

有限容积方法数值求解声子玻尔兹曼方程中的偏置误差及其影响规律

冯相友 陶文铨

(西安交通大学热流科学与工程教育部重点实验室, 710049, 西安)

摘要: 为了进一步厘清有限容积方法 (Finite Volume Method, FVM) 在数值求解声子玻尔兹曼方程 (Boltzmann Transport Equation, BTE) 中的误差机制, 在普遍认为的假散射和射线效应误差外, 本文指出了一种新的误差来源——偏置误差, 并分析了其影响规律。首先, 基于两个热传导算例中的温度、热流计算偏差的分析, 定义了偏置误差的概念: 偏置误差是在采用迎风偏置格式离散对流项时, 同一界面上不同方向声子能量所取上游节点不同, 所产生的热流计算偏差; 然后, 对偏置误差的影响因素进行了分析; 最后, 探究了高阶格式特征线分布对偏置误差的影响规律。研究表明: 影响偏置误差的因素主要有三个, 即网格克努森数 Kn_Δ (声子平均自由程与网格宽度的比值)、格式的偏置特性、结果的分布线型; 在一般情况下, 算例的 $1/Kn_\Delta$ 越大、所用离散格式特征线偏离零偏置线的程度越大、结果线型的非线性越强, 其偏置误差越大; 偏置误差的影响趋势可以由格式特征线偏离零偏置线的方向定性地确定, 若格式特征线在零偏置线之下, 偏置误差会导致计算中高估热流, 格式特征线在零偏置线之上则相反。该研究为声子 BTE 在求解微纳尺度传热问题中, 合理选择对流项离散格式和结果的误差评估提供了理论支持。

关键词: 声子玻尔兹曼方程; 有限容积方法; 偏置误差; 离散格式; 微纳尺度传热

中图分类号: TK124 文献标志码: AA

DOI: xxxxxxxxxxxxxxxxxxxx 文章编号: 0253-987X(XXXX)XX-0001-20

Offset error and its influence in the numerical solution of phonon Boltzmann transport equation using finite volume method

FENG Xiang-You, TAO Wen-Quan

(Key Laboratory of Thermo-Fluid Science & Engineering of MOE, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: In order to further clarify the error mechanism of the Finite Volume Method (FVM) in numerically solving the Boltzmann Transport Equation (BTE), this study points out a new error, namely offset error, in addition to the commonly recognized false scattering and radiation effect errors, and analyzes its influence. Firstly, based on the analysis of temperature and heat flux calculation deviations in two heat conduction cases, we defined the offset error as follows: the deviation in heat flux calculation caused by different upstream nodes of the phonon energy in different directions at the same

收稿日期: 2025-05-07。

interface when discretizing the ballistic term using an upwind scheme. Then the influencing factors of offset error were analyzed. Finally, the influence of the characteristic line of the high-order scheme on offset error was explored. The results showed that there are three main factors that affect the offset error: the Knudsen number based on the grid Kn_{Δ} (the ratio of the phonon mean free path to the grid width), the offset characteristics of the scheme, and the distribution of the result. Generally, for a case, the larger the value of $1/Kn_{\Delta}$, the greater the deviation of the characteristic line of the discretization scheme from the zero-offset line, and the stronger the nonlinearity of the distribution, the larger the offset error. The trend of the influence of the scheme offset error can be qualitatively determined by the direction of the scheme characteristic line deviation from the zero-offset line. If the scheme's characteristic line is below the zero-offset line, the offset error will lead to overestimation of heat flux in the calculation, and the opposite is true if the scheme's characteristic line is above the zero-offset line. This study provides theoretical guidance for the choice of the discretization scheme of the ballistic term and the error assessment of the results in solving microscale/nanoscale heat transfer problems using phonon BTE.

Keywords: phonon Boltzmann transport equation; finite volume method; offset error; discretization scheme; microscale/nanoscale heat transfer

热失效是半导体器件的主要失效形式之一, 器件的热分析对其安全稳定运行至关重要。随着半导体产业和微加工工艺水平的不断发展, 目前半导体器件尺度已达到纳米级^[1]。然而, 现有的研究已经通过理论和实验证明, 微纳米尺度下的传热过程存在明显的尺度效应, 经典 Fourier 热传导定律不再能够进行准确描述^[2-3], 人们迫切希望掌握微纳米尺度下的热传递规律和器件的热分析方法。为此, 学者们开发了一系列更机理的方法来分析该尺度下的热传递现象, 如分子动力学方法^[4]、原子格林函数方法^[5]、声子玻尔兹曼方程 (Boltzmann Transport Equation, BTE) 方法^[6]等。然而, 基于原子或分子水平的模型通常受限于目前的算力, 难以用于直接计算纳米到微米级器件中的传热过程。根据

固体物理学中关于晶格振动的理论, 绝缘体和半导体的热传导主要由原子振动能量的元激发——声子的迁移所表现的^[7]。当研究的尺度远大于声子的波长时, 相干效应可以忽略, 声子可以被当作粒子处理。此时, 玻尔兹曼方程可用于对声子行为的描述, 并被证明有效^[8]。声子 BTE 方法不再关注于每个原子的运动状态, 简化后可以应用于更大的计算尺度, 甚至可以过渡到宏观范畴。

声子 BTE 是一个高维的输运方程, 通常需要采用数值方法进行求解。目前声子 BTE 主要有两大类数值求解方法: 蒙特卡洛方法 (统计性方法)^[9]和确定性方法。前者基于统计方法, 通常所需的计算量很大且易受到统计量的影响^[10]。相较于蒙特卡洛方法, 确定性方

法所需的计算量可以大幅降低。目前常用于求解声子BTE的确定性方法主要有两种:有限容积方法(Finite Volume Method, FVM)与离散坐标法(Discrete Ordinate Method, DOM)结合的数值求解方法^[11-13];格子玻尔兹曼方法(Lattice Boltzmann Method, LBM)^[14]。本文的工作主要对FVM求解声子BTE的数值方法进行分析。

声子传递与热辐射中光子传递具有相似性,FVM求解声子BTE的数值方法最早发展自FVM对热辐射问题的求解^[15-17]。为了降低BTE的维度以便于求解,通常需要将速度空间和物理空间分别进行离散,再通过散射项进行耦合。FVM可以方便地对物理空间进行离散,而对于速度的离散则需要采用DOM。在DOM中,用有限个速度的方向来近似描述整个 4π 空间立体角中连续的速度方向,并保证各阶矩的一致性^[18]。目前普遍认为,FVM与DOM结合的数值方法有两个主要的误差来源,即射线效应(Ray effect)和假散射(False scattering)^[19]。射线效应主要体现在弹道机制(声子的自由程与研究尺度相当或大于所研究的尺度)下,由于DOM中所取离散速度方向的不足,计算结果表现出沿速度离散方向上的不合理射线状分布。假散射则是指在空间离散中,数值格式的精度不足所导致的场被“抹平”的现象,在计算流体力学和数值传热学中也被称为假扩散或者数值扩散^[20]。

然而,除了上述的两个误差来源外,一些在计算实践中所出现的“反常现象”同样值得关注。Wang^[21]对比了高阶格式和一阶迎风格式在计算一维热传导问题中的结果,发现在弹道导热机制下,一阶迎风格式的结果与高阶格式一致,但是当问题趋近于扩散机制时,一阶迎风格式计算的结果会高估热流。当计算网格加密后,一阶迎风格式的结果偏差会减小。Heich等^[22]指出当问题趋近于扩散机制时,相比于弹道输运,采用一阶迎风格式需要更细密的网格。他们将原因归结于,在扩散机制下,数值计算的假散射比弹道机制下更强。在最近的研究中,Hu等^[23]同样指出了一阶迎风格式在网格尺寸上的限制。他们认为一阶迎风格式所采用的计算网格尺寸应小于声子的平均自由程才能保证计算的精度,相应地,扩散机制下需要更细密的网格。上述的研究仅发现或指出了一阶迎风格式所存在的误差或限制,并未对其产生原因进行深入分析探讨,或仅将其归结于假散射的影响,不利于后续学者在选用离散格式和计算网格尺寸时的清晰判断。基于此,本文针对该问题进行了详细分析,经过分析发现,这种偏差是由一种区别于假散射的偏置误差所导致的。

本文的主要构架如下:第一节简要介绍了声子BTE及其基于DOM和FVM的数值求解方法;第二节提出了偏置误差的概念,并分析了其产生原因和影响因素;第三节对现有高阶格式

的偏置性进行了对比分析,得到了格式特征线分布与偏置误差的关系;第四节总结了本文得到的主要结论。

1 声子玻尔兹曼方程模型及其数值求解方法

本节主要介绍声子玻尔兹曼方程(BTE)模型和基于FVM与DOM的数值求解方法。简要给出宏观物理量(温度、热流、导热系数)与声子模态参数(群速度、弛豫时间)之间的推导关系;并对声子BTE基于DOM和FVM的数值求解方法做简要介绍,详细的离散与求解方法可以参考文献[10]和文献[24]。

1.1 声子玻尔兹曼方程

采用单弛豫时间模型简化后的声子玻尔兹曼方程为^[25]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v}_g \cdot \nabla f = \frac{f_0 - f}{\tau} \quad (1)$$

式中: $f=f(t, \mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}, \omega, p)$ 为声子的分布函数,是关于时间 t , 位置矢量 $\mathbf{r}$, 单位方向矢量 $\hat{\mathbf{s}}$, 频率 ω 和声子支 p 的函数; $\mathbf{v}_g=\mathbf{v}_g(\hat{\mathbf{s}}, \omega, p)$ 为声子的群速度; τ 为声子散射的弛豫时间; f_0 是平衡分布函数,满足波色-爱因斯坦平衡分布^[26]

$$f_0 = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \quad (2)$$

式中: $\hbar=h/(2\pi)$ 为约化普朗克常数; k_B 为玻尔兹曼常数; T 为体系的温度。相比于声子数分布,传热研究通常更关注于能量的分布,因此定义声子的局部频

带能量为(认为导热介质的布里渊区为各向同性)

$$e_{\omega,p} = e(t, \mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}, \omega, p) = \hbar\omega f D(\omega)/4\pi \quad (3)$$

$$e_{0,\omega,p} = e(t, \mathbf{r}, \omega, p) = \hbar\omega f_0 D(\omega)/4\pi \quad (4)$$

式中: $D(\omega)$ 为声子的态密度,表示单位频带中声子态的数量。 $e_{\omega,p}$ 即为某声子支 p 在某一频率,单位空间立体角内的能量密度。 $e_{0,\omega,p}$ 为声子能量的平衡分布函数。将式(3)和式(4)带入到式(1)中得到

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \mathbf{v}_g \cdot \nabla e = \frac{e_0 - e}{\tau} \quad (5)$$

局部总能量(能量密度)可通过 $e_{\omega,p}$ 在总频率范围和 4π 立体角内积分,并对所有声子支求和得到

$$U(t, \mathbf{r}) = \sum_p \int_{\omega_{\min,p}}^{\omega_{\max,p}} \int_{4\pi} e(t, \mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}, \omega, p) d\Omega d\omega \quad (6)$$

在局部热平衡下,局部温度可以由局部能量、波色-爱因斯坦平衡分布和声子态密度根据下式确定^[27]

$$U(t, \mathbf{r}) = \sum_p \int_{\omega_{\min,p}}^{\omega_{\max,p}} \frac{\hbar\omega D(\omega)}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} d\omega \quad (7)$$

如果声子的分布函数偏离了平衡态,通过式(7)得到的温度为相同局部能量下所对应平衡态的温度,将其称作伪温度(Pseudo-temperature)^[9,28]。虽然伪温度没有一个明确的物理意义,但是它可以描述局部能量的高低,并且将其作为温度计算平衡分布函数可以保证散射过程的能量守恒。热流可以通过下式计算^[27]

$$q(t, \mathbf{r}) = \sum_p \int_{\omega_{\min,p}}^{\omega_{\max,p}} \int_{4\pi} e(t, \mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}, \omega, p) \mathbf{v}_g(\hat{\mathbf{s}}, \omega, p) d\Omega d\omega \quad (8)$$

1.2 声子BTE的边界条件

为求解式(5)所示能量形式的声子BTE,需要给定求解的边界条件。常见的边界条件有三种:热化边界条件(定温边界)、绝热边界条件、周期性边界条件^[29]。

(1) 热化边界条件

该类型边界条件适用于给定计算域边界温度的情况,类似于辐射传热中的黑体边界,边界上声子的分布由特定温度下的平衡分布函数给出

$$e(\mathbf{r}_b, \hat{\mathbf{s}}, \omega, p) = e^{\text{eq}}(T_b, \omega, p), \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{n}_b < 0 \quad (9)$$

式中: T_b 为边界的温度, $\mathbf{n}_b$ 为边界面指向计算域外的法向量。

(2) 绝热边界条件

绝热边界通过声子在边界处的完全反射实现,反射方式主要分为镜面反射和漫反射。对于镜面反射,反射声子能量与相对应入射声子能量保持相等

$$e(\mathbf{r}_b, \hat{\mathbf{s}}, \omega, p) = e(\mathbf{r}_b, \hat{\mathbf{s}}', \omega, p), \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{n}_b < 0 \quad (10)$$

式中: $\hat{\mathbf{s}}'$ 为与 $\hat{\mathbf{s}}$ 相对应的入射方向。而对于漫反射,反射声子能量在半球空间中均匀分布,且保证边界上的能量守恒

$$e(\mathbf{r}_b, \hat{\mathbf{s}}, \omega, p) = \frac{\int_{\hat{\mathbf{s}}' \cdot \mathbf{n}_b > 0} e(\mathbf{r}_b, \hat{\mathbf{s}}', \omega, p) |\hat{\mathbf{s}}' \cdot \mathbf{n}_b| d\Omega}{\int_{\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{n}_b < 0} |\hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{n}_b| d\Omega}, \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{n}_b < 0 \quad (11)$$

(3) 周期性边界条件

周期性边界条件保证了声子模态热流的周期性

$$e(\mathbf{r}_{b_1}, \hat{\mathbf{s}}, \omega, p) - e^{\text{eq}}(T_{b_1}, \omega, p) = e(\mathbf{r}_{b_2}, \hat{\mathbf{s}}, \omega, p) - e^{\text{eq}}(T_{b_2}, \omega, p) \quad (12)$$

式中:下标 b_1 和 b_2 分别表示相关联的两个周期性边界。

1.3 灰体模型

虽然声子BTE模型相比于原子级的计算方法大幅降低了所需计算量,但是晶格振动中众多声子模态及其相互作用,仍然使声子BTE的求解需要巨大的计算量。灰体模型是一种常见的简化方法,即认为声子只有一种模态,其群速度、弛豫时间等参数取为整体模态的平均值。灰体模型可用来定性研究热传导问题的尺度效应,且在扩散机制下可以与宏观的热扩散模型很好地吻合。

为节省验证计算的时间,本文后续对晶体管二维简化模型的计算采用二维灰体模型。在二维灰体模型中,认为声子以单一群速度在 2π 方向范围内发射、迁移、散射。此时,声子的频带能量 $e(t, \mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$ 仅是关于时间、位置和方向的函数。

需要注意的是,二维灰体模型与三

维灰体模型的二维约化并不是完全等价的。文献[14]和文献[26]分别提出了不同的方法来将三维的平均声子群速度约化到二维，本文在此不对其进行讨论。为保证在扩散机制下得到与热扩散模型一致的结果，本文采用文献[30-31]中导热系数张量的计算式，给定二维灰体模型中声子平均群速度、弛豫时间与导热系数的关系为

$$\frac{1}{2\pi} \rho c_v \int_0^{2\pi} \mathbf{v}_g \otimes \mathbf{v}_g \tau d\theta = \lambda \quad (13)$$

其中

$$\int_0^{2\pi} \mathbf{v}_g \otimes \mathbf{v}_g d\theta = v_g^2 \int_0^{2\pi} \begin{pmatrix} \cos\theta \cos\theta & \cos\theta \sin\theta \\ \sin\theta \cos\theta & \sin\theta \sin\theta \end{pmatrix} d\theta = v_g^2 \begin{pmatrix} \pi & 0 \\ 0 & \pi \end{pmatrix} \quad (14)$$

将式(14)代入式(13)得到

$$\frac{1}{2} \rho c_v v_g^2 \tau \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \lambda \quad (15)$$

式中： ρ 、 c_v 、 λ 分别为材料的密度、比热容和导热系数张量。灰体模型与非灰体模型以及不同维度模型之间的差异主要体现在对声子在速度空间（波矢空间）分布上的简化，而单个模态声子在物理空间上的离散求解是基本一致的。本文后续所探究的偏置误差问题主要是在物理空间离散过程中产生的，在不同模型中都存在。因此，本文后续基于一维和二维灰体模型所得到的结论也同样适用于三维模型和非灰模型。

1.4 数值求解方法

灰体模型下，声子的局部能量

$e(t, \mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$ 除了是关于时间和位置的函数外，还是关于声子迁移方向的函数。因此，在数值求解过程中除了需要对 $e(t, \mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$ 进行物理空间上的离散外，还需要对其进行速度方向上的离散。方向上的离散可以采用离散坐标法，即用有限个特定的速度方向来近似描述 2π 角度内连续的速度方向分布，且要保证第零阶、一阶、二阶矩与连续情况下相等。类比于三维的离散坐标法^[18]，二维离散方向及其权重应满足

$$\int_{2\pi} d\theta = 2\pi = \sum_{i=1}^n w_i \quad (16)$$

$$\int_{2\pi} \hat{\mathbf{s}} d\theta = 0 = \sum_{i=1}^n w_i \hat{\mathbf{s}}_i \quad (17)$$

$$\int_{2\pi} \hat{\mathbf{s}} \otimes \hat{\mathbf{s}} d\theta = \pi \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^n w_i \hat{\mathbf{s}}_i \otimes \hat{\mathbf{s}}_i \quad (18)$$

式中： w_i 为所对应离散方向 $\hat{\mathbf{s}}_i$ 的权重。采用图1所示的离散方式，选取8个离散方向，相应的权重为

$$w_1 = w_2 = \dots = w_8 = \frac{2\pi}{8} \quad (19)$$

对声子的速度方向进行离散后，可以将声子能量按照离散的速度方向分为 $e_1, e_2, \dots, e_n$ ，每个方向上的声子能量都满足

$$\frac{\partial e_i}{\partial t} + \mathbf{v}_g \hat{\mathbf{s}}_i \cdot \nabla e_i = \frac{e_0 - e_i}{\tau} \quad (20)$$

局部总能为

$$U(t, \mathbf{r}) = \sum_i w_i e_i(t, \mathbf{r}) \quad (21)$$

热流可由下式表示

$$\mathbf{q}(t, \mathbf{r}) = \sum_i w_i e_i(t, \mathbf{r}) \mathbf{v}_g \hat{\mathbf{s}}_i \quad (22)$$

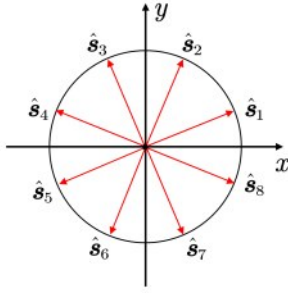


图1 一种速度方向离散格式

Fig. 1 A discretization scheme for the direction of velocity

式(20)中在方向上离散后的声子能量 e_i 仅是关于时间和位置的函数,可以通过经典的FVM方法进行数值求解。以一维问题为例,将式(20)在 Δt 时间间隔和图2所示的控制体上积分可以得到

$$\begin{aligned} & \frac{e_i^{(t+\Delta t)} - e_i^{(t)}}{\Delta t} \Delta x + (\hat{s}_i \cdot \mathbf{n}_x) v_g [(e_i)_e - (e_i)_w]^{(t+\Delta t)} \\ &= \left(\frac{e_0 - e_i}{\tau} \right)^{(t+\Delta t)} \Delta x \end{aligned} \quad (23)$$

式中: $\mathbf{n}_x$ 为 x 方向上的单位方向向量,下标 e 、 w 分别表示东、西界面。对于东、西界面上能量的计算,为保证结果的稳定性,通常需要采用一些稳定的格式,如一阶迎风格式。与求解宏观对流方程不同的是,式(23)对每个方向上的声子能量都要进行求解,并通过散射项进行耦合,这也是数值求解声子BTE需要更大计算量的原因。

2 偏置误差的定义与评估

本节将通过一维热传导问题和二维

晶体管模型传热问题来证明偏置误差的存在,并给出其定义。接着,对偏置误差的产生原因和影响因素进行分析。

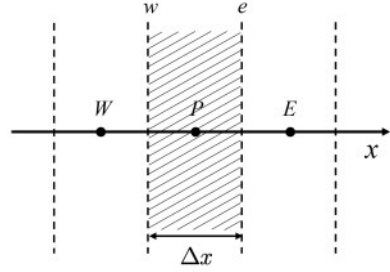


图2 一维控制体示意图

Fig.2 One-dimensional control volume

2.1 一阶迎风格式的偏差

如图3所示,我们首先考虑一个一维,长度为 L 介质中的稳态热传导问题,给定左、右两侧边界上的总能大小。在速度方向的离散上,将总能分为向左、向右迁移的两部分 e_1 和 e_2 ,它们的权重相等。将 e_1 和 e_2 分别采用式(23)进行数值离散求解,约去式中的非稳态项,散射项中的平衡分布为

$$e_0 = \frac{e_1 + e_2}{2} \quad (24)$$

在边界的处理上,计算域边界采用热化边界。即认为边界处于平衡态,左侧和右侧边界上发射的声子能量分别为

$$\begin{aligned} e_1(l) &= e_0(l) = U_l/2 \\ e_2(r) &= e_0(r) = U_r/2 \end{aligned} \quad (25)$$

式中: $U_l=1$ 、 $U_r=0$ 分别为左、右侧边界上的总能。对于边界上的来流声子能量,处理为无反射的完全黑体吸收。计算所采用的一维网格数量为60。

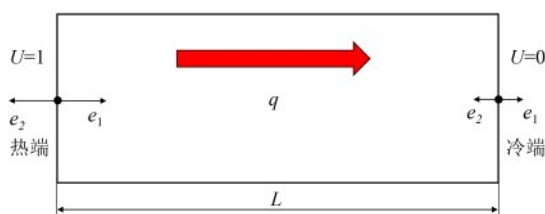


图3 一维热传导问题

Fig. 3 One-dimensional heat conduction problem

由于声子BTE中对流项与宏观输运方程中的对流项一样,具有强烈的方向性,需要选择合适的离散格式以保证结果的稳定性和有界性(计算结果不会出现非物理的越界)^[32]。在声子BTE的求解上,文献中常用的格式有一阶迎风格式^[11,22,25,27]、二阶迎风格式^[23]以及一些高阶有界格式如SMART (Sharp and Monotonic Algorithm for Realistic Transport) 格式^[13,33]。不同离散格式的区别主要表现在式(23)中控制体界面上热流的计算上,如对于东界面,热流的计算式为

$$q_e = \sum_{i=1}^n [(\hat{s}_i \cdot \mathbf{n}_x) v_g] (e_i)_e \quad (26)$$

不同格式获得 $(e_i)_e$ 的方法不同,在热流的计算上也会产生差异。

分别采用一阶迎风格式、二阶迎风以及高阶有界格式SMART来离散声子BTE中的对流项,并对比上述的热传导问题的结果。以介质长度 L 作为特征长度,定义克努森数(Knudsen number,有文献中也译为努森数)

$$Kn = \frac{\Lambda}{L} \quad (27)$$

式中: $\Lambda = v_g \tau$ 为声子迁移的平均自由

程。图4(a)、(b)分别展示了不同 Kn 下局部总能在无量纲位置坐标 $X=x/L$ 上的分布和无量纲热流的大小,无量纲热流的定义为

$$q^* = \frac{2q}{(U_l - U_r) v_g} \quad (28)$$

从计算结果可以看出,一阶迎风、二阶迎风和SMART格式在局部总能的计算结果上差别很小;但是在热流的计算结果上,当 Kn 取较小值时(趋近于扩散导热),一阶迎风格式计算的热流相比于另外两种格式明显偏高。上述现象与文献[21]中的计算结果一致。

上述一维热传导问题中给定了边界上温度,虽然三种格式计算温度的差异很小,但采用一阶迎风格式计算热流会导致一个偏差。再考虑一个二维晶体管模型中的稳态传热问题,给定发热源的大小,考察不同格式所计算温度场的差异。如图5所示,在晶体管栅极下方附近设置一个方形的发热源,发热源宽度 $L_s=0.1L$ 。模型底部设置为定温(热化)边界,上表面和两侧设置为绝热边界,采用本文1.2小节中介绍的漫散射模型。计算所采用的网格数量为 60×40 。定义无量纲坐标和温度

$$X = \frac{x}{L}; Y = \frac{y}{L} \quad (29)$$

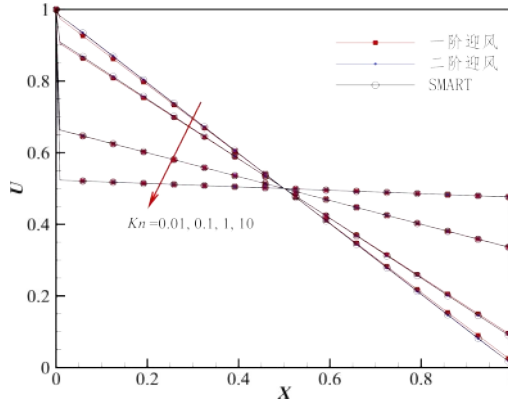
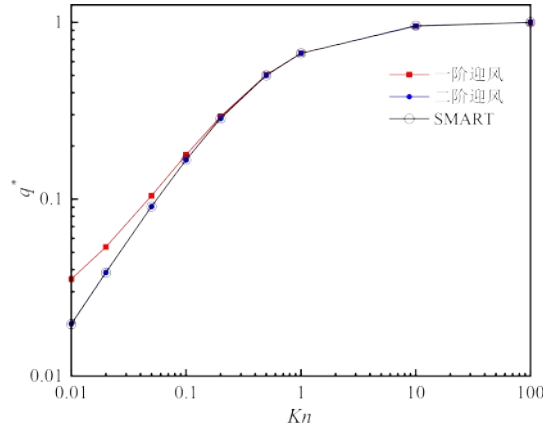
(a) 不同 Kn 数下的总能分布(b) 不同 Kn 下的无量纲热流

图4 三种格式的计算结果

Fig. 4 Results of three schemes

$$T^* = \frac{(T - T_c) c_v \rho v_g}{8SL} \quad (30)$$

式中: S 为热源大小, 计算中材料的比热密度参数简单设为 $c_v \rho = 1 \text{ J} \cdot \text{m}^{-3} \text{ K}^{-1}$ 。根据前文一维算例的结果可以发现, 一阶迎风格式在 Kn 较小, 即趋近于扩散导热机制时, 会产生计算偏差。因此, 在该二维算例中, 我们主要对比近扩散

机制下的结果。以热源宽度 L_s 作为特征长度来定义克努森数 $Kn = \Lambda / L_s$, 在本文中 Kn 设置为 0.025, 认为传热过程近似为扩散机制主导, 此时声子的平均自由程 $\Lambda = 0.0025L$, 声子迁移的群速度设置为 $0.4 L/s$ 。

图6展示了一阶迎风、二阶迎风、SMART 格式的计算结果与热扩散方程

结果的对比。可以看出,在给定热源的情况下,一阶迎风格式的结果与另外两种格式和热扩散方程的结果差了约六倍。这是值得注意的,如果计算中采用一阶迎风格式,那么有可能获得不真实的解。除此之外,在该二维算例中,二阶迎风与SMART格式的结果也不再保持一致。SMART格式的结果更接近于热扩散方程的解,而二阶迎风格式计算的温度则偏低。

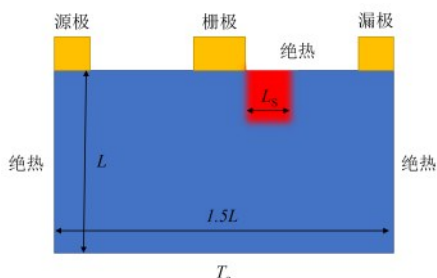


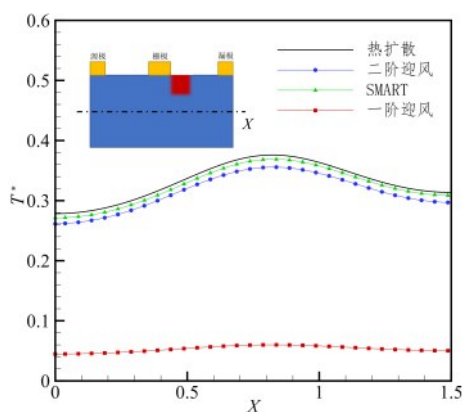
图5 二维晶体管模型

Fig. 5 Two-dimensional model of a transistor

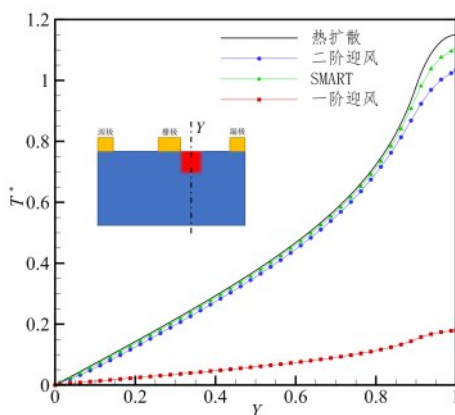
从本小节中验证的两个算例可以发现,采用一阶迎风格式离散声子BTE中对流项,得到的计算结果可能会出现较大的偏差,尤其在问题趋近于扩散导热机制的情况下。当给定计算域的边界温度时,一阶迎风格式所计算的热流会产生偏差;而当给定发热源或热流时,一阶迎风格式所计算的温度就会出现偏差。此外,当声子能量不再是线性分布时,不同高阶精度的格式也会产生计算偏差。

2.2 偏置误差的提出及其影响

因素



(a) $Y=0.5$ 上温度的分布



(b) $X=0.755$ 上温度的分布

图6 二维温度场的计算结果

Fig. 6 Results of the two-dimensional temperature field

由上述计算对比可以看出,一阶迎风格式的结果产生了很大偏差,作者认为不可将其简单归为假散射,原因有三点:(1)上述的计算结果中,一阶迎风格式的结果出现了数倍的偏差,这样大的偏差很难仅由假散射造成;(2)在一维算例中,一阶迎风格式计算的总能分

布并未有显著偏差,但热流的计算结果却显著偏离了另外两种格式,这与假散射所表现出的特性不符;(3)假散射表现为所求解物理场被“抹平”,但是有些格式会反过来导致计算结果偏高,该现象将在下一节中给出验证。因此,导致一阶迎风格式产生偏差的,可能还存在于另外一种误差来源。

将关注点回到2.1小节中的一维算例,三种格式的计算结果在总能的分布上偏差很小,但是在热流计算上,一阶迎风格式造成了一倍左右的偏差($Kn=0.01$)。在该一维问题中,速度方向上的离散仅选取了向左和向右两个速度方向,根据式(26),在图2中东界面上的热流为

$$q_e = v_g [(e_1)_e - (e_2)_e] \quad (31)$$

当采用一阶迎风格式获得东界面上的声子能量时,上式表示为

$$q_e = v_g [(e_1)_p - (e_2)_e] \quad (32)$$

可以发现,由于 e_1 、 e_2 方向的不同,在东界面上分别取得不同的上游节点值 $(e_1)_p$ 和 $(e_2)_e$ 。对流项的迎风离散,导致不同方向上的声子能量在同一界面上取得了不同节点上的值,这可能会导致热流计算的偏差。

在图7中,假设声子能量为线性分布,当问题趋近于扩散机制时,认为所有方向上声子能量的分布一致(e_1 、 e_2 均为线性分布,且斜率一致)。根据式(32),一阶迎风格式计算的热流 q' 会大于实际的热流 q (图中标标注 q 与 q' 需

乘以声子迁移的群速度大小才为热流量,为简化标注,在图中将其省略),这也是造成2.1小节中一阶迎风格式计算热流偏大的原因。从图中可以看出, q' 相比于实际热流 q ,正好高出了一个从 P 点到 E 点声子能量的变化量与声子迁移速度的乘积,即

$$\Delta q = q' - q = -\frac{de}{dx} \Delta x v_g \quad (33)$$

式中: Δx 为点 P 和点 E 之间的距离。由于 e_1 、 e_2 在 x 方向上梯度一致,因此在式(33)中再对梯度项做区分。我们将上述由于格式迎风偏置所产生的热流计算偏差 Δq 定义为偏置误差。根据式(20),在稳态下有

$$v_g \frac{de}{dx} = \frac{e_0 - e_1}{\tau} \quad (34)$$

$$v_g \frac{de}{dx} = -\frac{e_0 - e_2}{\tau} \quad (35)$$

上两式相加,再同时乘以声子的平均自由程 Λ 可以得到

$$2 \frac{de}{dx} \Lambda v_g = (e_2 - e_1) v_g = -q \quad (36)$$

将式(36)代入式(33)得到

$$\Delta q = \frac{1}{2} \frac{\Delta x}{\Lambda} q \quad (37)$$

定义网格克努森数 $Kn_\Delta = \frac{\Lambda}{\Delta x}$,其表

征了网格尺寸与声子平均自由程之间的相对大小关系。有了 Kn_Δ 的定义,可以表示出一阶迎风实际计算的热流

$$q' = \left(1 + 0.5 \frac{1}{Kn_\Delta}\right) q \quad (38)$$

式中: q 为真实热流, q' 为一阶迎风格

式计算的热流。式(38)解释了一阶迎风格式的结果高估热流的原因,同时也给出了偏差的大小。在同样的温度分布下,一阶迎风格式计算的热流会偏高;相反,当算例在给定热流或者热源时,采用一阶迎风格式计算的温度梯度会偏低。正如图6中,一阶迎风所计算的温升远小于其他格式和热扩散解,表现为“导热被加强”。

根据式(38),决定一阶迎风格式偏置误差大小的是网格尺寸和声子平均自由程之比,即 $1/Kn_{\Delta}$ 。之所以在本文一维算例和其他文献中的计算结果中,一阶迎风格式的结果在近扩散机制下(低 Kn)表现出更大偏差,是因为在网格尺寸一定的情况下,趋近于扩散机制算例的声子平均自由程更小, $1/Kn_{\Delta}$ 更大,致使一阶迎风格式的偏差更大。如果在近扩散机制的算例中,加密网格,也可以降低 $1/Kn_{\Delta}$,以减小误差。如图8所示,当采用更细密计算网格时(120×80 , 240×160 , 480×320), $1/Kn_{\Delta}$ 减小,其计算偏差也逐步降低,与式(38)相符。当无限加密计算网格时, $1/Kn_{\Delta}$ 趋近于0,此时一阶迎风格式所计算的热流也可以无限接近于真实热流。但是,计算网格的加密会极大地加重数值计算的算力负担,在实践中难以实现。

在二维算例中,除一阶迎风格式的计算结果出现显著偏差外,二阶迎风和SMART格式的计算结果也产生偏差,这主要是由声子能量的非线性分布造成

的。在图9中,取图6(b)靠近热源段的近似声子能量分布线型。可以发现,当声子能量不为线性分布时,二阶迎风格式对界面热流的计算也会产生偏差。同理,其他迎风偏置格式也存在同样的问题,但相比于偏置最大的一阶迎风格式,偏差会小得多。

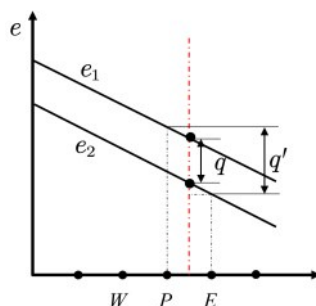


图7 偏置误差

Fig. 7 Offset error

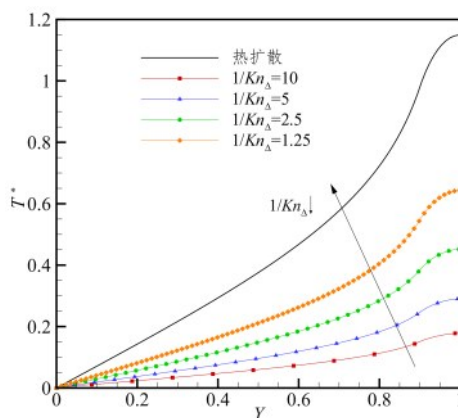


图8 网格疏密程度对偏置误差的影响

Fig. 8 Influence of mesh density on offset error

通过本小节分析,我们指出了在采用FVM求解声子BTE时,一种区别于假散射的新的误差来源——偏置误

差。偏置误差是指当采用迎风偏置格式来离散对流项时,在同一界面处,不同方向上声子能量迎风节点不同,所计算的界面热流与真实值产生的偏差。本文定义了一个无量纲量 Kn_Δ 来描述偏置误差的影响大小。虽然式(38)所给出的定量影响规律是基于线性声子能量分布推导得到的,但是 Kn_Δ 仍可以对偏置误差的大小进行评估,图8中的结果可以证明这一点。根据式(38),当 $1/Kn_\Delta = \frac{\Delta x}{\Lambda} > 0.2$ 时,一阶迎风格式计算的热流将会产生10%以上的计算偏差,会显著影响计算的准确度。因此,当采用一阶迎风格式时,应首先考察 $1/Kn_\Delta$ 的大小,应控制其在0.2以下,否则应该选用更高阶的格式,以降低偏置误差对结果的影响。

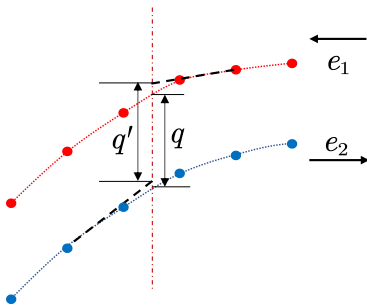


图9 非线性分布的偏置误差
Fig. 9 Offset error of nonlinear distribution

偏置误差本质上是具有相向速度方向的声子在物理空间离散时,在各自迎风方向上的偏置所造成的偏差。该现象在一维问题、二维问题以及三维问题中均会发生,在不同空间维度上具有共

性,前文中一维算例和二维算例分析结论的一致性也证明了这一点。受到计算时间的限制,本文未再对三维算例进行验证,但可以预见具有一致性的结论。

3 高阶格式的偏置特性

声子BTE中的对流项与计算流体力学中对流项相似,具有强的方向性。在选择数值离散格式时,除了需要考虑格式的精度外,还应特别注意格式的稳定性与有界性。在计算流体力学和数值传热学中,已经发展了许多既具有高阶精度又能保证有界性的高阶有界格式,这些格式也可以应用到声子BTE对流项的离散中。本节将通过三点格式的规正变量图方法^[34]来讨论这些高阶格式的偏置特性。

3.1 三点格式的规正变量方法

规正变量方法常用于三点格式的分析,在图10中,界面 f 上的函数值由其控制体中心点 C 、上游点 U 和下游点 D 得到。界面 f 上函数值可以表示为

$$\phi_f = f(\phi_U, \phi_C, \phi_D) \quad (39)$$

规正变量的定义为

$$\tilde{\phi} = \frac{\phi - \phi_U}{\phi_D - \phi_U} \quad (40)$$

由式(40)不难看出 $\tilde{\phi}_U = 0$ 、 $\tilde{\phi}_D = 1$ 。因此,通过变量规正化后, $\tilde{\phi}_U$ 和 $\tilde{\phi}_D$ 变成了确定的值,式(39)可以表示为

$$\tilde{\phi}_f = f(\tilde{\phi}_C) \quad (41)$$

不同格式对应着不同的 $f(\tilde{\phi}_c)$, 将其表示在图中, 即得到了规正变量图(Normalized variable diagram, NVD)。图11给出了均分网格下(如无特别指出, 本文后续分析均在均分网格下进行)常见格式在NVD上的表示, 经过点(0.5, 0.75)的格式被认为具有二阶及以上精度。

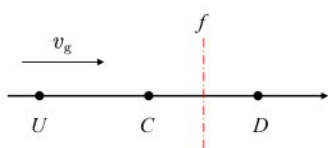


图10 三点格式界面与节点的相对位置关系

Fig. 10 Relative position of the interface and nodes in the three-node scheme

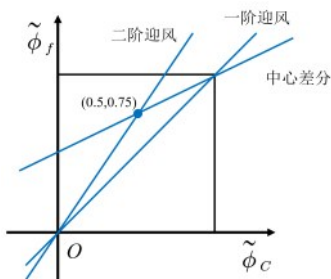


图11 规正变量图

Fig. 11 Normalized variable diagram

Gaskell 和 Lau^[34] 基于 NVD 提出了对流有界性准则 (Convection boundedness criterion, CBC), 其同样适用于声子 BTE 中对流项的离散格式。他们提出的 CBC 要求格式的特征线连续或分段连续递增, 且落在图 12 的阴影区域中, 才能够保证有界性。在计算

流体力学和数值传热学领域, 学者们发展了很多高阶有界格式, 如 SMART、MUSCL (Monotonic Upstream-centered Scheme for Conservation Laws)、MINMOD (Minimum Modulus)、HOAB (High-Order-Accurate and Bounded) OSHER (取自提出者姓)、STOIC (Second- and Third-order interpolation for convection) 等, 这些格式的表达式可在文献[32]中查得。接下来, 将对这些高阶有界格式的偏置特性进行分析。

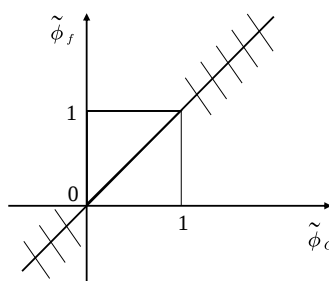


图12 对流有界性准则

Fig. 12 Convection boundedness criterion

3.2 高阶有界格式的偏置特性分析

第2节的分析指出, 偏置误差产生的原因是同一界面上不同方向声子能量所对应的迎风节点不同, 进而导致采用迎风偏置格式计算界面热流时产生偏差。当声子能量分布为线性时, 由于线性梯度补偿, 二阶及以上精度的格式并不表现出偏置误差。但当声子能量分布为非线性时, 高阶迎风偏置格式也会产

生计算偏差。正如图9中, e_1 的二阶迎风偏置使热流计算偏向于更大, e_2 的二阶迎风偏置使热流计算趋近于更小, 但是两者的影响程度不同, 作用不能完全抵消, 仍会有一定程度上的热流计算偏差。不难发现, 只有消除迎风偏置性才能从根本上避免偏置误差, 如采用对称的中心差分格式。然而由于对流项的强方向性, 中心差分格式会导致严重的数值不稳定问题。因此, 完全消除格式的偏置性是不现实的, 需要对偏置误差的影响规律进行探究, 最大程度上降低偏置误差的影响。

对于两个方向相向的声子模态, 某一界面上的热流可由式(31)计算, 当 $(e_1)_f$ 越大, $(e_2)_f$ 越小时, 热流的计算会被高估; 反之, 热流被低估。在图13中, 以中心差分格式的界面插值为基准, 若某一格式的 $(e_1)_f$ 插值大于中心差分格式, $(e_2)_f$ 插值小于中心差分格式, 则热流被高估, 反之, 热流则被低估。由于散射, 能量高的 e_1 沿迁移方向能量降低, 而能量低的 e_2 沿迁移方向能量递增。因此, 在NVD中, $(e_1)_f$ 越高, $(\tilde{e}_1)_f$ 越偏向于上游 $(\tilde{e}_1)_u=0$ 方向 (特征线更靠下); 对于 e_2 则相反, $(e_2)_f$ 越低, $(\tilde{e}_2)_f$ 越偏向于上游 $(\tilde{e}_2)_u$ 方向。在NVD中, 如果一个格式的特征线在中心差分格式特征线之下, 那么对于 e_1 , $(e_1)_f$ 要大于中心差分格式在界面上的插值; 而对于 e_2 , $(e_2)_f$ 小于中心差分格式在界面上的插值, 此时界面上的热流将会被高估。本文将中心差分格式的特征线称为零偏

置线。在图11中, 一阶迎风格式的特征线在区间[0,1]内都在零偏置线之下, 因此其计算结果中热流被高估。这里选取[0,1]区间是由于对于一般的平滑线型, 大部分的 $\tilde{\phi}_c$ 取值都在区间[0,1]中, 尤其位于 $\tilde{\phi}_c=0.5$ 附近的区段。一阶迎风格式的偏置情况验证了上述分析, 可以得到结论: 只要一个格式在NVD中的特征线在零偏置线 (中心差分格式的特征线) 之下, 一般情况下 (声子能量线性分布等特殊情况除外) 都会产生偏置误差, 且误差会导致热流被高估; 反之, 若格式特征线在零偏置线之上, 则偏置误差会使热流低估。如果格式特征线既存在零偏置线之上也存在零偏置线之下的部分, 偏置误差的对热流的影响不再能定性分析, 需要根据具体的线型判断两部分的影响大小。

根据上述结论, 对三个典型现有的高阶有界格式 MINMOD、HOAB 和 SMART 进行分析。它们在NVD上的特征线如图14所示。从它们的特征线和零偏置线的位置关系可以看出: MINMOD 格式在区间[0,1]上的特征线总体在零偏置线之下, 因此MINMOD的计算结果会高估热流; HOAB 格式在 $\tilde{\phi}_c=0.5$ 附近区段上的特征线总体在零偏置线之上, 其计算结果会低估热流; SMART 格式的特征线在 $\tilde{\phi}_c=0.5$ 附近区段上, 既存在零偏置线之上部分, 也存在零偏置线之下的部分, 因此难以直接定性分析其计算热流的偏置情况, 需要根据具体问题的线型确定。

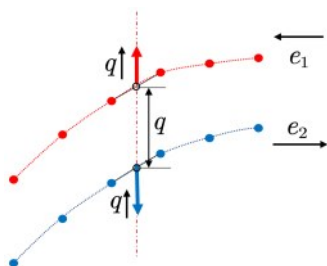


图13 界面值偏差对热流计算的影响

Fig. 13 Influence of the interface value deviation on heat flux calculation

3.3 算例验证

本小节采用2.1小节中的二维稳态

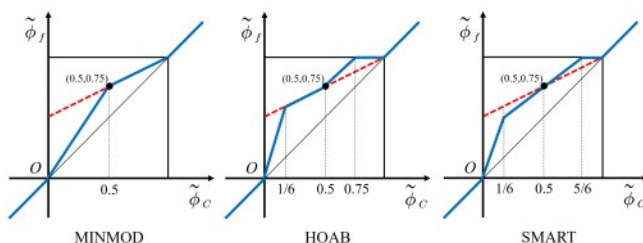


图14 MINMOD、HOAB与SMART格式的特征线

Fig. 14 The characteristic lines of MINMOD, HOAB and SMART

图16给出了上述几种高阶有界格式的计算结果。从图中可以看出, ABC、HOAB和STOIC格式计算的温度要高于热扩散方程的解。这三个格式的特征线在 $\tilde{\phi}_c=0.5$ 附近区段, 均位于零偏置线的上方。根据前述分析, 此时在计算中会低估热流。对于该算例热源给定的情况, 所计算的温升会偏高, 这与得到的结果相吻合。并且随着格式特征线偏离零偏置线程度的增大, 结果的偏差也越大, 图17所列出的 $\tilde{\phi}_c=0.5$ 附近特征线斜率表明了这一点。而在NVD中, $\tilde{\phi}_c=0.5$ 附近区段特征线在零

算例来验证高阶有界格式 SMART、MUSCL、MINMOD、HOAB、OSHER、STOIC 的偏置特性。宇等^[35]指出在选择离散格式时要兼顾格式计算精度、收敛速率和健壮性的综合性能, 并提出了一种综合性能最优的 ABC (Accuracy, Boundedness and Convergence rate-balance scheme) 格式, 本节也对其偏置特性进行对比。其中, MUSCL、OSHER、STOIC和ABC格式在NVD上的特征线由图15给出。

偏置线下方的格式 MINMOD, 其计算中会高估热流, 得到偏低的温升。从图16的结果中可以发现 MINMOD 格式计算的热源温度确实远低于其他格式, 验证了上述分析。在NVD中 $\tilde{\phi}_c=0.5$ 附近区段, SMART、MUSCL和OSHER格式的特征线既存在零偏置线之上部分, 也存在零偏置线之下部分, 它们的偏置情况要根据具体线型确定。从图16中的计算结果可以看出, SMART、MUSCL和OSHER格式计算的热源温度都低于热扩散方程的结果, 可见, 对于该二维问题, 格式特征线低于零偏置

线的部分影响更大。且从图 17 中格式特征线的斜率对比可以看出,格式特征线偏离零偏置线的程度越大,计算结果的偏差也就越大。

本小节通过实际算例的计算结果验证了前述对高阶有界格式偏置特性的讨论。在数值计算中,本文所指出的偏置误差可能会与假散射误差和射线效应同时存在并相互影响。采用一阶迎风格式时,若 $1/Kn_\Delta$ 较大,偏置误差会导致结果出现成倍数的计算偏差,可以明显区别于另外两种误差来源。但是当采用高阶的对流项离散格式时,计算结果中难以定量对这三种误差来源进行区分。虽然如此,但根据上述分析可以发现,偏置误差具有较明显的“方向性”,即可以通过格式特征线的分布来定性判断所造成偏差的方向(偏大或偏小)。而假散射误差影响是引入了数值扩散项,导致计算结果的线型趋于“平缓”。基于偏置误差的方向确定性和假散射误差的无方向性特点,可以根据结果的偏差方向和线型分布,定性对这两种误差进行区分和分析。不同误差来源之间定量的相互耦合影响规律,还需要后续研究进一步深入探索,但可预见的是,这种相互影响产生的误差在数量上应比单种误差本身更小。

4 结论

(1) 本文指出了 FVM 在求解声子 BTE 中一种新的误差来源——偏置误差。偏置误差区别于假散射,是在采用

迎风偏置格式离散对流项时,同一界面上不同方向声子能量所取上游节点不同所产生的热流计算偏差。

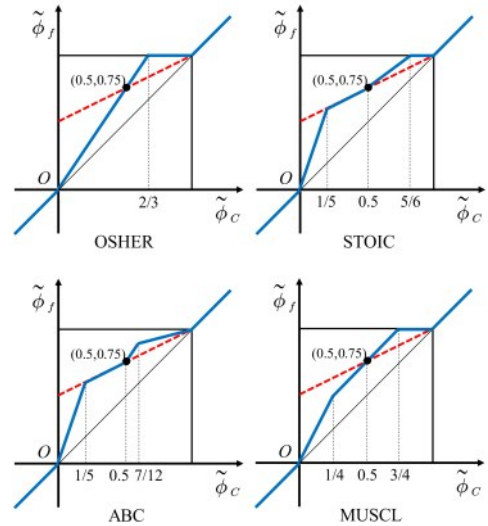


图 15 OSHER、STOIC、ABC 与 MUSCL 格式的特征线

Fig. 15 The characteristic lines of OSHER, STOIC, ABC and MUSCL

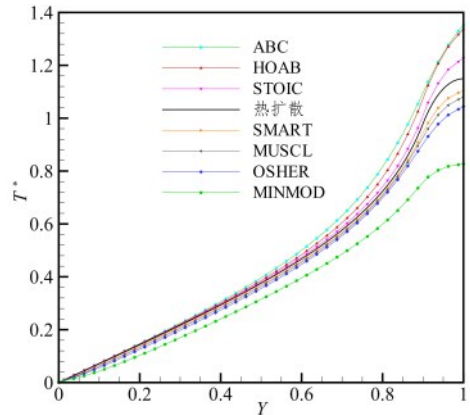


图 16 高阶有界格式的结果

Fig. 16 Results of high-resolution schemes

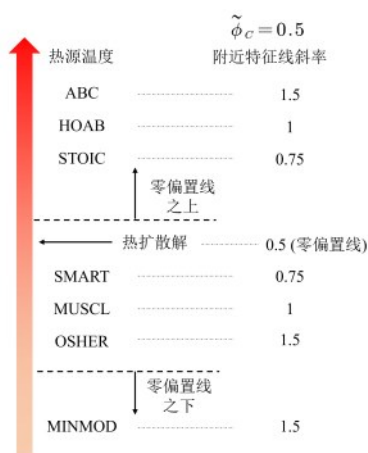


图 17 不同格式计算的热源温度排序

Fig. 17 Order of heat source temperatures calculated by different schemes

(2) 网格克努森数 Kn_Δ 和声子能量的分布线型都会影响偏置误差的大小。 $1/Kn_\Delta$ 越大, 声子能量分布线型曲率变化越大, 偏置误差越大。在采用一阶迎风格式求解声子 BTE 时, 应首先考察 $1/Kn_\Delta$ 的大小, 控制其在 0.2 以下, 才能保证偏置误差在 10% 以内。否则应选择更高阶的格式, 以保证结果的准确性。

(3) 本文揭示了高阶有界格式特征线分布与其偏置特性的影响关系。对于特征线在零偏置线之下的格式, 其计算中会高估热流, 若给定热流/热源, 则计算结果中的温度梯度会偏小; 特征线在零偏置线之上的格式则相反。对于 $1/Kn_\Delta$ 较大的计算, 应尽量选择特征线靠近零偏置线的格式, 以减小偏置误差, 得到可靠的结果。

参考文献

- [1] ZHANG Q, ZHANG Y, LUO Y, et al. New structure transistors for advanced technology node CMOS ICs [J]. National Science Review, 2024, 11(3): nwae008.
- [2] CHEN G. Ballistic-diffusive heat-conduction equations [J]. Physical Review Letters, 2001, 86(11): 2297-2300.
- [3] SVERDRUP P G, SINHA S, ASHEGHI M, et al. Measurement of ballistic phonon conduction near hotspots in silicon [J]. Applied Physics Letters, 2001, 78(21): 3331-3333.
- [4] SUN L, MURTHY J Y. Domain size effects in molecular dynamics simulation of phonon transport in silicon [J]. Applied Physics Letters, 2006, 89(17): 171919.
- [5] MINGO N, YANG L. Phonon transport in nanowires coated with an amorphous material: An atomistic Green's function approach [J]. Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics, 2003, 68(24): 245406.
- [6] MAJUMDAR A. Microscale heat conduction in dielectric thin films [J]. Journal of Heat Transfer, 1993, 115(1): 7-16.
- [7] 黄昆, 韩汝琦. 固体物理学[M]. 北京: 高等教育出版社, 1988.
- [8] HUANG K, HAN R. Solid State Physics [M]. Beijing: Higher Education Press, 1988.
- [9] YANG R, CHEN G, LAROCHE M, et al. Simulation of nanoscale multidimensional transient heat conduction problems using ballistic-diffusive equations and phonon Boltzmann equation [J]. Journal of Heat Transfer, 2005, 127(3): 298-306.
- [10] MAZUMDER S, MAJUMDAR A. Monte Carlo study of phonon transport in solid

- thin films including dispersion and polarization [J]. *Journal of Heat Transfer*, 2001, 123(4): 749-759.
- [10] MITTAL ARPIT M S. Prediction of non-equilibrium heat conduction in crystalline materials using the Boltzmann transport equation for phonons [D]. The Ohio State University, 2011.
- [11] MURTHY J Y, MATHUR S R. Computation of sub-micron thermal transport using an unstructured finite volume method [J]. *Journal of Heat Transfer*, 2002, 124(6): 1176-1181.
- [12] MURTHY J Y, MATHUR S R. An improved computational procedure for sub-micron heat conduction [J]. *Journal of Heat Transfer*, 2003, 125(5): 904-910.
- [13] NARUMANCHI S V J, MURTHY J Y, AMON C H. Submicron heat transport model in silicon accounting for phonon dispersion and polarization [J]. *Journal of Heat Transfer*, 2004, 126(6): 946-955.
- [14] GUO Y, WANG M. Lattice Boltzmann modeling of phonon transport [J]. *Journal of Computational Physics*, 2016, 315: 1-15.
- [15] FIVELAND W A. Discrete-ordinates solutions of the radiative transport equation for rectangular enclosures [J]. *Journal of Heat Transfer*, 1984, 106(4): 699-706.
- [16] RAITHBY G D, CHUI E H. A finite-volume method for predicting a radiant heat transfer in enclosures with participating media [J]. *Journal of Heat Transfer*, 1990, 112(2): 415-423.
- [17] CHUI E H, RAITHBY G D, HUGHES P M J. Prediction of radiative transfer in cylindrical enclosures with the finite volume method [J]. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 1992, 6(4): 605-611.
- [18] MODEST M F. Radiative Heat Transfer [M]. Third ed. San Diego: Academic Press, 2013.
- [19] CHAI J C, LEE H O S, PATANKAR S V. Ray effect and false scattering in the discrete ordinates method [J]. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 1993, 24(4): 373-389.
- [20] 陶文铨. 数值传热学[M]. 第二版. 西安: 西安交通大学出版社, 2001.
- TAO W. Numerical Heat Transfer [M]. Second ed. Xi'an: Xi'an Jiaotong University Press, 2001.
- [21] WANG T. Sub-micron thermal transport in ultra-scaled metal oxide semiconductor (MOS) devices [D]. Purdue University, 2007.
- [22] HSIEH T Y, LIN H, HSIEH T J, et al. Thermal conductivity modeling of periodic porous silicon with aligned cylindrical pores [J]. *Journal of Applied Physics*, 2012, 111(12): 124329.
- [23] HU Y, SHEN Y, BAO H. Ultra-efficient and parameter-free computation of submicron thermal transport with phonon Boltzmann transport equation [J]. *Fundamental Research*, 2024, 4(4): 907-915.
- [24] NI C. Phonon transport models for the heat conduction in sub-micron geometries with application to microelectronics [D]. Purdue University, 2009.
- [25] SAURAV S, MAZUMDER S. Phonon Boltzmann transport equation based simulation of frequency domain thermoreflectance experiments[C]. ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition, Proceedings (IMECE). Columbus, 2022: IMECE2022-95630.

- [26] NABOVATI A, SELLAN D P, AMON C H. On the lattice Boltzmann method for phonon transport[J]. *Journal of Computational Physics*, 2011, 230(15): 5864-5876.
- [27] ALI S A, KOLLU G, MAZUMDER S, et al. Large-scale parallel computation of the phonon Boltzmann Transport Equation [J]. *International Journal of Thermal Sciences*, 2014, 86: 341-351.
- [28] 罗小平. 微纳导热多尺度模型及低维材料声子水动力学研究[D]. 哈尔滨工业大学, 2020.
- LUO X. Multiscale modeling of micro-nanoscale thermal conduction and research on phonon hydrodynamics in low-dimensional materials [D]. Harbin Institute of Technology, 2020.
- [29] ZHANG C, GUO Z. Discrete unified gas kinetic scheme for multiscale heat transfer with arbitrary temperature difference [J]. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2019, 134: 1127-1136.
- [30] BROIDO D A, MALORNY M, BIRNER G, et al. Intrinsic lattice thermal conductivity of semiconductors from first principles [J]. *Applied Physics Letters*, 2007, 91(23): 231922.
- [31] GUO Y, WANG M. Phonon hydrodynamics and its applications in nanoscale heat transport[J]. *Physics Reports*, 2015, 595: 1-44.
- [32] 陶文铨. 计算传热学的近代进展[M]. 北京: 科学出版社, 2000.
- TAO W. *Modern Advances in Computational Heat Transfer* [M]. Beijing: Science Press, 2000.
- [33] NARUMANCHI S V J, MURTHY J Y, AMON C H. Comparison of different phonon transport models for predicting heat conduction in silicon-on-insulator transistors [J]. *Journal of Heat Transfer*, 2005, 127(7): 713-723.
- [34] GASKELL P H, LAU A K C. Curvature-compensated convective transport: SMART, A new boundedness-preserving transport algorithm [J]. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 1988, 8(6): 617-641.
- [35] 宇波, 焦开拓, 陈宇杰, 等. 有限容积法对流项离散格式的稳定性与有界性研究 [J]. *西安交通大学学报*, 2023, 57(4): 107-121.
- YU B, JIAO K, CHEN Y, et al. Study on the stability and boundedness of discrete scheme for convection term based on finite volume method [J]. *Journal of Xi'an Jiaotong University*, 2023, 57(4): 107-121.