arXiv:2611.28926v1 [physics.comp-ph] 21 Nov 2026

JAX-Nano：用于纳米尺度热传递的 GPU加速的可微声子玻尔兹曼输运求解器

Bo Zhang[a,*], Amy Zhaomei Zhang[b]

[a]北伊利诺伊大学机械工程系，美国伊利诺伊州迪卡尔布，邮编 *60115*[b] 伊利诺伊数学与科学学院，美国伊利诺伊州奥罗拉，邮编 *60506*

摘要

随着半导体器件的特征尺寸接近声子平均自由程，热输运进入弹道和准弹道区间，此时傅里叶定律已不再适用。声子玻尔兹曼输运方程（BTE）基于物理原理描述这些非平衡效应，但其高维计算结构给数值模拟和反演建模带来了巨大挑战。本文介绍 JAX-Nano，这是一款用于纳米尺度热传递的 GPU 加速、端到端可微声子 BTE 求解器。该求解器在统一的有限体积计算框架中实现稳态和瞬态 BTE 表述，支持结构化和非结构化网格、分模态声子输运、散射、体积热生成以及多种边界条件。稳态输运采用稀疏迭代方法求解，而瞬态输运则通过显式和隐式时间

*通讯作者。地址：美国伊利诺伊州迪卡尔布，邮编 60115电子邮箱：bzhang@niu.edu（Bo Zhang）、azhang3@imsa.edu（Amy Zhaomei Zhang）

积分格式推进。自动微分直接集成于离散化 BTE 求解器中，无需单独推导伴随方程，即可计算输运属性、边界条件、热生成率和几何参数的梯度。通过与解析基准及成熟的 BTE 求解器进行比较，在扩散到弹道输运机制范围内验证了正向求解结果。通过对单鳍片、双鳍片和阵列鳍式场效应晶体管（FinFET）构型进行热输运模拟，展示了 JAX-Nano 在复杂三维几何结构中的适用性。通过基于梯度的单参数和多参数反演识别，展示了该求解器的可微能力，其中包括同时恢复模态分辨声子弛豫时间和空间分布的体积热生成率。本文研究了稳态和瞬态反问题。计算基准测试量化了 GPU 性能及其在空间分辨率、角度离散和声子能带数量方面的可扩展性，并与成熟的基于MPI的声子BTE求解器进行了比较。结果表明，JAX-Nano 在统一的 GPU 加速计算框架中集成了三维声子输运模拟、自动微分和基于梯度的反向参数辨识，为未来纳米尺度热系统的敏感性分析与优化奠定了基础。
关键词：声子玻尔兹曼输运方程、可微科学计算、自动微分、纳米尺度热传递、GPU计算、反向参数辨识

1. 引言

纳米尺度热输运 [1, 2, 3] 在众多应用中都十分重要，包括微纳电子器件 [4, 5, 6, 7, 8], 薄膜 [9, 10, 11, 12], 超晶格 [13, 14, 15, 16], 纳米材料 [17, 18, 19],热电材料 [20, 21], 以及短脉冲激光加热 [22, 23]。半导体器件的持续微型化和三维集成 [24] 进一步加剧了现代电子系统中的热管理挑战。当特征尺寸接近热输运声子的平均自由程时，克努森数 $Kn = \Lambda/L$变得不可忽略，其中 Λ 和 L 分别表示声子平均自由程和特征长度尺度。在这些条件下，热输运可能显著偏离作为傅里叶定律基础的扩散区间 [25, 26, 27, 28, 29, 30]。弹道与准弹道输运 [31, 32, 33],、声子-边界相互作用 [34, 35, 36], 以及局域热生成 [37]可能导致强烈的非平衡热行为，而传统的基于扩散的模型无法充分表征这种行为。因此，要准确预测这些尺度下的热输运，就需要采用能够明确考虑声子传播和散射 [38, 39, 40]的计算描述。

傅里叶定律在微纳尺度上的局限性，推动了用于模拟热输运的替代方法的发展与应用，包括分子动力学（MD） [41, 42], 非平衡格林函数（NEGF）方法 [43, 44, 45], 以及声子玻尔兹曼输运方程（BTE） [37, 46]。分子动力学等原子尺度方法和非平衡格林函数等量子输运方法能够详细描述纳米尺度热输运，但其计算成本通常使其难以直接应用于大型器件尺度系统。

相比之下，当特征尺寸与声子平均自由程相当、非扩散输运变得显著时，连续介质热扩散模型便不再适用 [28]。声子玻尔兹曼输运方程提供了一个基于物理原理的框架，能够衔接这些输运区间，并描述扩散、准弹道和弹道区间中的热输运。结合第一性原理晶格动力学计算，玻尔兹曼输运方程可纳入模态分辨声子性质和散射过程 [47, 48]。然而，玻尔兹曼输运方程是一个高维积分微分方程，其瞬态谱形式包含七个独立变量：时间、三个空间坐标、两个角坐标以及声子频率。与傅里叶定律不同，玻尔兹曼输运方程能够解析声子分布在物理空间和声子态空间中的演化，并可显式考虑声子散射、边界相互作用和体积热生成。

目前已有确定性和随机性方法用于求解声子玻尔兹曼输运方程。确定性方法通常采用离散坐标法（DOM） [49, 50] 进行角度离散，并结合有限体积法（FVM） [39, 51, 52, 53, 54]进行空间离散；随机性方法则通常基于蒙特卡罗方法 [55, 56, 57, 58]。第一性原理声子计算和数值算法的进步，进一步推动了纳米尺度热输运模拟日益贴近现实 [59, 60, 61]。包括 ShengBTE [62], almaBTE [63], OpenBTE [64],MCBTE [57], P-TRANS [58], 和 GiftBTE [37], 在内的多种计算工具，进一步拓展了热导率预测以及块体材料和复杂几何结构中声子输运模拟的能力

能力。然而，要在物理空间以及方向和模态自由度上解析声子输运，使得三维器件尺度的玻尔兹曼输运方程模拟在计算上十分 demanding。

现有的大多数声子-BTE 计算主要被表述为正向问题：给定材料属性、几何结构、边界条件和热源特性，计算由此得到的温度场和热流场 [37, 62, 63, 64, 57, 58]。然而，纳米尺度热科学中的许多新兴问题，都需要建立热观测与产生这些观测的参数之间的反向联系。例如，根据温度测量识别不确定的输运参数或边界参数，确定器件温度对几何变化的敏感性，以及优化纳米尺度结构以改善热管理。解决这些问题需要计算所关注物理量相对于众多物理和设计参数的导数。

逆传热问题已通过参数估计、序贯方法、灵敏度方法、梯度方法、正则化方法和基于伴随的方法得到了广泛研究 [65, 66, 67, 68, 69, 70, 71, 72, 73]。这些方法已应用于根据热观测估计未知边界条件、热流、热物性、传热系数和几何参数。针对纳米尺度声子输运，人们也开发了相关的逆向方法和灵敏度方法。Kim 和 Daniel [74]推导了由声子玻尔兹曼输运方程控制的一维逆热传导问题的灵敏度方程、伴随方程和梯度方程，而 Péraud 和 Hadjiconstantinou [75] 则为线性化的

声子玻尔兹曼输运方程开发了伴随公式，以高效进行偏差蒙特卡洛计算。Romano 和 Johnson [76] 采用基于伴随的敏感性分析研究声子玻尔兹曼输运方程，用于非扩散热输运的逆向设计和拓扑优化。最近，Chen 等人 [77]将声子输运建模与科学机器学习相结合，根据超快电子衍射测量推断频率相关的界面透射特性和弛豫特性。

尽管取得了这些进展，对于一般的多维声子玻尔兹曼输运方程模拟，高效的灵敏度评估仍然颇具挑战。传统的有限差分敏感性分析需要针对扰动后的参数额外求解玻尔兹曼输运方程，因此在高维逆问题与设计问题中，计算成本可能很高。伴随方法可以大幅降低梯度计算的成本，但通常需要推导并实现与底层离散求解器相一致的伴随公式。

可微科学计算 [78, 79, 80, 81, 82] 通过将自动微分 (AD) 直接集成到基于物理的数值求解器中，提供了一种自动化的梯度计算方法。与物理信息神经网络 (PINN) 及相关神经偏微分方程方法不同，后者使用受控制方程约束的可训练神经网络来表示解 [83, 84, 85, 86, 87, 88], ，可微数值求解器 [80,81, 82] 则保留了物理模型的传统数值离散方式，同时允许导数在计算过程中传播。反向模式自动微分对于反问题和优化尤其有吸引力，因为原则上，无需分别扰动每个参数，就能计算标量目标函数相对于多个

参数的梯度。近年来，可微数值方法已应用于计算流体力学 [82, 89, 90, 91, 80, 92], 、有限元分析 [81], 、分子动力学 [93], 、纳米尺度热传递 [94],、密度泛函理论 [95], 及其他基于物理的计算问题 [78, 79], ，展现了将传统数值模拟与基于梯度的推断和优化相结合的潜力。面向图形处理器的可微编程环境（如 JAX [96]）进一步为自动微分、即时编译、向量化计算和加速器执行提供了统一的平台。

将这一范式拓展到声子输运领域，会面临若干不同于传统连续介质偏微分方程求解器所遇挑战的问题。确定性声子玻尔兹曼输运方程计算将空间输运与方向和模态声子表示、弛豫过程、局部平衡重构以及边界相互作用耦合起来。稳态迭代求解和瞬态时间积分都必须将这些操作表示在适用于求导的计算图中。复杂的三维几何结构还会带来边界处理问题，其导数必须在数值上保持有意义。最重要的是，自动微分返回的导数是对所实现的离散计算求得的精确导数，但它并不一定能准确近似底层物理问题的灵敏度 [97]。梯度的可靠性可能取决于空间和角分辨率、迭代收敛、时间离散化以及边界的数值处理。因此，仅验证正向解不足以确立其可靠性

对于可微分 BTE 求解器而言，计算得到的灵敏度本身也必须经过独立验证。

在本研究中，我们开发了 JAX-Nano，这是一款面向纳米尺度热传递、由 GPU 加速且端到端可微分的声子 BTE 求解器。JAX-Nano 在统一的计算架构中整合了稳态和瞬态 BTE 公式，并在可微分数值框架中处理声子输运、弛豫时间散射、温度依赖的局域平衡、体积热生成和声子边界条件。该实现采用 JAX，将面向加速器的计算与自动微分相结合，从而能够计算热学量和目标函数相对于物理参数、边界参数、热源参数及几何参数的导数，而无需单独推导伴随求解器。我们特别重视验证正向热学解，以及所得梯度的数值精度和收敛特性。此外，我们还研究了三维鳍式场效应晶体管的热输运 [98, 99, 100, 101, 102, 103, 104, 105, 106, 107, 108]，以展示该框架在复杂纳米器件几何结构和基于梯度的反向参数识别中的适用性。

本工作的主要贡献总结如下：

- 开发了一个统一的、GPU 加速且可微的有限体积框架，用于稳态和瞬态声子玻尔兹曼输运，支持结构化和非结构化空间离散、多种边界条件以及模态分辨声子输运。

- 集成用于稳态输

运的稀疏迭代求解方法，以及用于瞬态输运的显式和隐式时间积分方案，并将其纳入基于 JAX 的计算框架，从而能够在图形处理器上高效开展三维声子玻尔兹曼输运方程模拟。

•在离散化的声子BTE求解器中实现端到端自动微分，无需单独推导伴随方程，即可计算输运性质、边界条件、体积热源和几何参数相对于这些参数的梯度。

• 系统地验证并确认了从扩散到弹道的输运机制，方法包括与解析解和成熟数值方法进行比较，以及对复杂 FinFET 构型进行三维模拟。

• 展示了基于梯度的单参数和多参数反演识别，并定量评估了 GPU 计算性能和可扩展性，将其与成熟的基于MPI的声子BTE求解器进行比较。

2. JAX-Nano 计算框架

JAX-Nano 提供统一的计算框架，支持稳态和瞬态声子输运、GPU 加速计算、自动微分和基于梯度的反演建模。如图 1 所示，该框架将物理输入和有限体积声子玻尔兹曼输运方程求解器与正向热预测及端到端微分连接起来。稳态和瞬态公式均包含显式和隐式时间

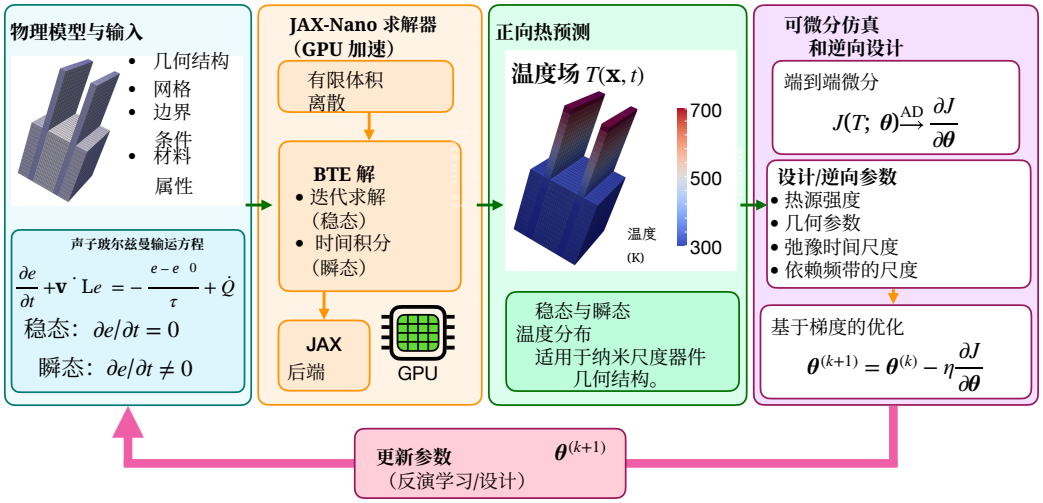

图 1：JAX-Nano 框架示意图，用于 GPU 加速的可微声子输运模拟和逆向设计。该框架将物理几何结构、边界条件和材料属性与有限体积声子玻尔兹曼输运求解器相结合，用于稳态和瞬态热预测。基于 JAX 的实现支持对基于温度的目标函数相对于物理和设计参数进行端到端自动微分，从而通过迭代参数更新循环实现基于梯度的逆向学习和优化。

积分均在同一基于 JAX 的计算架构中实现。

2.1. 声子玻尔兹曼输运方程

在弛豫时间近似（RTA）下，声子热传输由玻尔兹曼输运方程（BTE）描述，

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \mathbf{v}_g \cdot \nabla e = \frac{e^{\mathrm{eq}} - e}{\tau} + S, \tag{1}$$

其中， $e = e(\mathbf{x}\ \omega,\ p,\ \mathbf{s}\ t)$ 表示单位立体角和角频率下的方向性谱声子能量分布，$\mathbf{x}$表示位置， ω 表示角频率， p 表示声子偏振支，$\mathbf{s}$ 表示传播方向，而$\mathbf{v}_g$ 表示群速度。弛豫时间 τ 表征散射，而 S 表示外部能量产生。对于每个偏振支，频率积分范围限制在物理声子谱 $[\omega_{\min,p}, \omega_{\max,p}]$ 内。

在线性化表述中，各向同性平衡分布为

$$e^{\mathrm{eq}}(\omega, p, T_L) = \frac{C_{\omega p} T_L}{4\pi}, \tag{2}$$

其中， $C_{\omega p}$ 表示单位角频率下的谱体积热容， T_L 表示晶格温度。

局部能量等效温度 T 通过将声子总能量与相应的线性化平衡能量进行匹配来定义 [109,110],

$$\sum_p \int_{\omega_{\min,p}}^{\omega_{\max,p}} \int_{4\pi} e \, d\Omega \, d\omega = T \sum_p \int_{\omega_{\min,p}}^{\omega_{\max,p}} C_{\omega p} \, d\omega. \tag{3}$$

此处，Ω 表示方向空间中的立体角， $d\Omega$ 为微分立体角元。在所有声子传播方向上的积分

在单位球面上表示为 $\int_{4\pi}(\cdot)\,d\Omega$。在球面角坐标中，

$$d\Omega = \sin\theta\, d\theta\, d\phi, \qquad \int_{4\pi} d\Omega = 4\pi, \tag{4}$$

其中，$\theta \in [0,\pi]$ 是极角，$\phi \in [0,2\pi)$是方位角。因此，

$$T(\mathbf{x},t) = \frac{\displaystyle\sum_p \int_{\omega_{\min,p}}^{\omega_{\max,p}} \int_{4\pi} e(\mathbf{x},\omega,p,\mathbf{s},t)\, d\Omega\, d\omega}{\displaystyle\sum_p \int_{\omega_{\min,p}}^{\omega_{\max,p}} C_{\omega p}\, d\omega}. \tag{5}$$

RTA 碰撞项中的晶格温度 T_L 由声子散射守恒能量这一要求确定，

$$\sum_p \int_{\omega_{\min,p}}^{\omega_{\max,p}} \int_{4\pi} \frac{e^{\mathrm{eq}} - e}{\tau_{\omega p}}\, d\Omega\, d\omega = 0. \tag{6}$$

代入式 (2) 得

$$T_L(\mathbf{x},t) = \frac{\displaystyle\sum_p \int_{\omega_{\min,p}}^{\omega_{\max,p}} \int_{4\pi} \frac{e(\mathbf{x},\omega,p,\mathbf{s},t)}{\tau_{\omega p}}\, d\Omega\, d\omega}{\displaystyle\sum_p \int_{\omega_{\min,p}}^{\omega_{\max,p}} \frac{C_{\omega p}}{\tau_{\omega p}}\, d\omega}. \tag{7}$$

一般而言，当弛豫时间因声子模态而异时，T 和 T_L 并不相同。

宏观热流矢量是通过对能量分布取一阶速度矩得到的，

$$\mathbf{q}(\mathbf{x},t) = \sum_p \int_{\omega_{\min,p}}^{\omega_{\max,p}} \int_{4\pi} \mathbf{v}_g e\, d\Omega\, d\omega. \tag{8}$$

对于各向同性体积热生成 $Q(\mathbf{x}\ t)$，热容加权源项可写为

$$S(\mathbf{x},\omega,p,\mathbf{s},t) = \frac{C_{\omega p}}{4\pi \displaystyle\sum_{p'} \int_{\omega_{\min,p'}}^{\omega_{\max,p'}} C_{\omega' p'}\, d\omega'} Q(\mathbf{x},t), \tag{9}$$

其满足

$$\sum_{p} \int_{\omega_{\min,p}}^{\omega_{\max,p}} \int_{4\pi} S \, d\Omega \, d\omega = Q(\mathbf{x}, t). \tag{10}$$

同一物理公式适用于稳态和瞬态输运；在稳态极限下，式（1）中的时间导数为零。

2.2. 能带离散化

采用 Hu 等人 [37, 111]在 GiftBTE 中实现的基于平均自由程的方法，将连续的声子谱离散为有限个具有代表性的能带。输入的声子性质，包括模态热容、群速度大小和弛豫时间，均通过晶格动力学计算获得。对于每个声子模态 m，平均自由程定义为

$$\Lambda_m = v_m \tau_m, \tag{11}$$

其中， v_m 和 τ_m 分别表示模态 m的群速度大小和弛豫时间。

平均自由程域 $[\Lambda_{\min}, \Lambda_{\max}]$ 被划分为 N_b 个区间，每个区间定义一个代表性的声子带。令 $\mathcal{B}_b$ 表示分配到能带 b的声子模态集合。有效能带热容、群速度和弛豫时间计算如下：

$$C_b = \sum_{m \in \mathcal{B}_b} C_m, \tag{12}$$

$$v_b = \frac{\sum_{m \in \mathcal{B}_b} C_m v_m}{\sum_{m \in \mathcal{B}_b} C_m}, \tag{13}$$

and

$$\tau_b = \frac{\sum_{m \in \mathcal{B}_b} C_m v_m^2 \tau_m}{v_b \sum_{m \in \mathcal{B}_b} C_m v_m}, \tag{14}$$

其中， C_m 是与模态 m相关的热容。所得的 C_b、v_b和 τ_b 表示能带 b的有效输运性质。该能带表示假设声子性质各向同性，即群速度大小和弛豫时间与传播方向 [112]无关。

采用这种离散化后，连续声子玻尔兹曼输运方程中的频率积分可近似为对代表性能带的求和：

$$\sum_p \int_{\omega_{\min,p}}^{\omega_{\max,p}} \frac{e}{\tau_{\omega p}} \, d\omega \approx \sum_{b=1}^{N_b} \frac{e_b}{\tau_b}, \tag{15}$$

and

$$\sum_p \int_{\omega_{\min,p}}^{\omega_{\max,p}} \frac{C_{\omega p}}{\tau_{\omega p}} \, d\omega \approx \sum_{b=1}^{N_b} \frac{C_b}{\tau_b}. \tag{16}$$

其中， e_b 表示按能带划分的单位立体角方向能量分布，它由与能带 b相关的谱贡献汇总得到。JAX-Nano 使用由此得到的能带属性进行后续的方向离散和空间离散。

2.3. 方向离散化

声子能量分布的角度依赖性采用 Hu 等人 [37, 111] 在 GiftBTE 中实现的高斯–勒让德求积程序进行离散化。对整个立体角的积分近似为

对离散传播方向进行加权求和:

$$\int_{4\pi} e_b \, d\Omega = \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} e_b \sin\theta \, d\phi \, d\theta \approx \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} w_\alpha e_{b\alpha}, \tag{17}$$

其中， α 表示离散传播方向的索引， $e_{b\alpha}$ 表示分带方向声子能量分布， w_α 表示其角度求积权重。

对于每个离散方向，单位传播向量为

$$\mathbf{s}_\alpha = (\sin\theta_\alpha \cos\phi_\alpha, \, \sin\theta_\alpha \sin\phi_\alpha, \, \cos\theta_\alpha) \, , \tag{18}$$

其中， θ_α 和 ϕ_α 分别表示极角和方位角。相应的求积权重为

$$w_\alpha = w_{\theta,\alpha} w_{\phi,\alpha} \sin\theta_\alpha, \tag{19}$$

其中， $w_{\theta,\alpha}$ 和$w_{\phi,\alpha}$ 分别是映射到相应极角和方位角区间的一维高斯–勒让德求积权重。

首先在 $\theta \in [0, \pi/2]$ 和$\phi \in [0, \pi/2]$上计算求积点和权重。其余角度区域内的传播方向通过对称性生成。对于初始角度区域中的 N_θ 个极角求积点和 N_ϕ 个方位角求积点，离散方向的总数为

$$N_\alpha = 8 N_\theta N_\phi. \tag{20}$$

角度求积权重满足

$$\sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} w_\alpha = 4\pi. \tag{21}$$

所得离散方向和权重用于计算声子输运方程中的角积分，包括温度和热流计算。

离散平衡分布为

$$e_b^{\mathrm{eq}} = \frac{C_b T_L}{4\pi}, \tag{22}$$

其中， C_b 为能带热容， T_L 为通过在弛豫时间近似中强制满足能量守恒而确定的散射平衡晶格温度。

相应的离散晶格温度为

$$T_L = \frac{\sum_{b=1}^{N_b} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} w_\alpha e_{b\alpha}/\tau_b}{\sum_{b=1}^{N_b} C_b/\tau_b}, \tag{23}$$

而能量等效温度为

$$T = \frac{\sum_{b=1}^{N_b} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} w_\alpha e_{b\alpha}}{\sum_{b=1}^{N_b} C_b}. \tag{24}$$

当所有声子能带的弛豫时间相同时，这两个温度相等。

与能带 b 和方向 α 相关的群速度矢量为$\mathbf{v}_{b\alpha} = v_b \mathbf{s}_\alpha$，其中 v_b 是依赖能带的群速度大小。宏观热流矢量计算如下

$$\mathbf{q} = \sum_{b=1}^{N_b} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} w_\alpha \mathbf{v}_{b\alpha} e_{b\alpha}. \tag{25}$$

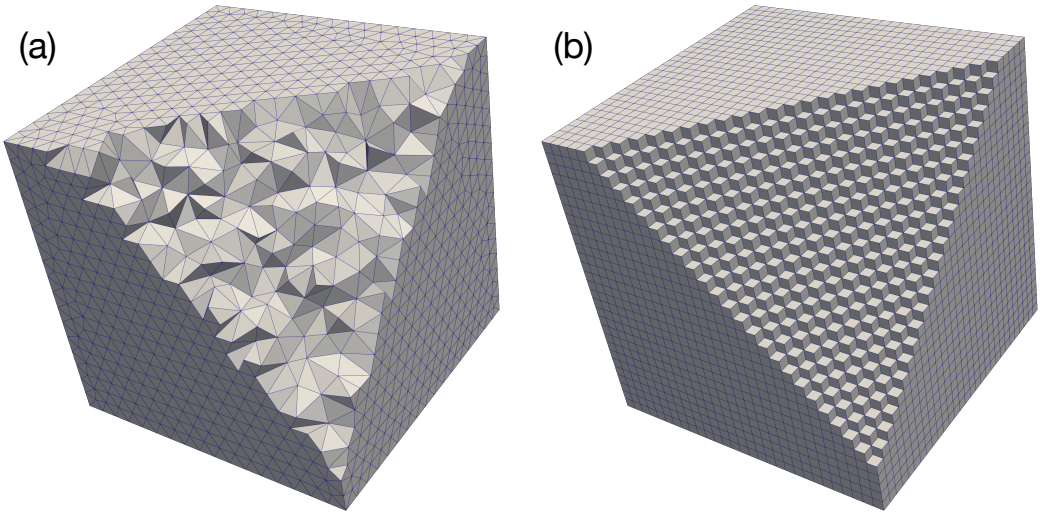

图 2：JAX-Nano 中采用的三维计算网格：(a) 非结构化四面体网格和 (b) 结构化六面体网格。剖视图展示了内部的单元排列。两种网格类型均采用相同的单元中心有限体积公式。

这些能带和方向分辨量为后续空间有限体积离散提供了基础。

2.4. 有限体积离散

计算域采用单元中心有限体积公式进行离散，该公式支持结构化和非结构化网格。图 2 展示了具有代表性的三维结构化六面体网格和非结构化四面体网格，剖视图呈现了它们内部的单元排列。两种网格类型均采用相同的守恒控制体平衡方程，同时以适用于基于面的数值通量计算的形式存储几何信息和面连接关系。

令 $\mathcal{D}$ 表示计算域，该区域被划分为 N_c 个互不重叠的

控制体 $\mathcal{D}_i$，使得 $\mathcal{D} = \bigcup_{i=1}^{N_c} \mathcal{D}_i$。每个单元 i 的体积为 V_i，质心为 $\mathbf{x}_i$，面集合为 $\mathcal{F}_i$。对于每个面 $f \in \mathcal{F}_i$，A_{if}、$\mathbf{n}^{if}$ 和 $\mathbf{x}^{if}$ 分别表示面面积、外向单位法向量和面质心。外向的面面积矢量定义为 $\mathbf{S}_{if} = A_{if}\mathbf{n}^{if}$。内部面由相邻控制体共享，而边界面则按照第 2.5 节处理。

结合第 2.2 节和第 2.3 节介绍的能带离散和方向离散，式（1）中的连续声子玻尔兹曼输运方程可表示为关于代表性声子能带 b 和离散传播方向 α 的形式：

$$\frac{\partial e_{b\alpha}}{\partial t} + \mathbf{v}_{b\alpha} \cdot \nabla e_{b\alpha} = \frac{e_b^{\mathrm{eq}} - e_{b\alpha}}{\tau_b} + S_b, \tag{26}$$

其中，S_b 表示与能带 b 相关的各向同性热源贡献。假设依赖能带的群速度大小 v_b 在每个均匀材料区域内空间均匀。

对式（26）在控制体积 $\mathcal{D}_i$ 上积分，并应用散度定理，可得半离散有限体积平衡：

$$V_i \frac{de_{ib\alpha}}{dt} + \sum_{f \in \mathcal{F}_i} F_{ifb\alpha} = V_i \left(\frac{e_{ib}^{\mathrm{eq}} - e_{ib\alpha}}{\tau_b} + S_{ib} \right), \tag{27}$$

其中，V_i 是控制体 $\mathcal{D}_i$ 的体积，$\mathcal{F}_i$ 表示其面集合，$e_{ib\alpha}$ 是单元平均方向性能量分布。穿过面 f 的定向数值通量定义为：

$$F_{ifb\alpha} = v_b \left(\mathbf{s}_\alpha \cdot \mathbf{S}_{if} \right) e_{ifb\alpha}, \tag{28}$$

其中$\mathbf{S}^{if}$ 为朝外的面面积矢量，$e_{ifb\alpha}$ 为重构的面能量分布。$e_{ifb\alpha}$ 的计算用于区分下文介绍的中心通量离散和迎风通量离散。

为考虑局域热生成，JAX-Nano 根据各单元质心在指定产热区域内的位置，设定单元体积热生成率 Q_i 。假设热生成各向同性，则使用谱分数 η_b 将源极分配到各声子能带中，得到

$$S_{ib} = \frac{\eta_b Q_i}{4\pi}, \qquad \sum_b \eta_b = 1. \tag{29}$$

其中， η_b 是声子带 b的归一化热容分数，定义为

$$\eta_b = \frac{C_b}{\sum_{b'} C_{b'}}, \tag{30}$$

其中， C_b 表示声子带 b的热容。对于满足 $\sum_\alpha w_\alpha = 4\pi$的角度求积权重 w_α ，此分配可确保恢复给定的体积热生成率：

$$\sum_b \sum_\alpha w_\alpha S_{ib} = Q_i. \tag{31}$$

对于无源模拟， $Q_i = 0$。

修正的格林–高斯梯度。单元中心梯度采用基于面贡献的修正的格林–高斯近似 [113] 进行计算。对于由相邻单元 i 和 j共享的内部面 f ，重构面分布为

$$e^{\mathrm{GG}}_{ifb\alpha} = \frac{e_{ib\alpha} + e_{jb\alpha}}{2} + \frac{\nabla e_{ib\alpha} + \nabla e_{jb\alpha}}{2} \cdot \left(\mathbf{x}_{if} - \frac{\mathbf{x}_i + \mathbf{x}_j}{2} \right), \tag{32}$$

其中， $e_{ib\alpha}$ 和 $e_{jb\alpha}$ 分别是单元 i 和 j中的单元平均方向能量分布，$\mathbf{x}_i$ 和 $\mathbf{x}_j$ 是它们的单元质心，而 $\mathbf{x}_{if}$ 是共享面的质心。量 $\nabla e_{ib\alpha}$ 和 $\nabla e_{jb\alpha}$ 表示

可用的单元中心梯度估计。第二项用于校正面质心与相邻单元质心中点之间的偏移，这在倾斜非结构网格中尤为重要。更新后的单元中心梯度由内部区域面和边界面的贡献组装而成：

$$(\nabla e_{ib\alpha})^{\mathrm{new}} = \frac{1}{V_i}\left(\sum_{f\in\mathcal{F}_i^{\mathrm{int}}} e_{ifb\alpha}^{\mathrm{GG}}\mathbf{S}_{if} + \sum_{f\in\mathcal{F}_i^{\mathrm{bnd}}} e_{ifb\alpha}^{\mathrm{BC}}\mathbf{S}_{if}\right), \tag{33}$$

其中，$\mathcal{F}_i^{\mathrm{int}}$和 $\mathcal{F}_{\text{边界}i}$分别表示单元i的内部面集合和边界面集合。量 $e_{ifb\alpha}^{\mathrm{BC}}$ 表示由指定边界条件确定的边界面分布，并考虑了声子传播方向中的出射和入射方向。对于内部单元，仅存在内部面贡献；而与边界相邻的单元则同时包含来自内部面和边界面的贡献。由于重构面分布取决于可用的单元中心梯度，该过程提供了经过几何修正的 Green–Gauss 梯度更新。

中心数值通量。 对于结构化网格，利用通过修正的 Green–Gauss 过程获得的单元中心梯度，将方向性能量分布分别从相邻单元中心重构到它们共用的内部面质心：

$$\begin{aligned} e_{i\to f,b\alpha} &= e_{ib\alpha} + \nabla e_{ib\alpha}\cdot(\mathbf{x}_{if}-\mathbf{x}_i),\\ e_{j\to f,b\alpha} &= e_{jb\alpha} + \nabla e_{jb\alpha}\cdot(\mathbf{x}_{if}-\mathbf{x}_j). \end{aligned} \tag{34}$$

其中，$e_{i\to f,b\alpha}$ 和$e_{j\to f,b\alpha}$ 分别表示从单元 i和 j重构得到的、位于面 f 处的方向性能量分布。数值面分布通过算术平均获得，相应的通量

is

$$e^{\mathrm{cen}}_{ifb\alpha} = \frac{e_{i\to f,b\alpha} + e_{j\to f,b\alpha}}{2}, \qquad F^{\mathrm{cen}}_{ifb\alpha} = (\mathbf{v}_{b\alpha}\cdot\mathbf{S}_{if})e^{\mathrm{cen}}_{ifb\alpha}. \tag{35}$$

该重构中心通量适用于结构化网格，且未应用 Barth–Jespersen 型限制器 [114]。

采用 *Barth–Jespersen* 型限制器的二阶迎风通量。对于结构化网格和非结构化网格，JAX-Nano 均采用基于分段线性重构并使用 Barth–Jespersen 型限制器的二阶迎风通量 [114]。对于每个单元、声子带和传播方向，根据单元自身及其有效内部邻居$\mathcal{N}(i)$确定局部上下界：

$$\begin{aligned} e^{\min}_{ib\alpha} &= \min_{k\in\{i\}\cup\mathcal{N}(i)} e_{kb\alpha}, \\ e^{\max}_{ib\alpha} &= \max_{k\in\{i\}\cup\mathcal{N}(i)} e_{kb\alpha}. \end{aligned} \tag{36}$$

对于内部面 f，未限制的重构增量定义为 $\Delta_{ifb\alpha} = \nabla e_{ib\alpha}\cdot(\mathbf{x}_{if} - \mathbf{x}_i)$。随后计算面上的 Barth–Jespersen 型限制器系数：

$$\phi_{ifb\alpha} = \begin{cases} \min\left(1, \dfrac{e^{\max}_{ib\alpha} - e_{ib\alpha}}{\Delta_{ifb\alpha}}\right), & \Delta_{ifb\alpha} > 0, \\ \min\left(1, \dfrac{e^{\min}_{ib\alpha} - e_{ib\alpha}}{\Delta_{ifb\alpha}}\right), & \Delta_{ifb\alpha} < 0, \\ 1, & \Delta_{ifb\alpha} = 0. \end{cases} \tag{37}$$

单元级限制器取所有有效内部面对应限制器的最小值：

$$\phi_{ib\alpha} = \min_{f\in\mathcal{F}_i^{\mathrm{int}}} \phi_{ifb\alpha}, \qquad 0 \le \phi_{ib\alpha} \le 1. \tag{38}$$

受限梯度用于在结构化网格和非结构化网格上进行面重构。相同的受限梯度也用于

在边界面处重构出射分布，但边界面不参与限制器计算。对于由单元 i 和 j共享的内部面，重构分布为

$$\begin{aligned} e^{\lim}_{i\to f,b\alpha} &= e_{ib\alpha} + \phi_{ib\alpha}\nabla e_{ib\alpha}\cdot(\mathbf{x}_{if}-\mathbf{x}_i), \\ e^{\lim}_{j\to f,b\alpha} &= e_{jb\alpha} + \phi_{jb\alpha}\nabla e_{jb\alpha}\cdot(\mathbf{x}_{if}-\mathbf{x}_j). \end{aligned} \tag{39}$$

迎风面分布根据法向声子群速度的符号选取:

$$e^{\mathrm{up}}_{ifb\alpha} = \begin{cases} e^{\lim}_{i\to f,b\alpha}, & \mathbf{v}_{b\alpha}\cdot\mathbf{S}_{if}\geq 0, \\ e^{\lim}_{j\to f,b\alpha}, & \mathbf{v}_{b\alpha}\cdot\mathbf{S}_{if}<0. \end{cases} \tag{40}$$

相应的数值通量为

$$F^{\mathrm{up}}_{ifb\alpha} = (\mathbf{v}_{b\alpha}\cdot\mathbf{S}_{if})e^{\mathrm{up}}_{ifb\alpha}. \tag{41}$$

当 $\phi_{ib\alpha}=0$ 时，单元 i 的重构退化为其单元平均分布，而 $\phi_{ib\alpha}=1$ 则保留无限制线性重构。

有限体积 *formulation* 与网格处理。对于任一数值通量，声子玻尔兹曼输运方程的半离散有限体积 formulation 可表示为

$$\frac{de_{ib\alpha}}{dt} = -\frac{1}{V_i}\sum_{f\in\mathcal{F}_i} F_{ifb\alpha} + \frac{e^{\mathrm{eq}}_{ib}-e_{ib\alpha}}{\tau_b} + S_{ib}. \tag{42}$$

稳态和瞬态声子输运采用相同的空间离散框架。在稳态下，时间导数为零；而在瞬态模拟中，则保留时间导数并采用所选的时间积分方法。体积热生成作为单元局部源项纳入，而不是作为面通量。内部面贡献通过相邻单元连通性和方向一致的面面积向量

进行组装。在边界面处，数值通量结合了流出的重构分布与由相应边界条件确定的流入分布，详见第 2.5 节。尽管结构化六面体网格与非结构化四面体网格的几何表示和连通性数据有所不同，但其底层有限体积平衡保持不变。结构化和非结构化网格均采用带有 Barth–Jespersen 型限制器的二阶迎风通量，而重构中心通量仅用于结构化网格。因此，与 GiftBTE 的比较应结合各项基准测试所采用的具体网格和数值通量配置来解读。

2.5. 边界条件

准确处理声子-边界相互作用对于模拟纳米尺度热输运至关重要，尤其是在特征长度尺度与声子平均自由程相当时。JAX-Nano 纳入了四种边界条件：热化、镜面反射、漫反射和周期性边界，如图 3 所示。这些条件涵盖声子热化、弹性边界散射以及跨周期界面的输运。

令 $\mathbf{n}$ 表示计算域的外向单位法向量，令 $\mathbf{s}$ 表示声子传播方向的单位向量。因此，$\mathbf{s}\cdot\mathbf{n} > 0$表示离开计算域的声子，而$\mathbf{s}\cdot\mathbf{n} < 0$ 表示从边界进入计算域的声子。边界条件针对入射声子能量分布进行规定

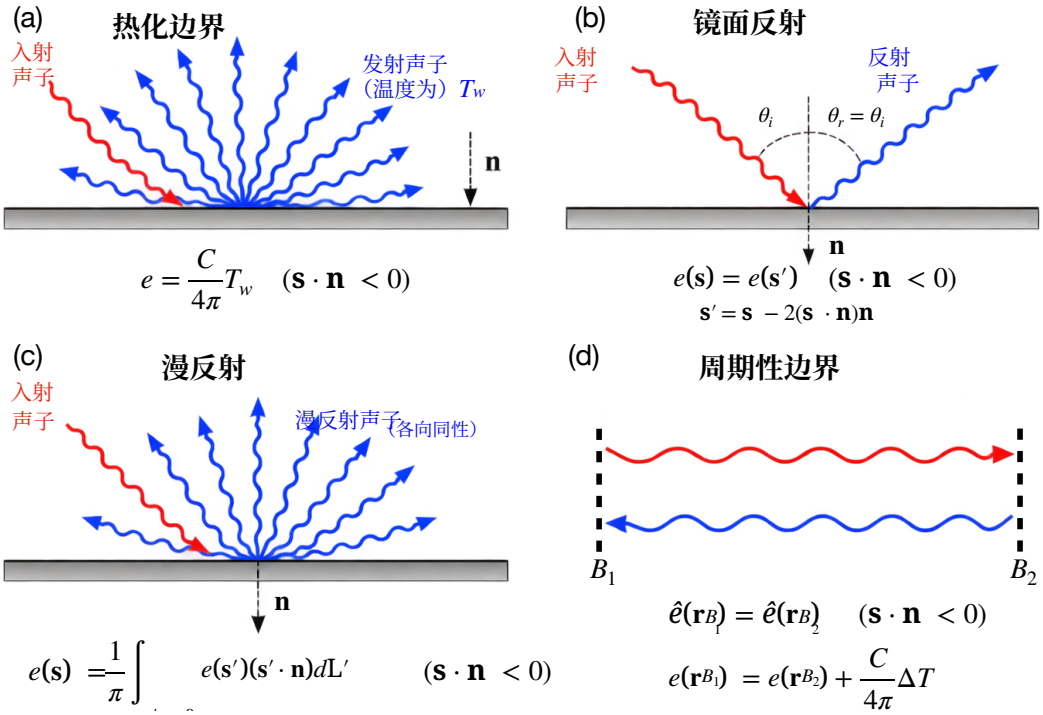

图3：JAX-Nano 中实现的声子边界条件示意图：(a) 热化边界，入射声子被吸收，并在给定壁面温度 T_w 下各向同性地发射平衡声子；(b) 镜面反射，反射角等于入射角；(c) 漫反射，入射声子在内向半球上各向同性地重新分布，因此绝热边界两侧的净法向热通量为零；(d) 周期性边界，其中 B_1 和 B_2 表示两个对应的周期性边界，声子能量分布在其间映射，同时保持其传播方向，并可选择加入给定温差 ΔT。红色和蓝色波浪箭头分别表示入射声子以及发射或反射声子的传播方向。

量 $e_b(\mathbf{x}, \mathbf{s}\ t)$，其中 b 表示声子带。

热化边界。在热化边界处，入射到壁面的声子会被吸收，而壁面则根据其在给定温度 T_w 下的局部平衡分布发射声子。在各向同性声子近似下，入射方向能量分布为

$$e_b(\mathbf{x}_w, \mathbf{s}, t) = \frac{C_b}{4\pi} T_w, \qquad \mathbf{s} \cdot \mathbf{n} < 0, \tag{43}$$

其中，C_b 是与声子带 b相关的体积热容，$\mathbf{x}_w$ 表示边界上的一点。发射的能量分布与传播方向无关，因此在内向半球上呈各向同性。与绝热反射边界不同，热化边界可以与计算域交换能量，从而允许存在非零法向热流。

镜面反射。在镜面反射边界处，声子发生类似镜面的反射，其能量和传播速度的大小保持不变。反射方向由下式确定:

$$\mathbf{s} = \mathbf{s}' - 2(\mathbf{s}' \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}, \tag{44}$$

其中，$\mathbf{s}'$ 和$\mathbf{s}$分别表示入射方向和反射方向。因此，入射角和反射角满足 $\theta_i = \theta_r$。相应的边界条件表示为

$$e_b(\mathbf{x}_w, \mathbf{s}, t) = e_b(\mathbf{x}_w, \mathbf{s}', t), \qquad \mathbf{s} \cdot \mathbf{n} < 0. \tag{45}$$

镜面反射保留入射声子的方向信息，并使穿过不可渗透边界的净法向能量通量为零。

漫反射。在漫反射边界处，入射声子会散射到内向半球，其方向能量分布各向同性，且与入射传播方向无关。对于绝热壁面，反射分布通过满足能量守恒确定，从而使入射和反射法向能流平衡。对于各向同性声子群速度，漫反射边界条件可写为

$$e_b(\mathbf{x}_w, \mathbf{s}, t) = \frac{1}{\pi} \int_{\mathbf{s}' \cdot \mathbf{n} > 0} e_b(\mathbf{x}_w, \mathbf{s}', t)(\mathbf{s}' \cdot \mathbf{n})\, d\Omega', \qquad \mathbf{s} \cdot \mathbf{n} < 0, \tag{46}$$

其中， $d\Omega'$ 是与入射方向相关的微分立体角。反射分布与$\mathbf{s}$无关，而其幅值由入射能流决定。因此，漫反射会随机化传播方向，同时保持绝热边界两侧的净法向热通量为零。尽管热化边界和漫反射边界都会产生各向同性的入射能量分布，但前者由预设的壁面温度控制，而后者由入射声子能流决定。

周期性边界。 周期性边界条件连接计算域相对边界上的对应位置，使声子能够在周期性重复几何结构中连续传播。对于两个对应的边界位置$\mathbf{x}_{B_1}$ 和$\mathbf{x}_{B_2}$，周期性条件表示为

$$e_b(\mathbf{x}_{B_1}, \mathbf{s}, t) = e_b(\mathbf{x}_{B_2}, \mathbf{s}, t). \tag{47}$$

声子传播方向在周期性界面两侧保持不变。对于线性能量公式，给定温差

ΔT 对应边界之间也可以施加移位周期性条件:

$$e_b(\mathbf{x}_{B_1}, \mathbf{s}, t) = e_b(\mathbf{x}_{B_2}, \mathbf{s}, t) + \frac{C_b}{4\pi}\Delta T, \tag{48}$$

其中， ΔT 的符号由所选的温差约定决定。此类条件使得对周期性重复结构以及由施加的宏观温度梯度驱动的输运进行建模成为可能。

2.6. 稳态求解方法

对于稳态声子输运，式（42）中的时间导数为零。由此得到的有限体积方程采用增量形式的缺陷修正方法求解，并遵循 GiftBTE [37] 的通用迭代框架。每次迭代中，使用重构面分布计算残差，同时采用一阶迎风输运-弛豫算子计算方向性声子能量密度的修正量。这种分离方式在通过通量重构保持较高空间精度的同时，也保留了稀疏的一阶修正算子。

对于每个声子带 b 和传播方向 α，修正方程表示为

$$\mathbf{A}^{b\alpha}\Delta\mathbf{e}_{b\alpha}^{(k+1)} = \mathbf{b}_{b\alpha}^{(k)}, \tag{49}$$

其中， $\Delta e_{ib\alpha}^{(k+1)} = e_{ib\alpha}^{(k+1)} - e_{ib\alpha}^{(k)}$ 表示单元 i 中的能量密度修正。

不同于未缩放的输运-弛豫形式，JAX-Nano 采用了按能带相关弛豫时间 τ_b 缩放的修正算子。单元 i 的对角矩阵系数为

$$A_{ii}^{b\alpha} = 1 + \frac{\tau_b}{V_i}\sum_{f\in\mathcal{F}_i}(\mathbf{v}_{b\alpha}\cdot\mathbf{S}_{if})\Theta(\mathbf{v}_{b\alpha}\cdot\mathbf{S}_{if}), \tag{50}$$

而与单元 i 和 j 共享的内部面相关联的非对角系数为

$$A_{ij}^{b\alpha} = \frac{\tau_b}{V_i}(\mathbf{v}_{b\alpha} \cdot \mathbf{S}_{if})\Theta(-\mathbf{v}_{b\alpha} \cdot \mathbf{S}_{if}). \tag{51}$$

这里， Θ 表示海维赛德函数， $\mathcal{F}_i$ 包括单元 i的内部面和边界面。对角系数考虑局部弛豫和向外输运，而非对角系数表示来自相邻单元的向内输运。连接同一对单元的多个面所产生的贡献会累加。迎风选择由法向声子群速度的符号决定。

右端向量由重构有限体积方程的残差构造而成，

$$b_{ib\alpha}^{(k)} = -\frac{\tau_b}{V_i}\sum_{f\in\mathcal{F}_i} F_{ifb\alpha}^{(k)} - e_{ib\alpha}^{(k)} + e_{ib}^{\mathrm{eq},(k)} + \tau_b S_{ib}, \tag{52}$$

其中， $F_{ifb\alpha}^{(k)}$ 表示数值面通量， S_{ib} 表示能带 b的体积源项。数值通量采用第 2.4 节所述的重构面分布计算。与 GiftBTE 采用的最小二乘重构不同，JAX-Nano 使用修正的格林–高斯梯度。一阶迎风近似仅用于修正算子，而重构通量用于确定高阶空间离散的残差。边界面通量计入残差，而入流边界校正则在线性化过程中显式处理。

与不同声子能带和传播方向相关的校正系统被组装成一个块对角稀疏矩阵，

$$\mathbf{A} = \operatorname{diag}\left(\mathbf{A}^{11}, \ldots, \mathbf{A}^{b\alpha}, \ldots\right). \tag{53}$$

最终的全局校正系统采用带雅可比预条件的双共轭梯度稳定法（BiCGSTAB）求解，

$$\mathbf{M}^{-1} = \mathrm{diag}(\mathbf{A})^{-1}. \tag{54}$$

与 GiftBTE 采用的稀疏直接 LU 分解不同，JAX-Nano 使用基于稀疏矩阵-向量乘积的迭代线性求解器。这些乘积通过 JAX 中的索引系数乘法和散射加累积实现，无需构造稠密矩阵。稀疏修正矩阵和雅可比预条件器只需组装一次，并在整个外层稳态迭代过程中重复使用。

每次线性求解后，方向能量密度按以下方式更新：

$$e_{ib\alpha}^{(k+1)} = e_{ib\alpha}^{(k)} + \Delta e_{ib\alpha}^{(k+1)}. \tag{55}$$

随后，通过强制满足声子散射算子的能量守恒来更新平衡能量密度。接着，根据更新后的方向能量分布求得宏观温度和热流。

通过计算连续迭代之间温度和热流大小的归一化均方根变化来评估收敛，

$$\varepsilon_T^{(k+1)} = \frac{\sqrt{\frac{1}{N_c}\sum_{i=1}^{N_c}\left(T_i^{(k+1)} - T_i^{(k)}\right)^2}}{\max_i |T_i^{(k+1)}|}, \tag{56}$$

and

$$\varepsilon_q^{(k+1)} = \frac{\sqrt{\frac{1}{N_c}\sum_{i=1}^{N_c}\left(\|\mathbf{q}_i^{(k+1)}\| - \|\mathbf{q}_i^{(k)}\|\right)^2}}{\max_i \|\mathbf{q}_i^{(k+1)}\|}, \tag{57}$$

其中 N_c 表示计算单元总数。当两个误差均满足预设容差时，迭代解即视为收敛，

$$\varepsilon_T^{(k+1)} \le \varepsilon_T^{\mathrm{tol}}, \qquad \varepsilon_q^{(k+1)} \le \varepsilon_q^{\mathrm{tol}}. \tag{58}$$

为实现 JAX 原生执行，外层稳态迭代采用 jax.lax.scan 实现，在固定的最大迭代次数内维护不断演变的声子能量分布、宏观场和收敛状态。在每个扫描步骤中，jax.lax.cond 会根据条件执行缺陷校正更新，或在两个收敛准则均已满足后保留当前解。尽管扫描保留了固定的迭代结构，但条件执行会在收敛后跳过后续的梯度重构、通量计算和稀疏线性求解。完整的计算过程总结于算法 1，其中 $K_{\max}$ 表示外层迭代的最大次数，c^k 是布尔型收敛标志，$\mathcal{C}^k$ 表示包含方向能量密度、平衡分布、温度、热流和收敛标志的迭代状态，$\mathcal{H}$ 表示记录的收敛历史。

2.7. 瞬态求解方法

为模拟时变声子输运，JAX-Nano 在有限体积框架中采用显式和隐式时间积分方案。显式公式使用一阶前向欧拉法，直接根据当前时刻计算得到的输运项和弛豫项推进各方向的声子能量分布。相比之下，隐式公式采用一阶后向欧拉法，并通过

算法 1 JAX-Nano 中的稳态声子 BTE 求解器。要求：声子性质、网格、角度求积、边界条件、最大迭代次数 $K_{\max}$和容差 $\varepsilon_T^{\mathrm{tol}}$、 $\varepsilon_q^{\mathrm{tol}}$1：初始化 e^0, $\mathrm{e}_{\mathrm{eq}}^0$、$\mathrm{T}^0$, q^0, 和 c^0 =false 2：组装稀疏迎风校正矩阵 A 和雅可比预条件器 M^{-1} 3：定义 $\mathcal{C}^0 = (\mathrm{e}^0, \mathrm{e}_{\mathrm{eq}}^0, \mathrm{T}^0, \mathrm{q}^0, c^0)$ 4：函数 ActiveStep($\mathcal{C}^k$) 5：$\nabla \mathrm{e}^k$ ←修正的格林–高斯重构 6：F^k ←重构的内部与边界面通量和 7：$\mathrm{r}^k \leftarrow -(\boldsymbol{\tau}/\mathrm{V}) \odot \mathrm{F}^k - (\mathrm{e}^k - \mathrm{e}_{\mathrm{eq}}^k) + \boldsymbol{\tau} \odot \mathrm{S}^k$8：$\Delta \mathrm{e}^{k+1} \leftarrow \mathrm{BiCGSTAB}(\mathrm{A}, \mathrm{r}^k, \mathrm{M}^{-1})$ 9：$\mathrm{e}^{k+1} \leftarrow \mathrm{e}^k + \Delta \mathrm{e}^{k+1}$10：更新 $\mathrm{e}_{\mathrm{eq}}^{k+1}$、$\mathrm{T}^{k+1}$和 q^{k+1}11：计算 ε_T^{k+1} 和 ε_q^{k+1}12：$c^{k+1} \leftarrow (\varepsilon_T^{k+1} \le \varepsilon_T^{\mathrm{tol}}) \wedge (\varepsilon_q^{k+1} \le \varepsilon_q^{\mathrm{tol}})$ 13：返回 $\mathcal{C}^{k+1}$ 和 $(\varepsilon_T^{k+1}, \varepsilon_q^{k+1})$ 14：结束函数 15：函数 InactiveStep($\mathcal{C}^k$) 16：返回未更改的 $\mathcal{C}^k$ 和非活动诊断信息 17：结束函数 18：函数 ScanStep($\mathcal{C}^k, k$) 19：返回 lax.cond(c^k, InactiveStep, ActiveStep $\mathcal{C}^k$) 20：结束函数 21：$(\mathcal{C}^{K_{\max}}, \mathcal{H}) \leftarrow$ lax.scan(ScanStep $\mathcal{C}^0$, $K_{\max}$) 22：返回 e、T、q 和收敛历史 $\mathcal{H}$

缺陷修正迭代和稀疏迭代线性求解器。这两种方法采用相同的空间离散和边界条件处理方式，为具有不同稳定性和计算需求的瞬态声子输运模拟提供了互补策略。以下小节将介绍这些方法的数值公式。

2.7.1. 显式时间积分

上一节推导的半离散瞬态声子玻尔兹曼输运方程采用一阶前向欧拉格式进行时间积分。方向性能量密度的时间导数近似为

$$\left.\frac{\mathrm{d}e_{ib\alpha}}{\mathrm{d}t}\right|_{t=t^n} \approx \frac{e_{ib\alpha}^{n+1} - e_{ib\alpha}^{n}}{\Delta t}, \tag{59}$$

其中， Δt 表示时间步长，上标 n和 $n+1$ 表示相邻的时间层。将其代入半离散有限体积方程可得

$$e_{ib\alpha}^{n+1} = e_{ib\alpha}^{n} - \frac{\Delta t}{V_i}\sum_{f\in\mathcal{F}_i} F_{ifb\alpha}^{n} \quad -\frac{\Delta t}{\tau_b}\left(e_{ib\alpha}^{n} - e_{ib}^{\mathrm{eq},n}\right) + \Delta t\, S_{ib}^{n}. \tag{60}$$

在每个时间步长，使用前文所述的空间离散方法和边界条件处理，在单元面上重构方向性能量分布。随后，在当前时间层计算所得数值通量、弛豫项和给定的源项，并将其代入式（60）以推进方向能量密度。接着更新平衡能量分布和宏观量，包括温度和热流。重复此过程，直至

达到规定的最终仿真时间，且无需进行非线性迭代或线性方程组求解。

显式时间步长根据库朗–弗里德里希–列维（CFL）准则选取 [115],

$$\Delta t = C_{\mathrm{CFL}} \frac{\Delta x_{\min}}{v_{\max}}, \tag{61}$$

其中， C_{CFL} 是指定的CFL数， $\Delta x_{\min}$ 是最小特征网格间距， $v_{\max}$ 是所有能带中的最大声子群速度。CFL数根据每次模拟的空间分辨率和稳定性要求选取。由于声子弛豫也采用显式处理，时间步长还必须足以分辨相关的弛豫时间尺度。

显式瞬态解的求解流程总结于算法2中。时间步进循环可使用 jax.lax.scan 实现，从而支持 JAX 编译和对时间演化过程进行自动微分。对于旨在求得稳态解的模拟，还可以使用 jax.lax.cond，在满足指定的收敛准则后跳过后续更新。

尽管显式方法无需进行线性方程组求解，但其稳定性限制可能导致在空间离散较精细或声子弛豫时间较短时需要大量时间步。为缓解这些限制，下一小节将介绍一种全隐式时间积分方法。

2.7.2. 隐式时间积分

为缓解显式积分对时间步长的严格要求，JAX-Nano 还采用全隐式后向欧拉格式求解瞬态

算法2JAX-Nano 中的显式瞬态声子BTE求解器。**要求：** 声子性质、网格、角度求积、边界条件 -

次数、终止时间 t_{end} 和预设的 CFL 数 C_{CFL}1：初始化 $\mathbf{e}^0$, $\mathbf{e}_{\mathrm{eq}}^0$、$\mathbf{T}^0$, $\mathbf{q}^0$, 和 $t^0 = 0$2：设置 $\Delta t = C_{\mathrm{CFL}} \Delta x_{\min} / v_{\max}$3：设置 $N_t = \lceil t_{\mathrm{end}} / \Delta t \rceil$4：定义 $\mathcal{C}^0 =$($\mathbf{e}^0$,$\mathbf{e}_{\mathrm{eq}}^0$、$\mathbf{T}^0$, $\mathbf{q}^0$、 t^0) 5：函数 TimeStep($\mathcal{C}^n$) 6：$\Delta t_n \leftarrow$ min($\Delta t, t_{\mathrm{end}} - t^n$) 7：$\nabla \mathbf{e}^n \leftarrow$ 修正的格林–高斯重构 8：$\mathbf{F}^n \leftarrow$ 重构内部与边界面通量和 9：$\mathbf{R}^n \leftarrow -\mathbf{F}^n / \mathbf{V} - (\mathbf{e}^n - \mathbf{e}_{\mathrm{eq}}^n) / \boldsymbol{\tau} + \mathbf{S}^n$10：$\mathbf{e}^{n+1} \leftarrow \mathbf{e}^n + \Delta t_n \mathbf{R}^n$11：更新 $\mathbf{e}_{\mathrm{eq}}^{n+1}$、$\mathbf{T}^{n+1}$ 和 $\mathbf{q}^{n+1}$12：$t^{n+1} \leftarrow t^n + \Delta t_n$13：返回 $\mathcal{C}^{n+1}$14：结束函数 15：函数 ScanStep($\mathcal{C}^n, n$) 16：$\mathcal{C}^{n+1} \leftarrow$TimeStep($\mathcal{C}^n$) 17：返回 $\mathcal{C}^{n+1}$ 及选定的诊断量 18：结束函数 19：($\mathcal{C}^{N_t}, \mathcal{H}$) $\leftarrow$ lax.scan(ScanStep $\mathcal{C}^0, N_t$) 20：返回 e、T、q 和瞬态历史 $\mathcal{H}$

声子输运。在此 formulation 中，输运、弛豫和源项均在新的时间层 t^{n+1} 进行计算，从而得到离散化的声子玻尔兹曼输运方程

$$\frac{e_{ib\alpha}^{n+1}-e_{ib\alpha}^{n}}{\Delta t} = -\frac{1}{V_i}\sum_{f\in\mathcal{F}_i} F_{ifb\alpha}^{n+1} \quad -\frac{e_{ib\alpha}^{n+1}-e_{ib}^{\mathrm{eq},n+1}}{\tau_b} + S_{ib}^{n+1}. \tag{62}$$

由于重构数值通量和局部平衡分布取决于时间层 $n+1$ 的未知解，式（62）定义了一个非线性系统。

按照稳态求解策略，该系统通过非线性缺陷修正迭代求解。在每个物理时间步，初始迭代值取前一时间层 $e_{ib\alpha}^{(0)} = e_{ib\alpha}^{n}$ 的解。非线性迭代 k 时按弛豫时间缩放的残差为

$$r_{ib\alpha}^{(k)} = -\frac{\tau_b}{\Delta t}\left(e_{ib\alpha}^{(k)}-e_{ib\alpha}^{n}\right) - \frac{\tau_b}{V_i}\sum_{f\in\mathcal{F}_i} F_{ifb\alpha}^{(k)} \quad -\left(e_{ib\alpha}^{(k)}-e_{ib}^{\mathrm{eq},(k)}\right) + \tau_b S_{ib}^{(k)}. \tag{63}$$

这里，上标（k）表示当前物理时间步内的一次非线性迭代。当后向欧拉方程满足时，残差为零。对于包含内部加热的模拟，该源项会被纳入；否则将其设为零。

通过求解下式更新方向能量分布

$$\mathbf{A}_{\mathrm{tr}}^{b\alpha}\Delta\mathbf{e}_{b\alpha}^{(k+1)} = \mathbf{r}_{b\alpha}^{(k)}, \qquad \mathbf{e}_{b\alpha}^{(k+1)} = \mathbf{e}_{b\alpha}^{(k)} + \Delta\mathbf{e}_{b\alpha}^{(k+1)}, \tag{64}$$

其中$\mathbf{A}_{\mathrm{tr}}^{b\alpha}$ 是声子带 b 和传播方向 α对应的稀疏修正矩阵。与稳态公式一样，修正矩阵采用一阶迎风近似，而残差则保留重构后的高阶面通量。后向欧拉积分会增加一个对角贡献，

$$\mathbf{A}_{\mathrm{tr}}^{b\alpha} = \mathbf{A}_{\mathrm{steady}}^{b\alpha} + \frac{\tau_b}{\Delta t}\mathbf{I}, \tag{65}$$

其中$\mathbf{A}_{\mathrm{steady}}^{b\alpha}$ 是相应的稳态迎风修正矩阵，$\mathbf{I}$ 是单位矩阵。对于固定的网格几何、声子性质和时间步长，该矩阵可在非线性迭代和物理时间步中重复使用。

稀疏修正系统采用带雅可比预条件的双共轭梯度稳定法（BiCGSTAB）求解。与 JAX 兼容的稀疏矩阵-向量运算使这些求解能够集成到 GPU 加速框架中。在每次非线性迭代中，都会计算重构梯度和面通量，并根据当前迭代值重新计算局部平衡能量分布。通过相对修正范数评估收敛情况，

$$\varepsilon_{\mathrm{NL}}^{(k+1)} = \frac{\left\|\Delta \mathbf{e}^{(k+1)}\right\|_2}{\left\|\mathbf{e}^{(k+1)}\right\|_2 + 10^{-30}}. \tag{66}$$

非线性修正会持续进行，直到误差低于预设容差，或达到最大迭代次数。在嵌套扫描实现中，jax.lax.scan 用于组织物理时间步和有界非线性迭代，而一旦检测到收敛，jax.lax.cond 就会跳过后续的修正求解。每个时间步完成最后一次修正后，会针对已接受状态重新计算平衡分布和重构梯度，并求得其温度和热流。

算法3概述了隐式瞬态求解器的实现。这里，$\mathcal{C}$ 表示迭代间传递的状态，而 N_t 和$K_{\max}$ 分别指定物理时间步数以及每个时间步的最大非线性修正次数。非线性收敛容差记为$\varepsilon_{\mathrm{NL}}^{\mathrm{tol}}$，$\mathbf{M}^{-1}$ 表示雅可比预条件器。瞬态历史 $\mathcal{H}$ 存储所选的时变输出。

算法3 JAX-Nano 中的隐式瞬态声子 BTE 求解器。要求：声子性质、网格、角度求积、边界条件、初始状态、 Δt、 N_t和 $K_{\max}$， 以及 $\varepsilon_{\mathrm{NL}}^{\mathrm{tol}}$1：初始化 e^0,$\mathrm{e}_{\mathrm{eq}}^0$、$\mathrm{T}^0$,和 $\mathrm{q}^0$2：组装稀疏稳态迎风修正矩阵 $\mathrm{A}^{\mathrm{steady}}$3：$\mathrm{A}_{\mathrm{tr}} \leftarrow \mathrm{A}_{\mathrm{steady}} + \mathrm{diag}(\boldsymbol{\tau}/\Delta t)$；构造雅可比预条件器 M^{-1}4：函数 CorrectionStep($\mathcal{C}^{(k)}$, e^n) 5：$\nabla \mathrm{e}^{(k)} \leftarrow$ 修正的格林–高斯重构 6：$\mathrm{F}^{(k)} \leftarrow$ 重构的内部与边界面通量和 7：更新平衡能量 $\mathrm{e}_{\mathrm{eq}}^{(k)}$8：$\mathrm{r}^{(k)} \leftarrow -(\boldsymbol{\tau}/\Delta t) \odot (\mathrm{e}^{(k)} - \mathrm{e}^n) - (\boldsymbol{\tau}/\mathrm{V}) \odot \mathrm{F}^{(k)} - (\mathrm{e}^{(k)} - \mathrm{e}_{\mathrm{eq}}^{(k)}) + \boldsymbol{\tau} \odot \mathrm{S}^{(k)}$9：$\Delta \mathrm{e}^{(k+1)} \leftarrow \mathrm{BiCGSTAB}(\mathrm{A}_{\mathrm{tr}}, \mathrm{r}^{(k)}, \mathrm{M}^{-1})$ 10：$\mathrm{e}^{(k+1)} \leftarrow \mathrm{e}^{(k)} + \Delta \mathrm{e}^{(k+1)}$11：使用公式（66）评估修正误差 $\varepsilon^{(k+1)}$ NL 12：返回更新后的 $\mathcal{C}^{(k+1)}$13：结束函数 14：函数 TimeStep($\mathcal{C}^n$) 15：初始化 $\mathrm{e}^{(0)} \leftarrow \mathrm{e}^n$ 和非线性状态 $\mathcal{C}^{(0)}$16：使用 lax.cond 在 $\varepsilon_{\mathrm{NL}} < \varepsilon_{\mathrm{NL}}^{\mathrm{tol}}$后跳过修正 17：$\mathcal{C}^{(K_{\max})} \leftarrow$ lax.scan(CorrectionStep $\mathcal{C}^{(0)}, K_{\max}$) 18：重新计算 $\mathrm{e}_{\mathrm{eq}}^{n+1}$、 $\nabla \mathrm{e}^{n+1}$、T^{n+1} 和 q^{n+1}19：在 $\mathcal{H}$中记录所选时间步输出 20：返回 $\mathcal{C}^{n+1}$ 和时间步历史输出 21：结束函数 22：$(\mathcal{C}^{N_t}, \mathcal{H}) \leftarrow$ lax.scan(TimeStep $\mathcal{C}^0, N_t$) 23：返回 e 、T、q 和 $\mathcal{H}$

与前向欧拉积分相比，后向欧拉积分避免了显式平流和弛豫所面临的相同稳定性限制，因此允许采用更大的时间步长。不过， Δt 仍必须充分解析物理瞬态动力学并保持时间精度。该隐式方法尤其适用于精细空间离散、较短的声子弛豫时间，以及持续时间较长的物理时间尺度下的模拟。

2.8. JAX 中的 *GPU* 加速实现

JAX-Nano 使用 JAX 实现。JAX 是一种高性能数值计算框架，支持即时（JIT）编译、自动微分以及在硬件加速器上执行。有限体积离散、声子输运计算和迭代求解过程均采用兼容 JAX 的数组运算进行表达，使计算密集型内核能够在图形处理器上执行。

重构梯度、数值面通量、声子散射项和宏观量的求值均采用向量化运算进行表达。JAX 的 jit 变换通过加速线性代数（XLA）编译器编译这些运算，从而减少 Python 执行开销，并实现对计算内核的优化。稳态与瞬态求解器采用兼容 JAX 的迭代过程，包括稀疏矩阵-向量运算和 Krylov 子空间线性求解器。对于隐式瞬态积分，嵌套的 lax.scan 运算用于组织物理时间推进和非线性校正迭代，而 lax.cond 则在编译后的计算中提供依赖收敛性的控制流。

JAX-Nano 的一个关键特性是兼容自动微分

。通过在 JAX 计算框架中表达控制数值运算，可以使用自动微分评估模拟量相对于可微模型参数的灵敏度。这一能力为纳米尺度热传输系统的基于梯度的参数估计、反演学习和优化奠定了基础。可微分公式及其验证将在下一节中讨论。

GPU 加速、即时编译和自动微分相结合，为正向声子输运模拟和基于梯度的逆向分析提供了统一的计算框架。

2.9. 自动微分与反演建模

JAX-Nano 将自动微分（AD）集成到有限体积声子玻尔兹曼输运方程（BTE）求解器中，以根据温度观测识别未知的物理参数和几何参数。该可微分公式在 JAX 计算框架内，将依赖于参数的输运模型、稳态或瞬态数值解以及基于温度的目标函数联系起来。本文考虑的反问题涉及热化边界温度、声子弛豫时间、特征几何长度和内部热生成率。

令 $\boldsymbol{\theta}$ 表示可学习的优化变量，$\mathbf{p}(\boldsymbol{\theta})$ 表示相应的物理参数。逆问题可表述为

$$\boldsymbol{\theta}^* = \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}), \tag{67}$$

其中，基于温度的均方损失定义为

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{N_{\mathrm{obs}}} \sum_{i=1}^{N_{\mathrm{obs}}} \left[\mathcal{H}_i\big(\mathbf{T}(\boldsymbol{\theta})\big) - T_i^{\mathrm{ref}}\right]^2. \tag{68}$$

此处，$\mathbf{T}(\boldsymbol{\theta})$表示稳态或瞬态 BTE 求解器预测的温度场，$\mathcal{H}_i$ 是观测算子，用于评估观测位置 i处的预测温度，N_{obs} 是温度观测的数量。对于全场反演学习，使用全部 N_c 个计算单元的温度，因此 $N_{\mathrm{obs}} = N_c$。对于稀疏观测反演学习，使用选定探针位置处的温度来计算目标函数。为评估如何根据有限观测进行参数识别，本文考虑了分别配置 5 个和 16 个温度探针的情形。

对于稳态逆向学习，使用收敛后的温度场计算目标函数。对于瞬态逆向学习，瞬态 BTE 求解器推进至指定的观测时间，并将预测温度场与同一时刻的参考场进行比较。在这两种情况下，温度观测均用于构建目标函数，以进行基于梯度的参数识别。

对于热化边界温度识别，将指定的边界温度 T_b 视为可学习物理参数。其依赖关系被纳入有限体积 BTE 求解器的热化边界条件中，从而可以根据观测温度响应推断边界温度。

对于弛豫时间识别，每个声子带 b 均可分配一个独立的正缩放因子，

$$\tau_b = \alpha_{\tau,b}\tau_b^{\mathrm{ref}}, \qquad \alpha_{\tau,b} = \exp(\theta_{\tau,b}), \tag{69}$$

其中 τ_b^{ref}表示参考弛豫时间，$\theta_{\tau,\ b}$ 是与声子带 b关联的无约束可学习参数。指数参数化确保识别出的弛豫时间保持为正值。或者，也可以使用一个通用缩放因子来识别全局弛豫时间修正。参数依赖关系被一致地纳入散射贡献、平衡能量计算和输运修正系统中。本文同时考虑单个弛豫时间识别和两个弛豫时间的同步识别。

对于几何参数识别，引入一个正的特征长度缩放因子，定义为

$$L = \alpha_L L^{\mathrm{ref}}, \qquad \alpha_L = \exp(\theta_L), \tag{70}$$

其中， L^{ref} 是参考特征长度， θ_L 是无约束的可学习参数。指数参数化可确保识别出的长度保持为正。网格连通性和拓扑保持不变。在均匀三维几何缩放下，面面积和单元体积分别按 α_L^2 和 α_L^3缩放，因此，有限体积输运项对单位体积的贡献按 $1/\alpha_L$缩放。将这种几何依赖关系直接纳入输运残差和相应的线性修正系统后，即可在无需重新划分网格的情况下，通过基于梯度的识别确定特征长度。

内部热源的强度通过缩放其参考体积热生成率来识别，

$$\dot{Q} = \theta_Q \dot{Q}_{\mathrm{ref}}, \tag{71}$$

其中 $\dot{Q}_{\mathrm{ref}}$ 为参考体积热生成率， θ_Q 为

可学习热源幅值。热源的空间分布保持固定，其大小则根据温度观测推断得出。

对于多个空间分布的热源，每个热源的名义体积热生成率参数化为

$$\dot{Q}_j = \theta_j \dot{Q}_{\mathrm{ref}}, \qquad j = 1, \ldots, N_Q, \tag{72}$$

其中， θ_j 是热源 j的归一化幅值。对于 3×3 鳍式场效应晶体管阵列，$N_Q = 9$，并根据温度观测同时识别全部九个热源幅值。

使用自动微分计算目标函数相对于可学习参数的梯度。对于单参数识别（边界温度除外）、两个声子弛豫时间的同时识别以及瞬态逆向学习，通过 JAX 的 value_和_grad 变换使用反向模式自动微分，

$$\mathbf{g} = \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}). \tag{73}$$

此变换计算基于温度的损失及其相对于所有可学习参数的梯度。对于瞬态逆向学习，梯度通过参数相关的 BTE 求解器的时间步进操作进行传播，使观测到的瞬态温度响应能够指导参数识别。

通过 JAX 的 jvp 变换采用正向模式自动微分，用于边界温度识别以及同时识别九个空间分布的热生成率。损失函数梯度的每个分量均通过雅可比-向量积计算，

$$g_j = J_{\mathcal{L}}(\boldsymbol{\theta}) \mathbf{e}_j = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta_j}, \qquad j = 1, \ldots, N_p, \tag{74}$$

其中 $J_{\mathcal{L}}$ 表示标量损失函数的雅可比矩阵，$\mathbf{e}j$ 是与第 j 个可学习参数对应的单位向量，而 N_p 是可学习参数的数量。

对于边界温度识别，$N_p = 1$，损失梯度通过一次雅可比向量积计算获得。对于 3×3 热源阵列，$N_p = 9$，完整的损失梯度由九次连续的雅可比向量积计算汇总而成。每次仅处理一个参数方向，从而限制同时通过迭代 BTE 求解器传播的切向方向数量，提供一种节省内存的微分策略。

根据逆问题的不同，所得梯度用于通过梯度下降、Adam 或结合梯度裁剪与回溯线搜索的投影梯度下降进行参数优化。对于投影梯度下降，可学习参数被限制在预先规定的允许范围内，而回溯线搜索仅接受有限且不增加的目标函数值。这两种微分方法都直接作用于离散化 BTE 求解器，无需推导单独的连续灵敏度方程。

算法 4 总结了稳态和瞬态 BTE 模拟的一般反演建模工作流程。梯度评估步骤采用反向模式自动微分或顺序前向模式雅可比向量积，后者详见算法 5。在每次优化迭代中，先将可学习变量映射为物理参数，然后进行前向模拟、目标函数评估和基于梯度的更新。数值结果部分将考察在全场温度观测和稀疏温度观测条件下推断参数的准确性。

算法 4 JAX-Nano 中基于自动微分的反演建模 要求：参考温度观测 $\mathrm{T}_{\mathrm{obs}}^{\mathrm{ref}}$、观测算子 $\mathcal{H}$、初始参数 $\boldsymbol{\theta}^{(0)}$、优化器、自动微分模式和最大迭代次数$N_{\mathrm{opt}}$ 确保：识别出的物理参数 p^{*}1: 对于 $k = 0, \ldots, N_{\mathrm{opt}} - 1$ 执行 2: 将 $\boldsymbol{\theta}^{(k)}$ 映射为物理参数 $\mathrm{p}^{(k)}$3: 求解稳态玻尔兹曼输运方程，或推进瞬态玻尔兹曼输运方程至观测时间 4: 获得预测温度场 $\mathrm{T}(\boldsymbol{\theta}^{(k)})$ 5: 使用公式 (68) 计算 $\mathcal{L}^{(k)}$ 6: 使用反向模式自动微分或算法 5 计算 $\mathrm{g}^{(k)}$ 7: 使用所选优化器更新 $\boldsymbol{\theta}^{(k+1)}$ 8: 如果满足终止准则，则 9: 跳出循环 10: 结束如果 11: 结束循环 12: $\boldsymbol{\theta}^{*} \leftarrow$ 最终接受的可学习参数 13: $\mathrm{p}^{*} = \mathrm{p}(\boldsymbol{\theta}^{*})$ 14: 返回 p^{*}

算法 5顺序前向模式梯度计算**要求：** 可学习参数 $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^{N_p}$，基于温度的损失 $\mathcal{L}$**确保：** 损失 $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})$和梯度 $\mathbf{g}$1: 计算 $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})$2: 初始化 $\mathbf{g} \leftarrow \mathbf{0}$ 3: **对于** $j = 1, \ldots, N_p$ **执行**4: 将 $\mathbf{e}_j$ 设为第 j 个坐标单位向量5: $g_j \leftarrow$ 雅可比向量积$[\mathcal{L}](\boldsymbol{\theta}, \mathbf{e}_j)$6: **结束循环**7: **返回** $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}), \mathbf{g}$

3. 验证与确认

通过一系列物理和计算复杂度逐步提高的基准测试，评估 JAX-Nano 的精度和稳健性。首先使用具有既定解析和数值参考解的典型问题，考察稳态和瞬态声子输运，随后在三维鳍式场效应晶体管几何结构中进行验证。通过系统的空间、角度、时间和求解器收敛研究，评估所提出框架的数值精度和可靠性。这些测试共同验证了 JAX-Nano 在应用于基于梯度的反向参数识别之前的正向预测能力。

3.1. 稳态面外声子输运

首先，使用 Guo 和 Xu [116] 所研究的介电薄膜中的典型面外热传导问题，对 JAX-Nano 的稳态实现进行验证。该薄膜沿 x 方向的厚度为 L，其中

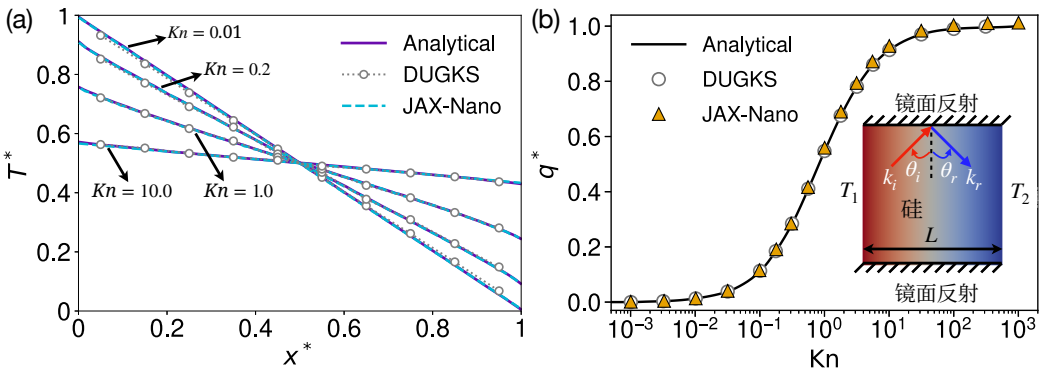

图 4：JAX-Nano 稳态求解器在扩散到弹道输运机制下进行面外声子输运的验证。(a) Kn $= 0.01$、0.2、1 和 10 时的无量纲温度分布 T^*，并与解析解和离散统一气体动理学格式（DUGKS） [116]的结果进行比较。(b) 无量纲热流 q^* 随克努森数的变化，并与解析解以及 Guo 和 Xu [116]给出的 DUGKS 结果进行比较。插图展示了面外输运构型，其中温度为 T_1 和 T_2，横向采用镜面边界。

两个边界分别位于 $x = 0$ 和 $x = L$，并维持在温度 T_1 和 T_2。由于薄膜及施加的热边界条件在两个横向方向上均匀，因此这些方向上不存在空间变化，问题可简化为沿薄膜厚度方向的一维输运。因此，声子分布在空间上仅取决于 x，同时仍保留对声子传播方向的依赖。此构型为研究面外声子输运从扩散区间到弹道区间的变化提供了一个典型基准测试。

尽管该参考问题在物理空间中是一维的，但在 JAX-Nano 中，它采用带有准一维 $400 \times 1 \times 1$ 网格的三维计算域表示。有限体积单元沿面外（x）方向堆叠，在两个横向方向上则各仅设置一个单元。横向各面施加镜面边界条件。由于解在横向方向上保持不变，在这些方向上增加单元并不会提供额外的物理信息。这种准一维表示保留了基准问题的一维特性，同时采用与后续全三维器件模拟相同的三维有限体积公式。模型采用单频带灰色声子模型，并将角度域离散为 64 个离散传播方向。

无量纲温度和空间坐标定义为

$$T^* = \frac{T - T_2}{T_1 - T_2}, \qquad x^* = \frac{x}{L}, \tag{75}$$

其中，T_1 和 T_2 分别表示热边界和冷边界的温度。面外热流由声子能量分布的离散角

矩计算得出，表示为

$$q_{x,i} = \sum_{b} \sum_{\alpha=1}^{N_\Omega} w_\alpha v_{g,b\alpha,x} e_{ib\alpha}, \tag{76}$$

其中， $e_{ib\alpha}$ 是单元 i、能带 b和离散传播方向 α上的声子能量分布， N_Ω 是离散传播方向的总数， w_α 是相应的角度求积权重， $v_{g,\ b\alpha,\ x}$ 是声子群速度的面内分量。对计算域内的热流进行空间平均，并以其弹道极限值归一化，得到

$$q^* = \frac{|\bar{q}_x|}{q_\infty}, \qquad \bar{q}_x = \frac{1}{N_c} \sum_{i=1}^{N_c} q_{x,i}, \qquad q_\infty = \frac{1}{4} C_v v_g (T_1 - T_2), \tag{77}$$

其中， N_c 是单元数， C_v 是体积热容， v_g是声子群速度。对于本文的单频带灰色模型计算，边界温度设为 $T_1 = 800$ K和 $T_2 = 300$ K。将 JAX-Nano预测与相应的解析解以及 Guo 和 Xu [116] 报道的离散统一气体动理学格式（DUGKS）结果进行比较。

图4(a)比较了 Kn $= 0.01$、0.2、1 和 10 时的无量纲稳态温度分布，涵盖了从近扩散区间到强弹道区间的输运行为。当 Kn $= 0.01$ 时，温度分布接近扩散极限，在薄膜内部呈近似线性变化。随着 Kn 增大，温度分布逐渐偏离扩散行为。内部温度梯度减小，而与边界非平衡相关的温度跳跃则愈发明显。当 Kn $= 10$ 时，温

度分布在内部区域几乎均匀，反映出弹道声子输运占据主导。

对于全部四个克努森数，JAX-Nano预测均与解析解和DUGKS结果高度吻合。具体而言，该求解器既能捕捉扩散区间中近乎线性的温度分布，也能准确反映随着输运逐渐趋于弹道区间，内部区域的温度分布逐步变平的现象。值得注意的是，JAX-Nano结果采用三维有限体积实现在准一维网格上获得，而非使用单独的一维求解器。因此，这些结果验证了三维空间离散、角度离散和边界处理能够正确再现预期的一维横向输运行为。

图4(b)通过考察范围宽得多的无量纲热流 $10^{-3} \leq \mathrm{Kn} \leq 10^{3}$，提供了补充验证。JAX-Nano预测在整个范围内均与解析解高度吻合，也与DUGKS参考结果一致。当Kn较小时，热流趋近扩散极限；随着Kn增大，输运机制则持续转变，经过准弹道区间并逐渐趋向弹道极限。在跨越六个数量级的Kn范围内仍能保持这种吻合，表明稳态公式不仅准确捕捉了各个极限输运区间，也准确描述了它们之间的过渡。

综合来看，图4中的温度分布和热流比较验证了 JAX-Nano 预测的空间分辨温度场以及整体输运响应。该基准测试还确认，通用三维实现能够正确恢复

准一维构型下的典型一维解，为随后讨论的瞬态和完整三维模拟提供了基准。

3.2. 瞬态热光栅

接下来，利用瞬态热光栅（TTG）问题评估 JAX-Nano 的瞬态计算能力。该问题为涵盖广泛输运区间的非平衡声子输运提供了经典基准测试。在这一问题中，在原本均匀的介质上施加空间周期性温度扰动，随后该扰动通过声子输运和散射逐渐弛豫。瞬态响应在很大程度上取决于声子平均自由程与热光栅特征空间尺度之间的关系，因此，TTG问题非常适合用于考察从扩散输运到弹道输运的转变。

初始温度场设定为正弦扰动，

$$T(x,0) = T_0 + \Delta T \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right), \tag{78}$$

其中， T_0 为参考温度， ΔT 为初始温度振幅， L 为热光栅波长。相应的光栅波数为 $k = 2\pi/L$。沿输运方向施加周期性边界条件，使计算域表示热光栅的一个空间周期。温度扰动的无量纲形式表示为

$$\hat{T}(x,t) = \frac{T(x,t) - T_0}{\Delta T}, \tag{79}$$

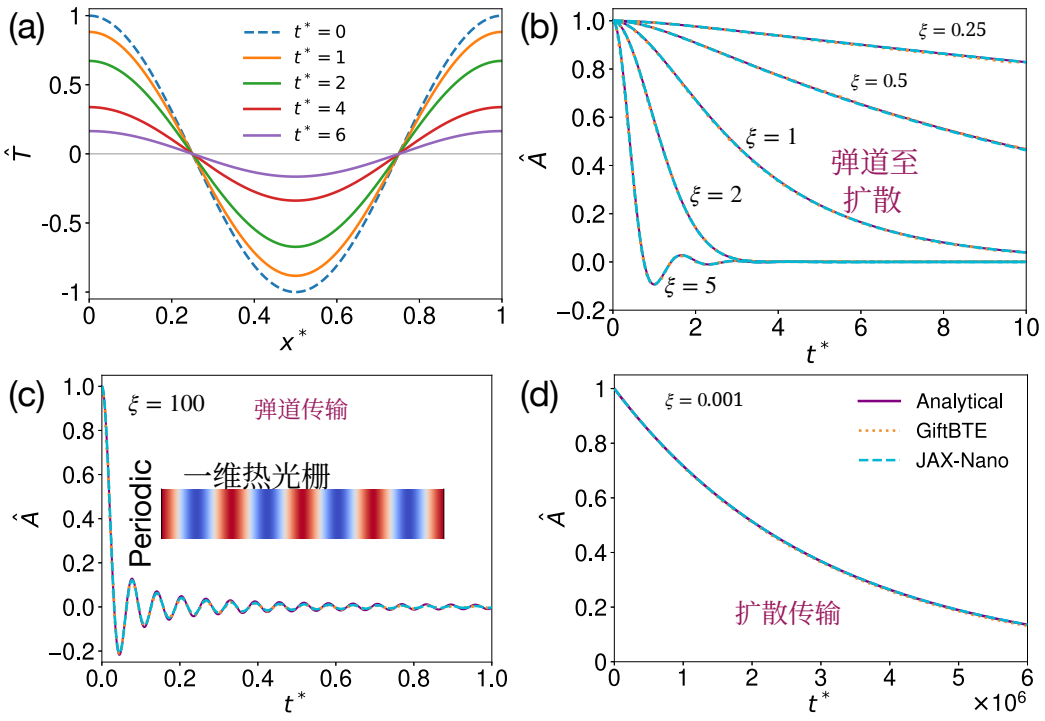

图 5：JAX-Nano 在弹道和扩散区间内求解一维瞬态热光栅（TTG）输运问题的验证。(a) 在选定的无量纲时间 t^* 下，无量纲温度分布 T 的演变；$\xi = 1$ 的结果由解析解给出。(b) 不同输运参数 ξ 下归一化光栅振幅 A 的衰减，展示了从弹道输运到扩散输运的转变。(c) 弹道极限（$\xi = 100$），其特征是光栅振幅快速阻尼振荡；插图展示了具有周期性边界的一维热光栅构型。(d) 扩散极限（$\xi = 0.001$），呈现单调热衰减。将 JAX-Nano 的预测与解析解及 GiftBTE 进行比较，结果表明其在各输运区间内吻合良好。

光栅的时间弛豫则由归一化幅值表征

$$\hat{A}(t) = \frac{A(t)}{A(0)}. \tag{80}$$

输运机制由无量纲参数表征

$$\xi = 2\pi \mathrm{Kn} = \frac{2\pi\Lambda}{L} = k\Lambda, \tag{81}$$

其中， Λ 为声子平均自由程，$\mathrm{Kn} = \Lambda/L$。因此， ξ 衡量声子平均自由程相对于温度变化的特征空间尺度 $1/k = L/(2\pi)$的大小。极限 $\xi \ll 1$ 对应扩散输运，而 ξ 增大则表明准弹道效应和弹道效应逐渐增强。无量纲时间定义为

$$t^* = \frac{t}{\tau}, \tag{82}$$

其中， τ 为声子弛豫时间。

TTG问题采用稳态计算中使用的相同有限体积声子玻尔兹曼输运方程框架进行模拟。由于温度场仅沿光栅方向变化，因此该问题被建模为一维输运，并使用100个有限体积单元进行离散化。采用单频带灰色声子模型，角度域则使用512个离散传播方向进行离散化。对于图5所示的结果，采用显式时间积分格式推进声子能量分布。该基准测试考察了空间温度场的演化，以及在从强扩散极限到强弹道极限的输运条件范围内，热光栅振幅的时间衰减。

图5(a)展示了在选定的无量纲时间 t^*下，根据解析解获得的无量纲温度分布 T 的空间演化。从给定的正弦温度分布出发，温度扰动的振幅随时间减小，同时保持其周期性空间结构。这些分布展示了热光栅的特征性弛豫过程，并为评估数值解提供了参考。

图5(b)展示了输运机制的影响，其中给出了 A 在 $\xi = 0.25$分别为0.5、1、2和5时的归一化光栅振幅。瞬态响应随 ξ发生显著变化，反映了声子散射与弹道传播之间的竞争。当 ξ相对较小时，响应趋近于扩散主导输运所特有的平滑衰减。随着 ξ 增大，弹道传播的重要性日益凸显，瞬态响应也逐渐偏离经典扩散行为。对于 ξ 这些中间值，JAX-Nano预测与参考解吻合良好，表明该数值公式能够捕捉从扩散、准弹道到弹道输运的连续转变。

图5(c)考察了 $\xi = 100$下的强弹道极限。在这种状态下，声子平均自由程远大于热光栅的特征空间尺度 $1/k$ 。因此，瞬态响应不再能用简单的单调扩散衰减来描述。相反，归一化光栅振幅呈现出快速衰减的振荡，这与声子弹道传播有关。JAX-Nano 准确再现了振荡行为及其衰减，展现了其捕捉

声子玻尔兹曼输运方程所描述的强非平衡输运行为的能力。

在相反的极限情况下，图5(d)考虑的是 $\xi = 0.001$。在此区间，声子平均自由程远小于热光栅的特征空间尺度，声子散射使输运趋向扩散极限。因此，归一化光栅振幅呈现平滑、单调的衰减。JAX-Nano预测与解析解和 GiftBTE 的结果均高度吻合，证实该数值公式能够正确再现预期的扩散行为。

综上，图5中的结果表明，JAX-Nano 能够准确解析宽广输运区间内的瞬态声子输运。同一数值框架捕捉到了扩散极限下平滑的热弛豫、穿越准弹道区间的转变，以及强弹道输运特有的阻尼振荡响应。这一验证补充了图4中的稳态交叉平面结果，并为随后将 JAX-Nano 应用于三维器件尺度模拟奠定了基础。

为进一步评估 JAX-Nano 的空间精度，使用在 $\xi = 100$ 和 $t^* = 0.01$ 处的准一维（quasi-1D）瞬态热光栅（TTG）基准测试开展了系统性的网格细化研究。声子输运采用具有单一声子带和 512 个离散传播方向的灰色玻尔兹曼输运方程（BTE）进行建模。初始温度扰动沿光栅方向呈正弦变化，同时在三维角空间中解析声子传播。在光栅方向的两端施加周期性边界条件，而施加镜面反射的绝热边界条件

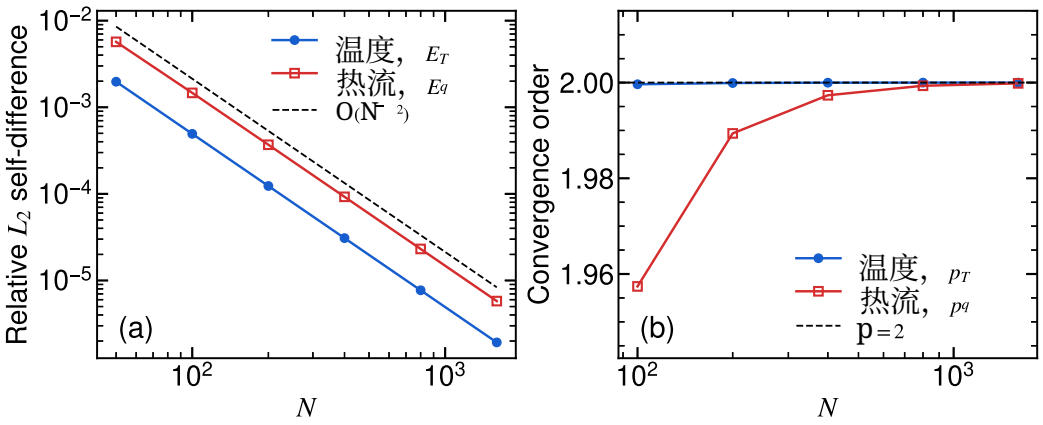

图 6：JAX-Nano 在 $\xi = 100$ 和 $t^* = 0.01$条件下瞬态热光栅（TTG）基准测试中的空间自收敛。(a) 相邻网格分辨率之间温度和热流的相对体积加权 L_2 自差异，并与二阶参考标度 $O(N^{-2})$ 进行比较。(b) 根据连续三种网格分辨率计算得到的温度和热流观测收敛阶。此处， N 表示每次比较所用的最细网格单元数。两种物理量均表现出近似二阶的空间自收敛。

传至四个侧壁。考虑七个依次加密的空间网格，其沿光栅方向分别包含 25、50、100、200、400、800 和 1600 个有限体积单元。所有网格分辨率下均采用相同的角度求积、物理参数、初始条件、边界条件和无量纲评估时间。

通过比较相邻网格上获得的温度和热流解来评估空间自收敛。使用体积加权平均算子，将细网格解守恒地限制到对应的粗网格上：

$$\mathcal{R}(\phi_{2N})_i = \frac{V_{2N,2i-1}\phi_{2N,2i-1} + V_{2N,2i}\phi_{2N,2i}}{V_{2N,2i-1} + V_{2N,2i}}, \tag{83}$$

其中，ϕ 表示温度 T 或沿光栅方向的热流分量$q_{\parallel}$，$V_{2N,\,j}$ 为细网格单元 j 的体积，而 $\mathcal{R}$表示守恒限制算子。空间网格采用嵌套且对齐的布局，使每个粗网格单元对应两个相邻的细网格单元。

定义包含N 个单元的网格上离散场 a 的体积加权 L_2 范数为

$$\|a\|_{2,V_N} = \left[\frac{\sum_{i=1}^{N} V_{N,i} a_i^2}{\sum_{i=1}^{N} V_{N,i}}\right]^{1/2}, \tag{84}$$

其中$V_{N,\,i}$ 表示粗网格单元 i的体积。

温度的相对体积加权 L_2 自身差异计算如下

$$E_T(N, 2N) = \frac{\|T_N - \mathcal{R}(T_{2N})\|_{2,V_N}}{\|T_N - \overline{T}_N\|_{2,V_N}}, \tag{85}$$

其中，体积平均温度为

$$\overline{T}_N = \frac{\sum_{i=1}^{N} V_{N,i} T_{N,i}}{\sum_{i=1}^{N} V_{N,i}}. \tag{86}$$

对于瞬态热光栅问题，以温度扰动而非绝对温度进行归一化是合适的，因为空间变化的热响应叠加在均匀的参考温度上。

类似地，热流的相对体积加权 L_2 自差定义为

$$E_q(N, 2N) = \frac{\left\| q_{\parallel,N} - \mathcal{R}(q_{\parallel,2N}) \right\|_{2,V_N}}{\left\| q_{\parallel,N} \right\|_{2,V_N}}. \tag{87}$$

这些度量量化的是不同网格分辨率下数值解之间的差异，而非相对于精确解的误差。两者均为无量纲量，因此可以直接比较温度和热流的自差。

根据三个连续的网格分辨率，观测到的空间收敛阶估算如下：

$$p_\phi(N) = \log_2 \left[\frac{E_\phi(N/4, N/2)}{E_\phi(N/2, N)} \right], \tag{88}$$

其中，$\phi \in \{T, q\}$ 和 N 分别表示每组三网格比较中最细网格的单元数。对于阶数为 p的渐近收敛空间离散，在时间离散误差和角度离散误差得到充分控制的前提下，均匀网格加密时，相对自差预计将近似按 N^{-p} 减小。

图6(a)展示了温度和热流的相对体积加权 L_2 自身差异随空间分辨率的变化。两者

均随网格加密而有规律地减小，并紧密遵循二阶参考结果标度 $O(N^{-2})$。

相应的观测收敛阶见图 6(b)。在所考察的分辨率范围内，温度收敛阶始终接近二阶，而随着网格加密，热流收敛阶趋近于二阶。这些结果表明，在强弹道 TTG 区域，温度场和热流均表现出近似二阶的空间自收敛。

结合图 4 和图 5 中分别呈现的稳态和瞬态基准比较，空间自收敛结果进一步佐证了 JAX-Nano 声子输运求解器的准确性和数值一致性。

3.3. 三维声子输运：验证与确认

为评估 JAX-Nano 在三维声子输运中的准确性和稳健性，我们在边长为 $L = 100$ 纳米的立方硅域中开展了一系列数值研究。底部（$y = 0$）和顶部（$y = L$）表面分别施加热化边界条件，并维持在 300 K 和 800 K；其余四个面则采用漫反射或镜面声子反射。研究涵盖稳态和瞬态输运，并特别关注网格结构、数值重构格式以及角度和频谱离散的影响。我们将数值预测与使用 GiftBTE 得到的结果进行系统比较；GiftBTE 采用基于迎风重构和最小二乘梯度计算的二阶空间离散。对于稳态计算，GiftBTE 使用合成迭代

格式加速收敛。通过这些比较，评估 JAX-Nano 在所研究配置下的准确性、数值一致性和稳健性。

除非另有说明，所有 JAX-Nano 模拟均采用带巴特–耶斯佩森（BJ）斜率限制器的二阶迎风重构。包括中心重构和无限制二阶迎风重构在内的替代重构格式，仅在数值格式对比中予以考察。

3.3.1. 具有漫反射边界条件的稳态输运

我们首先考察立方体硅域中的稳态声子输运：在顶部（800 K）和底部（300 K）表面施加热化边界条件，而在四个侧面施加漫反射条件。由此产生的温度梯度驱动声子在热边界和冷边界之间输运。声子玻尔兹曼输运方程采用 64 个角方向和单一谱带进行离散化。JAX-Nano 分别在结构化网格和非结构网格上进行模拟，以考察网格结构对数值预测的影响。将稳态温度和热流分布与使用 GiftBTE 获得的结果进行比较，后者作为数值参考结果。

图7展示了使用 JAX-Nano 在结构化网格和非结构化网格上获得的三维稳态温度分布，以及 GiftBTE 参考解。两项 JAX-Nano 模拟均采用带 Barth–Jespersen（BJ）限制器的二阶迎风重构。剖切可视化图揭示了内部区域的温度场，以及冷热表面之间的空间变化。

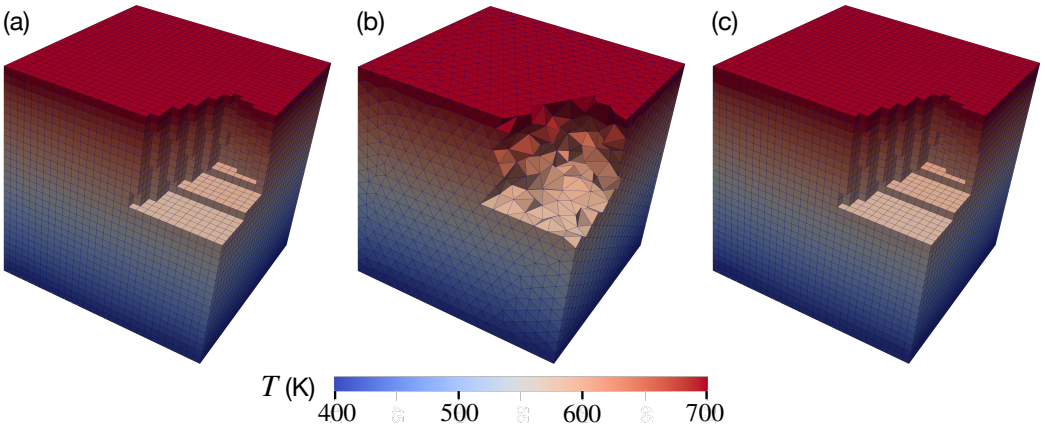

图7：比较立方硅域中的三维稳态温度分布，其中 $y = 0$ 和 $y = L$ 处为热化边界，其余四个面为漫反射边界。分别采用以下方法计算：(a) JAX-Nano在结构化网格上计算；(b) JAX-Nano在非结构化网格上计算；(c) GiftBTE在与(a)相同的结构化网格上计算。结构化网格包含 $30^3 = 27,000$ 个计算单元，非结构化网格则包含 22，789 个单元。两种 JAX-Nano 模拟均采用相同的数值框架，以评估网格结构的影响。剖视图展示了内部温度分布，三个算例使用相同的色标。结果高度吻合，表明 JAX-Nano预测在结构化网格和非结构化网格上的一致性良好，且与 GiftBTE参考结果吻合。

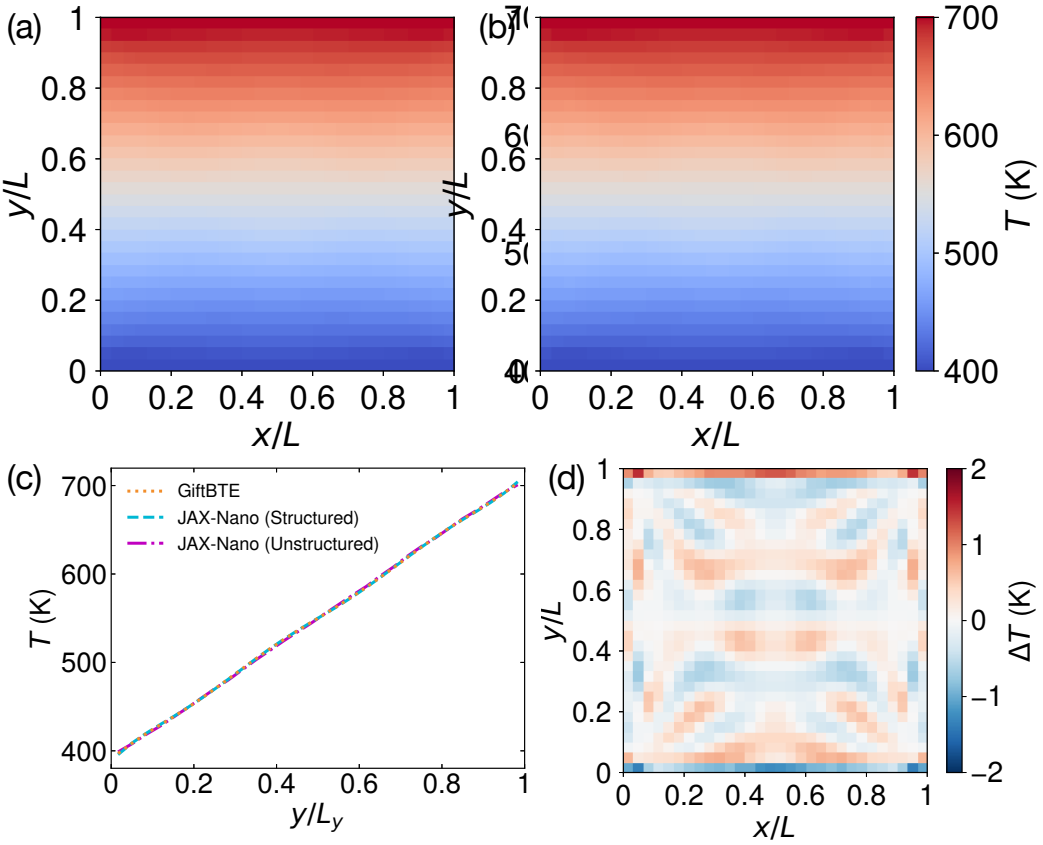

图8：在三维立方硅域中，$y = 0$ 和 $y = L$ 处采用热化边界条件、其余四个面采用漫反射时稳态温度分布的比较。（a）GiftBTE在结构化网格上预测的中心横截面温度分布。（b）JAX-Nano在相同结构化网格上预测的相应温度分布。（c）使用GiftBTE和JAX-Nano分别在结构化网格和非结构化网格上得到的中心线温度分布。中心线由 $x = z = L/2$定义，其中 y 从底部（300 K）表面延伸至顶部（800 K）表面，且两个表面均采用热化边界条件。（d）中心横截面上结构化网格JAX-Nano与GiftBTE解之间的局部温差$\Delta T = T_{\text{JAX-Nano}} - T_{\text{GiftBTE}}$。结果高度一致，表明JAX-Nano在结构化网格和非结构化网格上的预测结果与GiftBTE参考解一致。

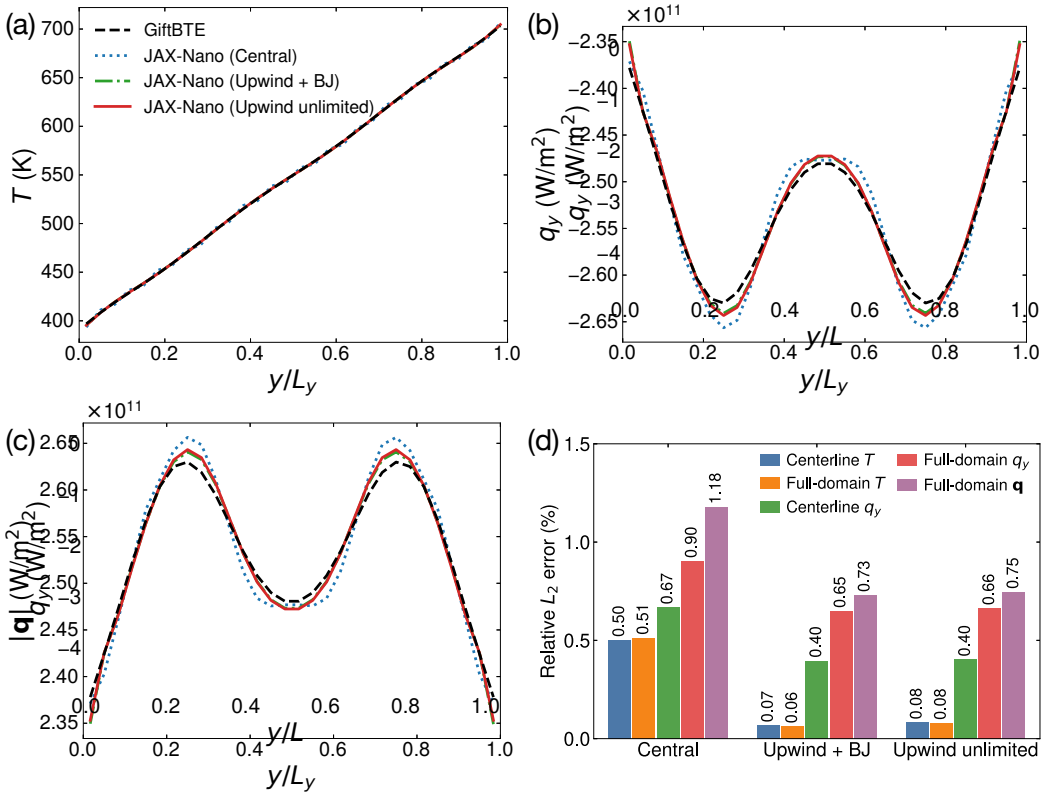

图 9：对于在 $y = 0$ 和 $y = L$ 处采用热化边界条件、其余四个面采用漫反射的三维立方硅域，比较使用 GiftBTE 和 JAX-Nano 中实现的三种空间重构格式得到的稳态温度与热流预测。结构化网格包含$30^3 = 27,000$ 个计算单元。(a) 区域中心线上的温度 T 。(b) 中心线上的带符号热流分量 q_y 。(c) 中心线上的热流大小 $|\mathbf{q}|$ 。(d) 中心线温度、全域温度、中心线 q_y、全域 q_y以及全域热流矢量$\mathbf{q}$的相对误差。JAX-Nano 的三种格式包括中心重构、采用 Barth–Jespersen（BJ）限制器的二阶迎风重构，以及无界二阶迎风重构。中心线定义为 $x = z = L/2$，其中 y 从底部热化边界变化至顶部热化边界。GiftBTE 用作所有相对误差计算的参考解。

三种模拟均呈现相似的温度分布，温度从热边界附近的高温区域逐渐过渡到冷边界附近的低温区域。尽管网格连通性和单元几何形状有所不同，结构化与非结构化 JAX-Nano 解呈现一致的温度模式，且与 GiftBTE 符合良好。这些结果展现了 JAX-Nano 在不同网格配置上处理三维声子输运的能力。

图 8 提供了更详细的定量比较。图 8(a) 和图 8(b) 分别展示了使用 GiftBTE 和 JAX-Nano 在同一结构化网格上得到的中心横截面温度分布。两种数值解呈现出几乎相同的空间温度变化。图 8(c) 中的中心线温度剖面进一步证实了 GiftBTE 与 JAX-Nano 的结构化及非结构化网格数值解之间的一致性，三条曲线在整个计算域内几乎重合。为考察局部差异，图 8(d) 展示了结构化网格 JAX-Nano 数值解与 GiftBTE 数值解之间的温度差异。在中心横截面上，差异基本保持在 ± 2 K 以内；与施加的 500 K 温差相比，这一差异很小。随空间变化的偏差表明数值解之间存在细微差别，但整体温度分布得到了稳定再现。

除了空间温度分布外，还采用相同的三维立方构型，研究数值重构格式对温度和热流预测精度的影响。结构化计算域被离散为 $30 \times 30 \times 30 = 27{,}000$ 个计

算单元。JAX-Nano 中考虑了三种重构格式：中心重构、采用 Barth–Jespersen（BJ）限制器的二阶迎风重构，以及无限制二阶迎风重构。如图 9 所示，通过中心线分布以及沿中心线和整个计算域计算的相对 L_2 误差，将数值预测与 GiftBTE 进行比较。

图 9(a)比较了连接两个热化边界的中心线上的稳态温度分布。三种 JAX-Nano 重构格式均能很好地再现 GiftBTE 温度分布，整个计算域内的曲线几乎重合。图 9(b)和图 9(c)分别展示了带符号热流分量 q_y 和热流大小 $|\mathbf{q}|$。三种格式均能捕捉到 GiftBTE 参考解中总体的空间变化，包括两个局部极小值和 q_y处的中间极大值，以及热流大小中相应的极值。不过，预测的热流分布存在明显差异。中心重构与 GiftBTE 参考结果的偏差较大，尤其是在局部极值附近；而两种迎风重构方案生成的曲线则更贴近参考解。BJ 限制迎风格式和无限制迎风格式的分布几乎重合，表明在此配置下，限制器对预测热流的影响很小。

为量化这些差异，相对 L_2 误差定义为

$$\varepsilon_{L_2} = \frac{\|u_{\text{JAX-Nano}} - u_{\text{GiftBTE}}\|_2}{\|u_{\text{GiftBTE}}\|_2} \times 100\%, \tag{89}$$

其中， u 表示在指定的计算 T单元集合上求得的温度、 q_y带符号热流分量或热流矢量 $\mathbf{q}$,

对于热流矢量， L_2 范数包含全部三个笛卡尔分量。

图 9(d) 总结了三种重构格式的相对 L_2 误差。对于中心重构，中心线和全域温度误差分别为 0.50% 和 0.51%；而对于 BJ 限制迎风重构，相应误差则降至 0.07% 和 0.06%。无限制迎风重构也得到相近的小温度误差，两种比较下均为 0.08%。

对于热流分量 q_y，中心重构沿中心线和全域的相对误差分别为 0.67% 和 0.90%。采用 BJ 限制迎风重构后，这些误差分别降至 0.40% 和 0.65%；采用无限制迎风重构后，则分别降至 0.40% 和 0.66%。中心重构、BJ 限制迎风重构和无限制迎风重构的全域热流矢量误差分别为 1.18%、0.73% 和 0.75%。

总体而言，这些结果表明，JAX-Nano 能够在结构化网格和非结构化网格上准确复现三维稳态声子输运，其温度分布与 GiftBTE参考解高度吻合。中心横截面上的温度差异很小，且中心线分布几乎重合，这证实了不同网格配置下数值预测的一致性。重构格式对比进一步表明，尽管三种格式均能捕捉整体温度和热流分布，但与中心重构相比，二阶迎风重构的精度显著更高，尤其是在热流预测方面。BJ 限制格式与无限制迎风格式的精度相当，

其中，BJ 限制格式的全域热流误差略小，并通过斜率限制对重构值提供了额外控制。这些发现证实了 JAX-Nano 在所研究的三维稳态构型中的准确性和数值一致性，并支持在后续声子输运模拟中采用 BJ 限制的二阶迎风重构。

3.3.2. 镜面边界条件下的稳态输运

为进一步评估 JAX-Nano 对声子-边界相互作用的处理，研究了三维硅立方体中的稳态输运。该立方体的四个侧面采用镜面反射，并使用包含 $30^3 = 27{,}000$ 个计算单元的结构化网格、64 个离散声子传播方向和单个谱带。底部和顶部表面的热化边界条件与漫反射情形保持不变，从而能够在相同热驱动条件下考察侧面边界处理的影响。

图10比较了使用 JAX-Nano 和 GiftBTE 获得的温度与热流预测结果。如图10(a)所示，温度主要沿 y 方向变化，而横向变化可以忽略不计。JAX-Nano 与 GiftBTE 之间的温差在内部区域始终较小，仅在热化边界附近出现局部偏差，如图10(b)所示。图10(c)中的中心线温度剖面显示，两种求解器给出的预测结果几乎无法区分。

图10(d)进一步比较了沿垂直中心线的带符号热流分量 q_y 和热流大小 $|\mathbf{q}|$ 。这两个量

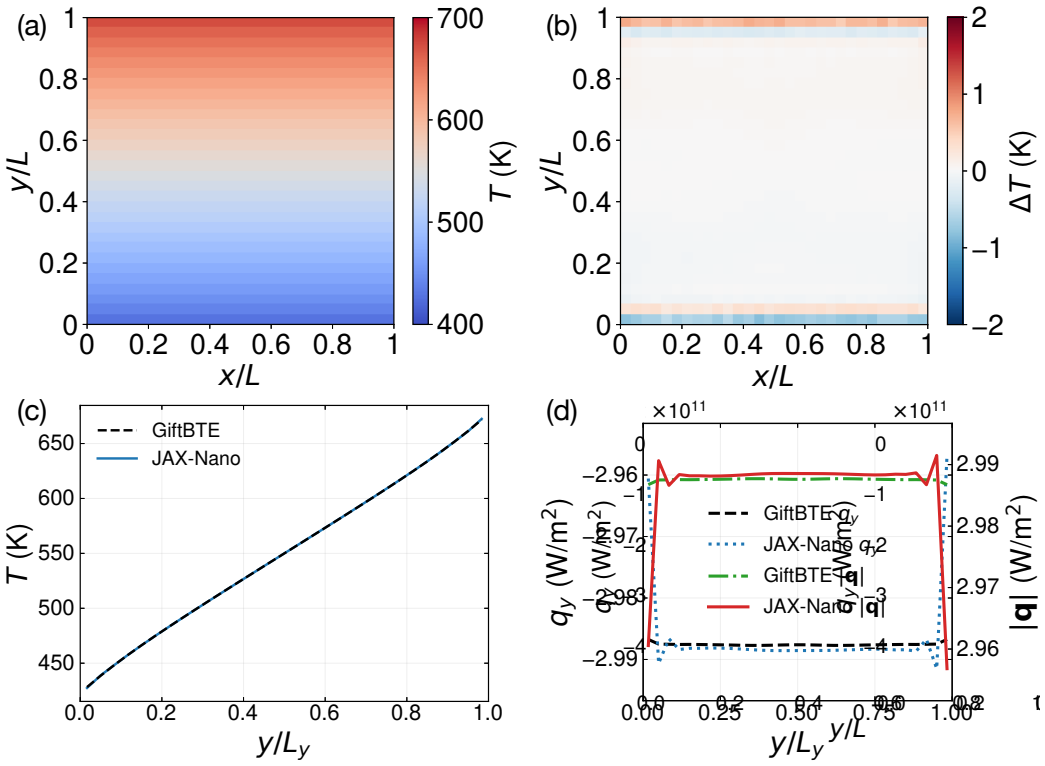

图10：对 JAX-Nano 与 GiftBTE 进行验证：模拟硅立方体中的三维声子输运，其中 $y = 0$ 和 $y = L_y$ 处设有热化边界，其余四个面设为镜面反射。(a) JAX-Nano 在中心 x–y 平面（$z = L/2$）上预测的温度分布。(b) 同一平面上的温差 $\Delta T = T_{\text{JAX-Nano}} - T_{\text{GiftBTE}}$。(c) 沿垂直中心线（$x = z = L/2$）的温度分布对比。(d) 沿同一中心线的带符号热流分量 q_y（左轴）和热流大小 $|\mathbf{q}|$（右轴）对比。结果表明，JAX-Nano 与 GiftBTE 在温度和热流方面均高度一致，仅在边界附近存在微小差异。

在内部区域基本保持均匀，仅在热化边界附近出现局部变化。 q_y 的负值表明热量从温度较高的上表面向温度较低的底面传输。尽管 JAX-Nano 与 GiftBTE 的热流幅值存在细微差异，但整体分布吻合良好。这些结果表明，JAX-Nano 能够在三维几何结构中复现具有镜面边界反射的稳态声子输运。

3.3.3. 具有漫反射和镜面反射边界条件的瞬态输运

为评估 JAX-Nano 的瞬态输运能力，我们模拟了边长为 $L = 100$ 纳米的三维硅立方体中的声子热传输。顶部（$y = L$）和底部（$y = 0$）表面分别维持在 800 K 和 300 K。研究考虑了漫反射和镜面反射两种声子边界散射条件。计算域离散为 27,000 个空间单元，包含 64 个离散声子传播方向和一个谱带。显式和隐式时间积分方案采用的时间步长分别为 $\Delta t = 3.0 \times 10^{-13}$ s 和$\Delta t = 1.5 \times 10^{-12}$ s。因此，隐式方案允许采用比显式模拟大五倍的时间步长。

图11比较了使用 JAX-Nano 的显式和隐式形式获得的瞬态温度和 y 方向热流分布，以及采用显式时间积分获得的相应 GiftBTE 解。沿 $t = 30$ 处的中心线提取 90 、 150 、 210 和 330 皮秒时的剖面。图 11(a) 和 (b) 展示了漫反射边界条件下的温度和热流分布，而图11(c)和(d)

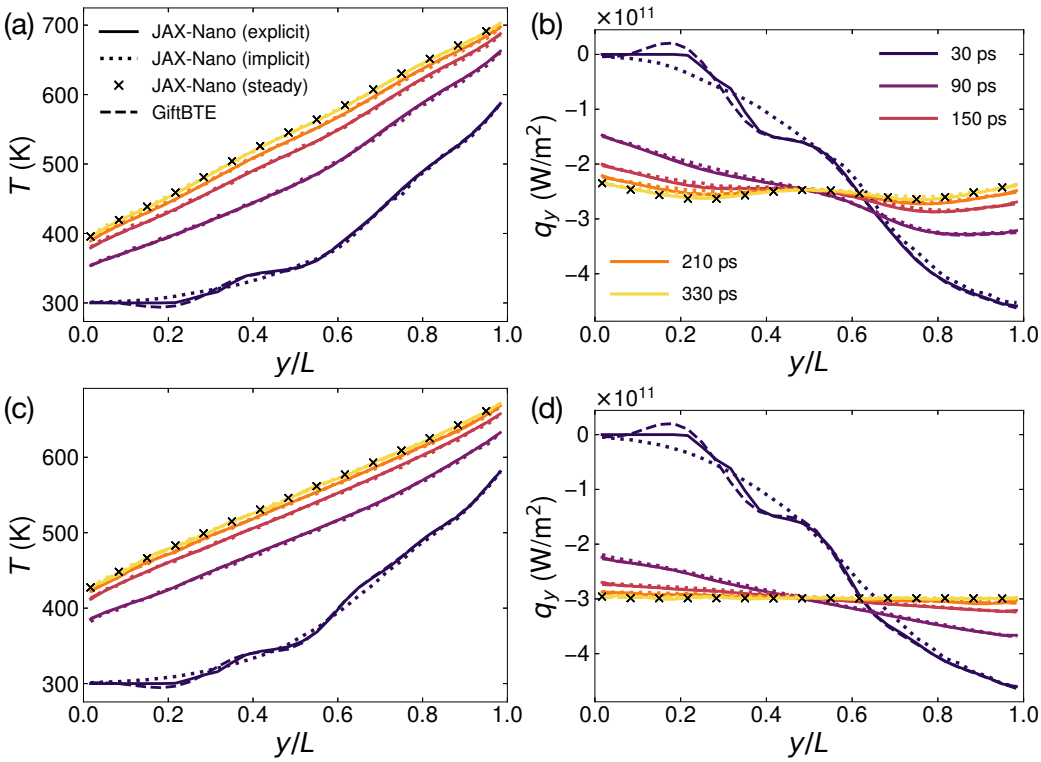

图11：在三维硅立方体中，比较 JAX-Nano 采用显式和隐式时间积分预测的瞬态温度与热流分布，以及 GiftBTE 的预测结果。(a) 漫反射边界条件下的温度和 (b) y 方向热流；(c) 镜面反射边界条件下的温度和 (d) y 方向热流。顶部（$y = L$）和底部（$y = 0$）表面分别保持在 800 K 和 300 K，区域长度为 $L = 100$ 纳米。沿位于 $t = 30$、90、150、210 和 330 皮秒时的中心线提取剖面。实线、点线和虚线分别表示 JAX-Nano 显式、JAX-Nano 隐式和 GiftBTE 解，黑色十字表示 JAX-Nano 稳态解。所有模拟均采用 27,000 个空间单元和 64 个离散声子传播方向。

展示镜面边界条件下的相应结果。

对于两种边界散射条件，显式和隐式 JAX-Nano 公式均与 GiftBTE 总体吻合，并再现了温度和热流分布的瞬态演变。尽管时间步长不同，两种时间积分方案所捕捉到的输运行为相似。数值解之间的差异在较早时刻更为明显，尤其体现在热流分布曲线上。随着模拟推进，温度和热流分布逐渐趋近相应的稳态解（以黑色十字标示）。这些对比表明，JAX-Nano 能够通过显式和隐式时间积分，捕捉不同边界散射条件下的瞬态声子输运。

3.3.4. 多个谱带下的非灰声子输运

为验证 JAX-Nano 模拟非灰声子输运的能力，针对不同数量的光谱带进行稳态模拟： $N_b = 2$，4，8，和 16。计算域为边长为 $L = 100$ 纳米的三维硅立方体。底面和顶面分别保持在 300 K 和 800 K，而四个侧面则施加漫反射声子反射。计算域划分为 27，000 个空间单元，并采用 64 个离散声子传播方向。将 JAX-Nano 的结果与使用 GiftBTE 在相同谱带、空间和角分辨率下获得的结果进行比较。

图 12 比较了不同谱带数量下硅立方体中心线上的稳态温度和 y 方向热流分布。如图 12(a) 所示，温度分布

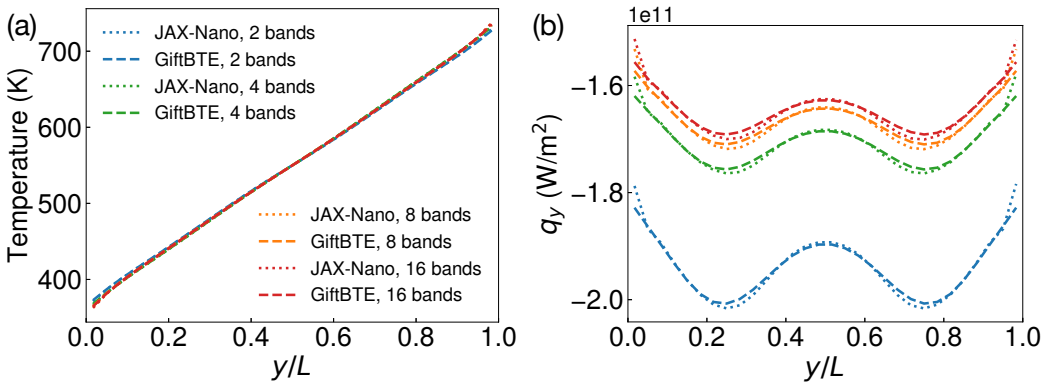

图 12：使用 JAX-Nano 和 GiftBTE 得到的不同谱分辨率下的稳态非灰声子输运预测结果对比（$N_b = 2$，4，8，16，其中N_b 表示光谱带数量）。三维硅立方体中心线上的温度（a）和 y方向热流分布（立方体边长为$L = 100$ 纳米）。底部（$y = 0$）和顶部（$y = L$）表面分别保持在 300 K 和 800 K，四个侧面则施加漫反射声子反射边界条件。所有模拟均使用 27，000 个空间单元和 64 个离散声子传播方向。点线和虚线分别表示 JAX-Nano 和 GiftBTE 的预测结果。

对频谱分辨率的灵敏度较弱，采用 2–16 个谱带获得的廓线几乎重合。在整个计算域内，JAX-Nano预测与相应的 GiftBTE 结果高度一致，表明在所研究的谱离散化下，温度预测具有一致性。

相比之下，图 12(b) 所示的热流分布表现出更明显的频谱分辨率依赖性。与采用更多能带的配置相比，双能带配置产生了显著不同的热流廓线。随着谱带数量增加，相邻热流预测之间的差异总体减小，其中 8 能带和 16 能带的解表现出较高的一致性。这一行为表明，热流预测正趋向于光谱收敛。热流对频谱分辨率表现出更强的依赖性，反映了其对不同谱带中声子输运性质表征的灵敏度。尽管存在这些差异，JAX-Nano 在每种频谱分辨率下都能准确复现相应的 GiftBTE 热流分布，包括其沿中心线的空间变化。

总体而言，这些结果表明，在所研究的频谱分辨率范围内，JAX-Nano 始终能够复现 GiftBTE 对稳态非灰声子输运的预测。随着频谱分辨率提高，热流差异进一步减小，这也表明解正趋于光谱分辨解。结合前述单光谱带验证案例，这些发现证明了 JAX-Nano 用于涉及多个光谱带的三维非灰声子输运的准确性和适用性。

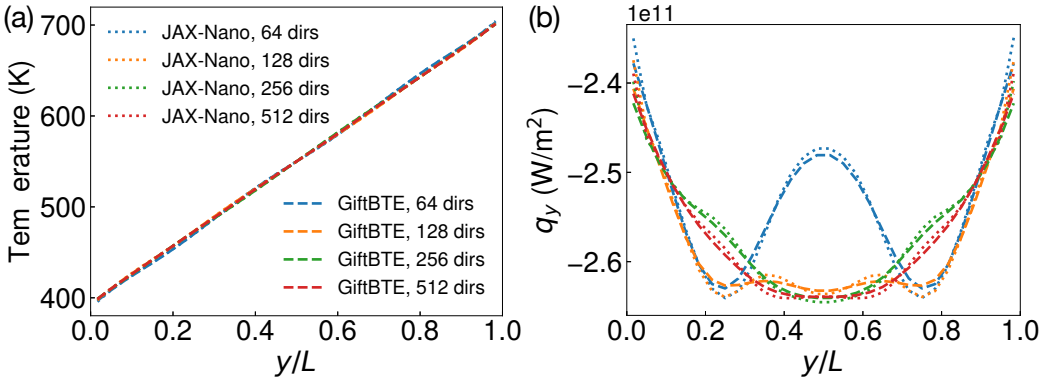

图13：使用 JAX-Nano 和 GiftBTE 得到的稳态声子输运预测对角分辨率的依赖关系。(a) 温度和 (b) y方向热流沿边长为 $L = 100$ 纳米的三维硅立方体中心线的分布。考虑了四种角分辨率：$N_\Omega = 64$、128、256 和 512，其中 N_Ω 表示离散声子传播方向的数量。底部（$y = 0$）和顶部（$y = L$）表面分别保持在 300 K 和 800 K，四个侧面则施加漫反射声子反射。所有模拟均采用 27,000 个空间单元和单个谱带。点线和虚线分别表示 JAX-Nano 和 GiftBTE 的预测结果。

3.3.5. 角分辨率与收敛

通过改变声子传播离散方向的数量，研究角度离散对 JAX-Nano 准确性和收敛性的影响。针对上述三维硅立方体，考察了四种角分辨率：$N_\Omega = 64$、128、256 和 512。所有模拟均采用 27,000 个空间单元、单频带，以及 JAX-Nano 中结合 Barth–Jespersen限制器的二阶迎风重构。底面和顶面分别维持在 300 K 和 800 K，而四个侧面则施加漫反射声子反射。

为评估两种数值实现的一致性，纳入了相应的 GiftBTE 解进行比较。

图13比较了不同角分辨率下，立方域中心线上的稳态温度和 y 方向热流分布。如图13(a)所示，温度分布对角分辨率的灵敏度较低。采用 64–512 个方向得到的预测结果几乎重合，且 JAX-Nano 在整个计算域内都能很好地再现相应的 GiftBTE 结果。这表明，在所研究的范围内，温度分布对角度离散的敏感性相对较低。

相比之下，图13(b)中的热流分布对角分辨率的依赖性更为显著。在 $N_\Omega = 64$处， y方向的热流呈现明显的空间变化，包括域中心附近一个较为显著的局部最大值。将角分辨率提高到 128 个方向后，热流廓线发生显著变化；而采用 256 和 512 个方向得到的预测结果则逐渐趋于一致。这些结果表明，与温度相比，热流需要更精细的角度离散才能达到相当的数值收敛程度。

温度与热流表现出不同的收敛行为，这可归因于二者对声子角分布的依赖方式不同。温度由角度平均的能量矩决定，而热流则涉及声子分布的方向加权矩。因此，对温度影响相对较小的角度离散误差，可能会导致热流预测出现更明显的差异。这种灵敏度在存在

漫反射边界散射时尤为重要，因为它会在不同传播方向之间重新分配声子能量。

尽管角分辨率会带来差异，JAX-Nano 和 GiftBTE 在每个对应的角度离散下预测的热流分布曲线仍高度吻合。两个求解器之间的一致性，以及连续角分辨率之间差异的逐渐减小，证明了 JAX-Nano 角度离散的一致性及其在三维稳态声子输运中的收敛特性。这些结果还强调，在为声子 BTE 模拟选择角分辨率时，应独立于温度收敛性评估热流收敛性。

4. 三维鳍式场效应晶体管热输运

4.1. 单鳍晶体管

为评估 JAX-Nano 模拟复杂三维几何结构中声子输运的能力，我们研究了一个硅单鳍片场效应晶体管（FinFET），如图 14(a) 所示。计算域由矩形衬底构成，其上支撑着一个垂直取向的硅鳍，鳍片上部附近设有局部热产生区域。边界条件和热源强度采用 Hu 等人所使用的设置。[37] 与金属电极（源极和漏极）接触的表面，以及远离加热区域的衬底边界，施加热化边界条件；边界温度固定为 T =300 K，以表示室温环境。与介电材料接触的表面则规定为漫反射边界条件

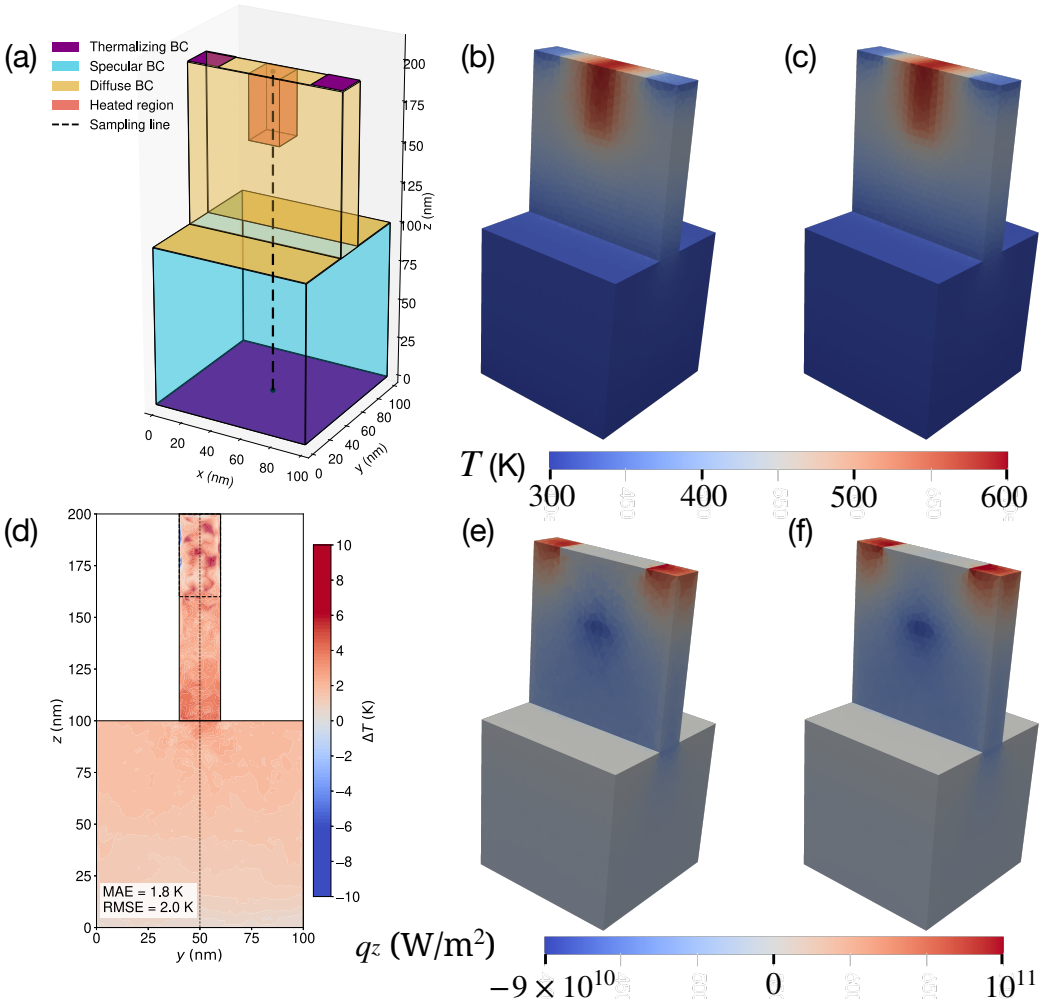

图14：硅鳍式场效应晶体管几何结构中的三维声子玻尔兹曼输运模拟，以及 JAX-Nano 与 GiftBTE 的对比。(a) 计算几何、边界条件、加热区域和垂直采样线。(b,c) 分别为 JAX-Nano 和 GiftBTE 预测的三维温度分布。(d) 两个求解器在中心 yz 平面上的温度差，平均绝对误差（MAE）为 1.8 K，均方根误差（RMSE）为 2.0 K。垂直虚线表示鳍中心线（$y = 50$ 纳米），水平虚线表示加热区域的下边界（$z = 160$ 纳米）。(e,f) 分别为 JAX-Nano 和 GiftBTE 预测的三维垂直热流分布，q_z。

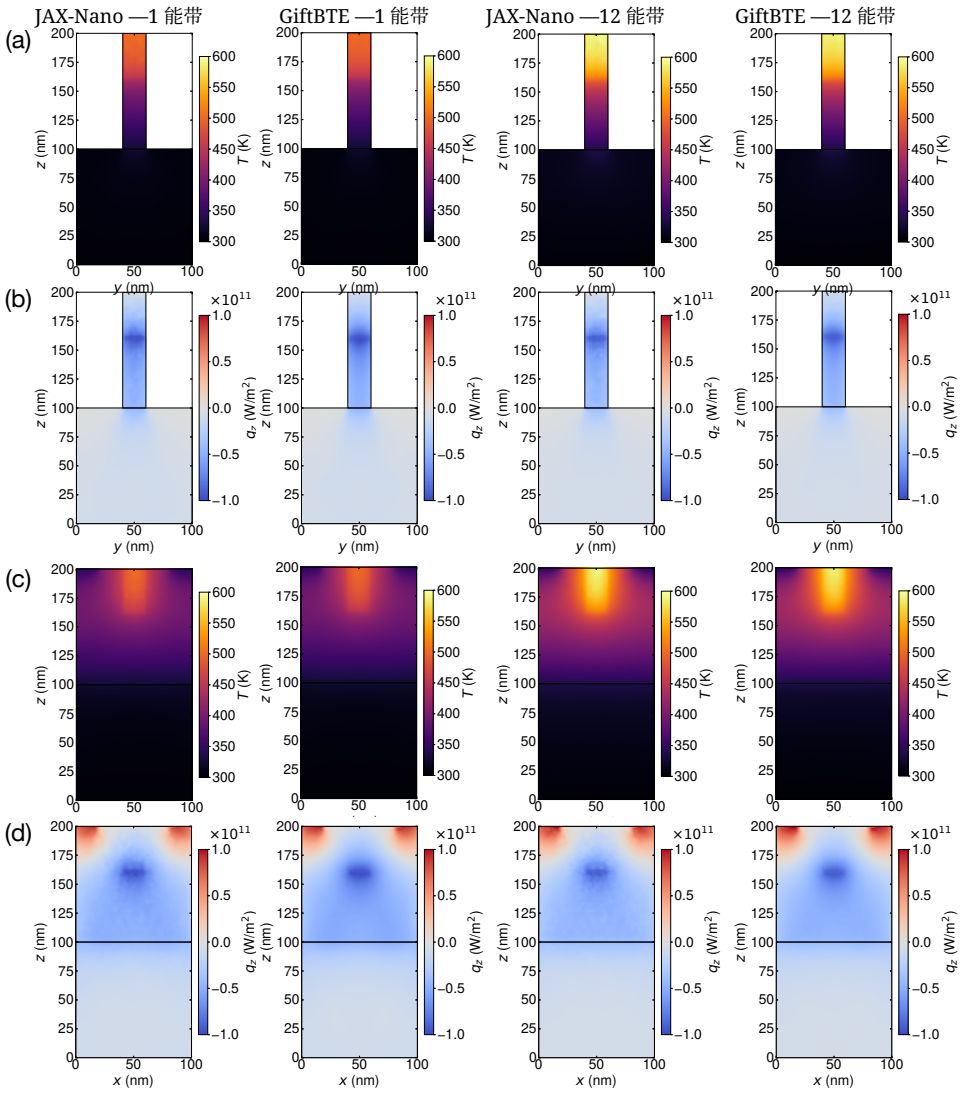

图 15：使用包含 45,804 个单元和 128 个离散方向的非结构网格，对硅鳍式场效应晶体管几何结构中的三维声子玻尔兹曼输运进行计算，比较 JAX-Nano 和 GiftBTE 预测的温度与垂直热流分布。结果分别针对单频带和 12 能带声子模型给出。四行分别显示：(a) 中央 yz 平面（$x = 50$ 纳米）上的温度 T；(b) 同一平面上的垂直热流 q_z；(c) 中央 xz 平面（$y = 50$ 纳米）上的温度 T；以及 (d) 同一平面上的垂直热流 q_z。

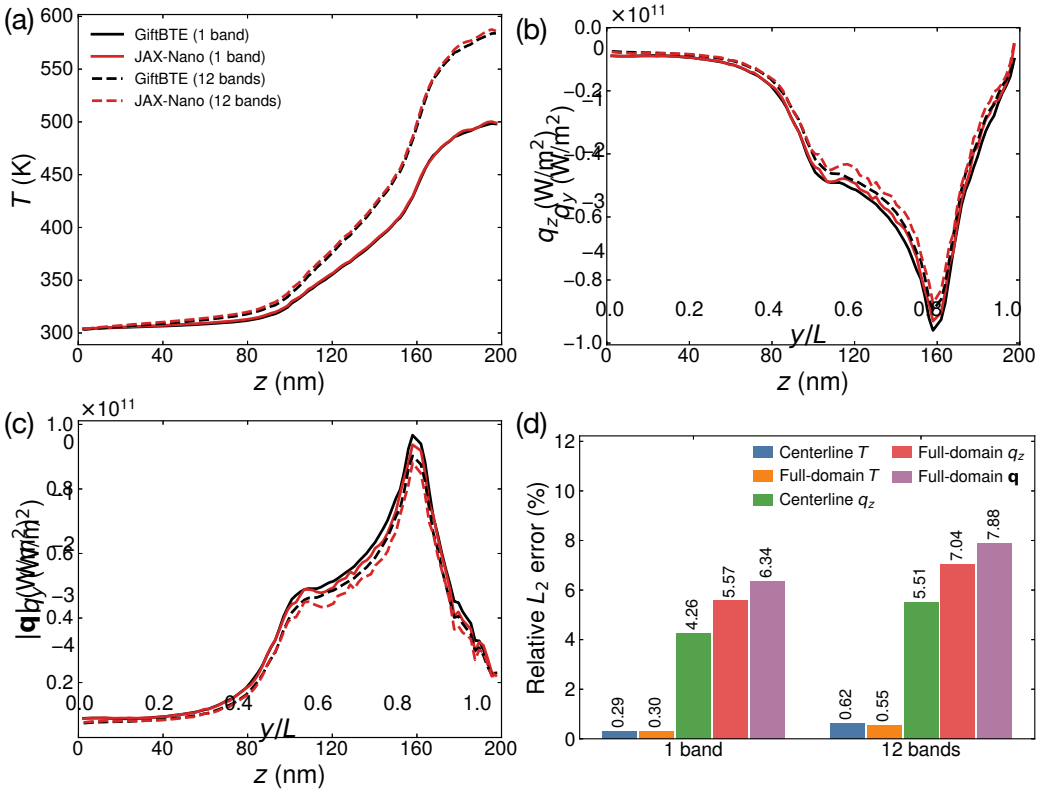

图16：使用包含45,804个单元和128个离散方向的非结构网格，对三维硅 FinFET 几何结构中的声子玻尔兹曼输运进行 JAX-Nano 与 GiftBTE 预测结果的比较。结果分别展示了单频带和12 能带声子模型。(a) 沿垂直中心线的温度分布 T 。(b) 沿同一中心线的垂直热流分布 q_z 。(c) 沿中心线的热流大小分布$|\mathbf{q}|$ 。实线和虚线分别表示单频带和12带模型，黑线和红线分别表示 GiftBTE 和 JAX-Nano预测。(d) JAX-Nano 与 GiftBTE 在中心线温度、全域温度、中心线垂直热通量、全域垂直热流以及全域热流矢量方面的相对 L_2 误差。

层，而其余边界则设为镜面反射，以表示相邻器件之间的对称性。在局部热点 $\Omega_{\mathrm{hot}} = [40, 60] \times [40, 60] \times [160, 200]\,\mathrm{nm}^3$，（其中 $(x,\ y,\ z) \in \Omega_{\mathrm{hot}}$）内施加均匀的总体积热生成率 $\sum_{b=1}^{N_b} \dot{Q}_b = 10^{19}\ \mathrm{W\ m^{-3}}$。计算域采用包含 45,804 个单元的非结构化四面体网格进行离散，角度域则由 128 个离散方向表示。本文考虑单频带和 12频带声子输运模型，以考察频谱分辨率对预测热响应的影响。

图14(b,c)对比了 JAX-Nano 和 GiftBTE 预测的三维温度分布。两种求解器均捕捉到硅鳍上部中央附近的局部高温区域，这是由指定的体积热生成造成的。鳍片上部角落处的温度逐渐降低，这与相邻热化边界（温度维持在 300 K）产生的冷却作用一致。沿鳍片高度方向也观察到显著的温度梯度，而下方衬底的温度则相对接近指定的边界温度。图14(e,f)所示的相应垂直热流分布呈现相似的空间模式，表明两者对热量从加热区域向衬底输运的预测一致。

为量化两种数值解之间的一致性，图 14(d) 展示了中央 yz 平面上的温差。相较于整体温度变化，该差异仍然较小，平均绝对误差（MAE）为 1.8 K，均方根误差（ RMSE ）为 2.0 K。这些结果表明，对于所研究的三维鳍式场效应晶体管结构，JAX-Nano 能够准确复现 GiftBTE 预测的

GiftBTE 预测的温度分布对于所考虑的三维鳍式场效应晶体管配置具有良好的准确性。

图15对温度和热流的空间分布进行了更详细的比较。前两行展示了中心 yz 平面（$x = 50$ 纳米）上的温度和垂直热流分布，后两行则展示了中心 xz 平面（$y = 50$ 纳米）上的相应场。对于单带模型和12带模型，JAX-Nano与GiftBTE生成的空间分布都高度吻合。局部体积热生成使硅鳍上部中心附近形成明显的高温区域。相比之下，鳍片上部边角附近的温度显著较低，这与相邻表面维持在300 K的热化边界条件一致。局部冷却与内部热生成共同作用，使鳍片上部附近形成较大的温度梯度。温度朝下方衬底逐渐降低，并始终相对接近规定的边界温度。与单带模型相比，12带模型预测的峰值温度更高，凸显了声子谱性质对纳米尺度结构中热输运的影响。

相应的垂直热流分布揭示了 FinFET 几何结构内热能的空间重新分布。q_z 的负值在鳍片内部占主导地位，表明热量总体上向下输运至衬底。在加热区域和鳍片上部边界附近，可以观察到q_z 的大小和方向发生局部变化，这反映了体积热生成、边界散射、

以及三维声子输运的综合影响。这些变化在温度梯度较大的区域附近尤为明显。尽管光谱表示存在差异，JAX-Nano 仍能针对两种能带模型重现 GiftBTE 预测的主要热流特征，包括向下热输运的空间分布，以及鳍片上部附近的局部热流变化。

图16(a–c)对硅鳍式场效应晶体管垂直中心线上的温度、垂直热流和热流大小进行了定量比较。通过在以 $x = y = 50$ 纳米为中心的圆柱形采样区域内进行空间平均，再沿 z 方向插值，得到这些分布。对于单带模型和12带模型，JAX-Nano 与 GiftBTE 预测的温度分布都非常接近。温度从衬底向鳍片上部的加热区域逐渐升高，这反映了局部体积热生成以及热能通过声子输运重新分布的过程。12带模型预测的温度高于单带模型，与图15所示的空间分布一致。

图 16(b) 中的垂直热流剖面在鳍片内呈现出明显的负值，峰值幅度出现在距 $z = 160$ 纳米附近，约对应于加热区域的下边界。这些负值表明热量向下输运至衬底。图 16(c) 中的热流幅值分布曲线显示了沿中心线的相应变化。两种求解器都再现了这些分布曲线的主要特征，包括与加热区域相关的强热流位置。与温度分布相比，热流预测中的差异更为明显，尤其是

在空间变化剧烈的区域附近。

JAX-Nano 与 GiftBTE 之间的相对 L_2 误差汇总于图 16(d)。对于单带模型，中心线和全域温度误差分别为 0.29% 和 0.30%；而对于 12 带模型，这两个误差分别为 0.62% 和 0.55%。对于单带模型，相应的中心线 q_z、全域 q_z和全域热流矢量误差分别为 4.26%、5.57% 和 6.34%；对于 12 带模型，这些误差分别为 5.51%、7.04% 和 7.88%。较大的热流差异表明，与温度场相比，热流场能够更严格地评估两个求解器之间的一致性。尽管如此，总体上，两者仍表现出良好的一致性，表明 JAX-Nano 能够复现 GiftBTE 对两种谱模型所预测的主要热输运特性。

总体而言，这项验证表明，JAX-Nano 能够利用非结构计算网格，重现三维硅鳍式场效应晶体管的宏观温度响应和空间分辨热流特性。对于单能带模型和 12带模型，JAX-Nano 的结果均与 GiftBTE 高度吻合，这支持了所提出的图形处理器加速声子玻尔兹曼输运方程框架适用于复杂纳米尺度热输运问题。

4.2. 双鳍晶体管

本文进一步采用双鳍硅场效应晶体管（鳍式场效应晶体管）结构，研究 JAX-Nano 在三维纳米尺度热输运中的适用性。该基准测试涉及局部体积热生成、多种声子边界散射条件，以及具有不同拓扑结构和空间分辨率的计算网格。稳态——

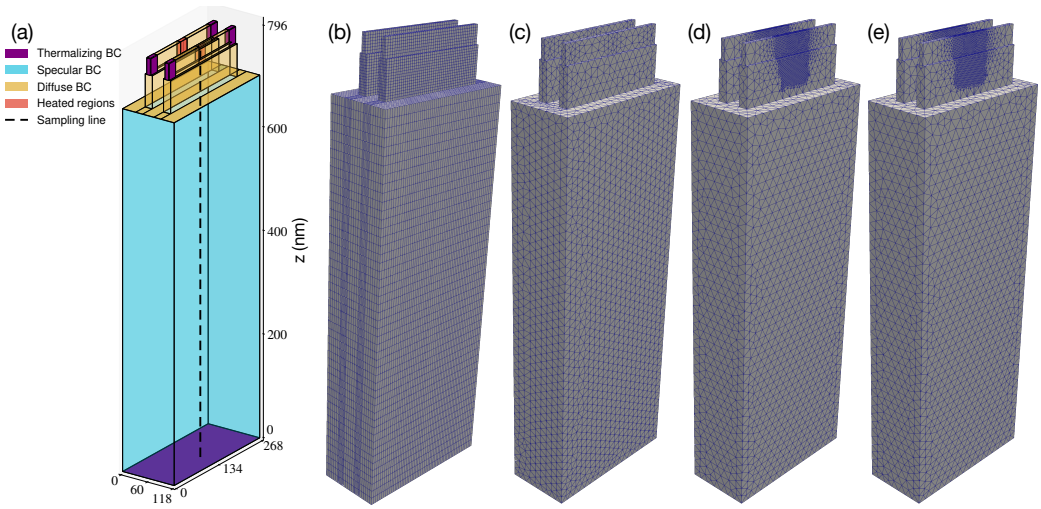

图17：双鳍硅 FinFET 配置的几何结构、边界条件和计算网格。(a) 三维器件几何结构，显示了热化、镜面反射和漫反射边界条件、局部体积发热区域，以及用于定量比较的采样线。(b) JAX-Nano 使用的结构化六面体网格（99,694 个单元）。(c) JAX-Nano 使用的粗略非结构化四面体网格（33,685 个单元）。(d) JAX-Nano 使用的精细非结构化四面体网格（54,839 个单元）。(e) GiftBTE 使用的非结构化四面体网格（55,040 个单元）。这些计算网格均对同一器件几何结构进行离散，但单元拓扑和空间分辨率各不相同。

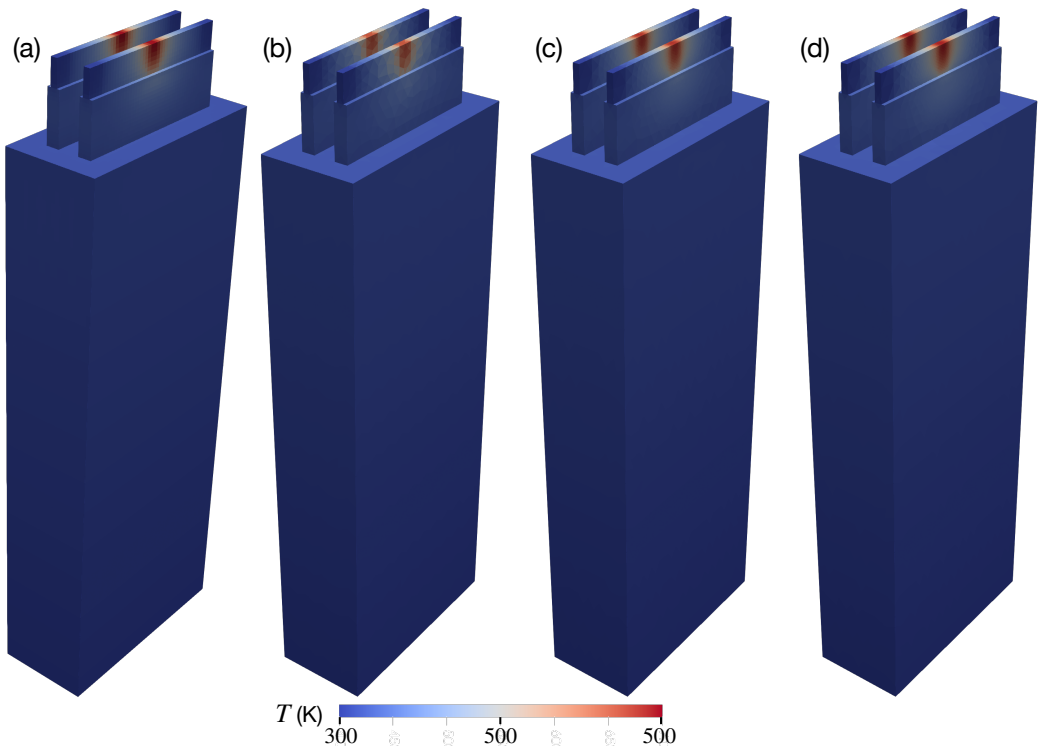

图18：双鳍硅 FinFET 配置中稳态温度分布的比较。(a) 使用结构化六面体网格（99,694 个单元）得到的 JAX-Nano 解。(b) 使用粗非结构化四面体网格（33,685 个单元）得到的 JAX-Nano 解。(c) 使用精细非结构化四面体网格（54,839 个单元）得到的 JAX-Nano 解。(d) 使用非结构化四面体网格（55,040 个单元）得到的 GiftBTE 解。所有模拟均采用相同的硅器件几何结构和热边界条件。温度场采用统一色标显示，以便直接比较空间温度分布以及加热区域附近的局部热点。

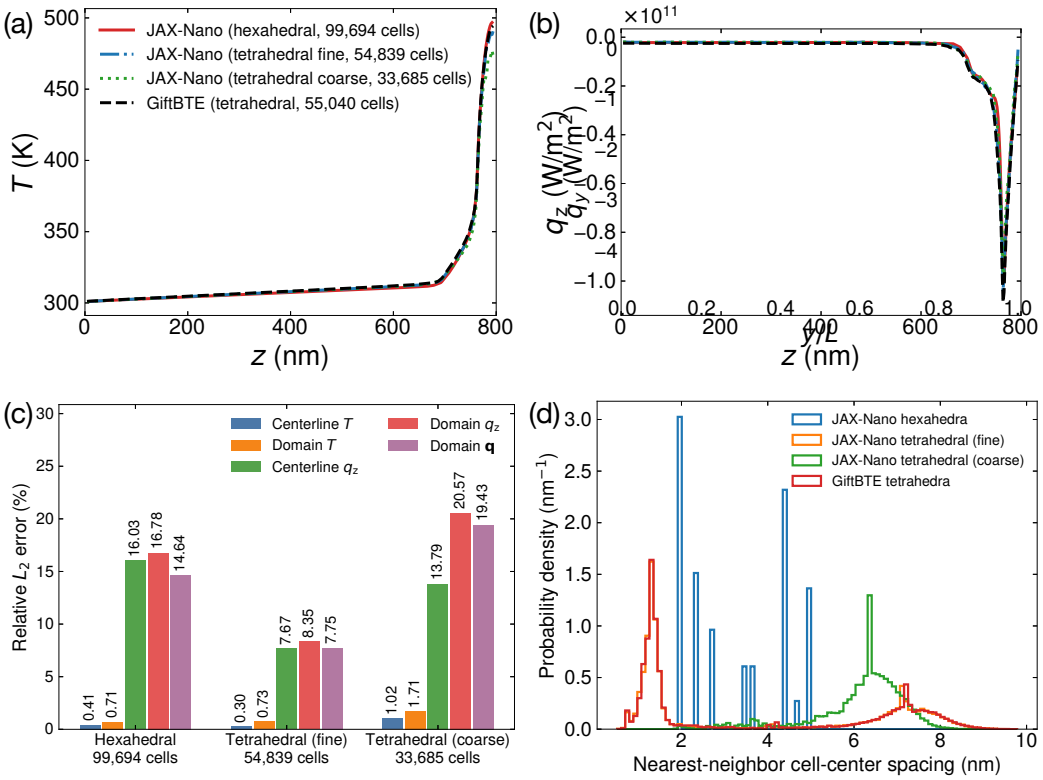

图19：针对双鳍硅鳍式场效应晶体管配置，使用不同计算网格对 JAX-Nano 与 GiftBTE 进行稳态验证。(a) 结构化六面体、精细四面体和粗糙四面体 JAX-Nano 网格沿采样线的温度剖面，并与 GiftBTE 四面体解进行比较。(b) 沿同一采样线的对应轴向热流分布曲线，q_z。(c) 以 GiftBTE 解为参考结果，中心线温度、全域温度、轴向热流和全域热流矢量的相对 L_2误差。(d) 四种计算网格的最近邻单元中心间距归一化分布，展示局部空间分辨率和网格非均匀性的差异。JAX-Nano 和 GiftBTE 使用的精细四面体网格具有高度一致的间距分布。

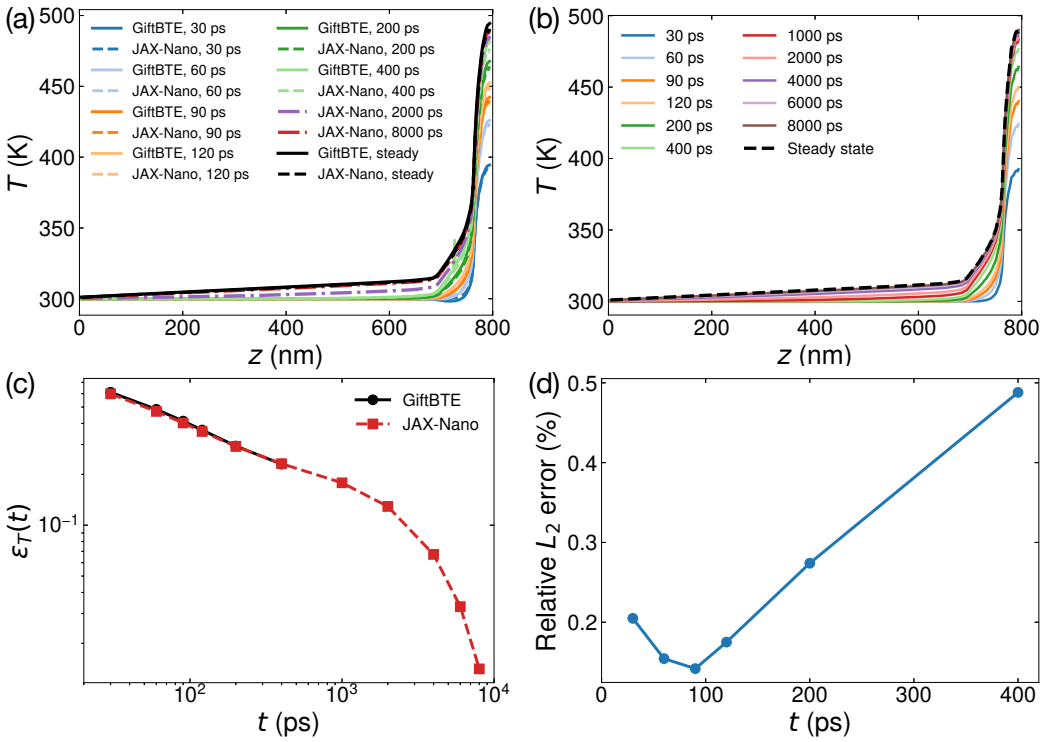

图20：双鳍硅鳍式场效应晶体管配置中的瞬态热响应及其趋于稳态的过程。(a) 比较 JAX-Nano 和 GiftBTE 在采样线上预测的温度分布，时间范围为 30 至 400 ps；同时展示 JAX-Nano 在 2000 和 8000 ps 时的额外温度分布，以及相应的稳态解。(b) JAX-Nano 温度分布从 30 至 8000 ps 的演化，展示温度场逐步趋于稳态的过程。(c) 各瞬态温度分布相对于相应稳态解的相对 L_2 偏差 $\varepsilon_T(t)$ 随时间的演化，并以高于 300 K 参考温度的稳态温升进行归一化。(d) JAX-Nano 与 GiftBTE 在相应仿真时间的瞬态温度分布之间的相对 L_2 误差，以百分比表示。瞬态对比使用精细四面体网格，其中 JAX-Nano 网格包含 54,839 个单元，GiftBTE 网格包含 55,040 个单元。

表1：双鳍 FinFET 仿真所用结构化和非结构化离散的网格特征。局部网格间距 h_i 定义为单元 i 中心与其最近邻单元中心$h_i = $之间的欧几里得距离，$_{j\neq i}$ $\|$最小值为$\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2$，其中$\mathbf{x}_i$ 表示单元 i的质心。量值 $h_{\min}$、 h_{med}、h_{mean}、 h_{95} 和 $h_{\max}$ 分别表示 h_i 的最小值、中位数、平均值、第95百分位数和最大值。这些统计量刻画了各计算网格中单元中心间距的分布，并反映了非均匀空间细化的影响。所有间距均以纳米为单位。

Mesh	单元	$h_{\min}$	h_{med}	h_{mean}	h_{95}	$h_{\max}$
JAX-Nano 六面体	99,694	2.000	2.667	3.247	5.000	5.000
JAX-Nano 四面体（精细）	54,839	0.508	1.507	3.717	8.022	9.603
JAX-Nano 四面体（粗糙）	33,685	1.861	6.376	6.166	7.418	9.071
GiftBTE 四面体	55,040	0.520	1.508	3.723	8.033	9.782

研究了稳态和瞬态声子输运，并将 JAX-Nano 的数值预测结果与使用 GiftBTE 获得的结果进行了比较。所有模拟均采用单一声子带和 64 个离散角方向。

图17(a)展示了用于定量比较的三维器件几何结构、边界条件、局部热生成区域和采样线。该硅器件由两个连接到同一衬底的鳍片组成。在局部加热区域内施加均匀的体积热生成率 10^{19} W m^{-3} 。通过热化边界条件，将衬底底面和每个鳍片的两个角部区域维持在 300 K 的参考温度。衬底的侧面采用镜面反射，其余外表面则采用漫反射，如

图中所示。由局部能量输入以及声子在器件边界处的散射所导致的热输运问题，其温度场和热流场在空间上并不均匀。

为评估网格拓扑和空间分辨率的影响，本文考虑了四种计算网格，如图17(b)–(e)所示。JAX-Nano分别应用于包含99,694个单元的结构化六面体网格、包含33,685个单元的粗非结构化四面体网格，以及包含54,839个单元的精细非结构化四面体网格。GiftBTE采用包含55,040个单元的非结构化四面体网格。对于两种精细非结构化四面体网格，在热生成区域附近进行了局部加密，以更好地解析相应的温度梯度和热流变化。四种网格均表示相同的器件物理几何，但单元连接关系和空间分辨率各不相同。

网格特征汇总于表1。局部网格间距定义为每个单元的质心与其最近邻单元质心之间的距离，

$$h_i = \min_{j \neq i} \left\| \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j \right\|_2 , \tag{90}$$

其中$\mathbf{x}_i$ 表示单元 i的质心。报告 h_i 的最小值、中位数、平均值、第95百分位数和最大值，以表征各网格的空间分辨率和非均匀性。

结构化六面体网格的单元中心间距平均值为 3.247 纳米，最大间距为 5.000 纳米。粗四面体网格的间距中位数为 6.376 纳米，而细四面体网格的间距中位数则小得多，为 1.507 纳米。相应的 GiftBTE 网格的间距中位数为 1.508 纳米。此外，平均间距

细 JAX-Nano 和 GiftBTE 四面体网格的平均间距分别为 3.717 和 3.723 纳米。这些高度吻合的间距统计数据为比较数值解提供了依据，同时减少了网格分辨率差异带来的影响。

图18比较了使用四种计算网格得到的稳态温度分布。所有解均呈现相似的整体热行为：局部热生成区域附近温度较高，并向热化衬底边界逐渐降低。使用结构化网格和非结构化网格得到的 JAX-Nano 解均再现了 GiftBTE 温度分布的主要特征。细四面体网格的 JAX-Nano 解与 GiftBTE参考结果尤其吻合，而粗四面体网格解则呈现出更明显的局部差异。这些比较表明，JAX-Nano 能够使用不同的网格拓扑，解析复杂三维硅器件中的稳态温度分布。

图19对稳态解进行了定量比较。对于中心线比较，沿同一条物理采样线提取温度和轴向热流剖面，该采样线从$z = 0$ 延伸至 $z = 796$ 纳米。基于周围单元中心的值，使用分段线性插值在400个均匀分布的采样位置处计算这些剖面，不进行最近邻外推。中心线误差计算仅保留四组数据集均具有有效插值结果的采样位置。

图19(a)显示了沿采样线的温度分布。

JAX-Nano 的解与 GiftBTE参考结果呈现出相似的空间温度变化。细四面体网格在整个采样线上与参考结果高度吻合，而结构化六面体网格和粗四面体网格则出现了稍大的局部偏差。

相应的轴向热流剖面 q_z 对比如图 19(b) 所示。与温度分布相比，热流分布对底层网格离散的灵敏度更高。这一现象反映了热流对声子分布函数方向矩的依赖，而方向矩可能比标量温度场对空间离散误差更为敏感。在三种 JAX-Nano 网格中，细化的四面体离散与 GiftBTE 的热流分布整体最为吻合。

为量化数值差异，本文考虑五种相对 L_2 误差指标：中心线温度、全域温度、中心线轴向热流、全域轴向热流以及全域热流矢量。

对于全域比较，选取 GiftBTE 的温度单元中心作为共同的评估点。采用具有八个最近邻且逆距离指数为二的逆距离加权（IDW）插值，将 JAX-Nano 的温度场和热流场映射到这些位置。当 GiftBTE 的采样坐标与温度场的采样坐标不同时，同样对其热流场进行插值。尽管网格连通性和空间分辨率存在差异，该过程仍可在一组共同的空间位置上直接比较数值解。

对于标量场或矢量场 ϕ，相对离散 L_2 误差定义为

$$\varepsilon_\phi = \frac{\left(\sum_{i \in \mathcal{V}} \left\| \phi_i^{\mathrm{JAX-Nano}} - \phi_i^{\mathrm{GiftBTE}} \right\|_2^2 \right)^{1/2}}{\left(\sum_{i \in \mathcal{V}} \left\| \phi_i^{\mathrm{GiftBTE}} \right\|_2^2 \right)^{1/2}} \times 100\%, \tag{91}$$

其中，$\mathcal{V}$ 表示有效公共评估点的集合。对于标量，内范数可化简为绝对值。误差采用离散的、未加权的采样点值进行评估，而不是使用基于体积积分的范数。

为避免无依据外推，仅当插值点与最近源网格单元中心之间的距离不超过相应局部源网格单元间距的三倍时，才接受该插值点。仅当至少95%的公共评估点满足插值有效性标准时，才报告全域误差。对于热流比较，JAX-Nano和GiftBTE场都必须满足有效性条件。中心线误差则使用相应的线性插值剖面单独进行评估。

图 19(c)总结了相对 L_2 误差。对于细四面体网格，中心线温度误差和全域温度误差分别约为0.30%和0.73%。相应的中心线轴向热流误差和全域轴向热流误差分别约为7.67%和8.35%，而全域热流矢量误差约为7.75%。

对于结构化六面体网格，中心线和全域温度误差分别约为 0.41% 和 0.71%，而热流误差更大。粗四面体网格产生的中心

线和全域温度误差分别约为 1.02% 和 1.71%，同时热流差异也更大。

这些结果表明，不同网格上的温度预测总体上较为一致，而热流预测对空间离散更加敏感。细四面体网格的整体吻合度最佳，尤其是在热流量方面，与 GiftBTE 的结果最为一致。剩余差异可能反映了网格拓扑、局部空间分辨率、插值以及两个求解器所采用的数值离散方法之间差异的综合影响。

图19(d)比较了归一化的最近邻单元中心间距分布。JAX-Nano 和 GiftBTE 使用的细四面体网格呈现出几乎重叠的分布，与表1中报告的网格统计数据一致。相比之下，粗四面体网格的间距分布有所不同，这与其较低的空间分辨率有关。结构化六面体网格则呈现出不同的分布，反映了其结构化的单元排列。这些比较为理解稳态解中依赖于网格的差异提供了更多背景信息。

随后，采用精细非结构化四面体网格研究瞬态热响应：JAX-Nano 的网格包含 54,839 个单元，GiftBTE 的网格包含 55,040 个单元。两个求解器均采用一个声子带、64 个离散角方向和显式时间积分，与稳态计算中使用的空间和角度离散方式一致。

JAX-Nano 瞬态模拟采用的时间步长为 $\Delta t = 3.0\times10^{-13}$ s，而 GiftBTE 采用 $\Delta t = 1.2\times10^{-13}$ s。对于当前配置，

观察发现，较大的时间步长会导致 GiftBTE 出现数值不稳定性。因此，两个求解器分别采用各自稳定的时间步长，并在相同的物理时间点比较瞬态温度分布，而非按照相同的迭代次数进行比较。

图20(a)比较了 JAX-Nano 和 GiftBTE 沿采样线在 30、60、90、120、200 和 400 皮秒时预测的瞬态温度分布。在共同的仿真区间内，两个求解器预测的整体温度分布相近。GiftBTE 的温度分布在 $t = 400$ 皮秒时出现局部尖峰，而相应的 JAX-Nano 温度分布则保持平滑。由于将 GiftBTE 模拟延长至更长物理时间的计算成本相当高，较长时间尺度的瞬态分析采用 JAX-Nano 进行。JAX-Nano 在 2000 和 8000 皮秒时的额外结果展示了更长时间尺度下的热响应。在 $t = 8000$ 皮秒时，JAX-Nano 的温度分布已非常接近相应的稳态解，表明其正趋于稳态温度分布。相应的稳态解也作为参考结果列出。

图20(b)展示了 JAX-Nano 的温度分布在扩展仿真区间内的演变。在早期，温度分布与初始参考状态较为接近。随着时间推移，局域热生成使温度逐渐升高，而声子输运则在硅器件中重新分配能量。瞬态温度分布逐渐趋近于相应的稳态温度分布。

为量化趋于稳态的程度，归一化相对 L_2

偏差定义为

$$\varepsilon_T(t) = \frac{\left[\sum_{i=1}^{N_s} \left(T_i(t) - T_{i,\mathrm{ss}}\right)^2\right]^{1/2}}{\left[\sum_{i=1}^{N_s} \left(T_{i,\mathrm{ss}} - T_{\mathrm{ref}}\right)^2\right]^{1/2}}, \tag{92}$$

其中， N_s 表示有效采样点的数量，$T_{i,\ \mathrm{ss}}$ 表示相应的稳态温度，$T_{\mathrm{ref}} = 300$ K。沿采样线，使用相同的有效空间位置计算范数。每个瞬态解都与使用同一求解器获得的稳态解进行比较。

图20(c)展示了 JAX-Nano 和 GiftBTE 的 $\varepsilon_T(t)$ 随时间的演化。在共同的模拟时间区间内，两种求解器的结果与各自稳态解之间的偏差均逐渐减小。扩展后的 JAX-Nano 结果表明，在更长的物理时间内，温度分布仍持续收敛至稳态温度分布。

最后，图 20(d)给出了 JAX-Nano 与 GiftBTE 在相同物理时间下的瞬态温度分布之间的相对 L_2 误差。求解器间误差定义为

$$\varepsilon_{T,\mathrm{cross}}(t) = \frac{\left[\sum_{i\in\mathcal{S}(t)} \left(T_i^{\mathrm{JAX-Nano}}(t) - T_i^{\mathrm{GiftBTE}}(t)\right)^2\right]^{1/2}}{\left[\sum_{i\in\mathcal{S}(t)} \left(T_i^{\mathrm{GiftBTE}}(t)\right)^2\right]^{1/2}} \times 100\%, \tag{93}$$

其中， $\mathcal{S}(t)$ 表示时间 t 时有效共同采样点的集合。该误差量化的是两种瞬态预测之间的差异，

而非各自偏离稳态的程度。如图 20(d) 所示，两种求解器在早期表现出较高的一致性；随着瞬态温度场逐渐形成，求解器间误差随之增大。后期较大的差异与温度分布中观察到的局部差异一致，包括 GiftBTE 解在 $t = 400$ 皮秒处出现的尖峰。尽管如此，在共同仿真区间内，两种求解器所再现的整体瞬态热行为相似。

稳态与瞬态对比结果共同表明，JAX-Nano 适用于复杂硅器件几何结构中的三维声子输运。结果显示，JAX-Nano 能够处理结构化和非结构化计算网格，重现 GiftBTE 预测的主要温度和热流特征，并捕捉趋向稳态的时间演化。这些对比还凸显了空间分辨率对于准确预测热流，以及一致的插值方法对于跨网格数值验证的重要性。

*4.3. FinFET*阵列

为进一步评估 JAX-Nano 模拟复杂三维几何结构中声子输运的能力，我们研究了一个 3×3 硅 FinFET 阵列，如图 21(a) 所示。与先前研究的单鳍片构型相比，该阵列在更大的计算域内引入了多个空间分布的热生成区域。该几何结构由九个垂直排列在同一衬底上的硅鳍片组成。每个鳍片的上部附近均设有一个局部热产生区域。衬底尺寸为 $340 \times 340 \times 100$ 纳米^3,

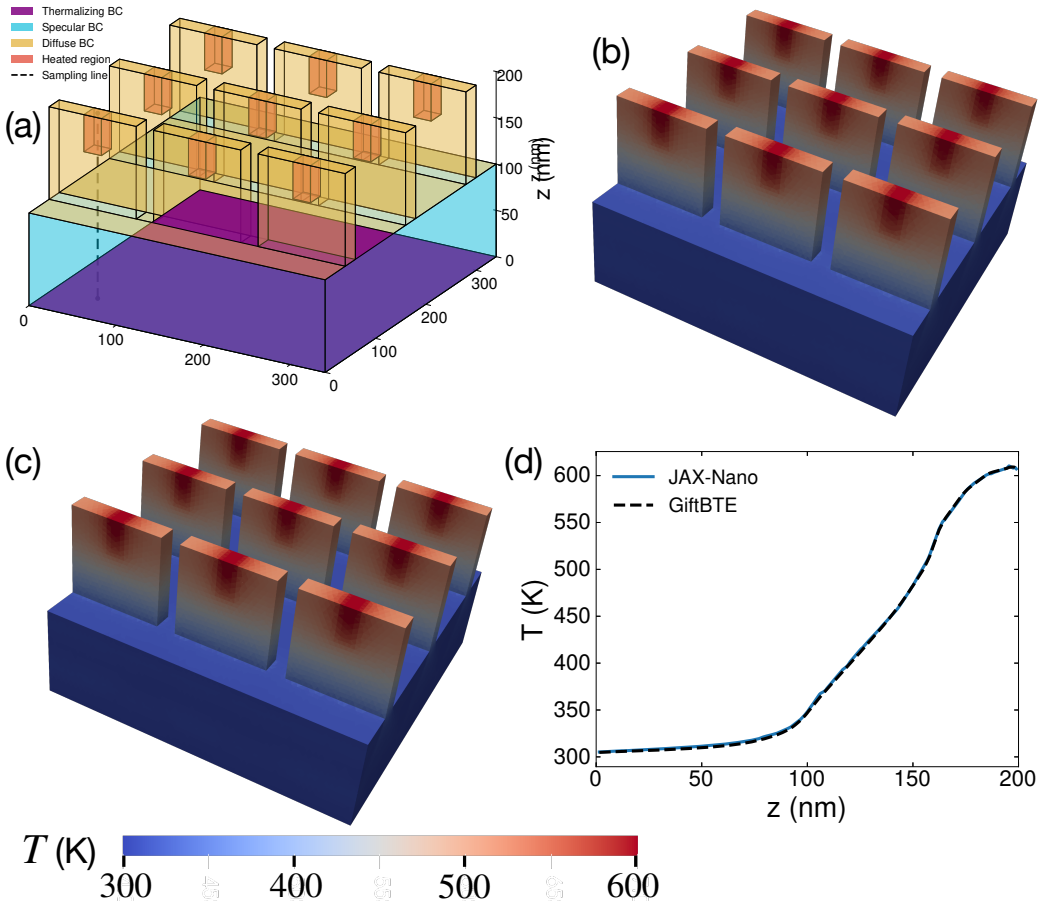

图21：三维 3×3 硅 FinFET 阵列中的稳态声子热输运。(a) 计算几何结构和边界条件示意图，包括热化边界、镜面边界、漫反射边界和局部体积发热区域。黑色虚线表示位于 $x = 50$ 纳米和 $y = 50$ 纳米处的采样线，延伸范围从 $z = 0$ 至 200 纳米。(b) JAX-Nano 预测的稳态温度分布。(c) GiftBTE 预测的相应温度分布。(d) 使用 JAX-Nano 和 GiftBTE 获得的沿采样线的温度分布对比。两种模拟均采用 313,345 个计算单元、一个声子带和 64 个角方向。

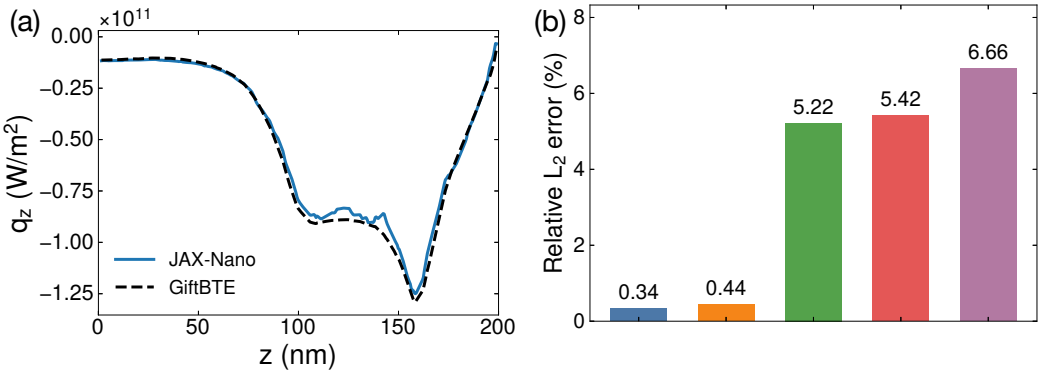

图 22：三维 3×3 硅 FinFET 阵列的稳态热通量验证。(a) 比较 JAX-Nano（蓝色实线）和 GiftBTE（黑色虚线）预测的采样线上 q_z 轴向热通量分量，该采样线位于$x = 50$ nm 和 $y = 50$ nm 处，范围从 $z = 0$ 延伸至 200 nm。(b) JAX-Nano 与 GiftBTE 在中心线温度、全域温度、中心线轴向热流、全域轴向热流和全域热流矢量方面的相对 L_2 误差分别为 0.34%、0.44%、5.22%、5.42% 和 6.66%。

而每个鳍片的尺寸为 $100 \times 20 \times 100$ 纳米^3。鳍片沿两个水平方向排列，中心间距均为 120 纳米，计算域的总高度为 200 纳米。

边界条件与单鳍片构型中采用的条件类似，但对鳍片上部边界作了重要修改。衬底底面施加热化边界条件，温度固定为 $T = 300$ K。衬底的侧表面采用镜面反射边界条件，而衬底暴露的表面以及所有暴露的鳍片表面均采用漫反射边界条件。与单鳍片构型不同，鳍片的上部角也被视为漫反射边界，而非热化边界。因此，鳍片上部表面不保持在给定温度，热量通过声子输运移向衬底底部的热化边界，从而实现热量移除。在每个局部加热区域内施加均匀的总体积热生成率 $\sum_{b=1}^{N_b} \dot{Q}_b = 10^{19}$ W m^{-3}。对于索引为（i，j）的鳍片，其中 i，$j \in \{0, 1, 2\}$，加热区域定义为

$\Omega^{(i,j)}{}_{\text{热}} = [40 + 120i, 60 + 120i] \times [40 + 120j, 60 + 120j] \times [160, 200]$ 纳米^3. (94) 计算域采用包含 313,345 个单元的非结构化四面体网格进行离散，角度域则由 64 个离散方向表示。JAX-Nano 和 GiftBTE 均采用单频带声子输运模型。

图21(b,c)对比了JAX-Nano和GiftBTE预测的三维稳态温度分布。两个求解器均预测，九个鳍片上部附近存在局部高温区域，对应于指定的体积热生成区域，

温度从加热区域向下方衬底逐渐降低，而衬底温度仍相对接近指定的边界温度。与单鳍片构型不同，后者的热化上角可提供额外的局部冷却；在当前鳍片阵列中，漫反射鳍片表面不会设定固定温度。因此，温度场主要由内部热生成、声子输运、边界散射以及通过衬底移除热量所决定。JAX-Nano和GiftBTE预测的空间温度分布高度吻合，包括局部热点，以及从鳍片延伸至衬底的温度梯度。

图 21(d) 展示了沿垂直采样线的温度分布定量比较。采样线位于 $x = y = 50$ 纳米处，从 $z = 0$ 延伸至 200 纳米，穿过衬底和其中一个鳍片。通过将单元中心数值解插值到一组共同的采样点上，获得温度分布。两个求解器均预测，衬底内温度逐渐升高，随后沿鳍片向加热区域方向明显升高。在加热区域的下边界附近（$z = 160$ 纳米处），温度迅速上升，在鳍片上端附近达到约 610 K。由于鳍片顶部没有热化边界，加热区域内的温度始终维持在较高水平。JAX-Nano 和 GiftBTE 的温度分布在整个采样线上几乎重合，表明两者对局部热响应的预测高度一致。

图 22(a) 对比了相应的垂直热流剖面。

q_z 沿采样线以负值为主，表明热量总体从加热区域向下输运至衬底。鳍片内向下热流的大小显著增加，并在约 $z = 160$ 纳米处达到明显的最大值，该位置大致对应热产生区域的下边界。在此位置上方， q_z 的大小朝鳍片顶部急剧减小。这一行为反映了鳍片上部产生的热能重新分布，并向下方衬底输运的过程。JAX-Nano 和 GiftBTE 均再现了垂直热流分布的主要特征，包括热输运方向、向下热流最大值的位置，以及加热区域附近的快速变化。两种预测结果之间存在局部差异，尤其是在热流随位置急剧变化的区域。这些差异比温度分布中观察到的更为明显。

JAX-Nano 与 GiftBTE 之间的相对 L_2 误差汇总于图 22(b) 中。中心线温度误差和全域温度误差分别为 0.34% 和 0.44%，表明两种求解器在预测温度场方面高度一致。中心线 q_z、全域 q_z和全域热流矢量的相应误差分别为 5.22%、5.42% 和 6.66%。全域比较通过将数值解插值到共同的单元中心评估点来进行。与单鳍片验证中的观察结果一致，热流误差大于温度误差，这表明热流场能更严格地评估两种求解器之间的一致性。尽管如此，温度结果高度一致且热流分布相符，

表明 JAX-Nano 能够重现 GiftBTE 对三维 FinFET 阵列所预测的主要热输运特性。

总体而言，该验证将单鳍片分析扩展到包含多个发热纳米结构的更大三维构型。JAX-Nano 与 GiftBTE 在温度和热流预测方面均吻合，证明了所提出的 GPU 加速声子 BTE 框架能够模拟复杂器件阵列中的稳态热输运，其中包含多个局域热源和漫反射鳍片边界。

5. 基于梯度的反向参数识别

在验证了 JAX-Nano 对三维声子输运的正向预测能力后，我们接下来探讨其在基于梯度的反向参数识别中的应用。与前几节讨论的正向问题不同，在这些问题中，材料属性、几何参数、边界条件和热生成率均已给定；反问题则旨在根据参考温度分布反推出选定的未知参数。JAX-Nano 的可微分实现使得能够通过自动微分评估热响应对这些参数的灵敏度，从而利用基于梯度的方法优化未知参数。

我们研究单参数和多参数识别问题。单参数研究涉及边界温度、计算域尺寸、体积热生成率和声子弛豫时间。

多参数研究则探讨在 3×3 FinFET阵列中，同时识别按模式分辨的弛豫时间和九个空间分布的体积热生成率。

5.1. 逆问题表述

为评估 JAX-Nano 的反演建模能力，本文采用正向声子玻尔兹曼输运方程（BTE）求解器生成的温度场作为参考数据，研究一系列参数识别问题。目标是根据未知物理参数对预测温度分布的影响，反推出这些参数。

这些反问题包括识别热化边界温度、声子弛豫时间、特征几何长度以及内部热生成率。本文研究了单参数识别和多参数同时识别。此外，还探讨了如何根据稀疏温度观测和瞬态温度响应进行反演学习。

对于每个逆问题，均使用指定的物理参数生成参考温度数据。可学习参数的初始值与其参考值不同，随后利用通过自动微分获得的梯度进行更新。基于温度的目标函数及梯度评估程序遵循第 2.9 节所述的表述。

通过将恢复出的参数与预设的参考值进行比较，并检查目标函数的收敛情况，评估逆向学习性能。这些数值实验评估了 JAX-Nano 在不同参数

维度、观测配置和时间条件下恢复物理参数的能力。

5.2. 单参数辨识

我们首先研究单个物理参数的辨识，以评估 JAX-Nano 中基于梯度的逆向学习的准确性与稳健性。所考虑的参数包括热化边界温度、声子弛豫时间、特征几何长度和内部生热率。

对于每种情况，均使用给定的参数值，通过正向玻尔兹曼输运方程模拟获得参考温度场。从不同的初始估计值出发，迭代更新未知参数，以尽量减小预测温度与参考温度之间的差异。损失梯度通过数值BTE求解器的自动微分计算。

这些实验考察可微求解器能否恢复决定不同物理机制的参数，包括边界热激励、声子散射、几何输运尺度和内部热生成。通过所得的参数轨迹和损失历史，评估参数是否收敛至参考值，以及恢复参数的准确性。

5.2.1. 域尺寸

稳态逆向学习。 我们首先研究 JAX-Nano 能否通过可微声子玻尔兹曼输运模拟辨识未知几何尺度。该逆问题以单鳍硅 FinFET 器件为对象进行构建，如图 23 所示。计算

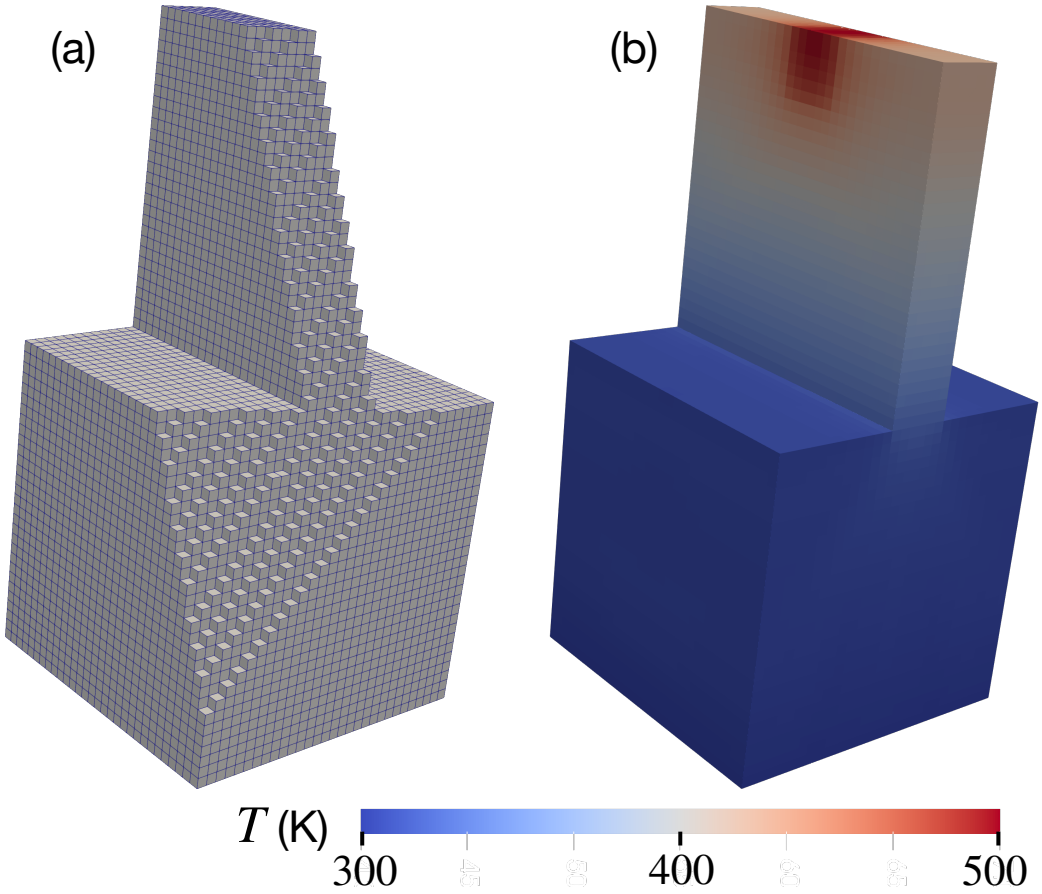

图23：单鳍硅FinFET器件的几何结构、计算网格和稳态温度分布。(a) 由32,400个单元组成的三维结构化六面体网格。衬底底面施加热化边界条件，其余所有外表面均采用漫反射边界条件。(b) JAX-Nano预测的稳态温度场，显示了鳍片顶部附近的局部加热，以及由此产生的整个鳍片和下方衬底中的温度分布。

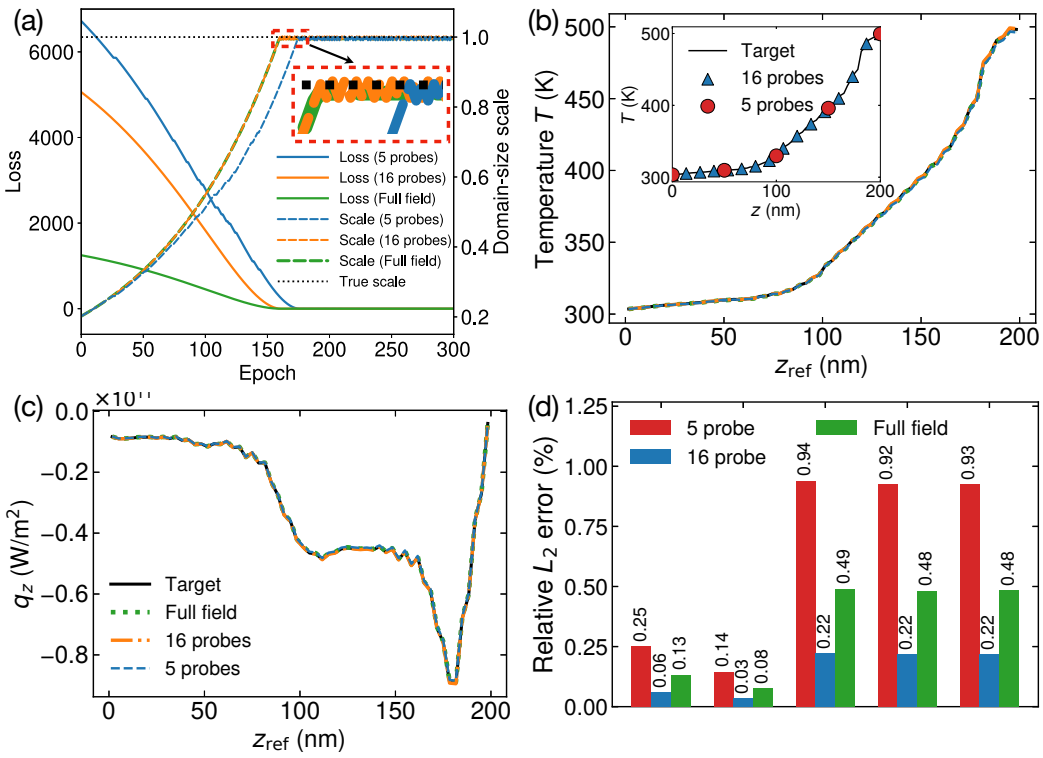

图24：利用可微声子玻尔兹曼输运模拟，通过三种温度观测配置——5 个探针、16 探针配置和全场测量——对单鳍硅鳍式场效应晶体管器件的几何尺度进行反演识别。(a) 反演学习损失和训练轮次中恢复的域尺寸尺度的演化。点划水平线表示真实的单位尺度，放大的插图突出显示了 5 探针配置和 16 探针配置在收敛附近恢复尺度中的小幅振荡。(b) 沿垂直中心线对比目标温度分布与重建温度分布，插图显示 5 个和 16 个温度探针的空间分布。(c) 对比中心线上的相应垂直热流分布q_z。(d) 对三种观测配置下中心线温度、全域温度、中心线垂直热流、全域垂直热流和全域热流矢量的相对 L_2 误差。误差使用对应的单元索引计算，未进行空间插值。

计算域采用结构化六面体网格离散化，共包含 32,400 个单元。在衬底底表面施加 300 K 的热化边界条件，同时对所有其余外表面施加漫反射边界条件。声子玻尔兹曼输运方程采用单个声子带和 64 个离散传播方向进行离散化。每次正向玻尔兹曼输运方程评估均执行 200 次迭代，以获得收敛的稳态温度场，用于反演学习。

在硅鳍顶部附近的区域内施加局部体积热源

$$\Omega_{\mathrm{hot}}(s) = [40s, 60s] \times [40s, 60s] \times [180s, 200s] \ \mathrm{nm}^3, \tag{95}$$

其中， s 表示无量纲几何尺度因子。在该区域内施加均匀的体积热生成率 $\dot{Q} = 10^{19}\ \mathrm{W\ m^{-3}}$ ，其他区域则为零。热源的尺寸和位置随计算几何结构按比例缩放，而体积热生成率保持不变。对于参考几何结构，最终的稳态温度场约为 300 至 500 K。

该逆问题旨在求得一个无量纲几何尺度因子 s，该因子根据以下关系对计算域的空间坐标进行均匀缩放

$$\mathbf{x}(s) = s\,\mathbf{x}_{\mathrm{ref}}, \tag{96}$$

其中，$\mathbf{x}_{\mathrm{ref}}$ 表示参考几何结构。目标几何结构对应于 $s_{\mathrm{true}} = 1$，而逆向学习过程以 s_0 =0.2 进行初始化。通过最小化预测稳态温度观测与目标稳态温度观测之间的差异来优化几何尺度，并使用 JAX 的 jax.value_and_grad 通过自动微分计算梯度。

为考察测量可用性的影响，考虑了三种观测配置：5 个温度探针、16 个温度探针以及全场温度测量。离散探针沿鳍式场效应晶体管器件的垂直中心线分布，而全场配置则使用整个计算域内的温度观测。三种逆问题均采用相同的声子BTE求解器，仅在用于构建逆向学习目标函数的温度观测数量上有所不同。

图 24(a) 展示了反演学习损失和恢复的几何尺度随迭代的变化。对于三种观测配置，随着推断出的尺度趋近于真实值 1，损失逐渐降低。放大的插图显示，在接近收敛时，5 探针配置和 16 探针配置恢复出的几何尺度存在小幅振荡，而全场配置则表现出相对稳定的收敛。尽管存在这些振荡，恢复出的尺度仍接近真实值，这表明无需全场观测，仅凭有限数量的温度测量即可识别几何尺度。

图 24(b) 对比了重构得到的垂直中心线稳态温度分布与目标解。相应的垂直热流分布曲线 q_z 如图 24(c) 所示。温度和热流均吻合良好，这表明推断几何结构不仅再现了观测到的热响应，还再现了相关的热传输特性。值得注意的是，热流并未直接纳入逆向学习目标函数，因此可作为评估重构精度的补充依据。

为量化重构误差，定义相对 L_2 范数如下：

$$\varepsilon_{L_2}(\phi) = \frac{\|\phi_{\mathrm{pred}} - \phi_{\mathrm{target}}\|_2}{\|\phi_{\mathrm{target}}\|_2} \times 100\%, \tag{97}$$

其中， ϕ_{pred} 和 ϕ_{target} 分别表示使用推断得到的几何尺度获得的重构解，以及与 $s_{\mathrm{true}} = 1$对应的参考解。变量 ϕ表示温度、垂直热流分量或完整的热流矢量。对于向量值量， L_2 范数包含全部三个笛卡尔分量。共评估五项误差指标：中心线温度、全域温度、中心线垂直热流、全域垂直热流和全域热流矢量。误差通过参考网格和重构网格中对应的单元索引计算，不使用空间插值。

如图 24(d)所示，三种观测配置在温度和热流方面均产生了相对较小的重构误差。16 探针配置在全部五项指标上均取得最低误差，其次是全场配置和 5 探针配置。具体而言，16 探针配置在全域温度和全域热流矢量方面的相对 L_2 误差分别约为 0.03% 和 0.22%。尽管 5 探针配置表现出较大的重构误差，但其全域温度误差和热流矢量误差仍分别低于 0.2% 和 1.0%。这些结果表明，仅使用稀疏温度测量即可实现精确的几何参数识别以及相关热场的重构。

瞬态逆向学习。几何反演学习问题进一步扩展至瞬态声子输运，采用相同的单鳍片硅——

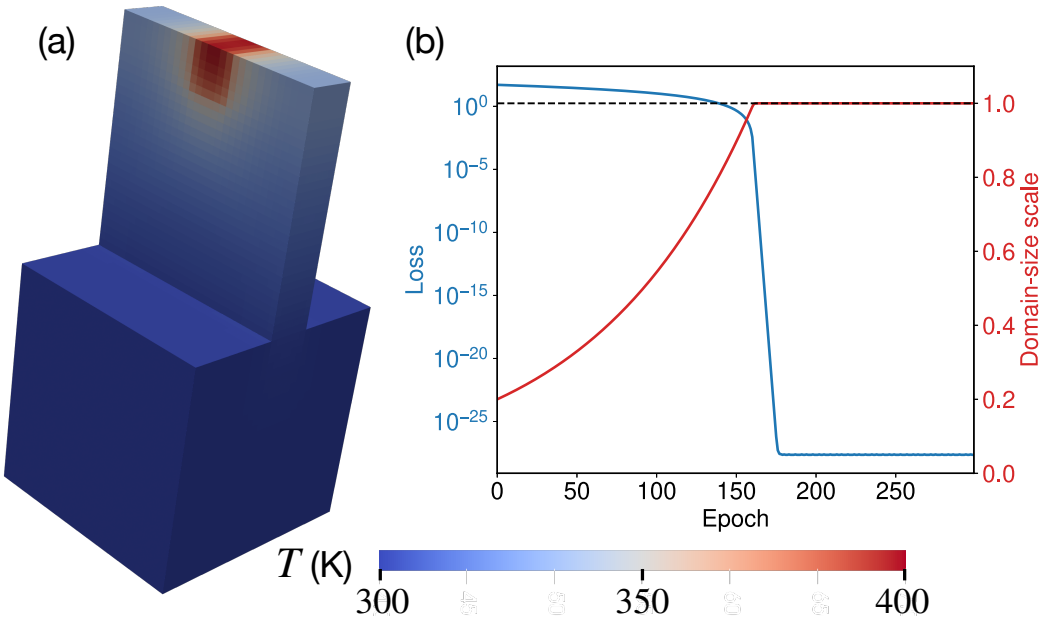

图 25：使用 JAX-Nano 对单鳍硅 FinFET 的几何尺度进行瞬态逆向学习。瞬态 BTE 求解器采用 1000 个时间步，时间步长为 $\Delta t = 10^{-13}$ s。(a) 参考几何结构在 $t = 100$ ps 时的瞬态温度分布。(b) 优化过程中基于温度的损失和学习得到的域尺寸尺度的变化。黑色虚线表示真实的几何尺度 $s = 1$。

FinFET 几何结构、计算网格、边界条件、体积热源、声子带和角度离散均与稳态情形中采用的相同。瞬态玻尔兹曼输运方程采用显式时间积分方案求解。每次正向玻尔兹曼输运方程计算均使用 1000 个时间步，固定时间步长为 $\Delta t = 10^{-13}$ s，对应的最终模拟时间为 $t = 100$ ps。将无量纲几何尺度因子 s 视为未知参数，并通过对瞬态 BTE 求解器进行反向模式自动微分来优化。

图 25(a) 显示了参考几何结构（$s = 1$）在 $t = 100$ps 时的瞬态温度分布。相应的逆向学习收敛历史见图 25(b)，其中绘出了基于温度的损失和学习得到的几何尺度随优化轮次的变化。从初始尺度 $s = 0.2$ 开始，学习得到的几何尺度逐步增大，趋近于指定的参考值 $s = 1$，并在约 160 轮时达到该值。随后，基于温度的损失急剧下降，并在约 175 轮时达到数值下限。

恢复得到的几何尺度与参考值在报告的数值精度范围内一致。最终的基于温度的均方损失约为 8.08×10^{-27}，对应的相对温度误差约为 2.95×10^{-14}%。这些结果表明，JAX-Nano 能够在瞬态声子输运模拟中准确传播参数敏感度，并根据无噪声的合成温度观测恢复几何尺度。

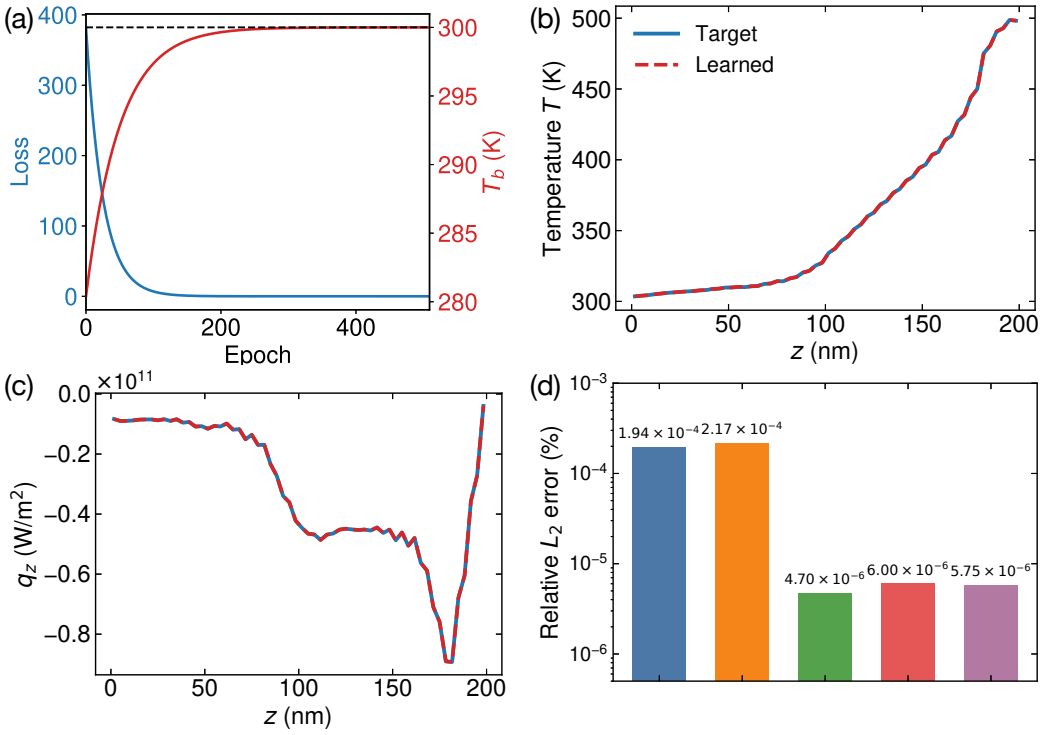

图 26：使用 JAX-Nano 对单鳍硅 FinFET 中的热化边界温度进行反演识别。(a) 优化过程中损失函数和学习得到的边界温度 T_b 的变化。虚线表示 300 K 的目标边界温度。(b) 沿 z 方向中心线的目标温度分布与重建温度分布对比。(c) 相应的垂直热流分量 q_z 对比。(d) 中心线和全域温度场及热流场（包括完整热流矢量 $\mathbf{q}$）的相对 L_2 误差。

5.2.2. 边界温度

我们研究单鳍硅 FinFET 配置中热化边界温度的反演识别。目标边界温度设为 $T_b^{\mathrm{true}} = 300$ K，初始估计值设为 $T_b^{(0)} = 280$ K。通过最小化预测稳态温度场与目标稳态温度场之间的差异，求得未知边界温度。使用前向模式自动微分，通过 JAX-Nano 求解器计算损失函数相对于 T_b 的梯度。

图 26(a) 展示了优化过程中损失函数和推断边界温度的变化。初始迭代期间，损失迅速下降，随后逐渐趋近于零。同时，推断出的边界温度从 280 K 单调上升至预设值 300 K。经过 500 个优化轮次后，恢复的温度约为 299.993 K，表明成功准确识别了未知热边界条件。

为评估重构解的准确性，图 26(b) 和图 26(c) 分别比较了沿 z方向中心线的目标温度与重建温度剖面，以及垂直热流剖面。在整个计算域内，重构剖面都非常接近目标解，包括温度梯度显著且热流变化明显的区域。

图 26(d) 给出了定量评估，其中分别评估了中心线分布和全域场的相对L_2 误差。中心线和全域温度误差分别为 1.9354×10^{-4}%

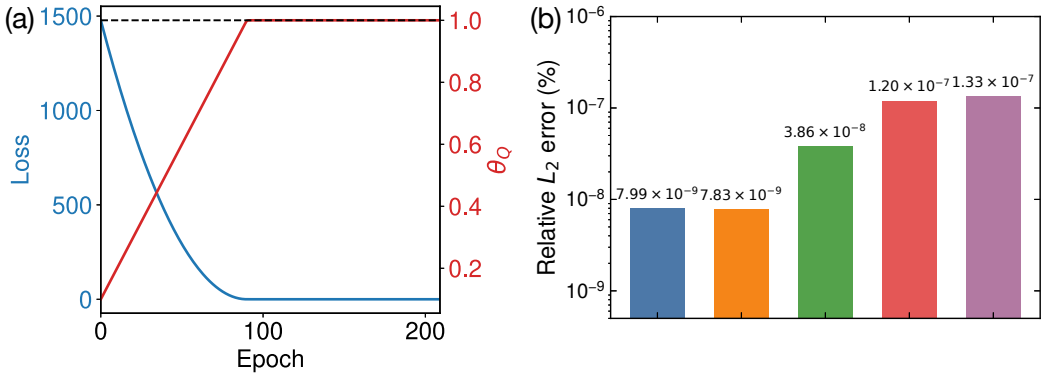

图 27：使用 JAX-Nano 对单鳍硅鳍式场效应晶体管中的体积热生成率进行反演识别。(a) 损失函数和学习得到的源幅值θ_Q 在优化过程中的变化。水平虚线表示参考值 $\theta_Q = 1$。(b) 中心线温度、全域温度、中心线垂直热流 q_z、全域垂直热流 q_z以及全域热流矢量$\mathbf{q}$中的相对 L_2 误差。

和 2.1650×10^{-4}%。垂直热流分量的相应误差分别为 4.70×10^{-6}% 和 6.00×10^{-6}%，而全域热流矢量的误差为 5.75×10^{-6}%。这些结果表明，推断得到的边界温度能够准确再现温度分布和热流场。

总体而言，此示例展示了 JAX-Nano 通过基于梯度的逆向学习识别未知热边界条件的能力，同时能够在重建稳态解时保持高精度。

5.2.3. 体积热生成率

我们研究单鳍FinFET中体积热生成率的反向识别。按照

式 (71) 中引入的参数化方法，源幅值 θ_Q 被视为未知参数，而热生成的空间分布保持不变。目标温度场使用 $\theta_Q = 1$生成，反向优化以 $\theta_Q = 0.1$ 初始化。通过最小化预测温度场与目标温度场之间的均方差来更新源幅值，并通过 BTE 求解器的反向模式自动微分计算梯度。

图 27(a) 展示了优化过程中损失函数和学习到的源幅值的变化。随着 θ_Q 接近其参考值，损失不断减小，而恢复出的参数则收敛至 $\theta_Q = 1$。这表明 JAX-Nano 能够根据温度观测识别内部热源的大小。

图 27(b) 进一步评估了重建热场的精度。报告了中心线温度、全域温度、中心线垂直热流 q_z、全域垂直热流 q_z 和全域热流矢量$\mathbf{q}$的相对 L_2 误差。所有五项误差均低于1.4×10^{-7}%，表明重建结果与参考解高度吻合。值得注意的是，尽管反向优化仅使用温度观测，重建的热流场误差也非常小。这些结果表明，JAX-Nano 能够准确恢复内部体积热源的幅值，同时保持重建温度场与热流场的一致性。

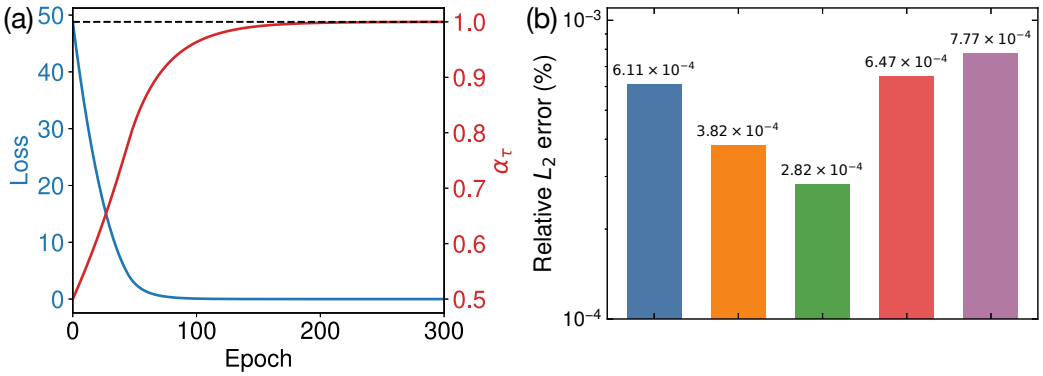

图28：使用 JAX-Nano 对单鳍硅 FinFET 中的声子弛豫时间缩放因子进行反演识别。(a) 优化过程中损失函数和学习得到的弛豫时间缩放因子 α_τ 的变化。水平虚线表示参考值 $\alpha_\tau = 1$。(b) 中心线温度、全域温度、中心线垂直热流 q_z、全域垂直热流 q_z以及全域热流矢量$\mathbf{q}$的相对 L_2 误差。

5.2.4. 声子弛豫时间

我们研究了单鳍FinFET中声子弛豫时间的反演识别。按照式（69）中引入的参数化，将全局弛豫时间缩放因子 α_τ 视为未知参数，使得 $\tau_b = \alpha_\tau \tau_b^{\mathrm{ref}}$。使用$\alpha_\tau = 1$生成目标温度场，而反向优化则以 $\alpha_\tau = 0.5$ 作为初始值。通过梯度下降最小化预测温度场与目标温度场之间的均方差，以识别该缩放因子；学习率为 0.01。损失函数梯度通过对 BTE 求解器进行反向模式自动微分计算。

图28(a)展示了优化过程中损失函数和学习得到的弛豫时间缩放因子的变化。损失迅速下降

在最初的优化轮次中，而 α_τ 则单调增加，趋近其参考值。恢复出的缩放因子逐渐趋近于$\alpha_\tau = 1$，这表明 JAX-Nano 能够根据温度观测确定声子弛豫时间。

图28(b)进一步评估了重建热场的准确性。文中报告了中心线温度、全域温度、中心线垂直热流、全域垂直热流以及全域热流矢量q的相对 L_2 误差。相应的误差分别为 6.11×10^{-4}%、 3.82×10^{-4}%、 2.82×10^{-4}%、 6.47×10^{-4}%和7.77×10^{-4}%。这五项误差均低于 8×10^{-4}%，表明重建结果与参考解高度吻合。值得注意的是，尽管逆向优化仅使用温度观测，重建的热流场也表现出较小的误差。这些结果表明，JAX-Nano能够准确识别全局声子弛豫时间缩放因子，同时保持重建温度场与热流场之间的一致性。

5.3 多参数识别

我们进一步研究了 JAX-Nano 在纳米尺度热输运中同时识别多个未知物理参数的能力。与单参数反向学习相比，多参数识别面临由参数耦合、非均匀灵敏度以及潜在的病态优化景观所带来的额外挑战。为评估可微分声子BTE框架对此类问题的适用性，本文考虑了两种具有代表性的反向学习场景。第一种场景涉及同时识别模态分辨声子弛豫时间，

而第二种场景则侧重于恢复 3×3 FinFET阵列中空间分布的热生成率。这些示例考察了 JAX-Nano 通过基于梯度的反向学习识别材料输运性质和空间变化热源参数的能力。

5.3.1. 模态分辨弛豫时间

我们首先考虑在三维FinFET几何结构中同时识别两个依赖于模态的声子弛豫时间。这些弛豫时间通过相互独立的缩放因子进行参数化，

$$\tau_b = \alpha_{\tau,b}\tau_b^{\mathrm{ref}}, \qquad b = 1, 2, \tag{98}$$

其中 τ_b^{ref}表示声子模态 b的参考弛豫时间，而 $\alpha_{\tau,\ b}$表示相应的未知缩放因子。目标是根据给定的目标温度场同时求出这两个缩放因子。

该逆问题通过最小化预测温度分布与目标温度分布之间的均方差来构建，

$$\mathcal{L}\left(\boldsymbol{\alpha}_\tau\right) = \frac{1}{N_c}\sum_{i=1}^{N_c}\left[T_i\left(\boldsymbol{\alpha}_\tau\right) - T_i^{\mathrm{target}}\right]^2, \tag{99}$$

其中 $\boldsymbol{\alpha}_\tau = [\alpha_{\tau,1}, \alpha_{\tau,2}]^{\mathrm{T}}$，$N_c$ 是计算单元的总数，T_i表示 JAX-Nano 预测的温度，T_i^{target} 是对应的目标温度。

损失函数相对于未知弛豫时间参数的梯度通过反向模式自动微分计算

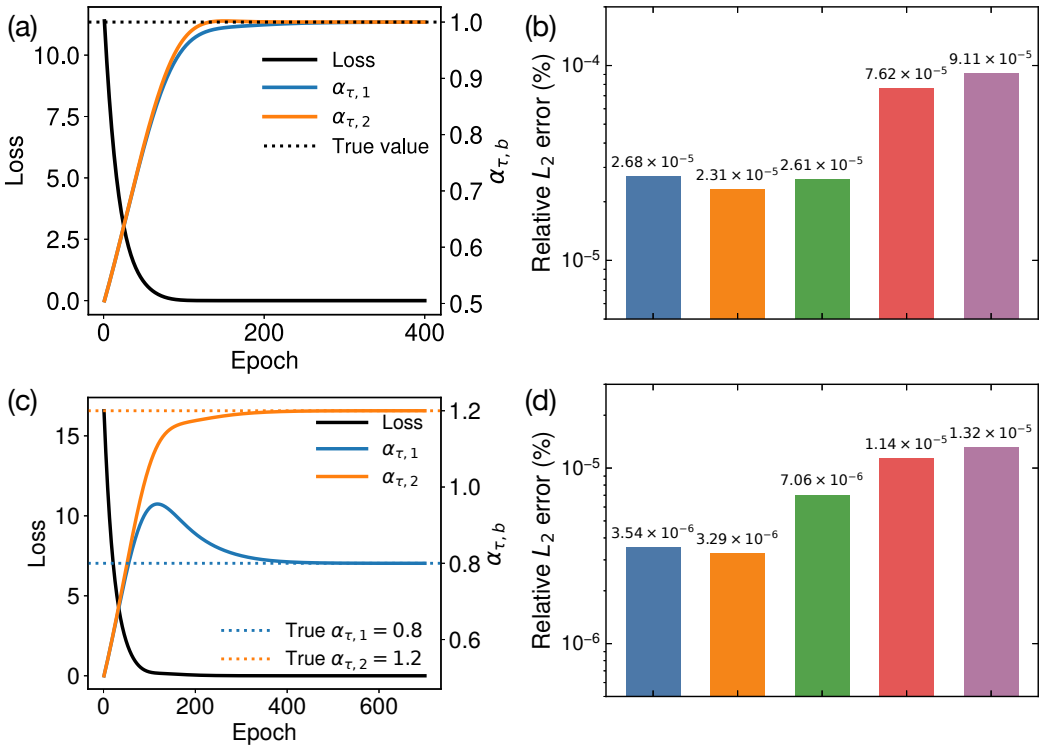

图29：使用 JAX-Nano 在三维单鳍硅 FinFET 几何结构中，对能带相关的声子弛豫时间进行反演学习。(a) 参考值相同的情况下，损失函数和学习得到的弛豫时间缩放因子的演变，$\alpha_{\tau,\ 1} = \alpha_{\tau,\ 2} = 1.0$。(b) 对于(a)中的情况，沿中心线和整个计算域评估的重建温度场和热流场的相对 L_2 误差。(c) 参考值不同时，损失函数和学习得到的弛豫时间缩放因子的演变，$\alpha_{\tau,\ 1} = 0.8$ 和$\alpha_{\tau,\ 2} = 1.2$。(d) 对于(c)中的情况，重建温度场和热流场对应的相对 L_2 误差。实线表示优化历史，点状水平线表示预设的参考弛豫时间缩放因子。

通过声子BTE 求解器进行求解。使用 Adam优化器同时优化这两个参数，学习率为 0.01。初始缩放因子设为 $\alpha_{\tau,1} = \alpha_{\tau,2} = 0.5$。逆学习实验采用三维FinFET几何结构，并将其离散为 32,400 个计算单元。

考虑两种数值设置相同、但参考缩放因子不同的情况。第一种情况下，两个缩放因子均设为 1，$\alpha_{\tau,1} = \alpha_{\tau,2} = 1.0$，对应于原始的模态相关弛豫时间。第二种情况下，指定不相等的缩放因子 $\alpha_{\tau,1} = 0.8$ 和$\alpha_{\tau,2}$ =1.2，以考察能否同时恢复经独立修改的模态相关弛豫时间。

图29(a)展示了缩放因子相同情况下，损失函数和学习得到的弛豫时间缩放因子的变化过程。在初始优化轮次中，损失显著下降，同时两个缩放因子从初始值逐渐上升，趋近于指定的参考值 1。两个参数呈现出相似的优化轨迹，并逐步趋近各自的参考值，表明成功地同时恢复了这两个弛豫时间缩放因子。

通过比较预测的温度和热流分布与相应的目标解，进一步评估重构热场的准确性。图29(b)展示了沿中心线及整个计算域评估的温度和热流相对 L_2 误差。较小的重构误差表明，预测热场与目标热场高度吻合，证明学习得到的弛豫时间参数能够高精度地再现预设的热响

应。

第二种情况考虑参考缩放因子不相等的情形，$\alpha_{\tau,\ 1} = 0.8$和 $\alpha_{\tau,\ 2} = 1.2$。如图29(c)所示，随着两个参数分别向各自的参考值演化，损失逐步降低。与缩放因子相同的情况不同，这两个参数呈现出不同的收敛轨迹。具体而言，第一个缩放因子最初增大并超过其指定的参考值，随后逐渐减小至 $\alpha_{\tau,\ 1} = 0.8$；而第二个缩放因子则持续增大至 $\alpha_{\tau,\ 2} = 1.2$。

这种非单调的参数演化表明，同时识别多个弛豫时间时存在耦合优化动力学。尽管各个参数轨迹不一定呈单调变化，优化过程仍会逐步缩小预测温度场与目标温度场之间的差异。这一行为表明，多参数反演学习取得成功，并不要求每个未知参数都单调趋近其参考值。

图29(d)展示了缩放因子不相等时，重构温度场和热流场中的相对 L_2 误差。较小的重构误差表明，即使两个声子模态具有不同的参考缩放因子，学习得到的弛豫时间参数仍能准确再现目标热响应。

总体而言，这些结果展示了 JAX-Nano 利用反向模式自动微分和基于梯度的优化，同时恢复多个模式相关弛豫时间缩放因子的能力。成功恢复相同和不同的缩放因子，证明了所提出框架在识别材料

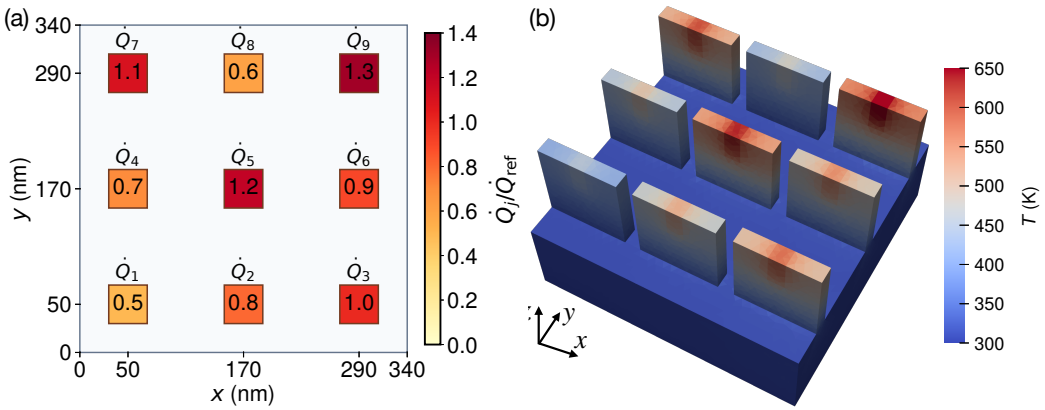

图30： 3×3 FinFET阵列中的空间分布体积热生成。(a) 九个热生成区域的空间排列，各区域的体积热生成率独立设定，并以 $\dot{Q}_{\mathrm{ref}} = 10^{19}$ W m^{-3}归一化。数值 表示设定的归一化热生成率 Q_j/Q_{ref}。(b) 使用设定的非均匀热生成率得到的三维稳态温度分布，作为反向参数辨识的参考解。

输运参数方面的有效性。在下一小节中，将进一步考察该框架在涉及更多未知参数的空间分布式热生成问题中的逆向学习能力。

5.3.2. 3 × 3 鳍式场效应晶体管阵列中的空间分布热源

为进一步评估 JAX-Nano 进行多参数反演识别的能力，我们考虑同时恢复 3×3FinFET阵列中九个空间分布的体积热生成率。计算几何结构和边界条件与前述正向验证研究所采用的相同，同时采用由66,441个单元构成的较粗四面体网格，并使用一个声子带和64个角方向。与均匀热生成配置相比，

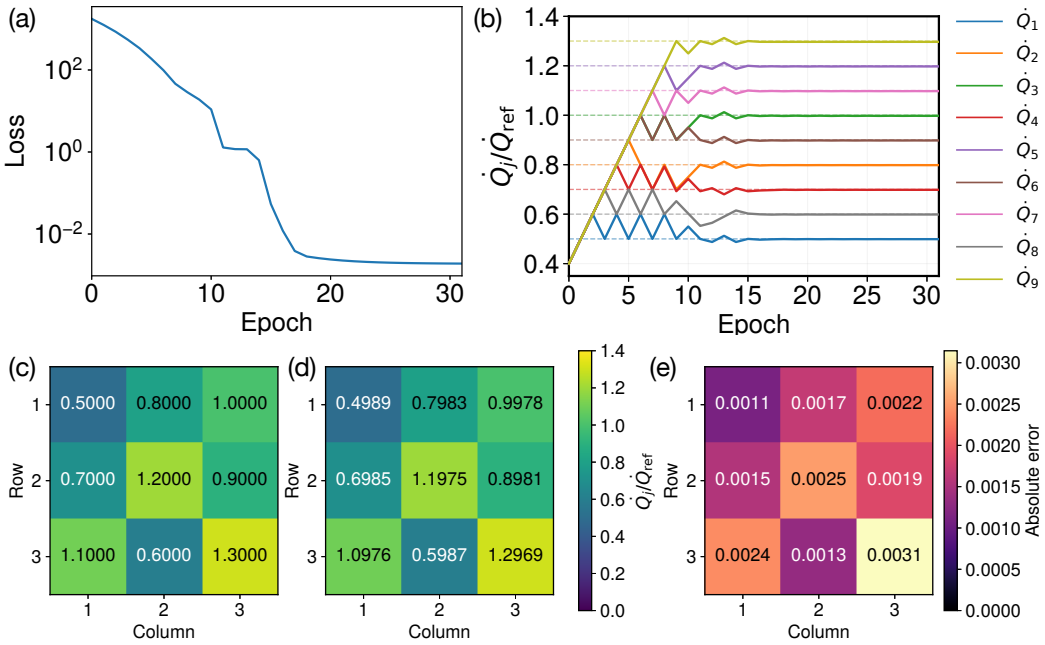

图31：对 3×3 FinFET 阵列中九个独立分布的体积热生成率进行基于梯度的反向识别。(a) 优化过程中基于温度的损失函数的演变。(b) 九个归一化 $\dot{Q}$ 热生成率 Q_j/Q_{ref} 的优化历史，水平虚线表示其预设参考值。(c) 预设的归一化热生成率。(d) 优化后恢复的归一化热生成率。(e) 预设与恢复的归一化热生成率之间的绝对误差。

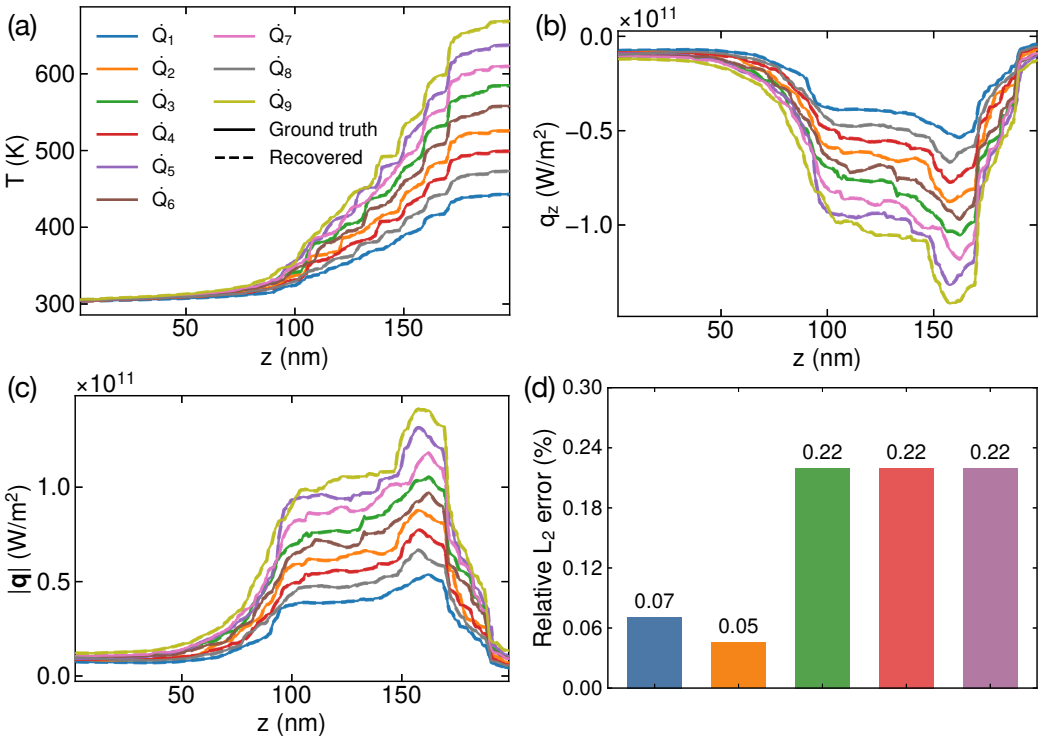

图32：使用恢复的体积热生成率对 3×3 鳍式场效应晶体管阵列中的参考热场与重构热场进行比较。(a) 沿穿过各个热生成区域的九条垂直中心线的温度分布。(b) 相应的垂直热流分量 q_z。(c) 热流大小 $|\mathbf{q}|$。实线和虚线分别表示参考解和重构解，相同颜色对应九个热生成区域。(d) 组合中心线温度分布、全域温度场、组合中心线垂直热流剖面、全域垂直热流以及全域热流矢量的相对 L_2 误差。

如前所述，九个热源区域被赋予不同的体积热生成率，如图30(a)所示。

未知参数向量定义为

$$\boldsymbol{\theta} = [\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_9]^{\mathsf{T}}, \qquad \theta_i = \frac{\dot{Q}_j}{\dot{Q}_{\mathrm{ref}}}, \tag{100}$$

其中，Q_j 表示第 j个热源区域内的体积热生成率，$\dot{Q}_{\mathrm{ref}} = 10^{19}$ Wm^{-3} 为参考热生成率。规定的归一化参数值为

$$\boldsymbol{\theta}_{\mathrm{ref}} = [0.5,\, 0.8,\, 1.0,\, 0.7,\, 1.2,\, 0.9,\, 1.1,\, 0.6,\, 1.3]^{\mathsf{T}}. \tag{101}$$

通过使用规定的热生成率求解正向声子玻尔兹曼输运方程，获得的相应稳态温度分布如图30(b)所示。非均匀的热生成率在各个鳍片之间产生了不同的温度分布，为反向参数辨识提供了参考热响应。

通过对基于温度的损失函数进行基于梯度的优化，同时辨识九个归一化热生成率。梯度采用前向模式自动微分计算，各个梯度分量通过分别计算雅可比向量积（JVP）获得。优化采用带梯度裁剪和回溯线搜索的投影梯度下降，初始学习率为 $\eta = 0.1$。所有九个参数均初始化为0.4。每次正向BTE评估均执行200次迭代，以获得收敛的稳态解。

图31展示了优化历史和参数辨识结果。如图31(a)所示，损失函数在

初始优化轮次中迅速下降，随后逐渐趋缓，最终趋于近乎稳定的值。图31(b)展示了九个归一化热生成率的相应变化。尽管它们的优化轨迹各不相同，所有九个参数都在约15个轮次内趋近预设的参考值，此后基本保持不变。

图 31(c) 和 (d) 对比了指定的归一化热生成率与反演得到的归一化热生成率。反演得到的参数向量为

$$\theta_{\mathrm{rec}} = [0.4989,\, 0.7983,\, 0.9978,\, 0.6985,\, 1.1975,\, 0.8981,\, 1.0976,\, 0.5987,\, 1.2969]^{\mathsf{T}}. \tag{102}$$

反演结果准确再现了指定的热生成空间分布。图 31(e) 所示的相应绝对识别误差介于 0.0011 至 0.0031 之间（以归一化热生成率计）。最大绝对误差出现在 Q_9，而全部九个归一化参数的绝对误差均低于 0.0032。这些结果表明，可微求解器能够根据多个空间分布热源的综合热响应，同时识别其热源强度。

为进一步评估识别参数的准确性，将重构的温度场和热流场与参考解进行比较。图32展示了沿穿过各个热产生区域的九条垂直中心线的温度、垂直热流分量和热流大小。中心线位置对应于图30(a)所示的热源位置。如图32(a)所示，在整个采样垂直范围内，重构的温度分布均紧密遵循参考温度分布。九条

中心线之间的差异反映了非均匀的热生成率，其中较大的热源强度通常会产生较高的局部温度。

图 32(b) 和 (c) 分别比较了相应的垂直热流分量 q_z 和热流大小 $|\mathbf{q}|$。重建解再现了这两个量的空间变化，包括热生成区域附近显著的热流变化。热流方面的一致性尤为重要，因为逆问题的目标函数基于温度观测，而热流场则为评估恢复得到的热输运响应提供了额外依据。

图 32(d) 汇总了相对 L_2 误差，据此量化重建精度。组合中心线上的温度相对 L_2 误差约为 0.07%，而全域温度误差约为 0.05%。对于垂直热流分量，组合中心线上的相对误差与整个计算域上的相对误差均约为 0.22%。全域热流矢量的相对 L_2 误差也约为 0.22%。

这些结果表明，JAX-Nano能够同时恢复九个独立分布的体积热生成率，且参数识别误差较小。此外，恢复出的参数能够同时再现参考温度场及相应的热流分布，相对 L_2 误差均低于0.25%。这一示例展示了可微分声子BTE框架在多参数逆问题中的适用性，该问题涉及三维纳米尺度器件中的空间非均匀热源。

6. 计算性能

6.1. GPU 性能与可扩展性

通过在三维立方硅域中进行声子输运模拟，评估JAX-Nano的计算性能和可扩展性。顶部和底部表面施加热化边界条件，温度分别维持在800 K和300 K；四个侧壁则施加漫反射边界条件。

基准测试在一台工作站上进行，该工作站配备两颗 Intel Xeon Gold 6438Y+ 处理器，提供 64 个物理 CPU 核心和 128 个逻辑 CPU。GPU 硬件包括一块配有 94 GB 内存的 NVIDIA H100 NVL，以及三块 NVIDIA RTX A6000 GPU，每块均配有 48 GB 内存。JAX-Nano 分别在单块 H100 NVL 和 RTX A6000 GPU 上进行评估，而基于 CPU 的 GiftBTE 求解器则使用 4、8、16、32 和 64 个 MPI 进程进行基准测试。

基准测试考察角分辨率、谱离散化和空间网格分辨率对计算成本的影响。相应的墙钟时间见图 33。(a)–(c) 图展示稳态声子输运，其中 JAX-Nano 和 GiftBTE 均采用 BiCGSTAB 迭代求解器，并固定迭代 200 次，以便进行一致的性能比较。(d) 图考察两个求解器采用显式时间积分进行的瞬态模拟，时间步长均为$\Delta t = 2 \times 10^{-13}$ s，且均执行 200 个时间步。

图33(a)比较了 JAX-Nano 和 GiftBTE 在角方向数量从 128 增至 4096 时的墙钟时间，计算采用包含 27,000 个计算单元的固定网格和一个声子带。对于 JAX-Nano

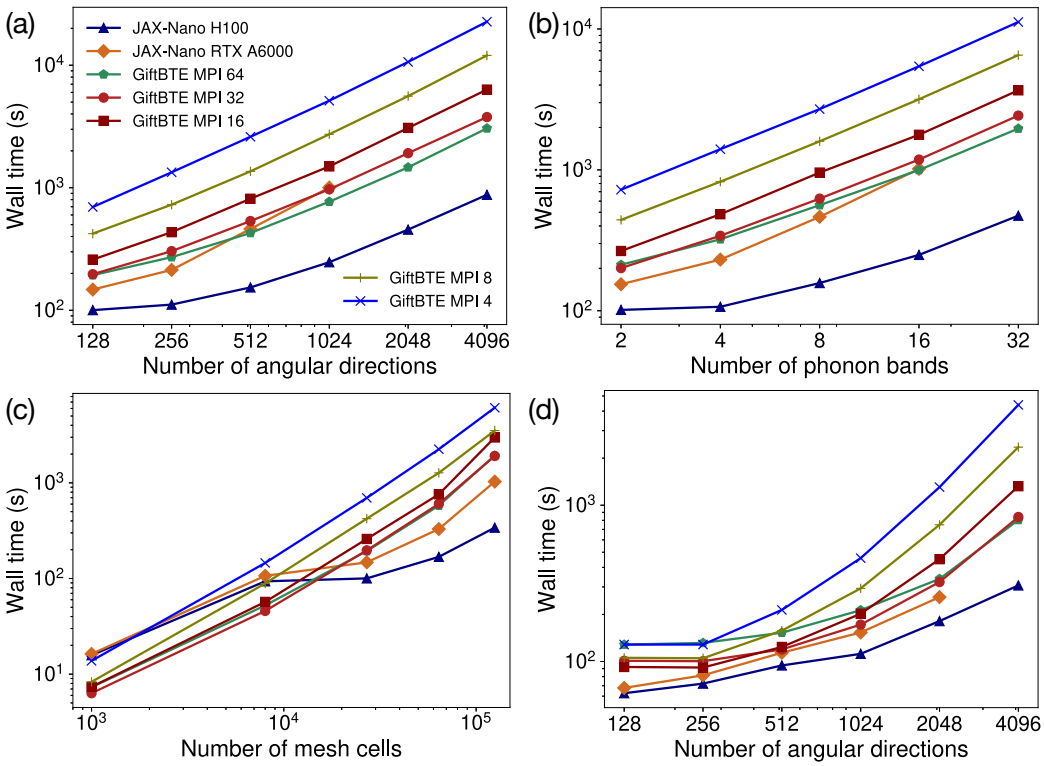

图33：JAX-Nano 和 GiftBTE 在三维立方硅计算域中进行稳态和瞬态声子输运模拟时的计算性能与可扩展性。墙钟时间分别随以下因素变化：(a) 一个声子能带、27,000 个计算单元时的角方向数量；(b) 64 个角方向、27,000 个计算单元时的声子能带数量；(c) 128 个角方向、一个声子能带时的计算网格单元数量。面板 (a)–(c) 对应稳态模拟。(d) 在 JAX-Nano 和 GiftBTE 中采用显式时间积分进行瞬态模拟时，墙钟时间随角方向数量的变化，其中包含一个声子能带和 27,000 个计算单元。JAX-Nano 在 NVIDIA H100 和 RTX A6000 GPU 上运行，而 GiftBTE 则使用 4、8、16、32 和 64 个消息传递接口进程进行评估。

在 NVIDIA H100 NVL GPU 上执行时，计算时间从 100.28 s 增加至 875.59 s；相比之下，GiftBTE 使用 64 个消息传递接口进程时，所需时间分别为 193.42 s 和 3052.92 s。因此，随着角分辨率的提高，JAX-Nano 相对于 GiftBTE 的加速比从 1.93 提升至 3.49。在 1024 和 2048 个角方向下，相应的加速比分别为 3.12 和 3.22，这表明对于规模更大的角度计算任务，H100 的计算优势更加显著。

在中等角分辨率下，NVIDIA RTX A6000 同样展现出不俗的性能。在 512 个角方向下，JAX-Nano 在 RTX A6000 上需要 461.06 s，而 GiftBTE 使用 32 个消息传递接口进程时需要 534.67 s，对应的加速比为 1.16。在 1024 个角方向下，两者的执行时间相近：RTX A6000 为 1003.37 s，GiftBTE 使用 32 个消息传递接口进程时为 970.94 s，差异约为 3.3%。这些结果表明，GPU 加速带来的计算优势取决于角分辨率和 GPU 硬件；与所研究的 CPU 配置相比，H100 始终具有更大的性能优势。

测得的加速比也取决于 GiftBTE 使用的 MPI 进程数。与使用 4 个 MPI 进程的 GiftBTE 相比，随着角方向数从 128 增至 4096，H100 实现的加速比介于 6.95 至 25.87 之间。与使用 64 个 MPI 进程的 GiftBTE 相比，相应的加速比则介于 1.93 至 3.49 之间。后者提供了要求更高的 CPU 基准，使用了基准测试工作站上全部 64 个物理 CPU 核心。

可用 GPU 内存也对

最大角分辨率构成了实际限制。配备 94 GB 内存的 NVIDIA H100 NVL GPU 能够成功完成最多包含 4096 个角方向的模拟，而在本次基准测试中，配备 48 GB 内存的 RTX A6000 受 GPU 内存限制，只能处理 1024 个角方向。这凸显了设备内存容量对于高维声子玻尔兹曼输运方程模拟的重要性，尤其是在角自由度数量增加时。

图 33(b) 考察了谱离散化的影响：在保持 64 个角方向和 27,000 个计算单元不变的情况下，声子能带数从 2 增至 32。能带数增加会引入更多谱输运方程，进而增加计算工作负载。对于在 NVIDIA H100 NVL GPU 上运行的 JAX-Nano，墙钟时间从 2 个能带时的 101.40 s 增至 32 个能带时的 472.84 s；而 GiftBTE 使用 64 个 MPI 进程时，耗时分别为 211.95 s 和 1963.65 s。因此，与使用 64 个 MPI 进程的 GiftBTE 相比，H100 的加速比从 2.09 提高至 4.15。与使用 4 个 MPI 进程的 GiftBTE 相比，相应的加速比则从 7.13 提高至 23.69。这些结果表明，随着声子能带数增加，GPU 加速的计算优势愈发显著。

RTX A6000 在多频带模拟中同样展现出具有竞争力的性能。其墙钟时间从两条能带时的 154.22 s 增加到 16 条能带时的 1016.57 s。在 16 条能带时，RTX A6000 的性能与使用 64 个 MPI 进程的 GiftBTE 相当，后者耗时 997.87 s，差异约为 1.9%。然而，32 条能带的配置

超出了 RTX A6000 的可用设备内存容量，而 H100 NVL 则成功完成了模拟。这些结果凸显了 GPU 加速在多频带声子输运中的计算优势，也突出了在增加谱自由度时设备内存容量的重要性。

图33(c)考察了空间分辨率对计算性能的影响，角方向数为128，声子带数为1。计算单元数从1000增加到125,000，输运未知量的数量也相应增加。对于相对较小的网格，基于中央处理器的 GiftBTE 求解器执行时间短于 JAX-Nano。在1000个单元时，GiftBTE 使用64个消息传递接口进程仅需7.30秒，而 JAX-Nano 在 H100 NVL 和 RTX A6000 GPU 上分别需要15.78秒和16.27秒。这表明，对于较小的计算工作负载，GPU 加速的收益较低，因为 JAX 即时（JIT）编译、GPU 初始化和预热所带来的开销可能占总执行时间的很大一部分。

在 8000 至 27,000 个计算单元之间，可以观察到明显的性能交叉点。在 8000 个单元时，使用 64 个 MPI 进程的 GiftBTE 可在 52.32 秒内完成模拟，而运行在 H100 NVL 和 RTX A6000 GPU 上的 JAX-Nano 分别需要 93.50 秒和 106.72 秒。然而，在 27,000 个单元时，H100 和 RTX A6000 分别只需 100.28 秒和 147.64 秒，而 GiftBTE 则需要 193.42 秒。相应的 GPU 加速比分别为 1.93 和 1.31。这一交叉表明，当空间计算工作负载足够大时，GPU 加速开始显现优势；

此时，提升的并行度能够抵消 GPU 执行所带来的开销。

随着网格分辨率进一步提高，JAX-Nano 的计算优势愈发明显。在 64,000 个单元的情况下，H100 用时 168.44 s 完成模拟，而 GiftBTE 使用 64 个 MPI 进程则需 578.42 s，加速比为 3.43。对于包含 125,000 个单元的最大网格，H100 用时 340.20 s，而 GiftBTE 使用 64 个 MPI 进程则需 1928.16 s，对应的加速比为 5.67。与使用 4 个 MPI 进程的 GiftBTE 相比，H100 在最大网格下的加速比达到 17.96。RTX A6000 在这一分辨率下也展现出计算优势，用时 1031.51 s，相较于使用 64 个 MPI 进程的 GiftBTE，加速比为 1.87。这些结果表明，随着空间计算工作负载的增加，GPU 加速的效果也愈发显著，凸显了 JAX-Nano 在大规模三维声子BTE模拟中的适用性。

图 33(d)考察了显式瞬态模拟的计算性能：在固定网格（包含 27,000 个单元）和一个声子带的条件下，角方向数量从 128 增加到 4096。JAX-Nano 和 GiftBTE 均采用相同的显式时间积分设置，以确保物理模拟时长一致，从而能够直接比较计算性能。随着角分辨率提高，计算成本也随之增加，因为每个时间步长都必须求解方向输运方程。

在 128 个角方向下，H100 NVL 上的 JAX-Nano 耗时 62.66 s，而 GiftBTE 使用 64 个 MPI 进程时耗时 128.25 s，对应的

加速比为 2.05。在 1024 个角方向下，两者的执行时间分别为 111.94 s 和 213.05 s，加速比为 1.90。对于包含 4096 个角方向的最大配置，H100 在 306.69 s 内完成模拟，而 GiftBTE 使用 64 个 MPI 进程时需要 804.13 s，加速比达到 2.62。相较于使用 4 个 MPI 进程的 GiftBTE，H100 在此角分辨率下的加速比达到 14.29。

RTX A6000 在中等角分辨率下也展现出计算优势。在 128 个方向下，其执行时间为 67.75 s，而使用 64 个 MPI 进程的 GiftBTE 需要 128.25 s，加速比为 1.89。在 2048 个方向下，RTX A6000 需要 258.18 s，而使用 64 个 MPI 进程的 GiftBTE 需要 337.60 s，加速比为 1.31。4096 个方向的配置超出了 RTX A6000 的可用 GPU 内存，因此无法在该设备上完成计算。

GiftBTE 的结果进一步表明，在角分辨率较低时，增加 MPI 进程数并不一定能提升计算性能。例如，在包含 128 个角方向的显式瞬态基准测试中，GiftBTE 使用 16 个 MPI 进程需要 92.25 s，而使用 64 个 MPI 进程则需要 128.25 s。这一现象与进程间通信和同步开销相对于分配给每个进程的计算工作量有所增加的情况相符。随着角分辨率提高，较大的计算工作负载可以提升额外 CPU 进程的利用率。在 4096 个角方向下，GiftBTE 使用 64 个 MPI 进程，在测试的 CPU 配置中实现了最短执行时间。这些观察结果凸显了根据角分辨率选择合适 MPI 进程数的重要性。

需要指出的是，当前瞬态基准测试仅考虑 200 个时间步，报告的墙钟时间包含 JAX 即时（JIT）编译、GPU 初始化和预热开销。对于时间较短的模拟，这些一次性开销可能占总执行时间的相当大一部分。对于包含更多时间步的较长瞬态模拟，相较于累积的时间积分成本，这些固定开销预计会变得不那么显著。因此，随着瞬态模拟时间延长，这些一次性开销的相对占比会降低，从而可能提升 JAX-Nano 的计算优势。下一小节将进一步考察 JAX-Nano 和 GiftBTE 在逐渐趋于稳态的较长瞬态模拟中的性能。

总体而言，这些基准测试表明，图形处理器加速对稳态和显式瞬态声子输运均有效，尤其是在空间、角度和频谱分辨率较高时。结果还凸显了计算工作负载和 GPU 内存容量对可实现性能的影响。下一小节将考察显式和隐式瞬态公式的计算效率。

6.2. 显式与隐式瞬态性能

本文使用一个包含 27,000 个计算单元、128 个角方向和一个声子带的三维立方硅计算域，评估稳态与瞬态公式的计算效率和数值一致性。JAX-Nano 的稳态公式以及瞬态显式和隐式公式在单个 NVIDIA H100 NVL GPU 上执行；GiftBTE 对应的稳态和瞬态模拟则在 CPU 平台上使用 64 个消息传递接口进程运行。

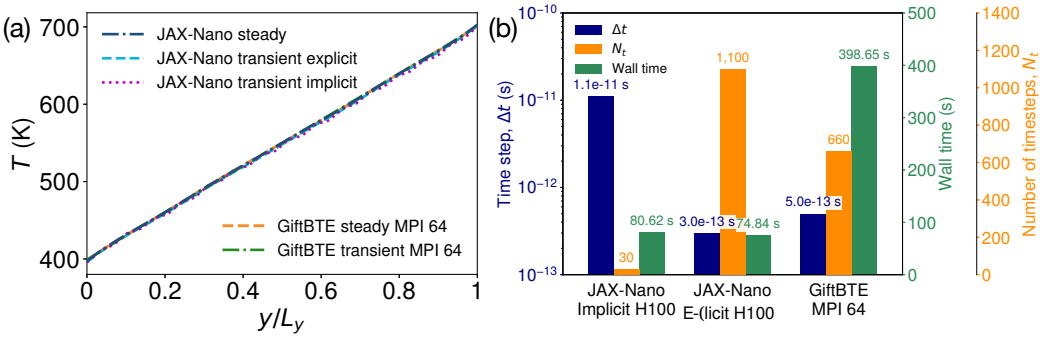

图34：JAX-Nano 和 GiftBTE 在包含 27,000 个计算单元、128 个角方向和一个声子带的三维立方硅域中的验证与计算性能。（a）比较使用 JAX-Nano 的稳态、瞬态显式和瞬态隐式公式获得的中心线温度分布，以及 GiftBTE 相应的稳态解和瞬态解。（b）比较 JAX-Nano 在 NVIDIA H100 NVL GPU 上进行隐式积分和显式积分时的时间步长 Δt、物理时间步数量 N_t 及总墙钟时间，以及 GiftBTE 使用 64 个 MPI 进程进行显式积分时的相应结果。所有瞬态模拟均达到相同的最终物理时间 3.3×10^{-10} s，此时达到稳态条件。

顶部和底部表面分别维持在 800 K 和 300 K，而四个侧面则施加漫反射条件。稳态解作为评估瞬态公式的参考结果。所有瞬态模拟均推进至相同的最终物理时间 3.3×10^{-10}s，此时温度场已达到稳态。

图34(a)比较了 JAX-Nano 和 GiftBTE 的稳态公式与瞬态公式所得的中心线温度分布。温度分布在整个计算域内高度吻合，表明显式和隐式瞬态公式均可恢复相应的稳态解。这种吻合也证实了基于图形处理器的 JAX-Nano 实现与基于中央处理器的 GiftBTE 求解器之间具有一致性。

图34(b)比较了时间步长、时间步数和总墙钟时间。JAX-Nano 的隐式公式采用 $\Delta t = 1.1\times10^{-11}$ s 的时间步长，仅需 30 个时间步即可到达最终物理时间，执行时间总计为 80.62 s。相比之下，JAX-Nano 的显式公式采用 $\Delta t = 3.0\times10^{-13}$ s 的时间步长，共使用 1100 个时间步，完成模拟耗时 74.84 s。GiftBTE 采用显式时间积分，时间步长为 $\Delta t = 5.0\times10^{-13}$ s，共使用 660 个时间步；使用 64 个 MPI 进程时，耗时 398.65 s。

尽管需要更多时间步，JAX-Nano 显式公式的总执行时间仍略短于其隐式版本。这一现象反映出，每个时间步求解隐式输运方程都需要额外的计算成本。相较于使用 64 个消息传递接口进程的 GiftBTE，JAX-Nano 的显式和隐

式公式的加速比分别约为 5.33 和 4.95。

这些结果表明，JAX-Nano 的两种瞬态公式都能高效地求得稳态声子输运解。尽管隐式时间积分允许采用大得多的时间步长，但其计算优势取决于时间步数与每次隐式求解成本之间的权衡。对于当前配置，显式时间积分的整体计算性能略好；与此同时，两种 GPU 实现的性能均显著优于基于中央处理器的 GiftBTE 求解器。

7. 结论

本研究介绍了 JAX-Nano，这是一个面向稳态和瞬态声子玻尔兹曼输运模拟的 GPU 加速、可微分有限体积框架。该框架在统一的 JAX 实现中集成了结构化与非结构化空间离散、分模态声子输运、多种边界条件，以及显式和隐式时间积分格式。该框架采用无矩阵稀疏迭代求解策略，并结合即时编译和 GPU 加速数值运算，在兼容自动微分的同时实现了三维声子输运模拟。这种集成方案为正向热分析和基于梯度的反向参数识别提供了计算基础。

通过经典声子输运基准测试，系统地检验了 JAX-Nano 的数值精度。对于稳态跨平面输

运，预测的温度和热流分布与解析解及 DUGKS 结果高度吻合，适用于广泛的克努森数范围，并捕捉到了从扩散输运到弹道输运的转变。对于瞬态热光栅问题，JAX-Nano 再现了扩散区间和弹道区间内特征性的温度演变，包括与声子弹道传播相关的振荡行为。空间加密研究表明，温度和热流的收敛阶近似为二阶。这些结果证实了该框架在不同输运区间内具有数值一致性。

该框架还在立方域中的三维声子输运以及真实的FinFET构型中得到了验证。在不同边界条件、空间离散和谱分辨率下，与 GiftBTE 的比较表明，温度和热流预测结果高度吻合。模拟涵盖了单鳍片和双鳍片晶体管，以及具有局部体积热源的 3×3 FinFET阵列。这些示例展示了 JAX-Nano 在几何结构复杂的纳米尺度器件和空间非均匀热输运问题中的适用性。

通过一系列基于梯度的反向参数辨识问题，展示了 JAX-Nano 的可微能力。单参数实验考察了特征域尺寸、热边界温度、体积热生成率和声子弛豫时间的恢复。多参数实验进一步研究了在一个 3×3

FinFET阵列中，同时识别两个模式相关弛豫时间缩放因子和九个独立分布的体积热生成率。弛豫时间实验成功恢复了原始的模态相关性质以及独立缩放后的弛豫时间。对于空间分布式热源问题，重建的温度场和热流场的相对误差均低于 0.25%。这些结果表明，通过声子BTE求解器进行自动微分，从热观测中识别多个物理参数是可行的。

我们在 NVIDIA H100 NVL 和 RTX A6000 GPU 上评估了 JAX-Nano 的计算性能，并将其与基于MPI的GiftBTE求解器进行了比较。系统性基准测试考察了空间分辨率、角离散化以及声子能带数量的影响。结果表明，随着计算工作负载的增加，GPU 加速带来的优势也随之提升。在包含 125,000 个计算单元的稳态模拟中，H100 上的 JAX-Nano 相较于使用 64 个 MPI 进程的 GiftBTE，加速比约为 5.67。对于 4096 个角方向，相应的加速比约为 3.49。对瞬态积分格式的比较还表明，隐式积分大幅减少了所需的物理时间步数，但由于额外的线性求解器开销，在所研究的配置下，其执行时间略长于显式积分。这些发现凸显了计算工作负载、数值公式和硬件特性对 GPU 加速声子输运模拟性能的决定性影响。

总体而言，JAX-Nano 建立了一个统一框架，将准确的声子BTE模拟、GPU 加速和自动微分

结合起来，用于纳米尺度热输运分析。除了正向预测，该框架还能够识别材料属性、边界条件、几何参数和空间分布的热源，展现了可微动理输运模拟在热表征和反演建模方面的潜力。未来工作将重点扩展该框架，以纳入更全面的声子色散和散射模型；提升大规模可微模拟的计算和内存效率；并实现针对复杂纳米尺度器件的基于梯度的热设计与优化。

致谢

本研究得到北伊利诺伊大学研究与创新合作承诺部门（RIPS）的支持。

数据可用性

支持本研究发现的数据可根据合理请求向通讯作者获取。

参考结果

参考结果

[1] Richard B Wilson 和 David G Cahill. 时域热反射实验中傅里叶理论的各向异性失效。*Nat. Commun.*，5(1):5075，2014。

[2] Andrea Cepellotti、Giorgia Fugallo、Lorenzo Paulatto、Michele Lazzeri、Francesco Mauri 和 Nicola Marzari。二维材料中的声子流体动力学。*Nat. Commun.*，6(1):6400，2015。

[3] Gang Chen。微尺度和纳米尺度上的非傅里叶声子热传导。《自然·物理评论》，3(8)：555–569，2021。

[4] C. L. Tien 和 G. Chen。微尺度导热与辐射传热面临的挑战。《传热学杂志》，116(4)：799–807，1994 年 11 月。doi：10.1115/1.2911450。URL：https://doi.org/10.1115/1.2911450。

[5] Per G. Sverdrup、Y. Sungtaek Ju 和 Kenneth E. Goodson。绝缘体上硅晶体管中热传导的亚连续介质模拟。《传热学杂志》，123(1)：130–137，2000 年 6 月。ISSN 0022-1481。doi：10.1115/1.1337651。

[6] Manish Chhowalla、Debdeep Jena 和 Hua Zhang。用于晶体管的二维半导体。《自然·材料评论》，1(11)：16052，2016。

[7] Wei Cao、Huiming Bu、Maud Vinet、Min Cao、Shinichi Takagi、Sung- woo Hwang、Tahir Ghani 和 Kaustav Banerjee。晶体管的未来。《自然》，620(7974):501–515，2023。

[8] Apurva Raj、Nitin Tiwari、Surya Pratap Vanka 和 Sanjiv Sinha。面向鳍式场效应晶体管的 GPU 加速瞬态声子玻尔兹曼输运方程（BTE）求解。《国际传热传质杂志》，272:129487，2027。

[9] G. Chen。超晶格和周期性薄膜结构中尺寸及界面对热导率的影响。《传热学杂志》，119(2): 220–229，05 1997。ISSN 0022-1481。doi: 10.1115/1.2824212。

[10] Kenneth E Goodson 和 Y Sungtaek Ju。新型电子薄膜中的热传导。材料科学年度评论，29(1):261–293，1999。

[11]Rama Venkatasubramanian、Edward Siivola、Thomas Colpitts 和 Brooks O'quinn。具有高室温优值的薄膜热电器件。《自然》，413(6856):597–602，2001。

[12]Suchismita Ghosh、Wenzhong Bao、Denis L Nika、Samia Subrina、Evghenii P Pokatilov、Chun Ning Lau 和 Alexander A Balandin。少层石墨烯中热输运的维度交叉。《自然·材料》，9(7):555–558，2010。

[13] M. V. Simkin 和 G. D. Mahan。超晶格的最小热导率。物理评论快报，84:927–930，2000年1月。doi: 10.1103/Phys- RevLett.84.927。

[14] Yee Kan Koh、Yu Cao、David G. Cahill 和 Debdeep Jena。超晶格中的热传输机制。*Adv. Funct. Mater.*，19(4)：610–615，2009 年。doi：https://doi.org/10.1002/adfm.200800984。

[15] Jivtesh Garg、Nicola Bonini 和 Nicola Marzari。短周期超晶格中的高热导率。*Nano Lett.*，11(12)：5135–5141，2011 年 12 月。ISSN 1530-6984。doi：10.1021/nl202186y。

[16]Jayakanth Ravichandran、Ajay K Yadav、Ramez Cheaito、Pim B

Rossen、Arsen Soukiassian、SJ Suresha、John C Duda、Brian M Foley、Che-Hui Lee、Ye Zhu 等。《外延氧化物超晶格中从非相干声子散射到相干声子散射的转变》。《自然·材料》，13(2)：168–172，2014。

[17] Allon I Hochbaum、Renkun Chen、Raul Diaz Delgado、Wenjie Liang、Erik C Garnett、Mark Najarian、Arun Majumdar 和 Peidong Yang。粗糙硅纳米线的热电性能增强。《自然》，451(7175):163–167，2008。

[18] Jae Hun Seol、Insun Jo、Arden L Moore、Lucas Lindsay、Zachary H Aitken、Michael T Pettes、Xuesong Li、Zhen Yao、Rui Huang、David Broido 等。支撑石墨烯中的二维声子输运。《科学》，328(5975):213–216，2010。

[19] Alexander ABalandin。石墨烯和纳米结构碳材料的热性质。《自然·材料》，10(8):569–581，2011。

[20] David Michael Rowe。热电学手册：从宏观到纳米。CRC出版社，2005。

[21]Olivier Delaire、Jie Ma、Karol Marty、Andrew F May、Michael A McGuire、Mao-Hua Du、David J Singh、A Podlesnyak、G Ehlers、MD Lumsden 等。碲化铅中的巨大非谐声子散射。《自然·材料》，10(8):614–619，2011。

[22] L. Wang、R. Cheaito、J. L. Braun、A. Giri 和 P. E. Hopkins. 采用结合时域与频域热反射且无需金属薄膜换能器的方法测量非金属的热导率。

《科学仪器评论》，87(9):094902，2016年9月。ISSN 0034-6748。doi: 10.1063/1.4962711。

[23] Aaron M. Lindenberg、Steven L. Johnson 和 David A. Reis。通过飞秒X射线散射技术可视化材料中的原子尺度运动。《材料研究年度评论》，47（第47卷，2017）：425–449，2017。ISSN 1545-4118。doi：https://doi.org/10.1146/annurev-matsci-070616-124152。

[24]Mark S Lundstrom 和 Jing Guo。 纳米尺度晶体管：器件物理、建模与仿真。Springer，2006。

[25]A. Majumdar。介电薄膜中的微尺度热传导。《传热学杂志》，115(1)：7–16，1993年02月。ISSN 0022-1481。doi：10.1115/1.2910673。

[26] Gang Chen。 纳米尺度能量输运与转换：电子、分子、声子和光子的并行处理。牛津大学出版社，2005年03月。doi：10.1093/oso/9780195159424.001.0001。URL https://doi.org/10.1093/oso/9780195159424.001.0001。

[27] David G. Cahill、Paul V. Braun、Gang Chen、David R. Clarke、Shan- hui Fan、Kenneth E. Goodson、Pawel Keblinski、William P. King、Gerald D. Mahan、Arun Majumdar、Humphrey J. Maris、Simon R. Phillpot、Eric Pop 和 Li Shi。《纳米尺度热输运。II：2003–2012》。《应用物理评论》，1(1):011305，2014年1月。ISSN 1931-9401。doi: 10.1063/1.4832615。

[28] Hua Bao、Jie Chen、Xiaokun Gu 和 Bingyang Cao。《微纳尺度热传导模拟方法综述》。*ES Energy Env-iron.*，1(84):16–55，2018年。

[29] Ronald J Warzoha, Adam A Wilson, Brian F Donovan, Nazli Don- mezer, Ashutosh Giri, Patrick E Hopkins, Sukwon Choi, Darshan Pahinkar, Jingjing Shi, Samuel Graham 等。电子封装中纳米尺度热输运的应用与影响。*ASME*《电子封装学报》，143(2):020804,2021。

[30] Xin Qian, Jiawei Zhou 和 Gang Chen。声子工程化极端热导率材料。《自然·材料》，20(9):1188–1202, 2021。

[31] Mark E Siemens, Qing Li, Ronggui Yang, Keith A Nelson, Erik H An- derson, Margaret M Murnane 和 Henry C Kapteyn。利用超快相干软X射线束观测到的纳米尺度界面准弹道热输运。《自然·材料》，9(1):26–30, 2010。

[32] Yongjie Hu、Lingping Zeng、Austin J Minnich、Mildred S Dresselhaus 和 Gang Chen。通过纳米尺度弹道输运实现热导率的谱映射。《自然·纳米技术》，10(8):701–706，2015。

[33] Chuang Zhang、Songze Chen、Zhaoli Guo 和 Lei Wu。用于稳态声子玻尔兹曼输运方程的快速合成迭代方案。《国际传热传质杂志》，174:121308，2021。ISSN 0017-9310。doi: https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.121308。

[34] Cheng Shao、Qingyuan Rong、Nianbei Li 和 Hua Bao。通过原子尺度波包研究理解无序表面声子漫散射的机制

。*Phys. Rev. B*，98:155418，2018年10月。doi: 10.1103/PhysRevB.98.155418。

[35] Navaneetha K. Ravichandran、Hang Zhang 和 Austin J. Minnich. 原子级粗糙表面热声子的光谱分辨镜面反射。《物理评论*X*》，8:041004，2018年10月。doi: 10.1103/PhysRevX.8.041004.

[36]Dhruv Singh、Jayathi Y. Murthy 和 Timothy S. Fisher. 声子色散对硅/锗界面热传导的影响。《传热学杂志》，133(12):122401，2011年10月。ISSN 0022-1481。doi: 10.1115/1.4004429.

[37] Yue Hu、Ru Jia、Jiaxuan Xu、Yufei Sheng、Minhua Wen、James Lin、Yongxing Shen 和 Hua Bao. Giftbte：一种高效的非灰声子玻尔兹曼输运方程确定性求解器。《物理学：凝聚态物质》，36(2):025901，2024年。

[38] JoelSchleeh、J Mateos、Ignacio Íñiguez-De-La-Torre、Niklas Wadefalk、Per-Ake Nilsson、Jan Grahn 和 AJ Minnich。电子设备散热的声子黑体辐射极限。《自然·材料》，14(2)：187–192，2015。

[39]J. Y. Murthy 和 S. R. Mathur。使用非结构化有限体积法计算亚微米热输运。《传热学杂志》，124(6):1176–1181，2002年12月。ISSN 0022-1481。doi: 10.1115/1.1518495。

[40] Yue Hu、Yongxing Shen 和 Hua Bao。用于高效求解非灰玻尔兹曼输运方程的优化声子带离散方案。《传热学杂志》，144(7):072501，2022年4月。ISSN 0022-1481。doi: 10.1115/1.4054300。

[41] Sebastian G. Volz 和 Gang Chen。分子动力学模拟研究硅纳米线的热导率。应用物理快报，75(14)：2056–2058，1999 年 10 月。ISSN 0003-6951。doi：10.1063/1.124914。URL https://doi.org/10.1063/1.124914。

[42] PatrickK Schelling、Simon R Phillpot 和 Pawel Keblinski。计算热导率的原子尺度模拟方法比较。*Phys. Rev. B*，65(14)：144306，2002 年。

[43]N Mingo 和 Liu Yang。涂覆非晶材料的纳米线中的声子输运：一种原子格林函数方法。*Phys. Rev. B*，68(24)：245406，2003 年。

[44]Jian-Sheng Wang、Bijay Kumar Agarwalla、Huanan Li 和 Juzar Thingna。量子热输运的非平衡格林函数方法。物理学前沿，9(6)：673–697，2014 年。

[45] Jie Chen、Xiangfan Xu、Jun Zhou 和 Baowen Li。界面热阻：过去、现在与未来。现代物理评论，94(2):025002，2022。

[46] Jie Zou 和 Alexander Balandin。半导体纳米线中的声子热传导。应用物理学杂志，89(5):2932–2938，2001年3月。ISSN 0021-8979。doi: 10.1063/1.1345515。

[47] David A. Broido、Michael Malorny、Gregor Birner、Natalio Mingo 和 Derek A. Stewart。基于第一性原理的半导体本征晶格热导率。《应用物理快报》，91(23):231922，2007。doi: 10.1063/1.2822891。

[48] Terumasa Tadano、Yoshihiro Gohda 和 Shinji Tsuneyuki。从第一性原理分子动力学中提取非谐力常数：在传热模拟中的应用。*J. Phys.: Condens. Matter*，26(22):225402，2014。

[49] Syed Ashraf Ali、Gautham Kollu、Sandip Mazumder、P Sadayappan 和Arpit Mittal。声子玻尔兹曼输运方程的大规模并行计算。*Int. J. Therm. Sci.*，86:341–351，2014。

[50] Michael F Modest 和 Sandip Mazumder。辐射传热。Academicpress，2021。

[51] G. Tryggvason、R. Scardovelli 和 S. Zaleski。气液多相流的直接数值模拟。剑桥大学出版社，2011。

[52] Sandip Mazumder。 偏微分方程数值方法：有限差分法和有限体积法。学术出版社，2015年。

[53] MDFM Mangani、M Darwish 等。计算流体动力学中的有限体积法。施普林格·查姆，瑞士，2016年。

[54] B. Zhang、S. Popinet 和 Y. Ling。对

非蒸发工况下汽油替代燃料射流初级破碎的建模与详细数值模拟。《*Int. J. Multiph. Flow*》，130:103362，2020。

[55]Sandip Mazumder 和 Arunava Majumdar。考虑色散和极化的固体薄膜声子输运蒙特卡罗研究。《传热学杂志》，123(4):749–759，2001。

[56] Arpit Mittal 和 Sandip Mazumder。考虑光学声子贡献的硅薄膜声子热传导蒙特卡罗研究。《传热学杂志》，132(5):052402，2010 年 3 月。ISSN 0022-1481。doi: 10.1115/1.4000447。

[57] Abhishek Pathak、Avinash Pawnday、Aditya Prasad Roy、Amjad J Aref、Gary F Dargush 和 Dipanshu Bansal。MCBTE：针对声子的线性化玻尔兹曼输运方程的方差缩减蒙特卡罗求解方法。*Computer Physics Communications*，265:108003，2021。

[58] Cheng Shao、Takuma Hori 和 Junichiro Shiomi。P-trans：一种用于模拟任意纳米结构中声子输运的蒙特卡罗光线追踪软件。*Computer Physics Communications*，276:108361，2022。

[59] Junichiro Shiomi、Keivan Esfarjani 和 Gang Chen。基于第一性原理计算的半赫斯勒化合物热导率。$Phys.\ Rev.\ B$，84(10):104302，2011。

[60]Takuma Shiga、Junichiro Shiomi、Jie Ma、Olivier Delaire、Tomasz Radzynski、Andrzej Lusakowski、Keivan Esfarjani 和 Gang Chen。

碲化铅低热导率的微观机制。*Phys. Rev. B*，85(15):155203，2012。

[61] Jie Peng、W Ryan Deskins 和 Anter El-Azab。基于密度泛函理论的各向异性色散关系在整个布里渊区内进行声子热输运的蒙特卡洛建模。*Computational Materials Science*，211：111528，2022。

[62] Wu Li、Jesús Carrete、Nebil A Katcho 和 Natalio Mingo。Sheng-BTE：用于声子的玻尔兹曼输运方程求解器。*Com-put. Phys. Commun.*，185(6)：1747–1758，2014。

[63] Jes ú s Carrete、Bjorn Vermeersch、Ankita Katre、Ambroise van Roekeghem、Tao Wang、Georg KH Madsen 和 Natalio Mingo。almabte：用于结构化材料中声子的时空相关玻尔兹曼输运方程求解器。*Comput. Phys. Com-mun.*，220：351–362，2017。

[64] Giuseppe Romano。Openbte：用于多维结构中第一性原理声子输运的求解器。*arXiv* 预印本 *arXiv:2106.02764*，2021年。

[65] James V. Beck、Ben Blackwell 和 Charles R. St. Clair。逆热传导：不适定问题。Wiley-Interscience，纽约，1985年。ISBN 9780471083191。

[66] C. K. Hsieh 和 A. J. Kassab. 一种求解系统几何形状部分未知的逆热传导问题的通用方法。《国际传热传质杂志》，29(1):47–58，1986。doi: 10.1016/0017- 9310(86)90033-5。

[67] Y. Jarny、M. N. Özisik 和 J. P. Bardon. 一种利用伴随方程求解多维逆热传导问题的通用优化方法。《国际传热传质杂志》，34(11):2911–2919，1991。doi: 10.1016/0017-9310(91)90251-9。

[68] Oleg M. Alifanov. 逆传热问题. 传热与传质国际丛书。Springer-Verlag，柏林，1994。doi: 10.1007/978-3-642-76436-3。

[69] B. Sawaf、M. N. Özisik 和 Y. Jarny。通过逆向分析估算正交各向异性介质中随温度线性变化的热导率分量和热容。《style id='2'>《国际传热传质杂志》，38(16):3005–3010，1995。doi: 10.1016/0017-9310(95)00044-A。

[70] Sun K. Kim、Bup Sung Jung、Hee June Kim 和 Woo Il Lee。各向异性复合材料热物性的逆向估算。《实验热与流体科学》，27(6):697–704，2003。doi: 10.1016/S0894- 1777(02)00309-6。

[71] Sun Kyoung Kim、Joon-Sik Lee 和 Woo Il Lee。利用结合三次样条函数规定法的序列梯度法求解非线性三维逆热传导问题的方法。《数值传热》*B* 辑，43(1)：43–61，2003。doi：10.1080/713836151。

[72] Brent A. Anderson 和 R. Paul Singh。利用逆

方法测量空气冲击解冻过程中的有效传热系数。《国际制冷杂志》，29(2):281–293，2006。doi: 10.1016/j.ijrefrig.2005.05.016。

[73] ZbigniewMalinowski、Tadeusz Telejko、Beata Hadała、Agnieszka Cebo- Rudnicka 和 Artur Szajding。用于反演确定水冷金属板表面热流与传热系数分布的专用三维数值模型。《国际传热传质杂志》，75:347–361，2014。doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2014.03.078。

[74] Sun K. Kim 和 Isaac M. Daniel。纳米尺度反问题热传导的梯度法。《国际数值方法工程学杂志》，60(13): 2165–2181，2004。doi: 10.1002/nme.1041。

[75] Jean-Philippe M Péraud 和 Nicolas G Hadjiconstantinou。用于声子输运计算的基于伴随方法的偏差蒙特卡洛方法。*Phys. Rev. B*, 91(23):235321，2015。

[76] Giuseppe Romano 和 Steven G. Johnson。通过插值界面声子透射进行纳米尺度热输运的逆向设计。结构与多学科优化，65:297，2022。doi：10.1007/s00158-022- 03392-w.

[77] Zhantao Chen、Xiaozhe Shen、Nina Andrejevic、Tongtong Liu、Duan Luo、Thanh Nguyen、Nathan C. Drucker、Michael E. Kozina、Qichen Song、ChengyunHua、Gang Chen、XijieWang、Jing Kong 和 Mingda Li。利用超快电子进行声子输运的全景式映射

衍射与科学机器学习。*Adv. Mater.*，35(2):2206997，2023。doi: 10.1002/adma.202206997。

[78] Kiwon Um、Robert Brand、Yun Raymond Fei、Philipp Holl 和 Nils Thuerey。Solver-in-the-loop：从可微物理中学习，以与迭代偏微分方程求解器交互。*Adv. Neural Inf. Process. Syst.*，33：6111–6122，2020 年。

[79]Philipp Holl、Vladlen Koltun 和 Nils Thuerey。学习使用可微物理控制偏微分方程。在国际学习表征会议，2020 年。

[80] Deniz A Bezgin、Aaron B Buhendwa 和 Nikolaus A Adams。Jax-fluids：用于可压缩两相流的完全可微高阶计算流体力学求解器。*Computer Physics Communications*，282：108527，2023 年。

[81] Tianju Xue、Shuheng Liao、Zhengtao Gan、Chanwook Park、Xiaoyu Xie、Wing Kam Liu 和 Jian Cao。Jax-fem：一种用于自动逆向设计和机理数据科学的可微图形处理器加速三维有限元求解器。*Computer Physics Communications*，291：108802，2023 年。

[82] Bo Zhang。用于可压缩流模拟的可微、激波捕捉神经网络求解器。《物理流体》，38(4):046105，2026年04月。

[83] Maziar Raissi、Paris Perdikaris 和 George E Karniadakis。《物理信息神经网络：用于求解涉及非线性偏微分方程的正问题和反问题的深度学习框架》。《计算物理学杂志》，378:686–707，2019。

[84]Lu Lu、Xuhui Meng、Zhiping Mao 和 George Em Karniadakis。DeepXDE：用于求解微分方程的深度学习库。*SIAM*评论，63(1):208–228，2021。doi: 10.1137/19M1274067。

[85] George Em Karniadakis、IoannisG Kevrekidis、Lu Lu、Paris Perdikaris、Sifan Wang 和 Liu Yang。物理信息机器学习。《自然·物理评论》，3(6):422–440，2021。

[86] Xiaowei Jin、Shengze Cai、Hui Li 和 George Em Karniadakis。NSFNets（Navier–Stokes 流网络）：用于不可压缩 Navier–Stokes 方程的物理信息神经网络。《计算物理学杂志》，426:109951，2021。

[87] Salvatore Cuomo、Vincenzo Schiano Di Cola、Fabio Giampaolo、Gian- luigi Rozza、Maziar Raissi 和 Francesco Piccialli。通过物理信息神经网络开展科学机器学习：现状与未来。《科学计算杂志》，92(3):88，2022。

[88]Jeremy Yu、Lu Lu、Xuhui Meng 和 George Em Karniadakis。用于正向与逆向偏微分方程问题的梯度增强物理信息神经网络。《计算方法与应用力学和工程》，393: 114823，2022。

[89] Justin Sirignano、Jonathan F MacArt 和 Jonathan B Freund。DPM：一种深度学习偏微分方程增强方法，并应用于大涡模拟。《计算物理学杂志》，423:109811，2020。

[90] Dmitrii Kochkov、JamieASmith、AyyaAlieva、QingWang、MichaelP Brenner 和 Stephan Hoyer。机器学习加速的计

算流体力学。美国国家科学院院刊，118(21): e2101784118，2021年。

[91] Björn List、Li-Wei Chen 和 Nils Thuerey。利用可微流体求解器进行湍流建模：基于物理的损失函数与优化时间范围。*J. Fluid Mech.*，949:A25，2022。

[92] Bo Zhang、Xiantao Fan 和 Jian-Xun Wang。用于高效模拟空化流的可微混合神经求解器。载于美国物理学会通报，美国华盛顿特区，2023年。美国物理学会。

[93] Samuel S Schoenholz 和 Ekin D Cubuk。JAX, MD：一个用于可微物理的框架。*J. Stat. Mech.: Theory Exp.*，2021(12):124016，2021。

[94] Bo Zhang、Wenjie Shang、Jyoti Panda、Jiahang Zhou、Jianxun Wang 和 Tengfei Luo。JAX-BTE：一种用于深度学习加速纳米电子学热建模的可微混合神经求解器。载于*ASME 2024*年夏季传热会议，美国加利福尼亚州阿纳海姆，2024年。

[95] Li Li、Stephan Hoyer、Ryan Pederson、Ruoxi Sun、Ekin D Cubuk、Patrick Riley 和 Kieron Burke。将 Kohn-Sham 方程作为正则化器：将先验知识融入机器学习物理。物理评论快报，126(3):036401，2021。

[96]James Bradbury、Roy Frostig、Peter Hawkins、Matthew J. Johnson、Chris Leary、Dougal Maclaurin、George Necula、Adam Paszke、Jake VanderPlas、Skye Wanderman-Milne 和 QiaoZhang。

JAX：Python+NumPy 程序的可组合变换。
http://github.com/google/jax，2018。

[97] Bo Zhang。可压缩空气动力学中的信息传输与可观测性。《物理流体》，38(10):106114，2026年10月。

[98] Eric Pop、Sanjiv Sinha 和 Kenneth E Goodson。纳米级晶体管中的热生成与传输。《*IEEE*会刊》，94(8):1587–1601，2006。

[99] Mayank Shrivastava、Manish Agrawal、Sunny Mahajan、Harald Goss- ner、Thomas Schulz、Dinesh Kumar Sharma 和 V. Ramgopal Rao。面向FinFET架构的热传输物理洞见与改进的电热建模框架。*IEEE*电子器件汇刊，59(5):1353–1363，2012。doi: 10.1109/TED.2012.2188296。

[100] Bala Krishna Kompala、Pragya Kushwaha、Harshit Agarwal、Sourabh Khandelwal、Juan-Pablo Duarte、Chenming Hu 和 Yogesh Singh Chauhan。FinFET中非线性热阻的建模。《日本应用物理学杂志》，55(4S):04ED11，2016年3月。doi: 10.7567/JJAP.55.04ED11。

[101]Rajeev Pankaj Nelapati 和 Sivasankaran K. 自热效应对混合FinFET性能的影响。微电子学杂志，76:63–68，2018。ISSN 1879-2391。doi: https://doi.org/10.1016/j.mejo.2018.04.015。

[102]W. Ahn、S.H. Shin、C. Jiang、H. Jiang、M.A. Wahab 和 M.A. Alam。受限ge-

ometry（鳍式场效应晶体管、纳米线场效应晶体管和纳米片场效应晶体管）晶体管自热的集成建模及其对 20 纳米以下现代集成电路可靠性的影响。微电子可靠性，81：262–273，2018。ISSN 0026-2714。doi：https://doi.org/10.1016/j.microrel.2017.12.034。

[103] Houssem Rezgui、FaouziNasri、Abdessalem Ben Haj Ali 和 Amen Allah Guizani。使用声子流体动力学方程分析亚 7 纳米绝缘体上硅鳍式场效应晶体管工艺节点中的超快瞬态热输运。《*IEEE*电子器件汇刊》，68(1):10–16，2021。doi: 10.1109/TED.2020.3039200。

[104] Faouzi Nasri、Hichem Guedri、Mohamed Fadhel Ben Aissa、Youssef Trabelsi、Nejeh Jaba、Hafedh Belmabrouk 和 Mohamed Atri。焦耳效应对纳米鳍式场效应晶体管热响应的影响。*Superlattice. Microst.*，156:106980，2021。

[105] Huali Duan、Erping Li、Qinyi Huang、Da Li、Zhufei Chu、Jian Wang 和 Wenchao Chen。从多物理场角度研究热应力对纳米尺度 p 型鳍式场效应晶体管亚阈值导电的影响。应用物理学杂志，135(10):104502，2024 年 3 月。ISSN 0021-8979。doi: 10.1063/5.0197002。

[106]Baoyi Hu、Zhaoliang Wang、Ke Xu 和 Dawei Tang。氮化铝镓/氮化镓鳍式场效应晶体管中的热点与非平衡热输运：电子-声子耦合蒙特卡罗模拟研究。*Int.J. HeatMassTransfer*，241:126679，2025。ISSN 0017-9310。doi：https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2025.126679。

[107] Xixin Rao、Kongzhang Huang、YiPeng Wu、Haitao Zhang 和 Chengdi Xiao。考虑焦耳热效应的鳍式场效应晶体管弹道热阻分析。*Micro Nanostruct.*，201:208113，2025。ISSN 2773-0123。doi: https://doi.org/10.1016/j.micrna.2025.208113。

[108]Baoyi Hu、Zhaoliang Wang 和 Dawei Tang。通过电子-声子耦合蒙特卡罗模拟研究应变氮化铝镓/氮化镓鳍式场效应晶体管中的热点形成与热输运。《国际传热传质杂志》，263:128658，2026年。ISSN 0017-9310。doi: https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2026.128658。

[109] Charles Kittel。 固体物理学导论。Wiley，1953年。

[110] John M Ziman。 电子与声子：固体中输运现象理论。牛津大学出版社，1960年。

[111] Yue Hu、Yongxing Shen 和 Hua Bao。利用声子玻尔兹曼输运方程，以超高效率、无参数的方式计算亚微米热输运。*Fundam. Res.*，4(4):907–915，2024年。

[112] Fan Yang 和 Chris Dames。平均自由程谱是理解块体和纳米结构中热导率的一种工具。*Phys. Rev. B*，87:035437，2013 年 1 月。doi: 10.1103/PhysRevB.87.035437。URL https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.87.035437。

[113] F. Moukalled、L. Mangani 和 M Darwish。计算流体力学中的有限体积法。Springer，2016 年。

[114] Timothy Barth 和 Dennis Jespersen。《迎风格式》的设计与应用

在第 *27* 届航空航天科学会议上，论文第 366 页，1989 年。

[115] John C Tannehill、Dale A Anderson 和 Richard H Pletcher。《计算流体力学与传热》。Taylor & Francis，1997。

[116] Zhaoli Guo 和 Kun Xu。基于声子玻尔兹曼输运方程的多尺度传热离散统一气体动理学格式。《国际传热传质杂志》，102:944–958，2016。