 $p^{i+1}(x)$,执行步骤一。

6.根据权利要求5所述的热界面材料结构模型的宏观热导率计算方法,其特征在于,根据所有单元晶胞的热流场和温度梯度场得到所述热界面材料结构模型的宏观热导率的方法包括:

对所有单元晶胞的热流场进行体平均得到平均热流场,并对所有单元晶胞的温度梯度场进行体平均得到平均温度梯度场;

将所述平均热流场与所述平均温度梯度场的比值作为所述热界面材料结构模型的宏观热导率。

7.根据权利要求5所述的热界面材料结构模型的宏观热导率计算方法,其特征在于,在步骤五中,根据如下变换关系对傅里叶空间的极化场 $p^i(\xi)$ 进行更新,

$$p^{i+1}(\xi) = p^i(\xi) - \alpha k_0 \cdot \Gamma^0(\xi) \cdot q^i(\xi) - \beta \Sigma^0(\xi) \cdot \Theta^i(\xi),$$

$$\Gamma^0(\xi) = \begin{cases} P(\xi), & \forall \xi \neq 0 \\ 0, & \text{for } \xi = 0 \end{cases}, \quad \Sigma^0(\xi) = \begin{cases} k_0 - k_0 \cdot \Gamma^0(\xi) \cdot k_0, & \forall \xi \neq 0 \\ 0, & \text{for } \xi = 0 \end{cases}, \quad P(\xi) = \frac{1}{|\xi|^2} \xi \otimes \xi.$$

其中, α 和 β 为常数。

8.一种热界面材料结构模型的宏观热导率计算装置,其特征在于,所述宏观热导率计算装置包括:

模型分割模块,用于将预先构建的热界面材料结构模型划分为预定数量的单元晶胞,所述预定数量的单元晶胞包括多类热导率不同的单元晶胞;

输入参数获取模块,根据每个单元晶胞的热导率和位置参数计算得到每个单元晶胞的热流场和温度梯度场;

计算模块,用于根据每个单元晶胞的热导率和位置参数计算得到每个单元晶胞的热流场和温度梯度场;以及

用于根据所有单元晶胞的热流场和温度梯度场得到所述热界面材料结构模型的宏观热导率。

9.一种计算机可读存储介质,其特征在于,所述计算机可读存储介质存储有热界面材料结构模型的宏观热导率计算程序,所述热界面材料结构模型的宏观热导率计算程序被处理器执行时实现权利要求1至7任一项所述的热界面材料结构模型的宏观热导率计算方法。

10.一种计算机设备,其特征在于,所述计算机设备包括计算机可读存储介质、处理器和存储在所述计算机可读存储介质中的热界面材料结构模型的宏观热导率计算程序,所述热界面材料结构模型的宏观热导率计算程序被处理器执行时实现权利要求1至7任一项所述的热界面材料结构模型的宏观热导率计算方法。

宏观热导率计算方法及其计算装置、存储介质和设备

技术领域

[0001] 本发明属于高分子结构材料特性的仿真技术领域,具体地讲,涉及热界面材料结构模型的宏观热导率计算方法、宏观热导率计算装置、计算机可读存储介质、计算机设备。

背景技术

[0002] 电子封装结构逐渐小型化和高功率化使电子产品产生的热量随之增加,从而严重影响器件的性能和寿命。解决器件散热问题的一种有效的方法就是在芯片和散热器之间填充一层具有高导热系数和良好可压缩性的热界面材料以降低接触热阻。在分子中添加具有高导热系数的球形颗粒是热界面材料最常见的选择,合理地选择填料并调配填料和聚合物基体的比例在学术和工业应用方面都具有重要意义。

[0003] 考虑到实验研究成本高、周期长,目前国内外很多关于界面材料的导热性质的研究是基于计算模拟的方法,主流方向主要分为两种。一种是解析模型和半经验模型,如Maxwell-Garnett模型、Bruggman模型、Russel模型、Lewis-Nielsen模型等,这些模型通过理论推导或经验公式给出材料宏观热导率随填料体积分数的预测值。另一种是数值模拟算法,主要是有限元方法,该方法针对具体的微结构利用离散化的方法对复合材料热导率进行均质化计算。

[0004] 然而,解析模型或半经验模型一般只适用于低填充体积分数的热界面材料,对于高填充密度的材料的性能预测并不准确,具有很大的局限性。同时,该方法也无法具体模拟微观结构参数(例如颗粒的尺寸分布、不同颗粒混杂、颗粒和颗粒之间的接触热阻等)对宏观热导率的影响。并且基于有限元的数值方法,其模型建立的复杂度高,计算效率较慢。

发明内容

[0005] (一) 本发明所要解决的技术问题

[0006] 本发明解决的技术问题是:如何识别各个不同区域的热导率,从而准确地模拟整个材料模型的宏观热导率。

[0007] (二) 本发明所采用的技术方案

[0008] 一种热界面材料结构模型的宏观热导率计算方法,所述宏观热导率计算方法包括:

[0009] 将预先构建的热界面材料结构模型划分为预定数量的单元晶胞,其中所述预定数量的单元晶胞包括多类热导率不同的单元晶胞,且各个单元晶胞的尺寸相同;

[0010] 依次获取每个单元晶胞的热导率和位置参数;

[0011] 根据每个单元晶胞的热导率和位置参数计算得到每个单元晶胞的热流场和温度梯度场;

[0012] 根据所有单元晶胞的热流场和温度梯度场得到所述热界面材料结构模型的宏观热导率。

[0013] 优选地,获取每个单元晶胞的热导率的方法包括:

- [0014] 计算每个所述单元晶胞的判定点与各个填充颗粒的球心之间的距离；
- [0015] 根据每个所述单元晶胞的判定点与各个填充颗粒的球心之间的距离和各个填充颗粒的半径的大小关系确定每个单元晶胞的材料属性；
- [0016] 根据每个单元晶胞的材料属性确定每个单元晶胞的热导率。
- [0017] 优选地,根据每个所述单元晶胞的判定点与各个填充颗粒的球心之间的距离和各个填充颗粒的半径的大小关系确定每个单元晶胞的材料属性的方法包括:
- [0018] 判断所述单元晶胞的判定点与各个填充颗粒的球心之间的距离是否小于或等于所述填充颗粒的半径;
- [0019] 若是,则确定所述单元晶胞的材料属性为颗粒属性;
- [0020] 若否,则判断所述单元晶胞与所述填充颗粒的距离和所述填充颗粒的半径差值是否小于或等于预定值;
- [0021] 若是,则确定所述单元晶胞处于所述填充颗粒的界面区域内,并确定所述单元晶胞的材料属性为界面层属性;
- [0022] 若否,则确定所述单元晶胞的材料属性为基体属性。
- [0023] 优选地,所述宏观热导率计算方法还包括:
- [0024] 判断所述单元晶胞是否同时处于相邻两个所述填充颗粒的界面区域内;
- [0025] 若是,则确定所述单元晶胞的材料属性为接触层属性。
- [0026] 优选地,根据每个单元晶胞的热导率和位置参数计算得到每个单元晶胞的热流场和温度梯度场的方法包括:
- [0027] 步骤一:根据如下变换关系计算所述单元晶胞的温度梯度 $\Theta^i(x)$,其中 $p^i(x)$ 表示极化场, $k(x)$ 表示单元晶胞的热导率, k_0 为常数, x 为单元晶胞的位置参数, i 为迭代次数,
- [0028] $\Theta^i(x) = (k(x) - k_0)^{-1} \cdot p^i(x)$;
- [0029] 步骤二:将步骤一中的温度梯度 $\Theta^i(x)$ 和极化场 $p^i(x)$ 转换为傅里叶空间的温度梯度 $\Theta^i(\xi)$ 和傅里叶空间的极化场 $p^i(\xi)$;
- [0030] 步骤三:根据如下变换关系计算得到傅里叶空间的单元晶胞的热流场 $q^i(\xi)$,
- [0031] $q^i(\xi) = k_0 \cdot \Theta^i(\xi) + p^i(\xi)$;
- [0032] 步骤四:根据步骤二得到温度梯度 $\Theta^i(\xi)$ 和步骤三得到的热流场 $q^i(\xi)$ 计算得到迭代误差,其中,在迭代误差小于或等于阈值时,停止迭代计算,将步骤二得到温度梯度 $\Theta^i(\xi)$ 和步骤三得到的热流场 $q^i(\xi)$ 作为单元晶胞最终的温度梯度和温度梯度;在迭代误差大于阈值时,执行步骤五;
- [0033] 步骤五:对步骤二中的傅里叶空间的极化场 $p^i(\xi)$ 进行更新,并将更新得到的 $p^{i+1}(\xi)$ 转换为实体空间的极化场 $p^{i+1}(x)$,执行步骤一。
- [0034] 优选地,根据所有单元晶胞的热流场和温度梯度场得到所述热界面材料结构模型的宏观热导率的方法包括:
- [0035] 对所有单元晶胞的热流场进行体平均得到平均热流场,并对所有单元晶胞的温度梯度场进行体平均得到平均温度梯度场;
- [0036] 将所述平均热流场与所述平均温度梯度场的比值作为所述热界面材料结构模型的宏观热导率。
- [0037] 优选地,在步骤五中,根据如下变换关系对傅里叶空间的极化场 $p^i(\xi)$ 进行更新,

$$[0038] \quad p^{i+1}(\xi) = p^i(\xi) - \alpha k_0 \cdot \Gamma^0(\xi) \cdot q^i(\xi) - \beta \Sigma^0(\xi) \cdot \Theta^i(\xi),$$

$$[0039] \quad \Gamma^0(\xi) = \begin{cases} P(\xi), & \forall \xi \neq 0 \\ 0, & \text{for } \xi = 0 \end{cases}, \quad \Sigma^0(\xi) = \begin{cases} k_0 - k_0 \cdot \Gamma^0(\xi) \cdot k_0, & \forall \xi \neq 0 \\ 0, & \text{for } \xi = 0 \end{cases}, \quad P(\xi) = \frac{1}{|\xi|^2} \xi \otimes \xi.$$

[0040] 其中, α 和 β 为常数。

[0041] 本发明还公开了一种热界面材料结构模型的宏观热导率计算装置,所述宏观热导率计算装置包括:

[0042] 模型分割模块,用于将预先构建的热界面材料结构模型划分为预定数量的单元晶胞,所述预定数量的单元晶胞包括多类热导率不同的单元晶胞;

[0043] 输入参数获取模块,根据每个单元晶胞的热导率和位置参数计算得到每个单元晶胞的热流场和温度梯度场;

[0044] 计算模块,用于根据每个单元晶胞的热导率和位置参数计算得到每个单元晶胞的热流场和温度梯度场;以及

[0045] 用于根据所有单元晶胞的热流场和温度梯度场得到所述热界面材料结构模型的宏观热导率。

[0046] 本发明还公开了一种计算机可读存储介质,所述计算机可读存储介质存储有热界面材料结构模型的宏观热导率计算程序,所述热界面材料结构模型的宏观热导率计算程序被处理器执行时实现上述的热界面材料结构模型的宏观热导率计算方法。

[0047] 本发明还公开了一种计算机设备,所述计算机设备包括计算机可读存储介质、处理器和存储在所述计算机可读存储介质中的热界面材料结构模型的宏观热导率计算程序,所述热界面材料结构模型的宏观热导率计算程序被处理器执行时实现上述的热界面材料结构模型的宏观热导率计算方法。

[0048] (三)有益效果

[0049] 本发明公开了一种热界面材料结构模型的宏观热导率计算方法,相对于传统的计算方法,具有如下技术效果:

[0050] (1)通过将热界面材料结构模型划分为多个单元晶胞,分别对识别各个单元晶胞的属性并赋予相应热导率,从而单独计算各个单元晶胞的热流场和温度梯度场,提高宏观热导率的计算准确率。

[0051] (2)利用傅里叶变换的方法对随机分散结构的宏观热性能进行均质化的计算,和一般的数值计算方法相比,速度更快,所需内存更小,在保证精度的同时降低了计算成本,提高了计算效率。

[0052] (3)本申请和解析模型相比,应用范围更加广泛,可以用于分析各种微观结构差异对宏观热导率的影响,如分散程度、粒子尺寸分布、混杂粒子、界面热阻和接触热阻的影响。同时,本申请的计算方法适用于从低到高颗粒填充体积分数的全域计算。

附图说明

[0053] 图1为本发明的实施例一的热界面材料结构模型的宏观热导率计算方法的流程图;

[0054] 图2为本发明的实施例一的获取每个单元晶胞的热导率的流程图;

[0055] 图3为本发明的实施例一的填充颗粒的分布示意图;

[0056] 图4为本发明的实施例一的单元晶胞的热流场和温度梯度场计算的方法的流程图;

[0057] 图5为本发明的实施例二的热界面材料结构模型的宏观热导率计算装置的架构图;

[0058] 图6为本发明的实施例四的计算机设备的示意图。

具体实施方式

[0059] 为了使本发明的目的、技术方案及优点更加清楚明白,以下结合附图及实施例,对本发明进一步详细说明。应当理解,此处所描述的具体实施例仅仅用以解释本发明,并不用于限定本发明。

[0060] 在详细描述本申请的各个实施例之前,首先简单描述本申请的发明构思:现有技术中,在计算热界面材料的宏观热导率时,对不同区域的热导率未做区分,导致计算结果的误差较大,本申请对将热界面材料结构模型划分为多个单元晶胞,分别对识别各个单元晶胞的属性并赋予相应热导率,从而单独计算各个单元晶胞的热流场和温度梯度场,最后再计算出整体的宏观热导率,通过考虑不同区域的热导率,从而精确地计算每个区域的热学数据,最终可以提高宏观热导率的计算准确率。

[0061] 实施例一

[0062] 具体地,如图1所示,本实施例一的热界面材料结构模型的宏观热导率计算方法包括如下步骤:

[0063] 步骤S10:将预先构建的热界面材料结构模型划分为预定数量的单元晶胞,其中所述预定数量的单元晶胞包括多类热导率不同的单元晶胞,且各个单元晶胞的尺寸相同。

[0064] 步骤S20:依次获取每个单元晶胞的热导率和位置参数。

[0065] 步骤S30:根据每个单元晶胞的热导率和位置参数计算得到每个单元晶胞的热流场和温度梯度场。

[0066] 步骤S40:根据所有单元晶胞的热流场和温度梯度场得到所述热界面材料结构模型的宏观热导率。

[0067] 具体来说,在进行宏观热导率计算之前,需要构建热界面材料结构模型,根据不同的填充密度,采用两种不同的构建方法。

[0068] 针对低填充密度:利用蒙特卡洛方法中马尔科夫链算法,将填充颗粒随机分布在具有周期性边界条件的正方体型代表性体积单元中。具体方法为,首先将全部颗粒随机无重合的放入代表性体积单元中,然后随机选取一个颗粒进行移动。如果移动后的颗粒与其他的颗粒无重合,即接收此次移动,更新该颗粒的位置;反之,则拒绝本次移动,即颗粒在原位置不动。重复这个过程,并在一定规则间隔内记录位置结构,最终获得一系列相互无关的代表性体积单元。其中,这里的代表性体积单元即为本实施例一的热界面材料结构模型,由于确定了颗粒数量、尺寸以及模型体积之后,会随机生成不同结构的模型,即代表性体积单元,通过对多个代表性体积单元的宏观热导率进行求平均和做标准差,从而提高准确率。需要说明的是,本实施例中后续的计算步骤,仅仅描述了针对其中一个代表性体积单元进行计算,对其他代表性体积单元也是进行相同的处理。

[0069] 针对高填充密度:对于具有高颗粒填充体积分数的体系,在Lammps (Large-scale

Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator,简称Lammps,大规模原子分子并行模拟器)软件中利用分子动力学的方法建立热界面材料结构模型,设定颗粒之间的L-J势能,实现颗粒分散,体系能量最小的时候颗粒位置就达到了稳定,我们输出此时的颗粒球心坐标以及颗粒的半径。具体来说,把颗粒看作硬球,并将Lennard-Jones(兰纳-琼斯势)势能乘以一个削度方程项 $f(r)$,来描述颗粒之间的相互作用。

[0070] 其中,当 $r < r_m$ 时, $f(r) = 1.0$;当 $r_m < r < r_{cut}$ 时, $f(r) = (1-x)^3 * (1+3x+6x^2)$;当 $r \geq r_{cut}$ 时, $f(r) = 0.0$ 。设置合理的内部截断距离 r_m 和外部截断距离 r_{cut} 来定义颗粒之间的排斥范围, r 表示相邻两个颗粒之间的距离。颗粒的位置利用共轭梯度法迭代调整,直到每个粒子受力平衡,体系能量达到最小值。作为优选实施例,内部截断距离 r_m 为 0.1\AA ,外部截断距离 r_{cut} 为颗粒的半径。

[0071] 具体地,在步骤S10中,将构建完成的热界面材料结构模型划分为多个正方体形成的单元晶胞。其中,热界面材料结构模型为正方体模型,其体积为 L ,单元晶胞为正方体,其边长为 δx ,单元晶胞的尺寸远远小于填充颗粒的尺寸。以一种填充颗粒为例,对于某一位置上的单元晶胞,其可能处于颗粒内部,也可能处于颗粒外部以及相邻颗粒之间的交界处,因此单元晶胞的热导率存在多种情况,通过区分不同热导率的单元晶胞,可以更加准确地计算。

[0072] 进一步地,如图2所示,步骤S20中,获取每个单元晶胞的热导率的方法包括如下步骤:

[0073] 步骤S21:计算每个所述单元晶胞的判定点与各个填充颗粒的球心之间的距离。

[0074] 步骤S22:根据每个所述单元晶胞的判定点与各个填充颗粒的球心之间的距离和各个填充颗粒的半径的大小关系确定每个单元晶胞的材料属性。

[0075] 步骤S23:根据每个单元晶胞的材料属性确定每个单元晶胞的热导率。

[0076] 具体来说,在步骤S21中,将单元晶胞的其中一个顶点作为单元晶胞的判定点,用于后续判定单元晶胞的材料属性。获取判定点的空间坐标和各个填充颗粒的球心坐标,并根据判定点的空间坐标和各个填充颗粒的球心坐标计算得到单元晶胞的判定点与各个填充颗粒的球心之间的距离。

[0077] 在步骤S22中,每个所述单元晶胞的判定点与各个填充颗粒的球心之间的距离和各个填充颗粒的半径的大小关系确定每个单元晶胞的材料属性。具体来说,如图3所示,计算单元晶胞的判定点 P 与填充颗粒的球心 O 的距离 R_1 。判断该距离 R_1 是否小于或等于填充颗粒的半径 R_2 ,若单元晶胞的判定点与填充颗粒的球心的距离 R_1 小于或等于填充颗粒的半径 R_2 ,说明单元晶胞的判定点处于填充颗粒的内部区域,此时将单元晶胞的材料属性确定为颗粒属性,并将填充颗粒的热导率作为单元晶胞的热导率。若单元晶胞的判定点与填充颗粒的球心的距离 R_1 大于填充颗粒的半径 R_2 ,则进一步判断单元晶胞与填充颗粒的距离 R_1 和填充颗粒的半径 R_2 差值是否小于或等于预定值 S ,即 $R_1 - R_2 \leq S$,预定值 S 为包覆在填充颗粒外表面的界面热阻层的厚度,若是则说明此时单元晶胞处于填充颗粒的界面区域内,因此确定单元晶胞的材料属性为界面层属性,并将界面热阻层的热导率作为单元晶胞的热导率。若判断单元晶胞与填充颗粒的距离 R_1 和填充颗粒的半径 R_2 差值大于预定值 S ,即 $R_1 - R_2 > S$,则说明单元晶胞完全处于填充颗粒外部,则确定单元晶胞的材料属性为基体属性,并将基体的热导率作为单元晶胞的热导率。其中,预定值 S 即为界面热阻层的厚度,且预定值 S 优选为

一个单元晶胞的边长。

[0078] 进一步地,由于热界面材料结构模型中的部分填充颗粒之间间隔较小,相邻两个填充颗粒的界面热阻层存在重叠区域,该重叠区域定义为接触层,接触层的热导率与界面热阻层的热导率不相同。因此,在进一步判断单元晶胞是否同时处于相邻两个填充颗粒的界面区域内,若是则说明单元晶胞处于接触层区域内,并确定单元晶胞的材料属性为接触层属性,从而将接触层的热导率作为单元晶胞的热导率;若否则说明单元晶胞的属性为颗粒属性。本实施例中讨论了只存在一种填充颗粒的情况,此时单元晶胞的热导率有四种不同值,当存在多种不同种类的填充颗粒时,单元晶胞的热导率便具有更多不同值,其判断方法都与上述方法相同。

[0079] 进一步需要说明的是,步骤S21中获取的单元晶胞的判定点的坐标作为单元晶胞的位置参数,用于后续计算使用。

[0080] 在步骤S30中,采用迭代计算的方法来计算每个单元晶胞的热流场和温度梯度场,如图4所示,具体方法包括如下步骤:

[0081] 步骤一:根据如下变换关系计算所述单元晶胞的温度梯度 $\Theta^i(x)$,其中 $p^i(x)$ 表示极化场, $k(x)$ 表示单元晶胞的热导率, k_0 为常数, x 为单元晶胞的位置参数, i 为迭代次数,

$$[0082] \quad \Theta^i(x) = (k(x) - k_0)^{-1} \cdot p^i(x);$$

[0083] 步骤二:将步骤一中的温度梯度 $\Theta^i(x)$ 和极化场 $p^i(x)$ 转换为傅里叶空间的温度梯度 $\Theta^i(\xi)$ 和傅里叶空间的极化场 $q^i(\xi)$,即 $\Theta^i(\xi) = FFT(\Theta^i(x))$, $p^i(\xi) = FFT(p^i(x))$,其中, ξ 为离散波矢量。需要说明的是,在进行傅里叶变换时,傅里叶空间的温度梯度 $\Theta^i(\xi)$ 和极化场 $q^i(\xi)$ 与实体空间中的单元晶胞的位置参数 x 是相关的。

[0084] 步骤三:根据如下变换关系计算得到傅里叶空间的单元晶胞的热流场 $q^i(\xi)$,

$$[0085] \quad q^i(\xi) = k_0 \cdot \Theta^i(\xi) + p^i(\xi);$$

[0086] 步骤四:根据步骤二得到温度梯度 $\Theta^i(\xi)$ 和步骤三得到的热流场 $q^i(\xi)$ 计算得到迭代误差,其中,在迭代误差小于或等于阈值时,停止迭代计算,将步骤二得到温度梯度 $\Theta^i(\xi)$ 和步骤三得到的热流场 $q^i(\xi)$ 作为单元晶胞最终的温度梯度和热流场;在迭代误差大于阈值时,执行步骤五;

[0087] 步骤五:对步骤二中的傅里叶空间的极化场 $p^i(\xi)$ 进行更新,并将更新得到的 $p^{i+1}(\xi)$ 转换为实体空间的极化场 $p^{i+1}(x)$,执行步骤一。

[0088] 在步骤四中,迭代误差 e^i 的定义如下:

$$[0089] \quad e^i = \max\left(\frac{\|Q(\xi) : \Theta^i(\xi)\|}{\|\Theta^i(\xi)\|}, \frac{\|P(\xi) : q^i(\xi)\|}{\|q^i(\xi)\|}\right)$$

[0090] 其中, $P(\xi) = \frac{1}{|\xi|^2} \xi \otimes \xi$,表示离散波矢量 ξ 的投影矩阵,当迭代误差 e^i 小于或等于阈值时,说明计算过程达到了收敛,此时停止迭代计算。作为优选实施例,阈值选为 10^{-3} 。

[0091] 在步骤五中,根据如下变换关系对傅里叶空间的极化场 $p^i(\xi)$ 进行更新,

$$[0092] \quad p^{i+1}(\xi) = p^i(\xi) - \alpha k_0 \cdot \Gamma^0(\xi) \cdot q^i(\xi) - \beta \Sigma^0(\xi) \cdot \Theta^i(\xi),$$

[0093] 其中, $\Gamma^0(\xi) = \begin{cases} P(\xi), & \forall \xi \neq 0 \\ 0, & \text{for } \xi = 0 \end{cases}$, $\Sigma^0(\xi) = \begin{cases} k_0 - k_0 \cdot \Gamma^0(\xi) / k_0, & \forall \xi \neq 0 \\ 0, & \text{for } \xi = 0 \end{cases}$, $P(\xi) = \frac{1}{|\xi|^2} \xi \otimes \xi$, α 和 β 为

常数。作为优选实施例, $\alpha = 1.5, \beta = 1.5, k_0 = -k_m, -k_m$ 表示基体热导率。

[0094] 重复上述步骤一至步骤五的迭代过程, 最终得到单元晶胞的温度梯度和热流场。

[0095] 在步骤S40中, 对所有单元晶胞的热流场进行体平均得到平均热流场 \bar{q} , 并对所有单元晶胞的温度梯度场进行体平均得到平均温度梯度场 $\bar{\Theta}$, 最后将平均热流场 \bar{q} 与平均温度梯度场 $\bar{\Theta}$ 的比值作为所述热界面材料结构模型的宏观热导率。

[0096] 本实施例一公开的热界面材料结构模型的宏观热导率计算方法, 通过将热界面材料结构模型划分为多个单元晶胞, 分别对识别各个单元晶胞的属性并赋予相应热导率, 从而单独计算各个单元晶胞的热流场和温度梯度场, 提高宏观热导率的计算准确率; 并采用傅里叶变换方法, 可快速计算, 降低了计算成本。

[0097] 实施例二

[0098] 如图5所示, 本实施例二公开的热界面材料结构模型的宏观热导率计算装置包括模型分割模块100、输入参数获取模块200和计算模块300。其中, 模型分割模块100用于将预先构建的热界面材料结构模型划分为预定数量的单元晶胞, 预定数量的单元晶胞包括多类热导率不同的单元晶胞。输入参数获取模块200用于根据每个单元晶胞的热导率和位置参数计算得到每个单元晶胞的热流场和温度梯度场。计算模块300用于根据每个单元晶胞的热导率和位置参数计算得到每个单元晶胞的热流场和温度梯度场; 以及用于根据所有单元晶胞的热流场和温度梯度场得到所述热界面材料结构模型的宏观热导率。

[0099] 具体地, 输入参数获取模块200还用于计算每个所述单元晶胞的判定点与各个填充颗粒的球心之间的距离; 以及根据每个所述单元晶胞的判定点与各个填充颗粒的球心之间的距离和各个填充颗粒的半径的大小关系确定每个单元晶胞的材料属性; 最后根据每个单元晶胞的材料属性确定每个单元晶胞的热导率。

[0100] 进一步地, 输入参数获取模块200还用于判断所述单元晶胞的判定点与各个填充颗粒的球心之间的距离是否小于或等于所述填充颗粒的半径; 若是, 则确定所述单元晶胞的材料属性为颗粒属性; 若否, 则判断所述单元晶胞与所述填充颗粒的距离和所述填充颗粒的半径差值是否小于或等于预定值; 若是, 则确定所述单元晶胞处于所述填充颗粒的界面区域内, 并确定所述单元晶胞的材料属性为界面层属性; 若否, 则确定所述单元晶胞的材料属性为基体属性。

[0101] 以及, 输入参数获取模块200还用于判断所述单元晶胞是否同时处于相邻两个所述填充颗粒的界面区域内; 若是, 则确定所述单元晶胞的材料属性为接触层属性, 若否则确定所述单元晶胞的材料属性为基体属性。

[0102] 具体地, 计算模块300用于根据每个单元晶胞的热导率和位置参数计算得到每个单元晶胞的热流场和温度梯度场的具体方法包括:

[0103] 步骤一: 根据如下变换关系计算所述单元晶胞的温度梯度 $\Theta^i(x)$, 其中 $p^i(x)$ 表示极化场, $k(x)$ 表示单元晶胞的热导率, k_0 为常数, x 为单元晶胞的位置参数, i 为迭代次数,

[0104] $\Theta^i(x) = (k(x) - k_0)^{-1} \cdot p^i(x)$;

[0105] 步骤二: 将步骤一中的温度梯度 $\Theta^i(x)$ 和极化场 $p^i(x)$ 转换为傅里叶空间的温度梯

度 $\Theta^i(\xi)$ 和傅里叶空间的极化场 $p^i(\xi)$, 即 $\Theta^i(\xi) = \mathcal{FFT}(\Theta^i(x))$, $p^i(\xi) = \mathcal{FFT}(p^i(x))$, 其中, ξ 为离散波矢量。

[0106] 步骤三: 根据如下变换关系计算得到傅里叶空间的单元晶胞的热流场 $q^i(\xi)$,

[0107] $q^i(\xi) = k_0 \cdot \Theta^i(\xi) + p^i(\xi)$;

[0108] 步骤四: 根据步骤二得到温度梯度 $\Theta^i(\xi)$ 和步骤三得到的热流场 $q^i(\xi)$ 计算得到迭代误差, 其中, 在迭代误差小于或等于阈值时, 停止迭代计算, 将步骤二得到温度梯度 $\Theta^i(\xi)$ 和步骤三得到的热流场 $q^i(\xi)$ 作为单元晶胞最终的温度梯度和热流场; 在迭代误差大于阈值时, 执行步骤五;

[0109] 步骤五: 对步骤二中的傅里叶空间的极化场 $p^i(\xi)$ 进行更新, 并将更新得到的 $p^{i+1}(\xi)$ 转换为实体空间的极化场 $p^{i+1}(x)$, 执行步骤一。

[0110] 实施例三

[0111] 本实施例三还公开了一种计算机可读存储介质, 所述计算机可读存储介质存储有热界面材料结构模型的宏观热导率计算程序, 所述热界面材料结构模型的宏观热导率计算程序被处理器执行时实现实施例一或实施例二的热界面材料结构模型的宏观热导率计算方法。

[0112] 实施例四

[0113] 本实施例四还公开了一种计算机设备, 在硬件层面, 如图6所示, 该终端包括处理器12、内部总线13、网络接口14、计算机可读存储介质11。处理器12从计算机可读存储介质中读取对应的计算机程序然后运行, 在逻辑层面上形成请求处理装置。当然, 除了软件实现方式之外, 本说明书一个或多个实施例并不排除其他实现方式, 比如逻辑器件抑或软硬件结合的方式等等, 也就是说以下处理流程的执行主体并不限于各个逻辑单元, 也可以是硬件或逻辑器件。所述计算机可读存储介质11上存储有热界面材料结构模型的宏观热导率计算程序, 所述热界面材料结构模型的宏观热导率计算程序被处理器执行时实现上述的热界面材料结构模型的宏观热导率计算方法。

[0114] 计算机可读存储介质包括永久性和非永久性、可移动和非可移动媒体可以由任何方法或技术来实现信息存储。信息可以是计算机可读指令、数据结构、程序的模块或其他数据。计算机可读存储介质的例子包括, 但不限于相变内存 (PRAM)、静态随机存取存储器 (SRAM)、动态随机存取存储器 (DRAM)、其他类型的随机存取存储器 (RAM)、只读存储器 (ROM)、电可擦除可编程只读存储器 (EEPROM)、快闪记忆体或其他内存技术、只读光盘只读存储器 (CD-ROM)、数字多功能光盘 (DVD) 或其他光学存储、磁盒式磁带、磁盘存储、量子存储器、基于石墨烯的存储介质或其他磁性存储设备或任何其他非传输介质, 可用于存储可以被计算设备访问的信息。

[0115] 上面对本发明的具体实施方式进行了详细描述, 虽然已表示和描述了一些实施例, 但本领域技术人员应该理解, 在不脱离由权利要求及其等同物限定其范围的本发明的原理和精神的情况下, 可以对这些实施例进行修改和完善, 这些修改和完善也应在本发明的保护范围内。

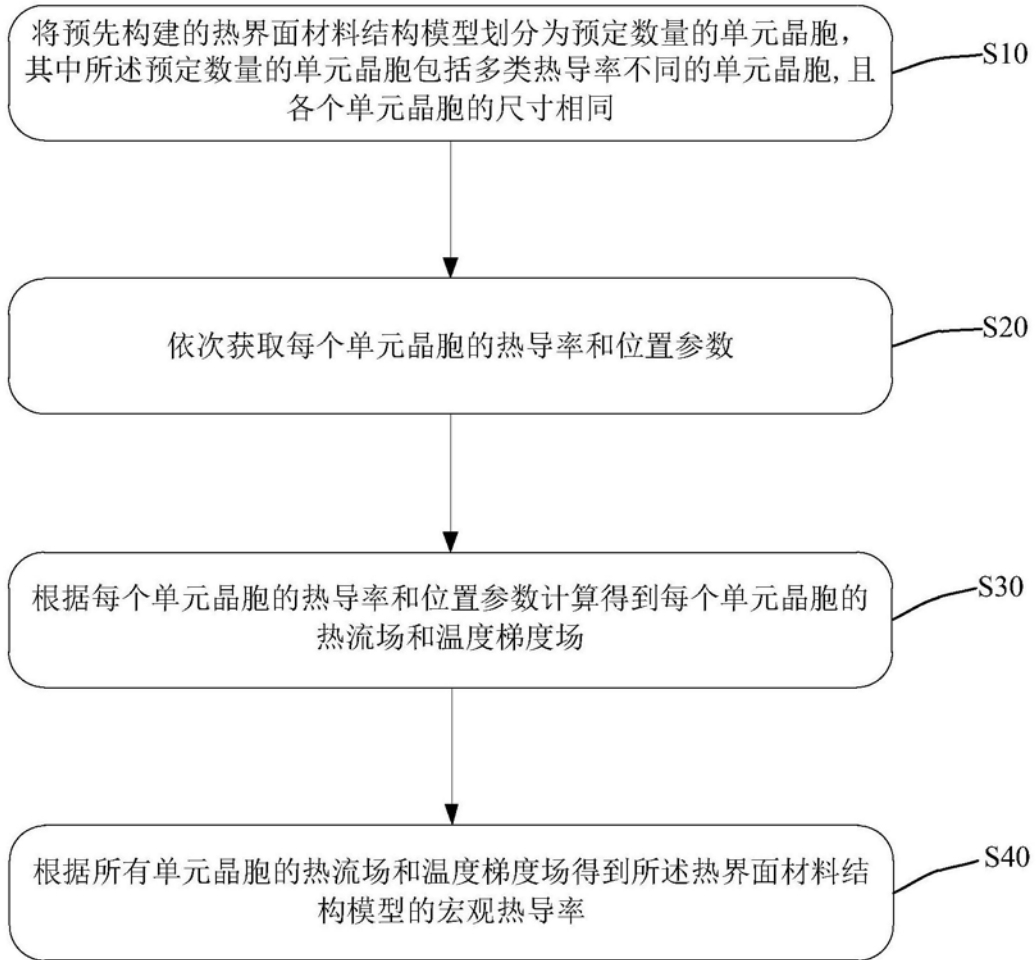


图1

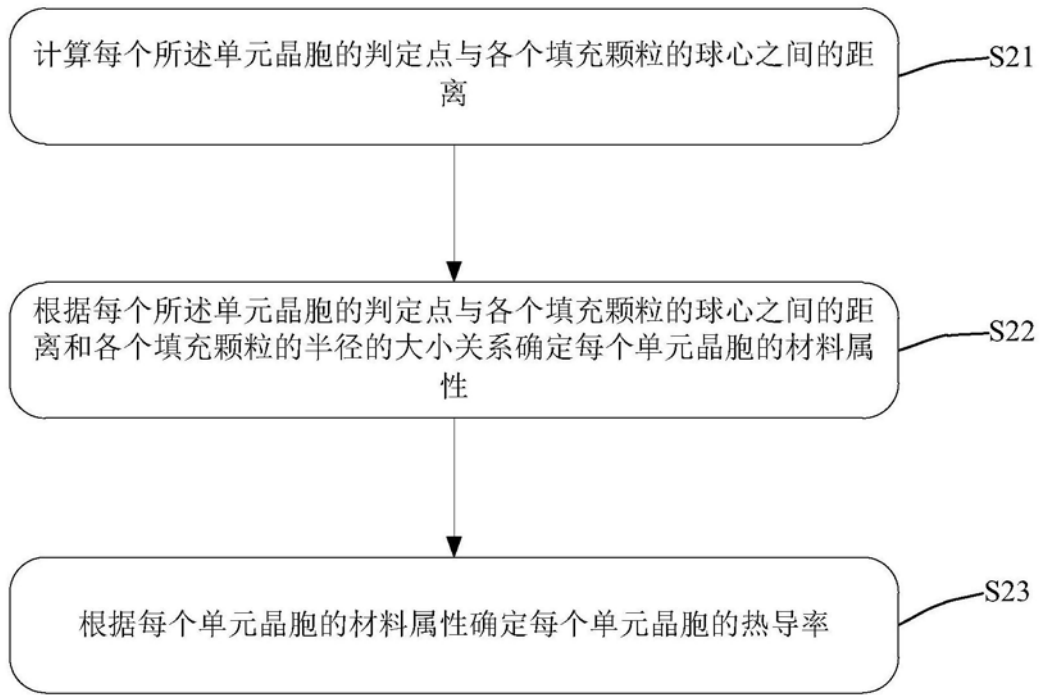


图2

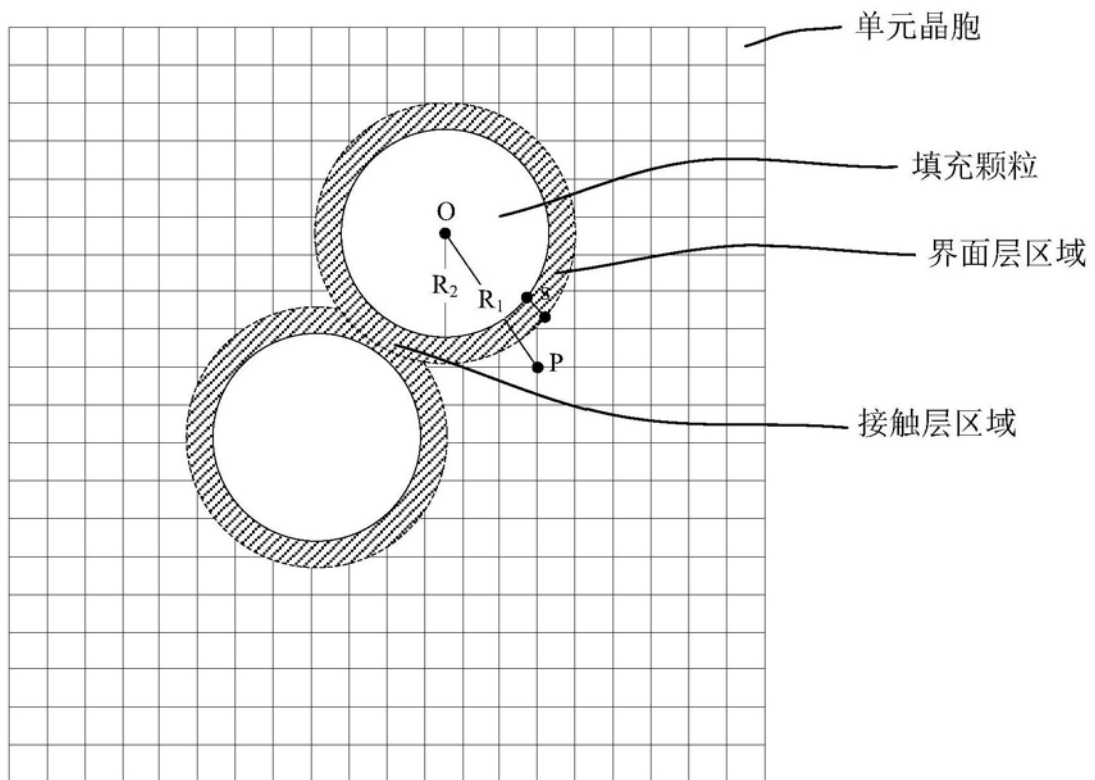


图3

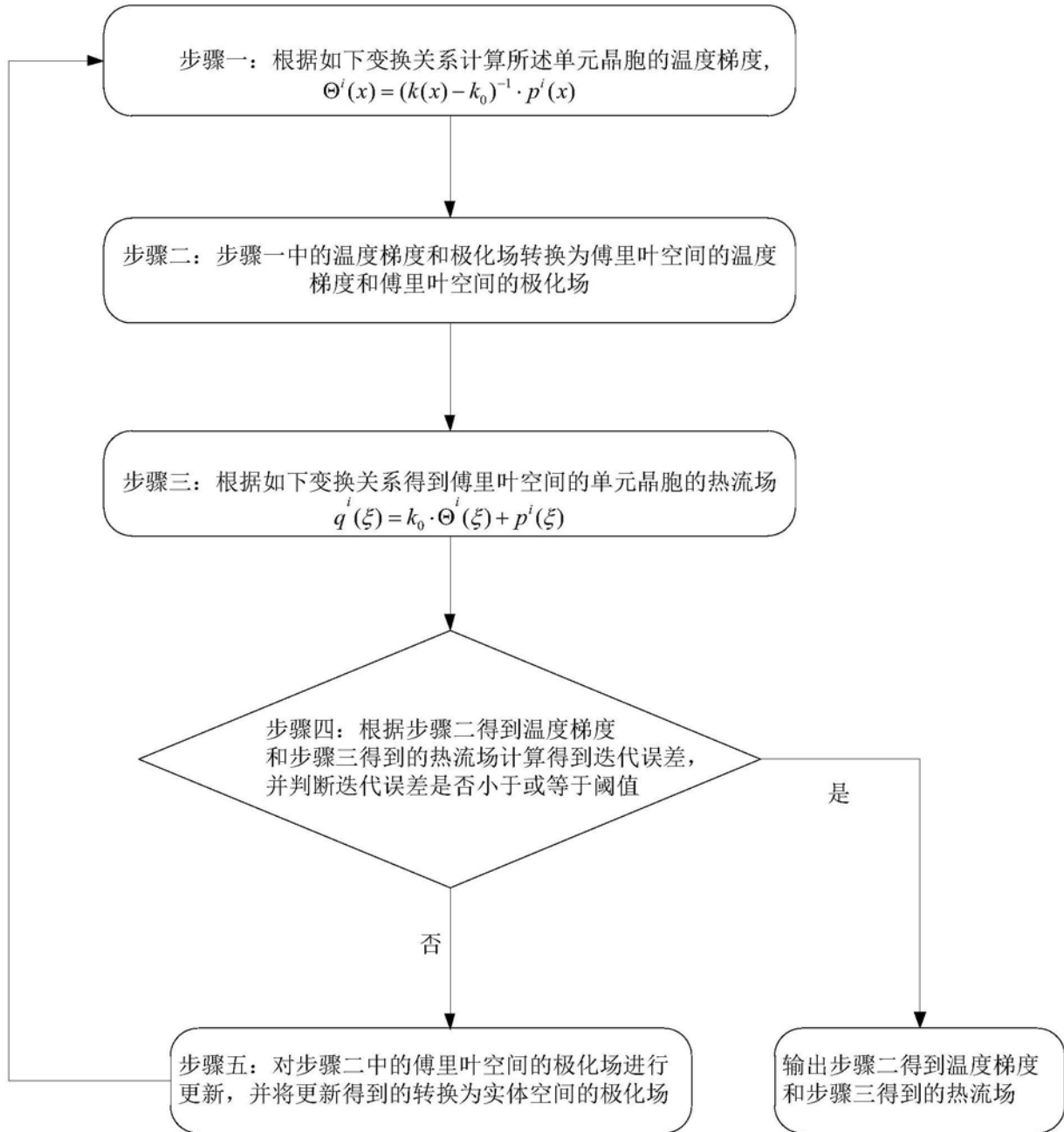


图4

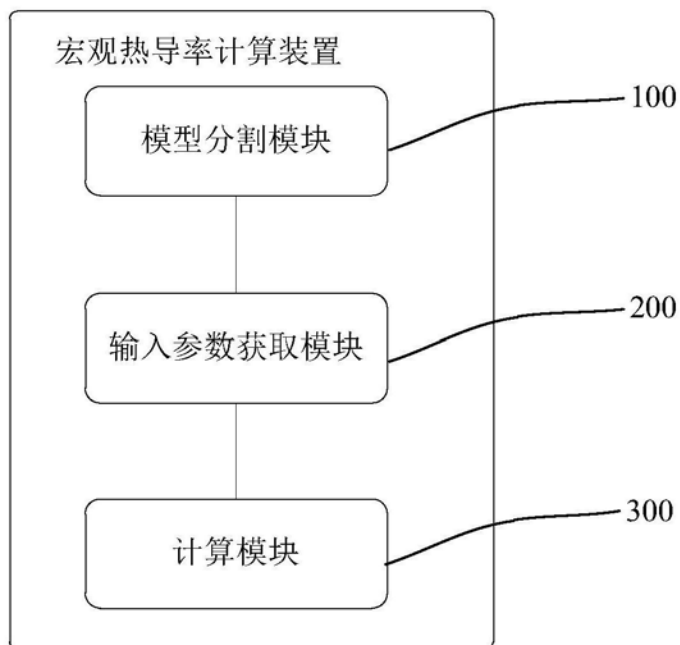


图5

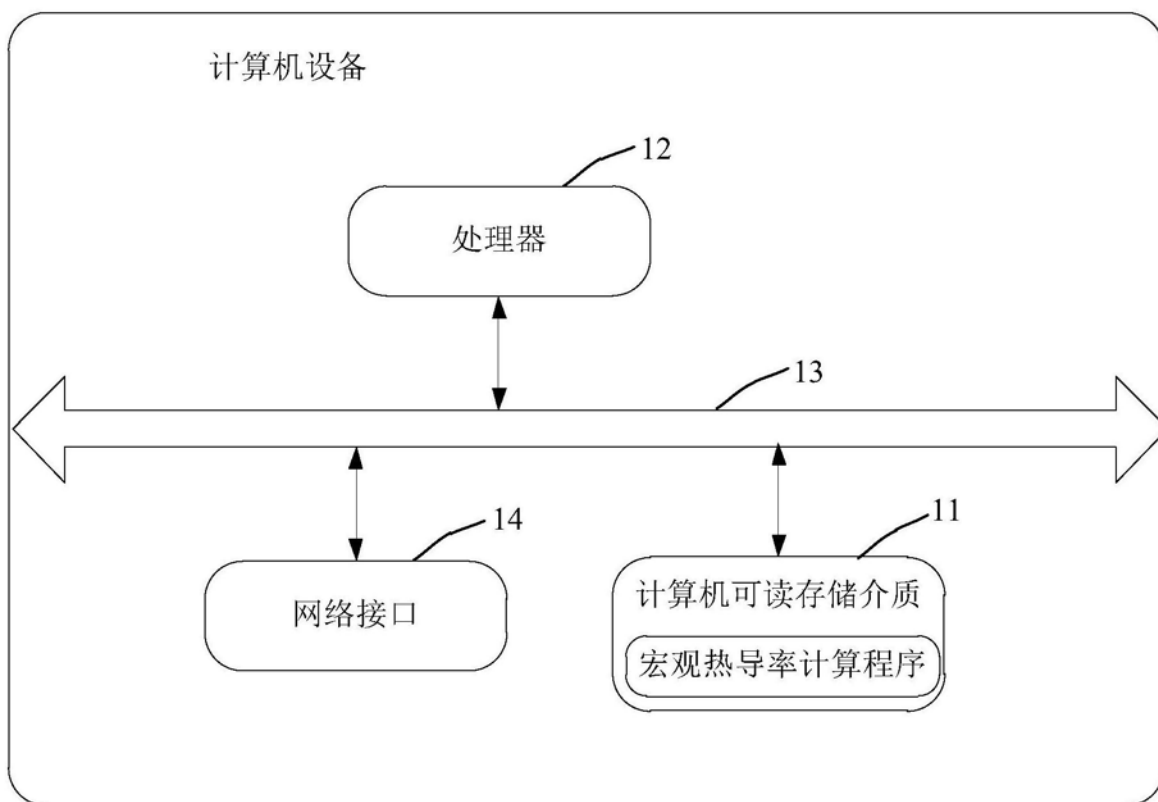


图6