



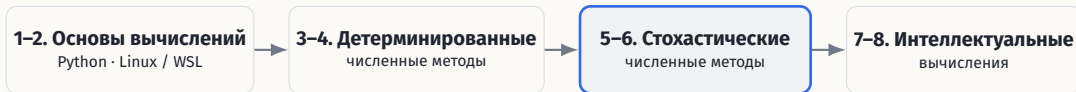
Метод Монте-Карло в задачах переноса

От случайного блуждания к уравнению Больцмана
и фоновому переносу

Лю Шисян

Кафедра теплофизики (Э6)
МГТУ им. Н.Э. Баумана
Москва / 2026

Место этой лекции в курсе



Лекция 6 — Monte Carlo в задачах переноса

В лекции 5 случайность использовалась для интегрирования и случайного блуждания. Теперь перейдём к **траекториям реальных переносчиков**: свободный полёт, случайное событие, новое состояние.

После лекции вы сможете:

- моделировать свободный полёт и случайные события;
- объяснять связь ансамбля траекторий с уравнением Больцмана;
- описывать базовый алгоритм фоновонного Monte Carlo.

План

- 1 От случайного блуждания к переносу
- 2 Метод Monte Carlo в задачах переноса
- 3 Уравнение Больцмана и фоновый Monte Carlo
- 4 Практика и итоги

ТОС

1

От случайного блуждания к переносу

От случайного блуждания к Transport Monte Carlo

В лекции 5 мы рассматривали простое случайное блуждание:

$$x_{n+1} = x_n + \Delta x_n, \quad \Delta x_n = \pm \ell.$$

Случайное блуждание

$$\Delta t = \text{const}, \quad |\Delta x| = \ell.$$

На каждом шаге:

$$x_n \xrightarrow{\text{случайный выбор}} x_{n+1}.$$

Случайность вводится **на каждом временном шаге**.

Transport Monte Carlo

Частица сначала движется свободно:

$$\mathbf{r}(t + \tau) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v} \tau,$$

а затем происходит случайное событие.

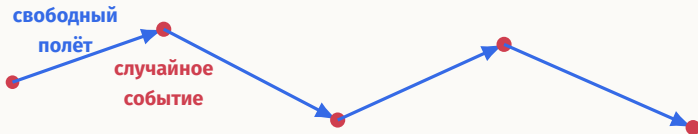
Случайными могут быть:

- время до следующего события;
- тип происходящего события;
- состояние частицы после события.

Главное отличие: между случайными событиями движение определяется физическими законами.

Микроскопическая картина переноса

Рассмотрим одну вычислительную частицу. Её движение состоит из последовательности **свободных полётов** и **случайных событий**.



Свободный полёт

Сначала случайно определяется время до следующего события τ .
Если скорость между событиями постоянна,

$$\mathbf{r}(t + \tau) = \mathbf{r}(t) + \mathbf{v} \tau.$$

При заданном τ движение **детерминировано**.

Случайное событие

В конце свободного полёта происходит случайное событие.

В результате могут измениться:

- направление;
- скорость;
- энергия.

Новое состояние выбирается по заданным вероятностям.

Состояние вычислительной частицы

Чтобы продолжить траекторию, программа должна хранить **текущее состояние** частицы.

$$\mathcal{S} = \{\mathbf{r}, \mathbf{v}, E, t, w, s, \dots\}$$

Кинематические переменные

$\mathbf{r}$ положение,

$\mathbf{v}$ скорость и направление,

t текущее время.

Они определяют движение частицы между событиями.

Внутреннее состояние

E энергия,

s тип, мода, ветвь и т.п.,

w статистический вес.

Они определяют вероятности последующих процессов.

Вычислительная частица

Одна Monte Carlo-частица не обязана соответствовать одной физической частице. При весе w одна траектория может представлять большое число одинаковых физических носителей.

Один алгоритм — разные задачи переноса

Физическая природа переносчика и возможных событий зависит от задачи, но структура Monte Carlo остаётся общей.

Задача	Носитель	Движение	Случайные события
Нейтронный перенос	нейтрон	свободный полёт	рассеяние, поглощение
Перенос излучения	фотон	распространение в среде	рассеяние, поглощение
Полупроводники	электрон	движение в поле	рассеяние на фононах, примесях, дефектах
Теплоперенос	фонон	свободный полёт с групповой скоростью	фонон-фононное, дефектное, электрон-фононное и граничное рассеяние



2

Метод Monte Carlo в задачах переноса

Как распределено время свободного полёта?

Пусть случайные события происходят с постоянной интенсивностью

$$\Gamma = \frac{1}{\tau},$$

где Γ — интенсивность событий, а τ — среднее время между событиями.

Вероятность свободного полёта

Вероятность того, что за время t событие ещё не произошло:

$$P_{\text{free}}(t) = e^{-\Gamma t} = e^{-t/\tau}$$

Чем больше t , тем меньше вероятность продолжительного свободного полёта.

Среднее время свободного полёта

Для экспоненциального закона среднее время до события равно

$$\langle t_{\text{free}} \rangle = \frac{1}{\Gamma} = \tau$$

То есть τ задаёт характерный временной масштаб между событиями.

Постоянная интенсивность событий $\Rightarrow$ экспоненциальный закон свободного полёта.

Как сгенерировать время свободного полёта?

Из предыдущего слайда:

$$P_{\text{free}}(t) = e^{-t/\tau}.$$

Генерируем случайное число

$$\xi \in (0, 1)$$

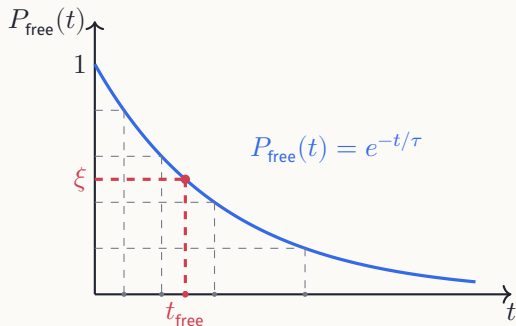
и приравниваем:

$$\xi = P_{\text{free}}(t_{\text{free}}) = e^{-t_{\text{free}}/\tau}.$$

Отсюда

$$\ln \xi = -\frac{t_{\text{free}}}{\tau},$$

$$t_{\text{free}} = -\tau \ln \xi$$



По значению ξ находим соответствующее время t_{free} .

Что происходит после выбора t_{free} ?

После генерации времени свободного полёта

$$t_{\text{free}} = -\tau \ln \xi$$

частица детерминированно движется до следующего события.

1. Свободный полёт

Если скорость между событиями постоянна,

$$\mathbf{r}_{\text{new}} = \mathbf{r}_{\text{old}} + \mathbf{v} t_{\text{free}}$$

Для движения вдоль оси x :

$$x_{\text{new}} = x_{\text{old}} + v_x t_{\text{free}}.$$

На этом участке случайности уже нет.

2. Случайное событие

В конце свободного полёта происходит событие.

Если возможны несколько процессов, необходимо определить:

- какой тип события произошёл;
- как изменилось состояние частицы.

Например:

$$\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{v}', \quad E \rightarrow E'.$$

Сначала случайно определяется время события, затем детерминированно вычисляется движение.

Как выбрать тип случайного события?

Пусть возможны несколько независимых процессов с интенсивностями $\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_N$. Общая интенсивность событий:

$$\Gamma_{\text{tot}} = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \dots + \Gamma_N$$

и среднее время до следующего события:

$$\tau = \frac{1}{\Gamma_{\text{tot}}}$$

Вероятность каждого события

Вероятность того, что произойдёт событие типа i :

$$P_i = \frac{\Gamma_i}{\Gamma_{\text{tot}}}$$

Чем больше интенсивность процесса, тем чаще он выбирается.

Розыгрыш события

Генерируем новое случайное число $\xi_2 \in (0, 1)$.
Например, для трёх процессов:

$$0 < \xi_2 < P_1 \Rightarrow \text{событие 1,}$$

$$P_1 < \xi_2 < P_1 + P_2 \Rightarrow \text{событие 2,}$$

$$P_1 + P_2 < \xi_2 < 1 \Rightarrow \text{событие 3.}$$

Первое случайное число задаёт время события, второе — его тип.

Как изменяется состояние после события?

После выбора типа события необходимо определить, как это событие изменяет состояние частицы.

$$\mathcal{S}_{\text{old}} \longrightarrow \mathcal{S}_{\text{new}}$$

Что может измениться?

В зависимости от типа события могут измениться:

- направление движения;
- скорость;
- энергия;
- внутреннее состояние.

Как определить новое состояние?

Для выбранного события разыгрывается его конкретный результат.

Например:

- при рассеянии на границе — новое направление;
- для фонона — новая мода или ветвь.

После этого частица продолжает движение уже в новом состоянии.

Тип события определяет, какие параметры частицы необходимо изменить.

Два подхода к моделированию случайных событий

Одни и те же случайные процессы можно моделировать двумя разными способами.

Событийный Monte Carlo

Сразу генерируется время до следующего события:

$$t_{\text{free}}^{(n)} = -\tau \ln \xi_n.$$

После этого время обновляется:

$$t_{n+1} = t_n + t_{\text{free}}^{(n)}$$

Интервалы между событиями **случайны**.

Пошаговый Monte Carlo

Заранее задаётся постоянный шаг

$$\Delta t = \text{const.}$$

Время обновляется по правилу:

$$t_{n+1} = t_n + \Delta t$$

На каждом шаге проверяется, произошло событие или нет.

Шаг по времени **фиксирован**.

Событийный МС: случайно время следующего события.

Пошаговый МС: время шага задано, случайно наличие события на этом шаге.

Пошаговый Monte Carlo

В пошаговом Monte Carlo движение системы разбивается на одинаковые интервалы времени

$$\Delta t = \text{const}$$

и расчёт последовательно выполняется для каждого временного шага.

1. Перемещение

За один временной шаг частица перемещается на расстояние

$$\Delta \mathbf{r} = \mathbf{v} \Delta t.$$

Поэтому

$$\mathbf{r}_{n+1} = \mathbf{r}_n + \mathbf{v}_n \Delta t$$

и

$$t_{n+1} = t_n + \Delta t.$$

2. Проверка события

За время Δt событие может произойти с некоторой вероятностью P_{event} .

Генерируем случайное число $\xi \in (0, 1)$.

Если

$$\xi < P_{\text{event}}$$

то событие происходит.

Если нет — частица продолжает движение.

Каждый шаг: перемещение → проверка события → следующий шаг.

Вероятность события и выбор временного шага

Для фиксированного шага Δt вероятность отсутствия события равна

$$P_{\text{free}}(\Delta t) = e^{-\Delta t/\tau}.$$

Следовательно, вероятность события за один шаг:

$$P_{\text{event}} = 1 - P_{\text{free}}(\Delta t) = 1 - e^{-\Delta t/\tau}$$

Как выбрать Δt ?

Временной шаг должен быть мал по сравнению со средним временем между событиями:

$$\Delta t \ll \tau$$

Почему это важно?

Если Δt слишком велик, за один шаг могут произойти несколько событий.

Простой алгоритм

”один шаг $\rightarrow$ одна проверка” тогда становится неточным.

При малом Δt вероятность нескольких событий за один шаг мала.

Меньший Δt повышает точность, но увеличивает вычислительные затраты.

Событийный и пошаговый Monte Carlo: сравнение

Два подхода отличаются тем, **как организовано продвижение системы во времени.**

	Событийный Monte Carlo	Пошаговый Monte Carlo
Основная идея	Частица сразу переходит от одного события к следующему	Все частицы продвигаются с одинаковым шагом Δt
Внешний цикл	Обычно по частицам и их траекториям	Обычно по времени
Главное преимущество	Высокая эффективность: не тратятся вычисления на шаги без событий	Удобно учитывать эволюцию системы: на каждом шаге можно обновлять локальные параметры
Ограничение	Сложнее при сильном изменении температуры и интенсивностей событий	Малый Δt увеличивает число шагов и вычислительные затраты

Температурная зависимость в пошаговом Monte Carlo

На каждом временном шаге

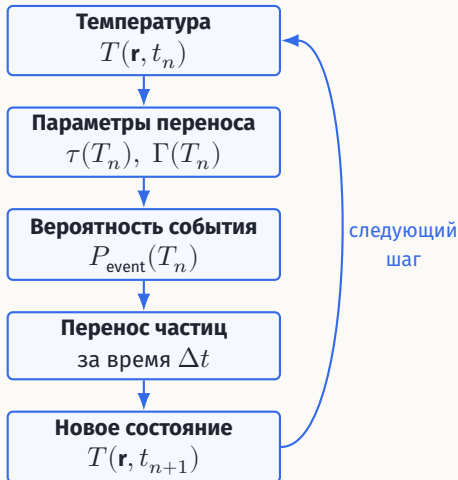
Для момента t_n :

1. определяем локальную температуру $T(\mathbf{r}, t_n)$;
2. обновляем

$$\tau(T_n), \quad \Gamma(T_n);$$

3. определяем вероятность события;
4. перемещаем частицы за Δt ;
5. рассчитываем новое состояние системы

$$T(\mathbf{r}, t_{n+1}).$$



3

Уравнение Больцмана и фоновый Monte Carlo

Уравнение Больцмана для фононов

Для фоновой моды λ функция распределения $f_\lambda(\mathbf{r}, t)$ показывает, насколько заполнено данное состояние в точке $\mathbf{r}$ в момент времени t .

Уравнение переноса Больцмана имеет вид

$$\frac{\partial f_\lambda}{\partial t} + \mathbf{v}_\lambda \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f_\lambda = \left(\frac{\partial f_\lambda}{\partial t} \right)_{\text{coll}}$$

Перенос

$$\frac{\partial f_\lambda}{\partial t} + \mathbf{v}_\lambda \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f_\lambda$$

описывает изменение распределения из-за движения фононов с групповой скоростью $\mathbf{v}_\lambda$.

Столкновения

$$\left(\frac{\partial f_\lambda}{\partial t} \right)_{\text{coll}}$$

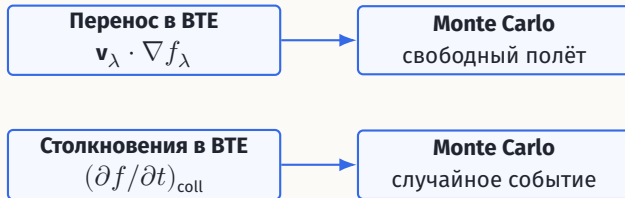
описывает изменение распределения из-за процессов рассеяния.

При рассеянии фонон может перейти $\lambda \rightarrow \lambda'$.

Уравнение Больцмана объединяет движение фононов и их рассеяние.

Как Monte Carlo связан с уравнением Больцмана?

Уравнение Больцмана описывает **распределение**, а Monte Carlo моделирует **отдельные траектории**.



Для одной частицы:

свободный полёт $\rightarrow$ рассеяние $\rightarrow$ свободный полёт $\rightarrow \dots$

Для большого ансамбля частиц:

множество траекторий $\rightarrow f_\lambda(\mathbf{r}, t)$

Monte Carlo статистически воспроизводит эволюцию функции распределения.

Фонон как вычислительная частица

Фононное состояние обозначим

$$\lambda = (\mathbf{q}, s)$$

где $\mathbf{q}$ — волновой вектор, а s — номер фононной ветви.

Свойства фононной моды

Для каждой моды λ определены

ω_λ частота,

$\mathbf{v}_\lambda$ групповая скорость,

τ_λ время жизни,

$\varepsilon_\lambda = \hbar\omega_\lambda$ энергия.

Состояние МС-частицы

Вычислительная частица может хранить

$$\mathcal{S} = \{\mathbf{r}, \lambda, t, w\}$$

где

$\mathbf{r}$ — положение,

λ — фононная мода,

w — статистический вес.

Два подхода для фононного Monte Carlo

Результаты второй главы непосредственно переносятся на фононный транспорт.

Событийный Monte Carlo

Для текущей моды λ

$$t_{\text{scat}} = -\tau_{\lambda} \ln \xi$$

и фонон движется со скоростью

$$\mathbf{v}_{\lambda}.$$

Положение обновляется:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{v}_{\lambda} t_{\text{scat}}.$$

Пошаговый Monte Carlo

Все фононы продвигаются на

$$\Delta t = \text{const.}$$

Для моды λ

$$P_{\text{scat}} = 1 - e^{-\Delta t / \tau_{\lambda}}$$

или, если свойства зависят от температуры,

$$\tau_{\lambda} = \tau_{\lambda}(T).$$

В gray-модели используется одно τ , в full-band модели — своё τ_{λ} для каждой моды.

От траекторий к температуре и тепловому потоку

Локальная энергия и температура

В ячейке объёма V_c локальная плотность энергии оценивается как

$$u_c = \frac{1}{V_c} \sum_{i \in c} w_i \hbar \omega_i$$

Температуру T_c определяем из условия

$$u_c = u_{\text{eq}}(T_c)$$

где $u_{\text{eq}}(T)$ — равновесная плотность энергии фононов при температуре T .

$$u_{\text{eq}}(T) = \frac{1}{V} \sum_{\lambda} \hbar \omega_{\lambda} f_{\lambda}^0(T).$$

Тепловой поток

Каждый фонон переносит энергию

$$\hbar \omega_i$$

с групповой скоростью $\mathbf{v}_i$.

Поэтому тепловой поток оценивается как

$$\mathbf{q}_c \approx \frac{1}{V_c} \sum_{i \in c} w_i \hbar \omega_i \mathbf{v}_i$$

Направление и величина $\mathbf{q}_c$ определяются статистикой движения фононов.

Два алгоритма фоновонного Monte Carlo

Событийный Monte Carlo

```
for particle in range(N):  
    while not finished:  
        dt_free = -tau * np.log(  
            np.random.rand()  
        )  
        x += vx * dt_free  
        mode = sample_scattering_mode()  
        vx = sample_new_velocity()
```

Пошаговый Monte Carlo

```
for t in range(Ntt):  
    for phonon in phonons:  
        x += vx * dt  
        P = 1 - np.exp(-dt / tau)  
        if np.random.rand() < P:  
            scatter(phonon)  
    update_temperature()
```

Пример открытой реализации: github.com/jeanphilippeperaud/1D_KMC_matlab

4

Практика и итоги

Практическое задание

Задача: теплопроводность плёнки Si

Используя две реализации фоновонного Monte Carlo:

Событийный MC и Пошаговый MC

рассчитать эффективную теплопроводность плёнки Si при нескольких значениях толщины L .

Параметры расчёта

Оставить одинаковыми:

$$T_L = 301 \text{ К}, \quad T_R = 299 \text{ К}, \quad T_{\text{eq}} = 300 \text{ К}.$$

Изменять только толщину плёнки. Для каждого L выполнить расчёт двумя алгоритмами.

Что необходимо получить?

Из рассчитанного теплового потока определить

$$k_{\text{eff}} = - \frac{\langle q_x \rangle}{(T_R - T_L)/L}$$

и построить зависимость $k_{\text{eff}}(L)$ для двух методов на одном графике.

Сегодня мы прошли путь

Случайное блуждание → свободный полёт и случайное событие → фоновый Monte Carlo

- При постоянной интенсивности событий время свободного полёта имеет экспоненциальное распределение:

$$t_{\text{free}} = -\tau \ln \xi.$$

- В событийном Monte Carlo частица сразу переходит к следующему случайному событию.
- В пошаговом Monte Carlo все частицы продвигаются с фиксированным шагом Δt :

$$P_{\text{scat}} = 1 - e^{-\Delta t / \tau_{\lambda}}.$$

- Фоновый Monte Carlo позволяет учитывать спектральные свойства фононов, внутреннее рассеяние и влияние границ.
- Из статистики фоновых траекторий можно определить $T(x, t)$, q_x и k_{eff} .

Практика: $k_{\text{eff}}(L)$ плёнки Si двумя алгоритмами Monte Carlo.