МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОБРАБОТКА ДАННЫХ

Научная статья

УДК 004.94
DOI: 10.18101/2304-5728-2025-4-65-74

ВЛИЯНИЕ ГЕОМЕТРИИ НА ЗАХВАТ ЧАСТИЦ В ДИФФУЗИОННОЙ МОДЕЛИ

© Архинчеев Валерий Ефимович
доктор физико-математических наук, профессор,
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
Россия, 670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а
varkhin@mail.ru

© Дерюгин Даниил Федорович
старший преподаватель,
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
Россия, 670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а
derugindf@bsu.ru

© Хабитуев Баир Викторович
старший преподаватель,
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
Россия, 670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а
bairkhabituev@bsu.ru

© Ханхаев Андрей Владимирович
студент,
Бурятский государственный университет имени Доржи Банзарова
Россия, 670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина, 24а
andrham2004@yandex.ru

Аннотация. В работе численно исследуется долговременная асимптотика вероятности выживания частиц, диффундирующих в двумерных областях со случайно расположенными поглощающими ловушками. Исследованы две области: фрактальная, построенная на основе кривой Коха, и обычная прямоугольная с неравномерной плотностью посева ловушек, имитирующей проекцию фрактала. Методом Монте-Карло смоделировано движение ансамбля частиц, проанализирована зависимость времени жизни системы и финального числа выживших частиц от количества ловушек. Установлено, что во фрактальной области захват частиц происходит медленнее, что приводит к значительно более высокому уровню выживаемости на больших временах. Показано, что для обеих областей зависимость времени жизни от количества ловушек наилучшим образом аппроксимируется гиперболической функцией, что согласуется с теоретическими результатами.

Ключевые слова: диффузия, поглощающие ловушки, случайные блуждания, фрактальная геометрия, кривая Коха, метод Монте-Карло, численное моделирование, захват частиц.

Благодарности

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда № 24-21-00356, https://rscf.ru/project/24-21-00356/

Для цитирования

Влияние геометрии на захват частиц в диффузионной модели / *В. Е. Архинчеев, Д. Ф. Дерюгин, Б. В. Хабитуев, А. В. Ханхаев* // Вестник Бурятского государственного университета. Математика, информатика. 2025. № 4. С. 65–74.

Введение

Диффузия частиц в средах с поглощающими ловушками изучалась во многих работах [1–3]. Интерес обусловлен как ожидаемыми новыми особенностями в транспорте частиц, так и различными приложениями. Одной из актуальных областей применения являются low-k диэлектрики [4–6].

Исследование диффузионных процессов в прикладных задачах часто приводит к необходимости работать с достаточно сложными двумерными и трёхмерными областями [7–9]. В качестве модели для описания объектов со сложной структурой можно использовать фракталы и их производные. В случае исследования скорости захвата частиц на ловушки в фрактальных областях возникла идея использовать аналогичные области с более простой структурой за счёт сгущения посева ловушек на некоторой части области.

В настоящей статье исследованы долговременные асимптотики вероятности выживания частиц, диффундирующих во фрактальной области, проведено сравнение с аналогичной плоской областью.

Статья выстроена следующим образом. Во втором пункте статьи сформулирована постановка задачи, кратко описаны алгоритмы и методы численного моделирования, а также приводятся характеристики областей и посевов ловушек. В третьем пункте изложены основные результаты численного эксперимента. В четвертом пункте обсуждаются особенности долговременных асимптотик вероятности выживания активных частиц. В заключении обсуждаются результаты.

1 Постановка задачи

В статье рассматривается диффузия частиц в двумерных областях. Область № 1 представляет собой двумерный фрактал, полученный из фрагмента кривой Коха (рис. 1).

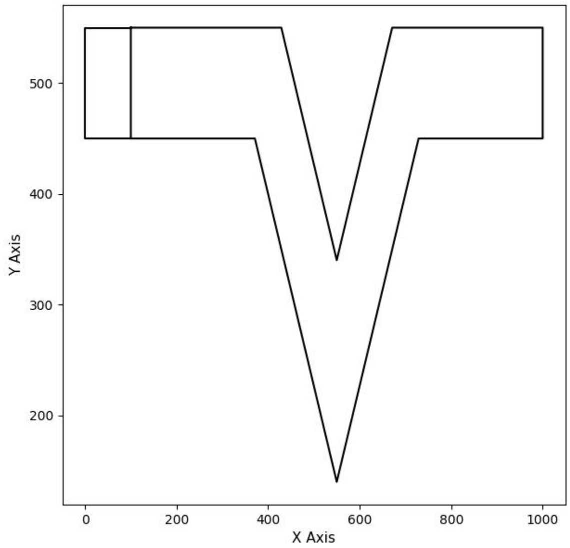

Рис. 1. Двумерная кривая Коха

Фрактал получен смещением кривой фрагмента кривой Коха по оси y. Высота фрактала — 100, длина — 900 (размеры приведены в условных единицах). На границах кривой произвольным образом размещаются ловушки. Слева от основной фигуры размещается буферная зона.

Область № 2 — прямоугольная область, высота — 100, длина — 900. В ряде источников предлагается моделировать фрактальные области как проекцию на ось абсцисс. В связи с этим область разделена на 3 части: центральную и две боковые (рис. 2).

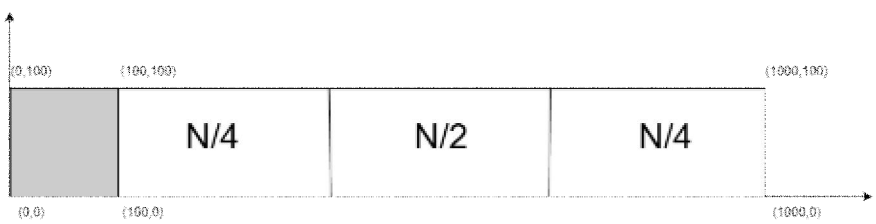

Рис. 2. Прямоугольная область

Посев ловушек проводится на границы области в соотношении, изображённом на рис. 2, здесь N — общее количество ловушек.

Для моделирования движения частиц воспользуемся вероятностным подходом, предложенным в классических работах [10; 11], данный подход позволяет моделировать диффузию частиц в различных областях [12; 13].

На каждой итерации алгоритма частица случайным образом выбирает направление движения — одно из четырёх возможных (по направлению осей координат). Новая координата определяется смещением по выбранному направлению на условную единицу. При этом соблюдаются следующие правила:

1) если новая координата не занята другой частицей, то частица перемещается в неё, иначе остаётся на своём месте;
2) при достижении границы области частица «отражается», то есть возвращается в исходное положение;
3) если в новой координате располагается ловушка, то частица исключается из дальнейшего итерационного процесса, а ловушка деактивируется и больше не поглощает частицы.

2 Процесс моделирования и результаты

Для описанных областей сгенерировано 75 посевов с количеством ловушек $700 \leq M \leq 2200$, посевы генерировались с дискретным шагом $\Delta M = 20$. Для каждого посева проведено 20 независимых запусков алгоритма количество итераций в запуске — 3 000 000, первоначальное количество частиц постоянно и равно 1 000.

Данные по числу активных частиц фиксировались через каждые 1000 числа шагов по времени (число итераций) для указанных конфигураций ловушек. Также отдельно фиксировался номер итерации, на котором количество активных частиц становится меньше, чем вычисленное время жизни. Полученные данные по конфигурациям были усреднены и построен график изменения количества активных частиц от времени (числа итераций). Для генерации случайных чисел был использован алгоритм «Вихрь Мерсенна».

2.1 Асимптотическое поведение на больших временах

Для начала рассмотрим, как изменяется количество активных частиц после завершения итераций, то есть частиц, которые не были поглощены ловушками. На рис. 3 представлены графики зависимости финального количества активных частиц от количества ловушек в посеве.

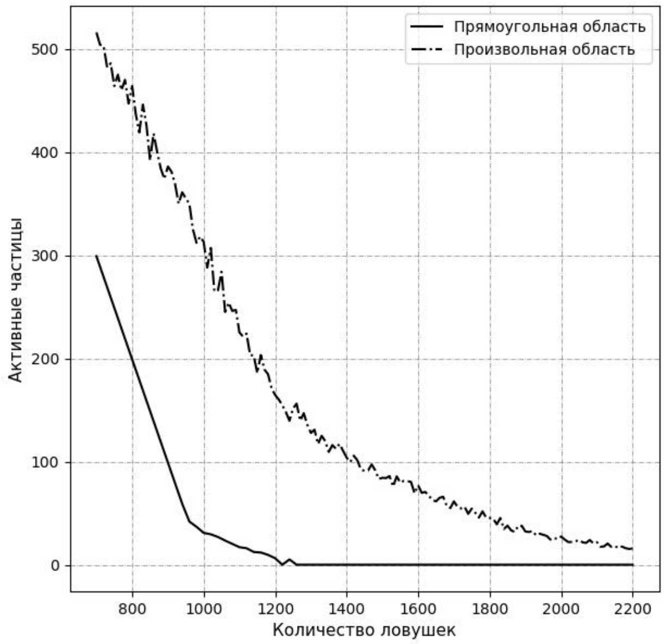

Рис. 3. Зависимость количества выживших частиц при различных количествах ловушек. Сплошная линия — область № 1, пунктирная линия — область № 2

При увеличении количества ловушек число активных частиц уменьшается в обеих областях, однако ввиду более сложной геометрической структуры захват на ловушки в области № 1 происходит медленнее, как следствие, после завершения итерационного процесса во фрактальной области количество активных частиц выше. Стоит отметить, что начиная с M>1200 в области № 2 все частицы захватываются на ловушки.

В работе [14] нами предложено рассматривать величину «время вымирания» (в данной статье мы будем использовать более корректную формулировку: время жизни) в качестве характеристики скорости захвата частиц на ловушки. Время жизни определяется формулой:

$$\tau = \arg\min_t \left(N_t \le \frac{N_0}{e} \right), \tag{1}$$

где N_0 — Начальное количество частиц, N_t — количество активных (незахваченных) частиц на итерации *t, e* — экспонента. То есть время жизни — номер итерации, когда система теряет примерно 63% от начального количества частиц. Для описанного эксперимента это означает, что должна быть поглощена 631 частица.

Рассмотрим зависимость времени жизни от количества ловушек. На рис. 4 представлена зависимость среднего (по запускам) времени жизни от количества ловушек.

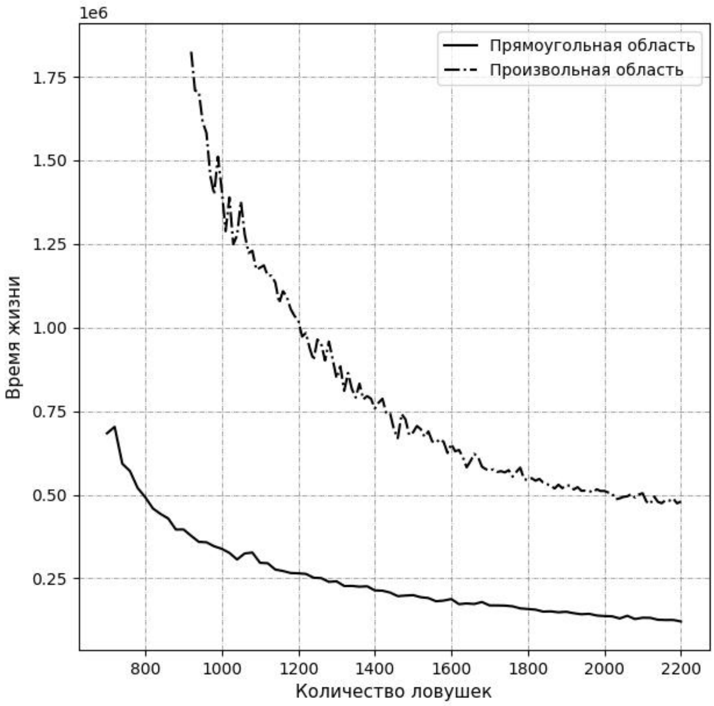

Рис. 4. Зависимость количества выживших частиц при различных количествах ловушек. Сплошная линия — область № 1, пунктирная линия — область № 2

При увеличении количества ловушек частицы быстрее захватываются, как следствие, время жизни уменьшается. Отметим, что в прямоугольной области время жизни достигается на всех конфигурациях, в то время как для фрактальной время жизни было впервые достигнуто при M=920. Как и в случае с количеством активных частиц, графики существенно отличаются, при этом визуальный анализ не даёт однозначной оценки характеру убывания.

2.2 Аппроксимация

Для определения характера убывания проведём аппроксимацию времени жизни для двух зависимостей. Для вычисления коэффициентов аппроксимации была использована функцию curve_fit из библиотеки SciPy. В таблице 1 представлены результаты.

Таблица 1

Средняя ошибка аппроксимации

Аппроксимирующая функция	Область № 1, %	Область № 2
$\frac{a}{x}+b$	7.484	8.004
$a\ln(x)+b$	11.134	13.897
ax^2+bx+c	4.919	9.45
$ax+b$	14.649	18.861
$\frac{a}{\sqrt{x}}+b$	9.327	11.073
$\frac{a}{x^b}$	-	18.861

В таблице 1 приведены результаты аппроксимации в первом столбце — вид аппроксимирующей функции, во втором столбце — значение средней ошибки аппроксимации (в процентах) для фрактальной области, в третьем столбце — средняя ошибка аппроксимации для прямоугольной области. Лучший результат для двух областей показывает гипербола, что совпадает с теоретическими выкладками.

Заключение

В статье проведено сравнительное численное исследование диффузии частиц с поглощением ловушками во фрактальной и прямоугольной областях. Основные результаты работы заключаются в следующем.

1. Подтверждено качественное различие в процессе захвата частиц в областях разной геометрии. Фрактальная структура области № 1 благодаря своей сложной геометрии существенно замедляет процесс захвата частиц ловушками. Это проявляется в более высоком конечном количестве выживших частиц и в более высоких значениях времени жизни частиц во фрактальной системе по сравнению с прямоугольной областью № 2 при одинаковом количестве ловушек.

2. Количественно показано, что зависимость времени жизни системы от количества ловушек в обоих случаях имеет гиперболический характер, что подтверждается результатами аппроксимации с наименьшей средней

ошибкой. Это свидетельствует о том, что, несмотря на кардинальное различие в геометрии, общий характер асимптотики сохраняется, однако особенности поведения определяются конкретной структурой области.

3. Предложенный подход к моделированию фрактальной области с помощью прямоугольной с неравномерным посевом ловушек показал возможность такого подхода, однако выявлены и существенные количественные расхождения, что указывает на невозможность полного сведения сложной геометрии к простой за счет изменения распределения ловушек.

Таким образом показано, что фрактальная геометрия существенно влияет на кинетику диффузионно-контролируемых реакций.

Литература

1. Montrol E. W., Weiss G. H. Random Walks on Lattices. *Journal of Mathematical Physics*. 1965; 6: 167–175.

2. Балагуров Б. Я., Вакс В. Г. Теория диффузных фазовых переходов // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1973. Т. 65. С. 1600–1604.

3. Soghra Safaverdi, Gerard T. Barkema, Eddy Kunnen, Adam M. Urbanowicz, Christian Maes. Saturation of front propagation in a reaction-diffusion process describing plasma damage in porous low-k materials. *Physical Review B*. 2011; 83: 245320. DOI: 10.1103/PhysRevB.83.245320.

4. Kunnen E., Barkema G. T., Maes C., Shamiryan D., Urbanowicz A., Struyf A., Baklanov M. R. Integrated diffusion–recombination model for describing the logarithmic time dependence of plasma damage in porous low-k materials. *Microelectron. Eng.* 2011; 88: 631–634.

5. Архинчеев В. Е. Влияние дрейфа на временную асимптотику вероятности выживания частиц в средах с поглощающими ловушками // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2017. Т. 151, вып. 2. С. 322–325. DOI: 10.7868/S0044451017020109.

6. Maex K., Baklanov M.R., Shamiryan D., Iacopi F., Brongersma S.H., Yanovitskaya Z. Sh. Low Dielectric Constant Materials for Micro Electronics. *Journal of Applied Physics*. 2003; 93: 8793–8841. DOI: 10.1063/1.1567460.

7. Rasadujjaman M., Wang X., Wang Y., Zhang J., Arkhincheev V. E., Baklanov M. R. Analytical Study of Porous Organosilicate Glass Films Prepared from Mixtures of 1,3,5- and 1,3-Alkoxysilylbenzenes. *Materials.* 2021; 14: 1881.

8. Bini F., Pica A., Novelli S., Pecci R., Bedini R., Marinozzi A., Marinozzi F. 3D FEM Model to Simulate Brownian Motion inside Trabecular Tissue from Human Femoral Head. *Comput. Methods Biomech. Biomed. Eng. Imaging Vis.* 2022; 10: 500–507.

9. Arkhincheev V. E., Kunnen E., Baklanov M. R. Active species in porous media: random walk and capture in traps. *Microelectronic Engineering.* 2011; 88; 5: 686–689. DOI: 10.1016/j.mee.2010.08.028.

10. Рязанов Г. В. Случайные блуждания на плоской решетке с ловушками // Теоретическая и математическая физика. 1972. Т. 10. С. 271–277. DOI: 10.1007/BF01090731.

11. Балагуров Б. Я., Вакс В. Г. Случайные блуждания частицы по решеткам с ловушками // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1973. Т. 65. С. 1939–1943.

12. Численное моделирование диффузии в средах с ловушками: статистика в одномерном случае / В. Е. Архинчеев, Б. В. Хабитуев, Д. Ф. Дерюгин [и др.] // Вестник Бурятского государственного университета. Математика, информатика. 2024. № 3. С. 31–44. DOI: 10.18101/2304-5728-2024-3-31-44.

13. Архинчеев В. Е., Хабитуев Б. В., Мальцев С. П. Влияние дрейфа на временную асимптотику вероятности выживания частиц в средах с поглощающими ловушками: численное моделирование // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2025. Т. 167, № 5. С. 703–710. DOI: 10.31857/S0044451025050086.

14. Arkhincheev V. E., Khabituev B. V., Maltsev S. P. Numerical Simulation of Capture of Diffusing Particles in Porous Media. *Computation.* 2025; 13; 4 : 82. DOI: 10.3390/computation13040082.

Статья поступила в редакцию 30.10.2025; одобрена после рецензирования 21.11.2025; принята к публикации 26.11.2025.

EFFECT OF GEOMETRY ON PARTICLE CAPTURE IN A DIFFUSION MODEL

Valery E. Arkhincheev
Dr. Sci. (Phys. and Math.), Professor,
Dorzhi Banzarov Buryat State University
Russia, 670000, Ulan-Ude, Smolina st. 24 a

Daniil F. Deriugin
Senior lecturer,
Dorzhi Banzarov Buryat State University
Russia, 670000, Ulan-Ude, Smolina st. 24 a

Bair V. Khabituev
Senior lecturer,
Dorzhi Banzarov Buryat State University
Russia, 670000, Ulan-Ude, Smolina st. 24 a

Andrey V. Khanhaev
Student,
Dorzhi Banzarov Buryat State University
Russia, 670000, Ulan-Ude, Smolina st. 24 a

Abstract. This paper numerically investigates the long-term asymptotic behavior of the survival probability of particles diffusing in two-dimensional domains with randomly placed absorbing traps. Two modeled domains are compared: a fractal structure based on the Koch curve and a rectangular area with a non-uniform trap density mimicking the fractal projection. Using the Monte Carlo method, the motion of an ensemble of particles was simulated, and the dependence of the system's lifetime and the final number of surviving particles on the number of traps was analyzed. It was found that particle capture occurs slower in the fractal domain, leading to a significantly higher survival rate at long times. It is shown that for both domains, the dependence of the lifetime on the number of traps is best approximated by a hyperbolic function, which is consistent with theoretical predictions.

Keywords: diffusion, absorbing traps, random walks, fractal geometry, Koch curve, Monte Carlo method, numerical simulation, particle capture.

For citation

Arkhincheev V. E., Deriugin D. F., Khabituev B. V., Khanhaev A. V. Effect of Geometry on Particle Capture in a Diffusion Model // Bulletin of Buryat State University. Mathematics, Informatics. 2025. N. 4. P. 65–74.

The article was submitted 30.10.2025; approved after reviewing 21.11.2025; accepted for publication 26.11.2025.