

参赛学生姓名：江天奕

Participant's name: Jiang Tianyi

中学：中国人民大学附属中学

Secondary school: The High School Affiliated to Renmin University of China

省份：北京

Province: Beijing

国家/地区：中国

Country/Region: China

指导教师姓名：雷祥翠；张兴华

Instructor's name: Lei Xiangcui; Zhang Xinghua

指导教师单位：中国人民大学附属中学；北京交通大学

Instructor Units: The High School Affiliated to Renmin University of China; Beijing Jiaotong University

论文题目：穿越“随机”：颗粒体在超匀介质中输运

Title: Travelling through chaotic space: permeability of particles in hyperuniform medium

# 穿越“随机”：颗粒体在超匀介质中运输

作者：江天奕

学校：中国人民大学附属中学

指导教师：雷祥翠

工作单位：中国人民大学附属中学

指导教师：张兴华

工作单位：北京交通大学

2024年11月

# **Travelling through chaotic space: permeability of particles in hyperuniform medium**

**Author:** Jiang Tianyi

The High School Affiliated to Renmin University of China  
Beijing, China

**Instructor:** Dr. Lei Xiangcui

The High School Affiliated to Renmin University of China

**Instructor:** Prof. Zhang Xinghua

Beijing Jiaotong University

November 2024

## 摘要

流体在多孔介质中的高效渗透是过滤、催化和物质纯化等工程领域中的重要科学和技术问题，其物理本质是流体粒子在多孔介质中的扩散行为。本研究通过建立多孔介质的空间点阵模型，用点阵中固定粒子之间的空间关联来表征多孔介质的结构：关联程度最高的有序晶格结构、无关联的随机结构、关联程度介于二者之间的超匀（Hyperuniform）结构。结果表明，在超匀分布介质中，粒子扩散轨迹在局部小尺度上的无规行走与无序的随机结构中的行为相似，而在大尺度上能够表现相对较快的宏观渗透速率与有序的晶体结构中的行为相似。

为了直观验证将超匀结构中粒子的空间关联性作为控制扩散行为的参量，实现宏观渗透速率调控的机制，本研究同时设计了基于伽尔顿板的宏观实验装置，对比了晶格结构、随机结构、超匀结构中宏观粒子在重力驱动下的渗透行为。结果表明，粒子在晶格结构中展现出较快的渗透速度，在随机分布中表现出明显的“陷阱”效应，在超匀结构中则实现了局部无规则运动与大尺度快速扩散之间的平衡。实验结果与模拟结果一致，可与微观计算模拟总结的调控机制相互印证。本研究所揭示的超匀介质中流体渗透的微观机制可为设计高效多孔材料提供新的理论框架。

**关键词：**扩散；超匀结构；多孔介质；计算机模拟；伽尔顿板

## Abstract

Efficient permeation of fluids in porous medium is an important scientific and technological problem in engineering fields such as filtration, catalysis and material purification. The physical essence of this process is the diffusion behavior in the porous medium of fluid particles. In this study, a spatial lattice model of the porous medium was established, using the spatial correlation between fixed particles in the lattice to represent the structure of the porous medium. The study examined three types of structures: a highly correlated ordered grid structure, an uncorrelated random structure, and a hyperuniform structure with correlation levels between the two. The results show that in hyperuniform medium, particle diffusion exhibits random walks on small local scales, similar to the behavior in disordered random structures. However, on larger scales, the diffusion exhibits relatively fast macroscopic permeability rates, akin to those in ordered crystalline structures.

To visually verify the mechanism by which the spatial correlation of particles in hyperuniform structures acts as a parameter for controlling diffusion behavior, and to achieve macroscopic permeability regulation, a macroscopic experimental device based on a Galton board was designed. The permeability behavior of macroscopic particles driven by grid structure, random distribution, and hyperuniform structures was compared. The results show that the particles exhibit a fast penetration rate in the grid structure, an obvious “trap” effect in the random distribution, and a balance between local irregular motion and large-scale fast diffusion in the uniform structure. The experimental results are consistent with the simulation results, and can be corroborated with the regulation mechanism summarized by the microscopic computational simulation. The microscopic mechanism of fluid permeability in hyperuniform medium revealed by this study offers a new theoretical framework for designing efficient porous materials.

**Key words:** Diffusion; Hyperuniform structure; Porous medium; Computer simulation; Galton board

# 目录

摘要 .....	I
Abstract.....	II
<b>1 引言 .....</b>	<b>1</b>
1.1 多孔介质扩散技术的应用 .....	1
1.2 多孔介质扩散理论与布朗运动 .....	3
1.3 多孔障碍物粒子分布 .....	4
1.3.1 六角晶格和随机分布 .....	5
1.3.2 超匀分布 .....	5
1.4 研究思路与创新点 .....	8
<b>2 理论与模型 .....</b>	<b>10</b>
2.1 模型系统构成 .....	10
2.2 运动方程 .....	10
2.2.1 朗之万方程 .....	11
2.2.2 牛顿方程 .....	12
2.3 分子动力学模拟 .....	12
2.4 多孔障碍物生成 .....	14
2.4.1 六边形晶格 .....	14
2.4.2 正方形晶格 .....	14
2.4.3 长方形晶格 .....	15
2.4.4 居中长方形晶格 .....	15
2.4.5 倾斜晶格 .....	16
2.4.6 超匀晶格 .....	16
2.4.7 随机分布 .....	21
<b>3 模拟结果与讨论 .....</b>	<b>23</b>
3.1 布朗运动模拟结果与讨论 .....	23
3.2 惯性运动模拟结果与讨论 .....	27
<b>4 实验演示与验证 .....</b>	<b>35</b>
4.1 实验装置 .....	35
4.2 预实验 .....	36
4.3 实验设计 .....	38
4.4 实验结果与讨论 .....	41

5 总结与展望 .....	46
5.1 结论 .....	46
5.2 展望 .....	46
参考文献 .....	48
致谢 .....	51

2024 S.-T. Yau High School Science Award  
仅用于2024丘成桐中学科学奖论文公示

# Content

<b>Abstract</b> .....	<b>II</b>
<b>1 Introduction</b> .....	<b>1</b>
1.1 Application of porous medium diffusion technique.....	1
1.2 Diffusion theory of porous medium and Brownian motion.....	3
1.3 Particle distribution of porous obstacle .....	4
1.3.1 Hexagonal grid and random distribution .....	5
1.3.2 Hyperuniform distribution .....	5
1.4 Research ideas and innovations .....	8
<b>2 Theory and Modeling</b> .....	<b>10</b>
2.1 Model system components.....	10
2.2 Equations of motion.....	10
2.2.1 Langevin equation.....	11
2.2.2 Newtonian equation .....	12
2.3 Molecular dynamics simulation.....	12
2.4 Porous obstacle generation .....	14
2.4.1 Hexagonal Grid.....	14
2.4.2 Square Grid.....	14
2.4.3 Rectangular Grid.....	15
2.4.4 Centered Rectangular Grid .....	15
2.4.5 Skewed Grid .....	16
2.4.6 Hyperuniform Grid .....	16
2.4.7 Random Distribution.....	21
<b>3 Simulation Results and Discussion</b> .....	<b>23</b>
3.1 Brownian motion .....	23
3.2 Inertial motion.....	27
<b>4 Experimental Demonstration and Verification</b> .....	<b>35</b>
4.1 Device .....	35
4.2 Pre-experiment.....	36
4.3 Experimental design .....	38
4.4 Results and discussion .....	41
<b>5 Conclusion and Prospects</b> .....	<b>46</b>



5.1 Conclusion .....	46
5.2 Prospects .....	46
<b>Reference .....</b>	<b>48</b>
<b>Acknowledgement.....</b>	<b>51</b>

2024 S.-T. Yau High School Science Award  
仅用于2024丘成桐中学科学奖论文公示

# 1 引言

## 1.1 多孔介质扩散技术的应用

粒子或流体在多孔介质中的渗透与扩散在环境保护和能源利用中具有重要应用<sup>[1-3]</sup>。例如，在水处理、空气净化、土壤修复和重金属去除以及锂电池和燃料电池的碳捕集和存储技术。人类的工业活动正在改变空气、水体和土壤等人类和生物一起赖以生存的环境。燃烧化石燃料释放的大量温室气体加速了全球气候变化，同时排放的有毒气体和颗粒物严重影响了空气质量和公共健康。能源开采和使用过程中产生的废水排放和化学泄漏等问题，也对水体和土壤环境造成了深远的负面影响，威胁到生态系统的健康与人类的饮用水安全。无论是空气、水体还是土壤污染问题的治理都涉及过滤技术。开发高效、低功耗的过滤材料和技术是绿色科学的关键问题。要实现这一目标，需要兼顾被过滤物质在多孔材料中的渗透率和物质与多孔材料的相互作用时间两方面问题。其中，渗透率保证给定量的物质通过多孔材料的能耗；足够长的物质与多孔材料的相互作用时间，保障了多孔材料中如催化剂等对物质的净化作用。提升相互作用时间，往往通过提升材料密度，或通道的孔径，而这将带来渗透率的降低。在此背景下，一方面需要开展多孔介质中物质扩散技术的基本理论研究，另一方面探索多孔介质的新型结构将为开发更高效、更具针对性的过滤和绿色净化技术，以应对当前的环境找到新的技术路径。

粒子或流体在多孔介质中的渗透与扩散不仅仅是污染物净化科学的基本问题，这一理论问题的研究成果也将有益于很多的能源和环境研究，比如海水淡化<sup>[4,5]</sup>。海水淡化技术是应对全球水资源短缺的重要手段，尤其在淡水资源匮乏的地区，如中东和北非，海水淡化为数以百万计的人们提供了饮用水。其核心在于通过物理和化学方法去除海水中的盐分和杂质，使其转化为可饮用的淡水。常见的海水淡化方法包括蒸馏法和反渗透法。蒸馏法通过加热海水使其蒸发，再冷凝成淡水，但能耗较高；而反渗透法则利用半透膜在高压下分离盐分和杂质，能耗较低。扩散现象在反渗透过程中起到了核心作用，因为水分子必须从高浓度区域（海水）向低浓度区域（淡化水）移动。这一过程的效率受到多种因素的影响，包括膜材料的孔隙结构、孔径大小、表面化学性质以及操作条件等。液体在材料中的扩散还与膜的表面结构和化学性质密切相关。例如，通过改变膜表面的亲水性或疏水性，可以调节水分子与膜材料之间的相互作用，从而影响扩散速率。在实际应用中，液体在材料中的扩散还涉及膜的稳定性和抗污染能力。海水中的微生物、有机物和无机盐等都可能对膜造成污染，降低其性能。通过在材料孔道中负载的催化能力集团来改性技术来提

高膜的抗污染能力。

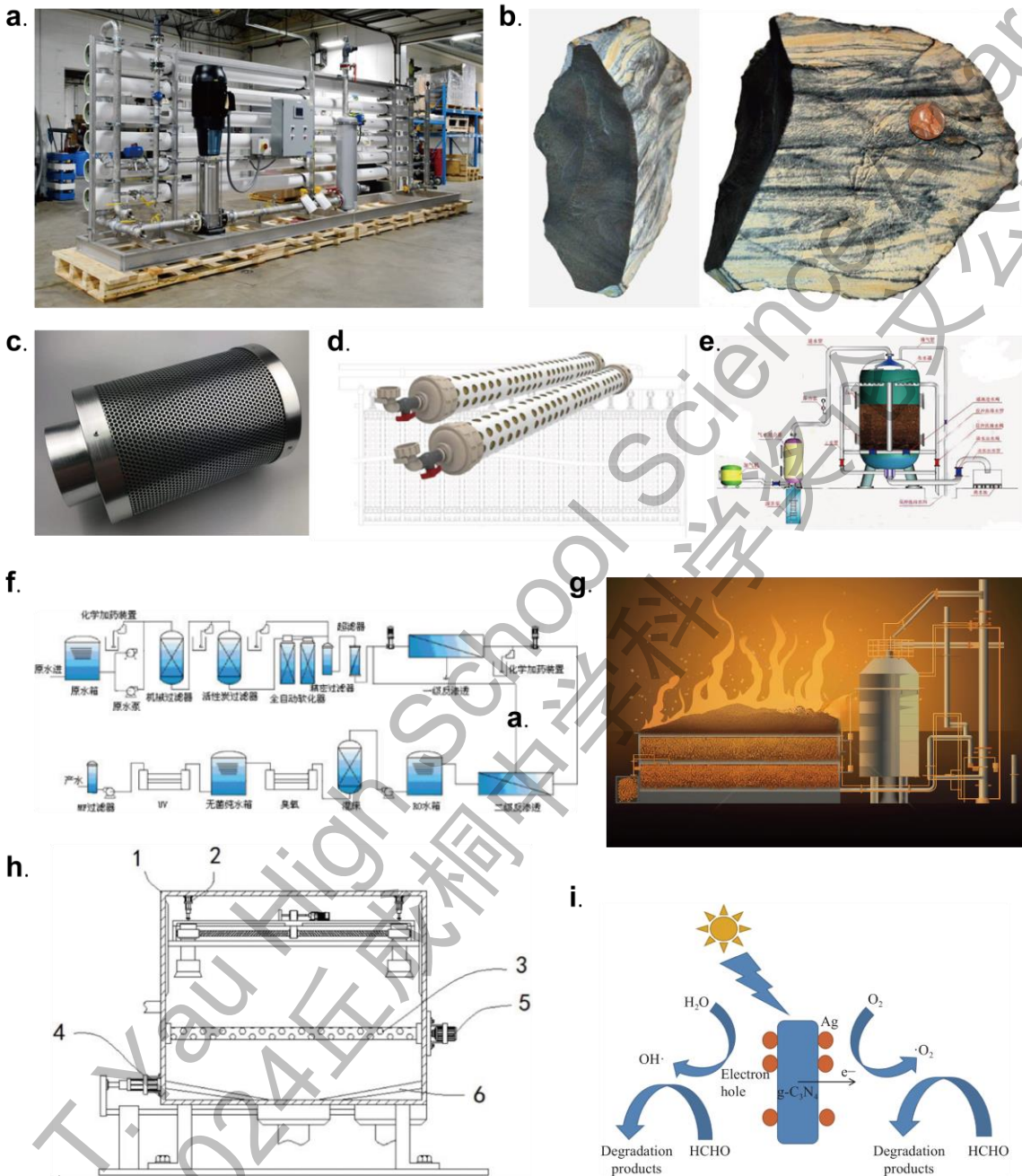


图 1.1 多孔介质扩散技术的应用 (a) 海水淡化；(b-f) 油页岩；(g-i) 污水和废气处理

Fig. 1.1 Applications of the diffusion techniques in porous medium: (a) seawater desalination; (b-f) oil shale; (g-i) waste water and waste gases treatments

又比如，石油开采，油页岩是一种含有机物的沉积岩，通过热解可将其转化为液态油和气体<sup>[6]</sup>。油页岩在美国、巴西、中国和俄罗斯等国拥有丰富储量，随着常规石油资源的减少，其作为替代能源的潜力受到重视。然而，油页岩开发成本高且技术复杂，特别是在热解过程中产生的固体颗粒和杂质如果不加以控制，会严重影响

响设备的稳定性和效率。物理过滤系统在油页岩开发的多个阶段中发挥关键作用。在开采过程中，砂滤和超滤等技术被用来净化废水，去除泥沙和悬浮颗粒，防止设备磨损。在热解过程中，旋风分离器等设备用于去除气体和液体产物中的固体颗粒，防止杂质积累和设备堵塞，从而确保生产过程的稳定性和效率。

污水处理系统通常包括砂滤、活性炭过滤和膜过滤等物理过滤方法，旨在去除污水中的固体颗粒、溶解性有机物和病原微生物<sup>[7-10]</sup>。废气处理系统则利用 HEPA 滤网和活性炭吸附器来捕捉空气中的颗粒物和有害气体<sup>[11-13]</sup>。此外，催化降解过程通过优化催化剂结构和反应条件，将废气中的有害成分转化为无害物质，有效减少了环境污染。合理设计过滤系统的排布结构，不仅提高了过滤效率，还降低了系统的能耗和运营成本，显著增强了环境治理的效果。

## 1.2 多孔介质扩散理论与布朗运动

多孔介质扩散理论的研究是物理学的一个重要课题<sup>[14-16]</sup>。多孔介质由固体骨架和分布于其中的孔隙构成，这些孔隙为流体或粒子的传播提供了重要的通道。在自然界中，土壤、岩石、木材和海绵等都是典型的多孔介质。这些介质的物理特性，例如孔隙率、渗透性和孔隙结构，决定了流体和溶质在其中的运动行为。孔隙率越高，意味着流体有更多的空间进行流动，而高渗透性则使得流体更容易穿过介质。通过了解这些特性，研究人员可以预测和控制流体在多孔介质中的行为，从而有效应用于实际工程问题中，例如污染物的迁移、地下水资源的开发，以及新型材料的设计。

在多孔介质中，扩散可以通过多种机制进行，包括分子扩散、对流扩散以及吸附和解吸作用<sup>[17-19]</sup>。分子扩散是由于分子的热运动引起的，通常遵循菲克定律，即扩散速率与浓度梯度成正比。而对流扩散则是由流体的宏观运动驱动，通常由压力差等外部因素引发。此外，多孔介质表面的吸附和解吸作用也对溶质的扩散产生重要影响，通过这些作用，溶质可以暂时滞留或重新释放，改变其在介质中的分布和传播路径。本文仅关注分子在介质的复杂孔道结构中的扩散行为。

布朗运动是描述物质扩散的最基本模型<sup>[15]</sup>。布朗运动这一现象得名于其发现者，英国植物学家罗伯特·布朗。在 1827 年，布朗在观察水中的花粉颗粒时，注意到它们在不断进行着不规则的、看似随机的运动。尽管最初他怀疑这是因为花粉颗粒具有生命，但后续的实验表明，无生命的颗粒（如尘埃）在水中也表现出类似的行为。直到 1905 年，由爱因斯坦从分子运动论提出了理论解释以及著名的爱因斯坦关系（涨落耗散定理），这不仅为布朗运动提供了一个物理基础，而且标志着现代统计物理学的开端。

布朗运动，是指微观粒子在流体中因受到流体分子不断撞击而进行的不规则随机运动。这种现象在多孔介质中的扩散研究中起着至关重要的作用。多孔介质，如土壤、岩石和多孔聚合物等，具有复杂的孔隙结构，其中的流体运动和传质过程常常由布朗运动主导。通过模拟物质粒子在多孔介质中的布朗运动，研究者能够得到在这些介质中粒子如何通过微观尺度的碰撞过程进行迁移，来研究扩散行为受到固体基质的复杂几何形态的限制导致的异常扩散现象。

物质粒子在多孔介质中的布朗运动既可以采用扩散方程来描述，又可以采用基于 *over-dumped* 的分子动力学模拟来描述<sup>[20,21]</sup>。采用扩散方程描述在非均匀介质中需要根据特定的结构和边界条件进行修正，并设计针对性的数值求解方法。分子动力学模拟通过模拟原子和分子间的相互作用，能够在各种条件下（甚至是非常高或低的压力和温度）探究多孔材料中扩散过程的微观细节。需要指出的是本文关心的是扩散的粒子与介质孔道尺寸相近的情况，此时在介质的孔道尺度上难以形成均匀的流场，因而更适合采用分子动力学方法。

### 1.3 多孔障碍物粒子分布

多孔介质的结构对扩散行为的影响是本研究的关键问题，其中首要的问题是表征多孔介质的结构特征。如果没有介质，那么粒子的扩散是自由的布朗运动，如果有介质，那么粒子将与介质发生散射偏离原来的运动轨迹。相邻两次散射的时间和空间间隔决定了两次散射之间的关联，也决定了粒子在介质中的扩散行为。为了能够定量描述粒子在相邻两次散射之间的关联，本研究用在空间中固定的障碍物粒子组成点阵作为多孔介质的模型。障碍物粒子间的间隙作为多孔介质的孔道。多孔介质的结构（或者粒子在相邻两次碰撞的关联）可以通过障碍物粒子的空间排布方式来确定。空间点阵根据点之间的关联可以分为有序的晶格结构和无序的随机分布。晶格结构中障碍物粒子有着确定的空间关联，他们会为扩散形成明确的规整的通道。而无序的随机点阵，障碍粒子之间不存在关联，他们形成的扩散通道也是随机的。除了周期性的晶格结构和随机结构之外，近年来凝聚态物理学的一个新的进展是超匀（Hyperuniform）结构的发现。即空间上粒子排布的关联程度可以介于随机和晶格之间。在小尺度上关联程度趋近于零，而在大尺度上有明确的关联。本研究将满足超匀结构特征的点阵也作为多孔介质，研究超匀结构中粒子的扩散行为。为了理论的简洁和实验的可展示性，在本研究中研究粒子的 2 维空间中的扩散研究，下面简介几种本研究采用的 2 维障碍物点阵的结构。

### 1.3.1 六角晶格和随机分布

首先是有序的周期排布方式-六边形晶格，这是一种具有高对称性和紧密堆积特性的二维晶格结构，其中每个晶格点与周围六个最近邻点等距排列<sup>[22,23]</sup>。由于其几何特性使其具有高效填充和稳定性。以六角密排晶格的为代表的二维晶格可以代表如分子筛、金属有机框架（MOF）等具有有序周期性的多孔材料的结构。随机分布的点阵作为参考，随机分布点阵是一种特殊的二维结构，其中晶格点的位置并不按照固定的几何规则排列，而是通过随机化过程在空间中分布，这种无序的排列方式可以有效模拟自然界中许多复杂和非晶态多孔材料的结构，包括非晶态的高分子多孔材料、玻璃态多孔物质等系统，以随机的无序多孔材料为参考，研究粒子在其中的扩散、渗透的动力学特性，为探究超匀多孔材料中粒子的扩散行为，优化材料的多孔结构提供了基本的理论参考。

### 1.3.2 超匀分布

超均匀性是描述粒子系统在大尺度上密度波动被显著抑制的物理现象<sup>[24-28]</sup>。超匀材料的研究代表了现代材料科学和凝聚态物理学中的一个重要前沿领域。这类材料的粒子分布具有短程上的密度涨落，显示出在长程尺度上的有序性，这种特性使得超匀结构有着独特应用，而且自然的物质世界也有很多的超匀结构的案例。因而关于超匀结构的理论研究具有重要意义。在光学领域，超匀材料因其独特的光散射特性而受到广泛关注。这些材料能有效控制光的传播路径和散射过程，从而显著降低光学系统中的能量损失。例如，通过精确调控材料内部的粒子排布，可以设计出透明度高且散射损失极低的光学元件，这对于提高光纤通讯和高精度激光系统的效率至关重要。在声学应用中，超匀结构展现出了控制声波传播的潜力。这些材料能通过其内部结构的精细调控来影响声波的散射和吸收特性，进而制造出高性能的声隔板和声学滤波器。这种能力使得超匀材料在降噪技术和精密声学仪器设计中具有广泛的应用前景。此外，超匀结构也对材料的力学性能产生深远影响。这些材料的有序性质使其在承受外力时显示出超常的弹性和抗断裂能力，这一点对于设计高强度轻质材料尤为重要，特别是在航空航天和高性能体育设备的开发中。电子性能的提升也是超匀结构带来的另一重要优势。在半导体和其他电子材料中，超匀结构通过优化电子的移动路径，可以显著提高电子器件的操作速度和能效。这种特性对于发展下一代微电子设备，如更高效的晶体管和更快的计算平台，提供了技术基础。综上所述，超匀材料的研究不仅拓宽了对物质结构和性能关系的理解，也为多个高技术领域的发展提供了创新的解决方案。通过深入探索这些材料的基



本物理性质和工程应用，可以期待在未来出现更多的技术突破和新型材料的商业应用。

在自然界中，超匀结构的存在不仅展现了其在物理和生物系统中的普遍性，而且还揭示了这些结构在适应环境和功能优化方面的重要作用。这些结构提供了关于如何通过精确控制组成元素的排列来优化功能的洞见，为现代科技的发展提供了启示。

### 1. 鸟类视网膜中的感光细胞

在鸟类视网膜中，感光细胞的超匀分布是一种高度优化的排列，这种结构使得鸟类能够在捕食或飞行中获得高度敏锐的视觉能力<sup>[29]</sup>。例如，猛禽的视网膜中心区域具有密集的锥体细胞排列，这种排列不仅提高了视觉分辨率，还减少了光信号的噪声，使得它们能够在高速飞行中精确地看到远处的猎物。这种超匀结构的研究不仅有助于了解视觉处理的生物机制，而且对开发高分辨率的成像系统和改进人类视觉辅助设备也具有重要意义<sup>[30]</sup>。

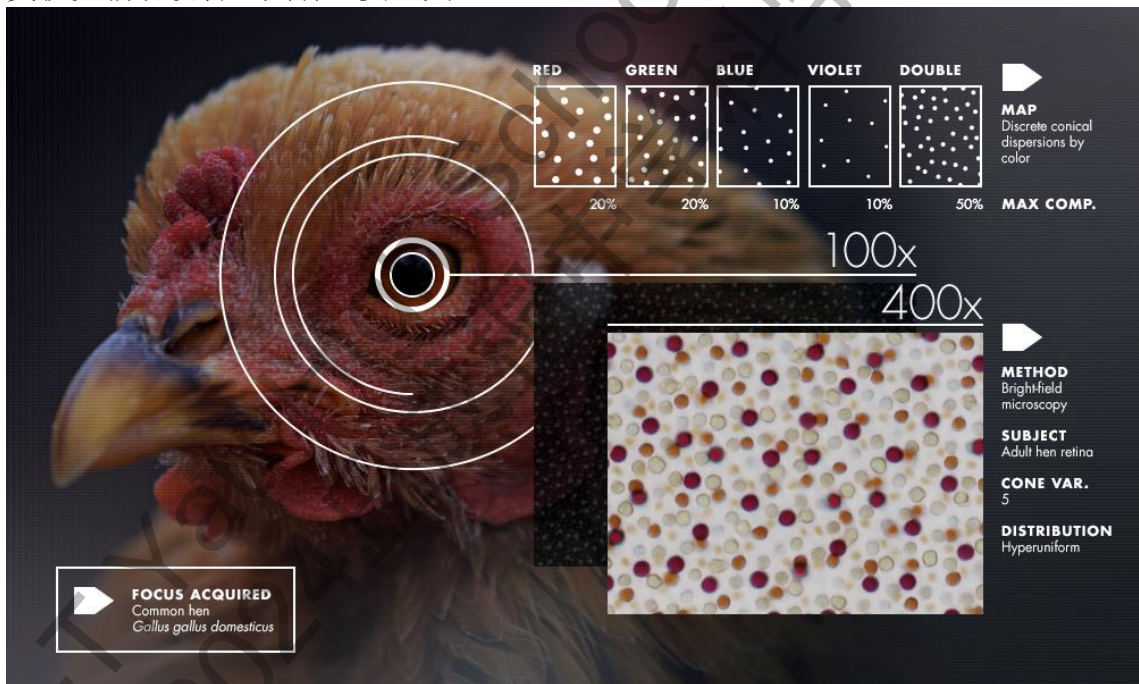


图 1.2 鸟类视网膜中的感光细胞

Fig. 1.2 Photoreceptor cells in the avian retina

### 2. 昆虫复眼的微观结构

昆虫复眼的超匀排列提供了一种独特的视觉系统，其中每个小眼柱都独立于其他小眼柱捕捉光线。这种结构使得昆虫能够覆盖广泛的视野并迅速反应环境中的动态变化。复眼的这种超匀排列优化了光的捕捉和信息处理，提高了昆虫在自然环境中的生存能力，例如在捕食和逃避天敌时。模仿这种复眼结构，科学家们已经在开发人造视觉系统和高效传感器方面取得了进展，这些技术在无人机和机器

人视觉中展现出潜在的应用价值。



图 1.3 昆虫复眼的微观结构

Fig. 1.3 Microstructure of the compound eye of insects

### 3. 宇宙中的星系分布

星系在宇宙空间的超匀分布是宇宙学研究的一个关键领域，这种分布模式提供了对宇宙早期条件和演化历程的深刻洞见。星系的这种分布不是随机的，而是形成了一种复杂的网络结构，其中包含了大量的虚空和超星系团<sup>[31,32]</sup>。这种宇宙结构的研究不仅对理解宇宙的大尺度结构和暗物质分布至关重要，而且对于引力理论和宇宙背景辐射的研究也有着直接的影响。此外，这些知识对于精确模拟宇宙结构的形成和演变以及为未来的天文观测提供理论基础也是不可或缺的<sup>[33]</sup>。

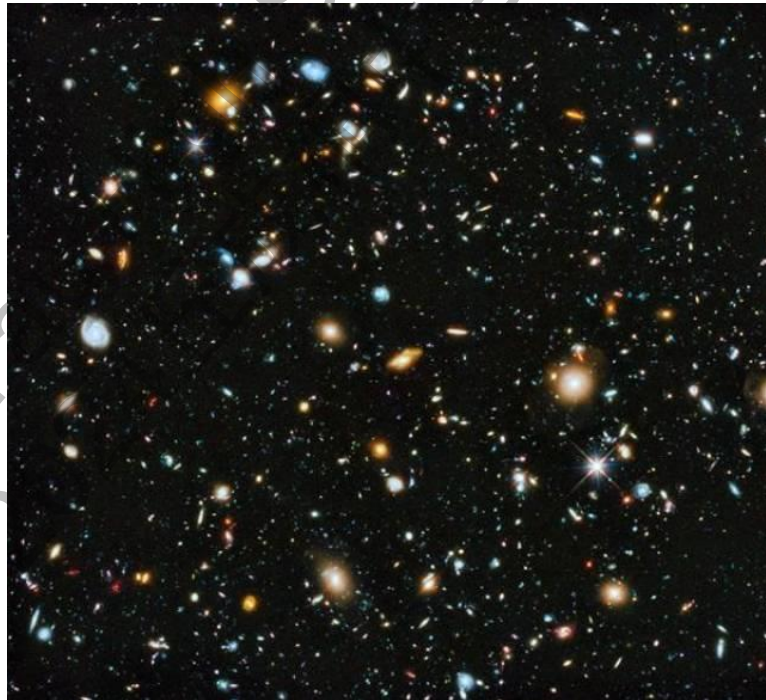


图 1.4 宇宙中的星系分布

Fig. 1.4 Distribution of galaxies in the universe

这些例子表明，超匀结构在自然界中的普遍存在不仅是对物理和生物过程深入理解的一扇窗口，也是现代科技发展的重要灵感来源。通过深入研究这些自然形



成的超匀结构，可设计出更为高效和精确的技术应用，从高分辨率成像系统到复杂的数据分析模型，这些都在推动科学和技术的边界向前延伸。

## 1.4 研究思路与创新点

本研究通过研究代表流体的粒子在 2 维障碍物粒子构成的点阵中的扩散行为，探索多孔介质的结构对扩散行为的影响，特别是通过对满足超匀分布的点阵中扩散行为的研究，找到通过多孔介质结构调控扩散行为的方法。

本文针对粒子在障碍物粒子点阵中的布朗运动开展微观尺度上流体的渗透行为受多孔介质结构的影响的计算机模拟研究。以布朗运动的研究为指导，设计演示实验装置，探索在宏观系统中验证工作，主要研究意义和目的是：

1. 理解粒子在障碍物粒子点阵中的布朗运动：粒子在各种空间关联性质的点阵中的运动。通过粒子的运动轨迹、位置的时间和空间关联来表征扩散行为。依据模拟的数值结果深入理解障碍物粒子点阵的空间关联对粒子扩散行为的调控机制。
2. 优化微流体装置和纳米技术应用：在微流体装置和纳米技术中，控制粒子的运动路径是设计的关键。通过引入满足超匀分布的障碍物粒子形成的点阵，实现对流体在多孔介质中穿越的调控效率的作用。
3. 通过设计宏观尺度的颗粒体在宏观点阵中的输运行为验证多孔材料介质中障碍物粒子的空间关联对扩散行为影响的机制，同时验证超匀结构作为一种可能的新型多孔材料设计的新思路。

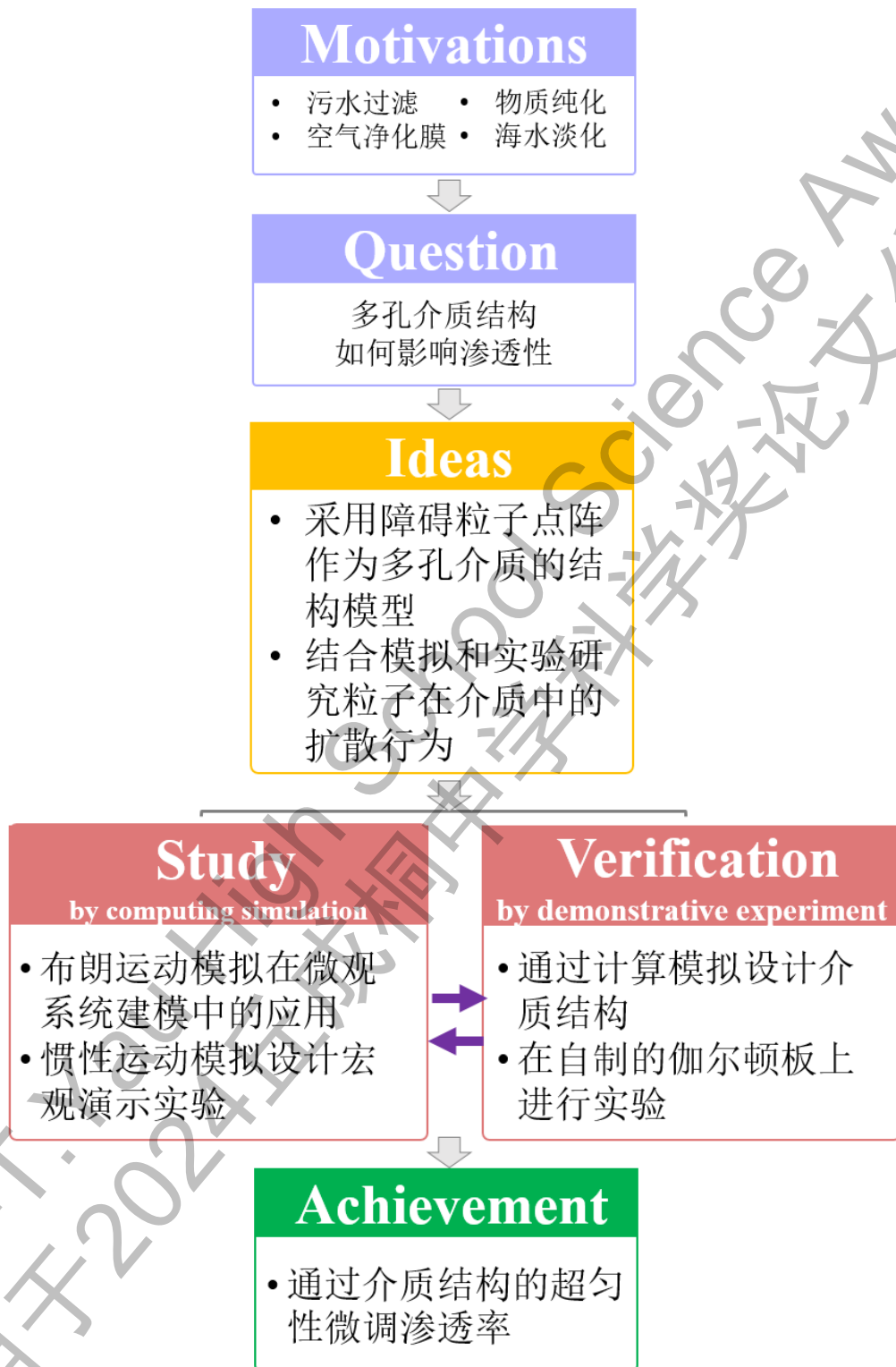


图 1.5 粒子在多孔介质中扩散研究框架图

Fig. 1.5 Framework diagram for the study of particle diffusion in porous medium

## 2 理论与模型

### 2.1 模型系统构成

为精确描述粒子在复杂介质中的扩散过程，本研究采用了两种不同的运动模型：一种是微观层面上用于模拟随机运动的布朗运动模型，另一种是宏观实验中常用的牛顿运动模型。通过结合这两种模型，能够深入分析障碍物分布对扩散粒子动力学特征的影响，并探讨粒子在多孔介质中的扩散机制。

在本研究中，构建了一个二维板模型，用以模拟外力驱动下粒子在含有障碍物的空间中的运动行为。模型分为两部分：

**布朗运动模拟：**在此模型中，系统的尺寸设定为宽度  $L_x = 5 \text{ cm}$ 、长度  $L_y = 20 \text{ cm}$ 。系统包含两类粒子：扩散粒子和障碍物粒子。扩散粒子是直径为  $0.1 \text{ cm}$  的圆形粒子，共有 100 个，它们从二维板的顶部向下扩散，并与障碍物粒子发生相互作用。障碍物粒子是直径为  $0.05 \text{ cm}$  的圆形钉状粒子，按照一定的间距  $d_x$  排列。这种障碍物的排列方式和分布对扩散粒子的随机运动路径产生了重要影响。

**牛顿运动模拟：**在该模型中，系统的尺寸设定为宽度  $L_x = 15 \text{ cm}$ 、长度  $L_y = 60 \text{ cm}$ 。系统同样包含两类粒子：扩散粒子和障碍物粒子。扩散粒子是直径为  $0.38 \text{ cm}$  的圆形粒子，数量为 300 个，它们在二维板上从顶部向下扩散，并受到障碍物粒子的影响。障碍物粒子是直径为  $0.19 \text{ cm}$  的圆形钉状粒子，按照间距  $d_x$  排列。与布朗运动模型类似，障碍物的分布方式对粒子的惯性运动产生了显著影响。

在这两种模型中，障碍物的空间分布（包括其数量和排列模式）对扩散粒子的运动轨迹和扩散行为有着显著影响。通过调整障碍物的排列方式，如六边形密堆、随机分布或超均匀分布，本文进一步研究了这些障碍物对粒子扩散速率、路径复杂度以及穿透能力的作用。最终，研究揭示了在不同障碍物分布和外力作用下，粒子在多孔介质中的扩散特性，这为理解自然界和工业过程中的扩散行为提供了理论依据。

### 2.2 运动方程

为描述扩散粒子在模型系统中的运动，本文使用了两种经典的动力学方程：郎之万方程和牛顿方程。

## 2.2.1 朗之万方程

朗之万方程是一种用于描述粒子在粘性介质中运动的方程，结合了牛顿第二定律与随机热噪声的影响。它表达了粒子在外力、粘性阻力和随机热扰动共同作用下的运动状态。具体来说，朗之万方程将粒子的加速度与粘性阻力及由热波动引起的随机力相关联，使其能够模拟布朗运动等现象，并在统计力学和材料科学中广泛应用于研究粒子的扩散行为。扩散粒子的运动可以表示为以下形式的朗之万方程：

$$\begin{aligned} v_{ix} &= (\alpha F_{ix} + \beta \eta) \Delta t \\ v_{iy} &= (\alpha F_{iy} + g + \beta \eta) \Delta t \\ \mathbf{r}_i &= \mathbf{r}_i + \mathbf{v}_i \Delta t \end{aligned} \quad (2.1)$$

式中： $v_{ix}$ 、 $v_{iy}$ 为第*i*个粒子的速度分别在  $x$ 、 $y$  方向的分量； $\mathbf{r}_i$ 为第*i*个粒子在三维空间中的位置； $g$ 为重力加速度，是一个常数量； $F_{ix}$ 、 $F_{iy}$ 为第*i*个粒子所受合力分别在  $x$ 、 $y$  方向的分量，其中合力  $\mathbf{F}_i = F_{ix}\mathbf{e}_x + F_{iy}\mathbf{e}_y = \sum \mathbf{F}_{ij}$ ，第*i*个粒子和第*j*个粒子间的受力  $\mathbf{F}_{ij} = \text{WCA}(r)$ ，是由 WCA 势产生的排斥力； $\mathbf{e}_x$ 、 $\mathbf{e}_y$ 分别为  $x$ 、 $y$  方向上的单位矢量； $\eta$ 为随机数，假设  $\langle \eta \rangle = 0$ 、 $\langle \eta^2 \rangle = 1$ ； $\alpha$ 、 $\beta$ 为扩散系数，可表示为：

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{\Delta}{\zeta} \\ \beta &= \sqrt{\frac{2\Delta}{\zeta}} \end{aligned} \quad (2.2)$$

式中， $\Delta$ 为时间， $\zeta$ 为热力学量。

朗之万方程综合了粒子所受的决定性力（如外力和粘性阻力）以及随机的热噪声作用。对于扩散粒子，这个方程能很好地描述它们在障碍物之间的复杂运动行为。

其中，WCA 势 (Weeks-Chandler-Andersen 势) 是一种修正的 Lennard-Jones 势，常用于模拟系统中防止粒子间距过于接近。WCA 势通过在 Lennard-Jones 势的基础上进行截断和移位，使其在粒子接近时提供较强的排斥力，但不引入吸引力。具体来说，WCA 势截断了 Lennard-Jones 势在势能最小值的位置，使得势能在此点之后为零，从而排除了吸引力，仅保留了排斥力。

WCA 势的数学表达式为：

$$U(\mathbf{r}_{ij}) = \begin{cases} 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \varepsilon, & r_{ij} \leq 2^{(1/6)}\sigma \\ 0, & r_{ij} > 2^{(1/6)}\sigma \end{cases} \quad (2.3)$$

式中， $\varepsilon$  表示势能深度，决定了相互作用强度； $\sigma$  表示粒子间距的尺度参数； $r$  是粒子间的距离。WCA 势在  $r = 2^{(1/6)}\sigma$  处被截断，并在此点之后的距离上势能为零。图 2.1 给出了 WCA 势的截断形式，其中黄色曲线表示 WCA 势能随粒子间距  $r$  的变化。红色虚线表示在  $r = 2^{(1/6)}\sigma$  处的截断，超过此距离后势能为零。

WCA 势仅保留了排斥部分，确保粒子不会过于接近，但不会产生吸引力。

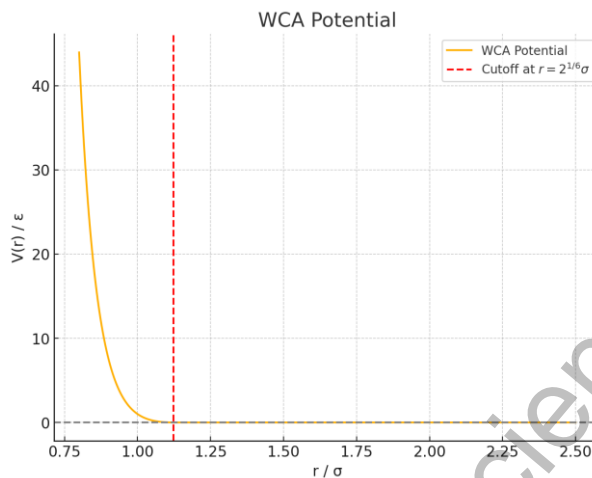


图 2.1 WCA 势的截断形式

Fig. 2.1 Truncated form of the WCA potential

## 2.2.2 牛顿方程

在没有显著随机力或热噪声的情况下，粒子的运动可以简化为经典力学的描述，即使用牛顿第二定律进行建模。其是经典力学的核心方程之一，用于描述物体在受力作用下的运动规律。该方程表明，物体的加速度与所受的净外力成正比，与物体的质量成反比，由牛顿第二定律可得分子动力学模拟的运动方程为：

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_x &= \mathbf{v} + (\mathbf{f}_{ij} - c\mathbf{v}_x)\Delta t/m_i \\ \mathbf{v}_y &= \mathbf{v} + (\mathbf{f}_{ij} + m_i\mathbf{g} - c\mathbf{v}_y)\Delta t/m_i \\ \mathbf{r}_i &= \mathbf{r}_i + \mathbf{v}\Delta t \end{aligned} \quad (2.4)$$

式中， $m_i$ 、 $\mathbf{r}_i$ 、 $\mathbf{f}_{ij}$  分别为第  $i$  个粒子的质量、位置、粒子  $i$ 、 $j$  所受的相互作用力； $\Delta t$  为时间间隔； $c$  为摩擦系数。与朗之万方程不同的是，这里忽略了随机力的影响，仅考虑了粒子受重力引起的加速度并加入了惯性。

对于模型系统中的障碍物粒子，由于它们的位置是固定的，因此通常不需要使用牛顿方程或朗之万方程来描述它们的运动。相反，这些障碍物粒子会对扩散粒子施加力，影响它们的运动轨迹。

## 2.3 分子动力学模拟

分子动力学 (Molecular Dynamics, MD) 仿真技术是探索复杂微观世界的有力工具，依据牛顿力学确定性原理，构建了一种热力学计算框架，其应用跨越了物理、化学、生物学、材料科学及医学等多个学科领域。

分子动力学模拟过程中，利用差分方程解析粒子运动轨迹，进而追踪系统随时间演变的多种构象状态。鉴于计算负荷随系统内粒子数目的增加而显著增长，当前分子动力学模拟方法主要局限于小规模分子链系统及短时间尺度的模拟，或对某些高分子链特征进行简化处理。针对大规模粒子系统或长期时间尺度需求，粗粒化近似模型成为常用手段，即通过减少系统自由度以降低计算复杂度。体系粗粒化后的力场参数精确获取是模拟过程中的关键步骤，常见解决方法有 Force matching 法、Relative entropy minimization 法、Inverse Monte Carlo 法、Iterative Boltzmann inversion 技术以及 Martini 力场等多种途径。为提高计算效率、稳定性及精度，研究者广泛采用 Verlet 算法、Leap-frog 算法及 Velocity-Verlet 算法等高效算法体系。

在本研究中，粒子在 WCA 势场和外部加速度作用下的速度变化。在  $X$  方向上，速度变化完全由 WCA 势产生的力决定；在  $Y$  方向上，速度变化则由 WCA 势产生的力和外部加速度共同决定。每个时间步长 ( $\Delta t$ ) 内，粒子的速度都会根据这些力和加速度进行更新，从而实现动态模拟。

下图给出了粒子在分子动力学模拟中移动的流程。

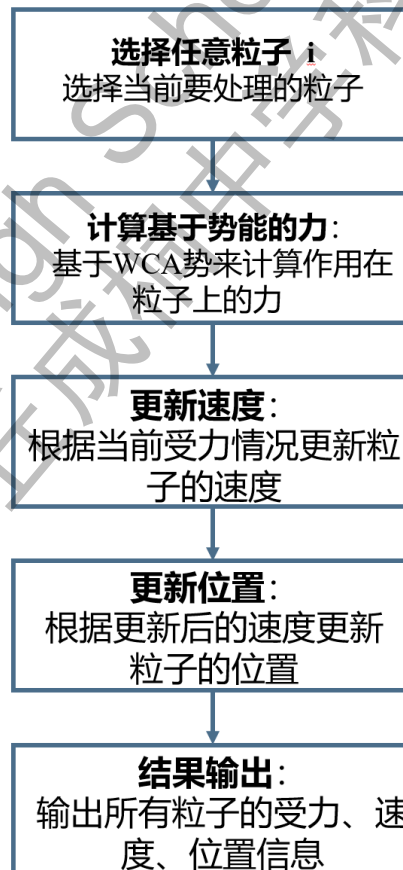


图 2.2 粒子在分子动力学模拟中移动的流程

Fig. 2.2 Flow diagram of the particles moving in the molecular dynamic simulation

## 2.4 多孔障碍物生成

二维晶格排布的调整在材料科学、物理模拟以及计算机科学等领域具有重要意义。不同的晶格结构，例如六边形晶格、正方形晶格、长方形晶格等，能够反映出材料或系统在不同物理环境下的几何对称性和各向异性。通过改变晶格的排列方式，不仅可以研究不同材料在应力、传输和相变行为上的特性，还能通过构建更复杂的晶格模型，如居中长方形或倾斜晶格，来模拟特定的物理现象。此外，晶格排布的优化也是生成具有超均匀性分布的重要途径，特别是在模拟低维材料的过程中，排布方式决定了系统的密度波动和局部无序性。在统计物理学中，这种优化排布广泛应用于研究相变和自组织行为。

### 2.4.1 六边形晶格

六边形晶格 (Hexagonal Grid) 中的点按照蜂窝状的结构排列。在水平方向上，每两个相邻点的间距为  $dx$ ，而在垂直方向上，间距为  $dy = \frac{\sqrt{3}}{2} \times dx$ 。为了形成六边形结构，相邻行之间的点沿  $x$  方向错开  $dx/2$ ：

$$x(i) = \text{MOD}(i, \text{num\_columns}) \times dx + \left( \text{MOD} \left( \left\lfloor \frac{i}{\text{num\_columns}} \right\rfloor, 2 \right) \right) \times \frac{dx}{2} \quad (2.5)$$

$$y(i) = \left\lfloor \frac{i}{\text{num\_columns}} \right\rfloor \times dy \quad (2.6)$$

式中， $\text{num\_columns}$  为水平方向的列数。

六边形晶格是二维中最紧密堆积的结构之一，具有较高的密度和均匀性，每个点有六个等距的最近邻点，常用于材料科学中的最密堆积模型。除了六边形晶格以外，同时模拟了其他规则晶格（正方形晶格、长方形晶格、居中长方形晶格等）。

### 2.4.2 正方形晶格

正方形晶格 (Square Grid) 是最基本的二维晶格结构，具有高度对称性，所有最近邻点之间的距离相等，适用于对称性要求较高的应用场景，其特点是晶格点以正方形的形式均匀排列，每个晶格点都有四个等距的最近邻点，分别位于上下左右方向。由于其高度对称性和简单的几何构造，正方形晶格在统计物理学中具有广泛的应用，例如，它被用于经典的伊辛模型 (Ising Model) 研究中，以模拟自旋系统的相变行为。此外，正方形晶格还在计算机模拟和晶体学研究中发挥着重要作用，例如在元胞自动机 (Cellular Automata) 中模拟扩散和传播过程，以及帮助理解更复杂的晶体结构。

正方形晶格中的每个点在二维平面上按照固定的水平间距  $dx$  和垂直间距  $dy$  排列。所有点的位置由网格的整齐排列决定，即每个点的位置可以表示为：

$$x(i) = \text{MOD}(i, \text{num\_columns}) \times dx \quad (2.7)$$

$$y(i) = \left\lfloor \frac{i}{\text{num\_columns}} \right\rfloor \times dy \quad (2.8)$$

正方形晶格是最基本的二维晶格结构，具有高度对称性，所有最近邻点之间的距离相等，适用于对称性要求较高的应用场景。

### 2.4.3 长方形晶格

长方形晶格 (Rectangular Grid) 是一种二维晶格结构，其中晶格点以长方形的形式均匀排列，每个晶格点有四个最近邻点，分别位于上下左右方向，且相邻点在两个垂直方向上的间距可以不同。由于其非等距的几何特点，长方形晶格常用于描述具有各向异性特性的系统。在实际应用中，长方形晶格被用于模拟某些材料的结构，如正交晶系中的晶体结构，此外，还在物理学中用于研究各向异性介质的传输性质和相变行为。长方形晶格的这种各向异性特性使其成为研究材料在不同方向上表现出不同物理性质的有效模型，并在材料科学和固体物理学中具有广泛应用。

长方形晶格类似于正方形晶格，但垂直方向的间距  $dy$  与水平方向的间距  $dx$  不同。点的位置由以下公式决定：

$$x(i) = \text{MOD}(i, \text{num\_columns}) \times dx \quad (2.9)$$

$$y(i) = \left\lfloor \frac{i}{\text{num\_columns}} \right\rfloor \times dy \quad (2.10)$$

其中， $dy \neq dx$ ，通常  $dy$  大于  $dx$ 。长方形晶格具有各向异性，水平和垂直方向的点间距不同，这种布局在某些物理模拟中更符合实际情况，如具有不同拉伸特性的材料。

### 2.4.4 居中长方形晶格

居中长方形晶格 (Centered Rectangular Grid) 是一种二维晶格结构，其特点是晶格点不仅位于长方形的顶角，还在每个长方形的中心增加一个晶格点，这种结构使得晶格在垂直方向和水平方向上具有不同的间距，但在整体上保持了一定的对称性。居中长方形晶格在材料科学中被用来描述某些正交晶系的晶体结构，如钙钛矿材料，这些材料因其独特的电子和光学特性而在太阳能电池、传感器和其他光电器件中得到广泛应用。此外，居中长方形晶格还用于研究各向异性材料中的物理现象，如应力分布和弹性性质，帮助深入理解材料在不同方向上的不同力学行为。这



种晶格结构的独特性使其成为分析具有复杂对称性和各向异性特性的二维系统的重要工具。

在居中长方形晶格中，粒子沿着  $dx$  和  $dy$  间隔排列，并且在奇数行上，粒子的位置在  $x$  方向上相对于偶数行错开  $dx/2$ ，形成交错的结构：

$$x(i) = \text{MOD}(i, \text{num\_columns}) \times dx + \left( \text{MOD} \left( \left\lfloor \frac{i}{\text{num\_columns}} \right\rfloor, 2 \right) \right) \times \frac{dx}{2} \quad (2.11)$$

$$y(i) = \left\lfloor \frac{i}{\text{num\_columns}} \right\rfloor \times dy \quad (2.12)$$

居中长方形晶格常用于模拟更复杂的晶体结构，具有较高的密度和规整性，适合描述交错排列的原子或分子。

#### 2.4.5 倾斜晶格

倾斜晶格 (Skewed Grid) 是一种二维晶格结构，其中晶格点按照平行四边形的形式排列，晶格的两个基矢量之间形成一个非直角的夹角，因此不再具备正交晶格的对称性。由于其非正交的几何特性，倾斜晶格能够描述具有各向异性和非对称性的材料结构和物理现象。倾斜晶格在研究低维材料、晶体缺陷以及畸变结构中具有重要应用，例如，它可以用于模拟在应变作用下发生变形的二维材料，以及在研究液晶分子排列和晶体中的位错现象时，提供一个有效的理论模型。此外，倾斜晶格还在计算物理中用于研究材料的各向异性扩散和传输特性，这些研究对于开发新型功能材料和优化现有材料的性能具有重要意义。

在倾斜晶格中，点在  $dx$  和  $dy$  间隔下生成，且每一行的点在  $x$  方向上相对于前一行错开  $dx/4$ ，形成一种非正交的晶格结构：

$$x(i) = \text{MOD}(i, \text{num\_columns}) \times dx + \left( \text{MOD} \left( \left\lfloor \frac{i}{\text{num\_columns}} \right\rfloor, 2 \right) \right) \times \frac{dx}{4} \quad (2.13)$$

$$y(i) = \left\lfloor \frac{i}{\text{num\_columns}} \right\rfloor \times dy \quad (2.14)$$

这种非正交晶格在应变材料或倾斜的晶体结构中可能出现，点之间的距离不一致，适合于研究复杂材料中的非对称效应。

#### 2.4.6 超均匀晶格

在一个给定的观察窗口内，随着窗口体积的增加，窗口内点数的方差增长速度低于窗口体积的增长速度，该系统便被认为是超均匀的。这表明在宏观尺度上，粒子的分布逐渐趋于均匀。从数学角度来看，超均匀性可以通过数目方差  $\sigma^2(N)$  来

量化, 该参数与系统中的局部密度波动密切相关。对于超均匀系统, 数目方差  $\sigma^2(N)$  随着观察窗口体积的增长呈次线性关系。数目方差的计算公式为:

$$\sigma_N^2(R) = \langle N^2(R) \rangle - \langle N(R) \rangle^2 \quad (2.15)$$

式中,  $N(R)$  表示半径为  $R$  的观察窗口内的粒子数;  $\langle \cdot \rangle$  表示对所有观察窗口的平均。对于超均匀系统, 数目方差  $\sigma_N^2(R)$  与观察窗口半径  $R$  的关系通常满足:

$$\sigma_N^2(R) \sim R^{d-\alpha} \quad (2.16)$$

式中,  $d$  是系统的维数,  $\alpha > 0$  表示超均匀性。典型情况下,  $d=1$  对应于一维系统,  $d=2$  对应于二维系统,  $d=3$  对应于三维系统。

在点阵模型的背景下, 超均匀性涉及粒子排列的特定方式, 这些排列方式在长距离尺度上极大地抑制了密度波动。这类系统包括完全有序的晶体结构、某些准周期系统 (如准晶体) 以及特别设计的无序系统。当超均匀性概念扩展到两相异质介质时, 它描述了这些材料中两种不同相 (如固体相和空隙相) 的分布特性。在此类系统中, 超均匀性保证了在大观察窗口内, 某一相的局部体积分数的方差随窗口大小的增加而显著降低, 从而在大尺度上实现相的均匀分布。特别地, 如公式 2.16 所示的幂率规律应该在  $R \rightarrow \infty$  时成立, 以此避免超均匀系统在小观察窗口内的无序性所造成的影响。

Poisson Disk Sampling 通过在二维区域内逐步生成和验证新点的位置, 确保生成的点集具有超均匀性。点与点之间的距离至少为  $r$ , 通过随机选择和验证的过程, 保证了点集的均匀性和随机性。算法的主要操作集中在生成候选点和验证新点的位置是否有效, 从而构建出一个均匀分布的点集合。具体地, Poisson Disk Sampling 算法的基本流程可以描述如下:

步骤 1: 首先, 将目标区域 (例如宽度为  $W$  和高度为  $H$  的矩形区域) 划分为一个网格。网格单元的边长设定为  $\text{cell\_size} = \frac{r}{\sqrt{2}}$ , 这样确保每个网格单元中最多只能包含一个点。网格的宽度和高度分别为  $\text{grid\_width} = \lceil \frac{W}{\text{cell\_size}} \rceil$  和  $\text{grid\_height} = \lceil \frac{H}{\text{cell\_size}} \rceil$ , 并初始化一个大小为  $\text{grid\_width} \times \text{grid\_height}$  的网格  $G$ , 所有单元初始值为 -1。

步骤 2: 在目标区域  $W \times H$  内随机生成一个初始点  $p_0$ , 其坐标为  $p_0 = (x_0, y_0)$ , 其中  $x_0 \in [0, W]$  且  $y_0 \in [0, H]$ 。将这个点添加到点集合  $S$  和处理列表  $P$  中。同时, 将该点在网格中的位置标记, 设其对应的网格坐标为  $(i_0, j_0)$ , 则  $G(i_0, j_0)$  被更新为点在集合  $S$  中的索引。

步骤 3: 从处理列表  $P$  中随机选择一个点  $p = (x, y)$ , 并生成  $k$  个候选点  $p'$ , 这些点的生成方式为: 随机角度  $\theta \in [0, 2\pi)$  和随机距离  $d \in [r, 2r]$ , 然后计算  $p' = p + d \cdot (\cos(\theta), \sin(\theta))$ 。

步骤 4: 对于每个候选点  $p'$ , 首先检查其是否位于目标区域内, 即  $0 \leq x' <$

$W$  且  $0 \leq y' < H$ 。接着，检查它与其邻近网格内所有已生成点之间的距离是否满足  $\|p' - p_i\| \geq r$  对于所有  $p_i \in S$ 。如果该候选点满足这些条件，则将其添加到点集合  $S$  和处理列表  $P$  中，并在网格  $G$  中标记其位置。

步骤 5: 如果在  $k$  次尝试后，未能找到满足条件的候选点，则从处理列表  $P$  中移除点  $p$ 。该步骤确保当一个点周围无法再生成新点时，不再浪费计算资源继续尝试。

步骤 6: 重复步骤 3 到步骤 5，直到处理列表  $P$  为空，即没有更多的点可以生成为止。

步骤 7: 最终，算法返回生成的点集合  $S$ ，其中所有点满足最小距离  $r_0$  的约束，形成一个超均匀分布。

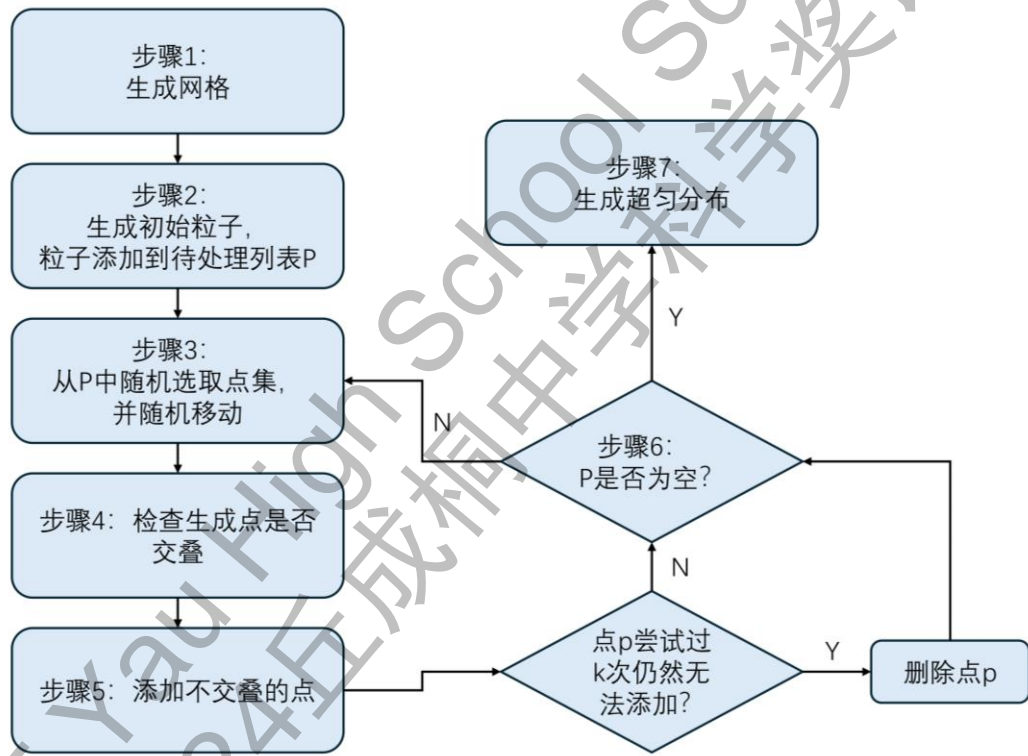


图 2.3 Poisson Disk Sampling 算法的基本流程图

Fig. 2.3 Basic flowchart of the Poisson Disk Sampling algorithm

通过调节参数  $r_0$  (即点之间的最小距离)，可以显著影响生成点集合的性质。较小的  $r_0$  允许点之间的距离更近，从而增加了点的密度。这种情况下，点集更具随机性，因为点在较小区域内的排列会更加自由和不规则。然而，由于点彼此之间的距离较短，这种随机性可能会导致局部区域的均匀性降低，出现点的聚集现象。反之，增大  $r_0$  会强制点之间保持更大的距离，减少了点的密度。这种设置下，点集趋向于更加均匀地分布，因为点之间的排斥作用增大，减少了局部区域的随机性。更大的  $r_0$  也意味着在宏观尺度上，点集展现出更强的全局结构性，点的排列在空

间中显得更加规整，避免了局部的高密度聚集现象。

因此， $r_0$  的大小直接影响点集的密度、均匀性、随机性和全局结构性之间的平衡。较小的  $r_0$  倾向于增加点集的密度和随机性，但可能牺牲均匀性；较大的  $r_0$  则减少密度和随机性，但增强了均匀性和整体结构。调节  $r_0$  使得生成的点集能够适应不同的应用需求，从而在不同的场景中实现最佳的空间分布。

图 2.4 展示了在粒子密度为  $\rho = 0.007/\text{mm}^2$  时，粒子在不同均匀性参数  $r_0$  下的超均匀分布情况。从图中可以看到，随着  $r_0$  值的增加，粒子的分布逐渐表现出更加明显的集群效应。当  $r_0=0$  时，粒子呈现出随机分布的特性；当  $r_0=0.5 \text{ mm}$  时，粒子分布开始表现出一定的规律性，局部均匀性提高；而当  $r_0=3.0 \text{ mm}$  时，粒子的排列趋向更加有序，形成了更明显的超均匀分布特征，这说明  $r_0$  参数在调控粒子分布的均匀性和集群性上具有重要作用。

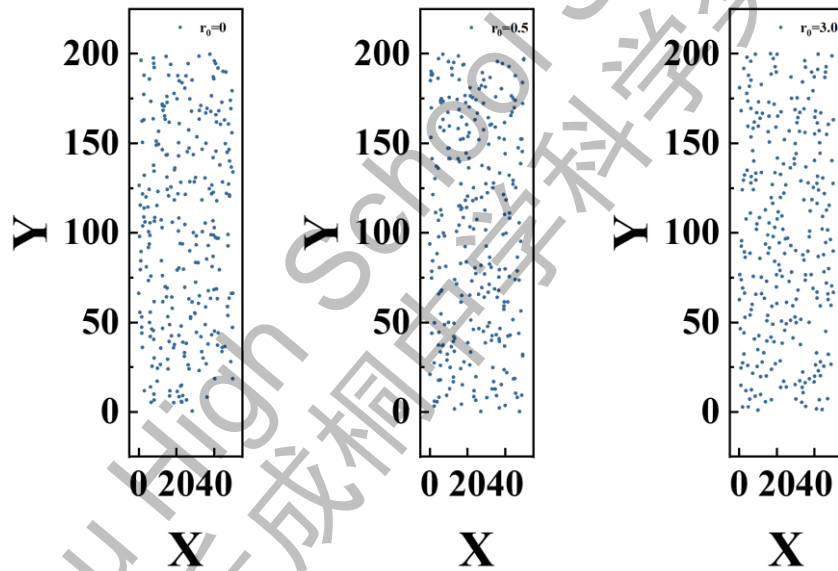


图 2.4  $\rho = 0.007/\text{mm}^2$  时粒子在不同均匀性下的超均匀分布情况

Fig. 2.4 Hyperuniform distribution of particles at different homogeneities when  $\rho = 0.007/\text{mm}^2$

图 2.5 展示了在  $r_0=1.0 \text{ mm}$  的条件下，粒子在不同密度  $\rho$  下的超均匀分布情况。图中从左到右依次为密度  $\rho = 0.008/\text{mm}^2$ 、 $\rho = 0.007/\text{mm}^2$ 、 $\rho = 0.006/\text{mm}^2$  和  $\rho = 0.005/\text{mm}^2$  的粒子分布图。随着密度的降低，粒子之间的距离逐渐增大，分布变得更加稀疏。在较高密度时，粒子分布更加紧密，接近均匀排列，而随着密度下降，粒子之间的空隙增大，表现出一定的随机性，这说明粒子密度对超均匀分布的形成有着显著影响，密度越高，粒子分布越趋向均匀。

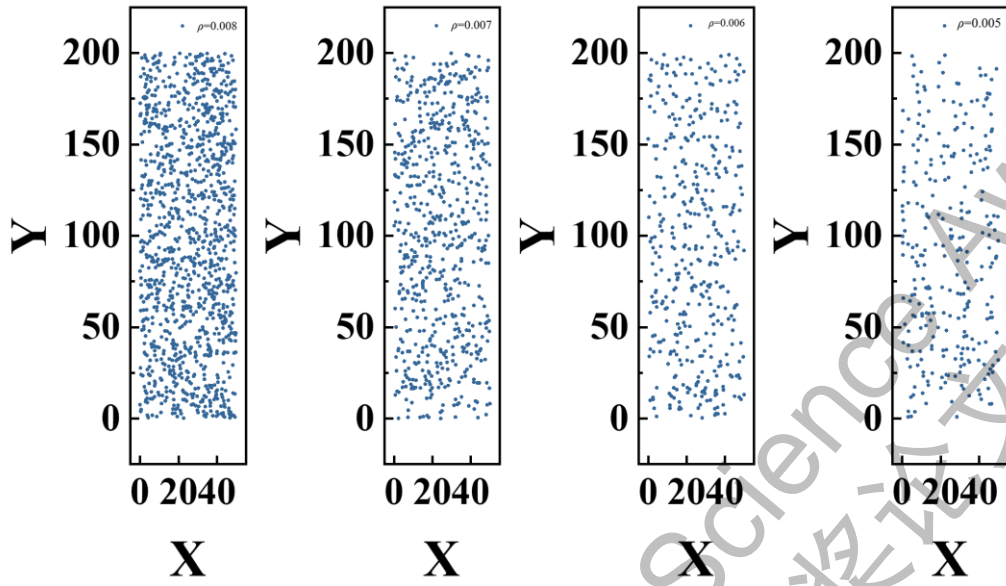


图 2.5  $r_0=1.0$  mm 时粒子在不同密度下的超匀分布情况

Fig. 2.5 Hyperuniform distribution of particles at different densities when  $r_0=1.0$  mm

在生成超均匀点集的过程中，Poisson Disk Sampling 算法是一个常用的工具，它可以生成在空间上具有最小距离约束的点集。然而，Poisson Disk Sampling 的局限性在于，它无法灵活地指定生成点集的密度，也无法在需求下回归到随机分布的情况。这对于一些研究需求来说，尤其是在需要生成从随机到有序分布过渡的点集时，是不够的。因此，本文引入了一种基于蒙特卡洛方法的算法，它能够通过模拟粒子间的相互作用力来动态调整点的位置，从而生成具有指定密度且趋向超均匀分布的点集。

为解决上述问题，在本研究中，引入了一种基于蒙特卡洛方法的算法，用以生成具有超均匀特性的点集。该算法的核心思想是通过迭代地模拟点之间的排斥力，从而逐步优化点的位置分布，使其在大尺度上实现密度均匀性，同时在小尺度上保留一定的无序性。

首先，在给定的区域  $[0, \text{width}] \times [0, \text{height}]$  内随机生成  $N$  个点，这些点的位置表示为：

$$\vec{p}_i = \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix}, \vec{p}_i \sim \text{Uniform}([0, \text{width}] \times [0, \text{height}]) \quad (2.17)$$

这种初始化代表了点集的均匀随机分布。其次，计算每对点  $\vec{p}_i$  和  $\vec{p}_j$  之间的欧几里得距离：

$$d_{ij} = \|\vec{p}_i - \vec{p}_j\|_2 = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} \quad (2.18)$$

若  $d_{ij} < r$  (其中  $r$  为指定的最小距离)，在这对点之间施加排斥力  $\vec{F}_{ij}$ ，其大小与距离的立方成反比：

$$\vec{F}_{ij} = \frac{\vec{p}_i - \vec{p}_j}{d_{ij}^3} \quad (2.19)$$

总的排斥力  $\vec{F}_i$  为每个点  $\vec{p}_i$  对其他所有点的排斥力的叠加：

$$\vec{F}_i = \sum_{j \neq i} \vec{F}_{ij} = \sum_{j \neq i} \frac{\vec{p}_i - \vec{p}_j}{d_{ij}^3} \quad (2.20)$$

在每次迭代中，根据计算的总排斥力  $\vec{F}_i$  更新每个点的位置  $\vec{p}_i$ ：

$$\vec{p}_i^{(k+1)} = \vec{p}_i^{(k)} + \alpha \cdot \vec{F}_i \quad (2.21)$$

式中， $\alpha$  为学习率，用于控制每次迭代时位置调整的幅度。通过调节  $\alpha$  的大小，可以实现点集从随机到有序的平滑过渡。

为了确保所有点始终位于指定区域内，使用裁剪操作将更新后的点坐标限制在  $[0, \text{width}]$  和  $[0, \text{height}]$  之间：

$$\vec{p}_i^{(k+1)} = \text{clip}(\vec{p}_i^{(k+1)}, [0, 0], [\text{width}, \text{height}]) \quad (2.22)$$

该算法不断迭代，直至每个点的位置变动小于预设的阈值，即满足收敛条件：

$$\|\vec{p}_i^{(k+1)} - \vec{p}_i^{(k)}\| < \epsilon, \forall i \quad (2.23)$$

通过多次迭代，点集最终达到一种平衡状态，形成具有超均匀性特征的分佈结构。

#### 2.4.7 随机分布

多孔障碍物粒子随机分布(Random Distribution)的点位置是均匀随机生成的，覆盖整个区域  $[0, Lx]$  和  $[0, Ly]$ 。每个点的位置  $(x, y)$  都是独立随机产生的：

$$x(i) = \text{rand}(0, Lx) \quad (2.24)$$

$$y(i) = \text{rand}(0, Ly) \quad (2.25)$$

随机分布的点集合没有任何规则性或周期性，适用于模拟无序系统，如气体分子的位置分布，或需要随机性作为特征的场景。图 2.6 给出了上述每一种晶格（六角晶格、正方形晶格、长方形晶格、居中长方形晶格、倾斜晶格、超匀晶格、随机分布）的具体构型。



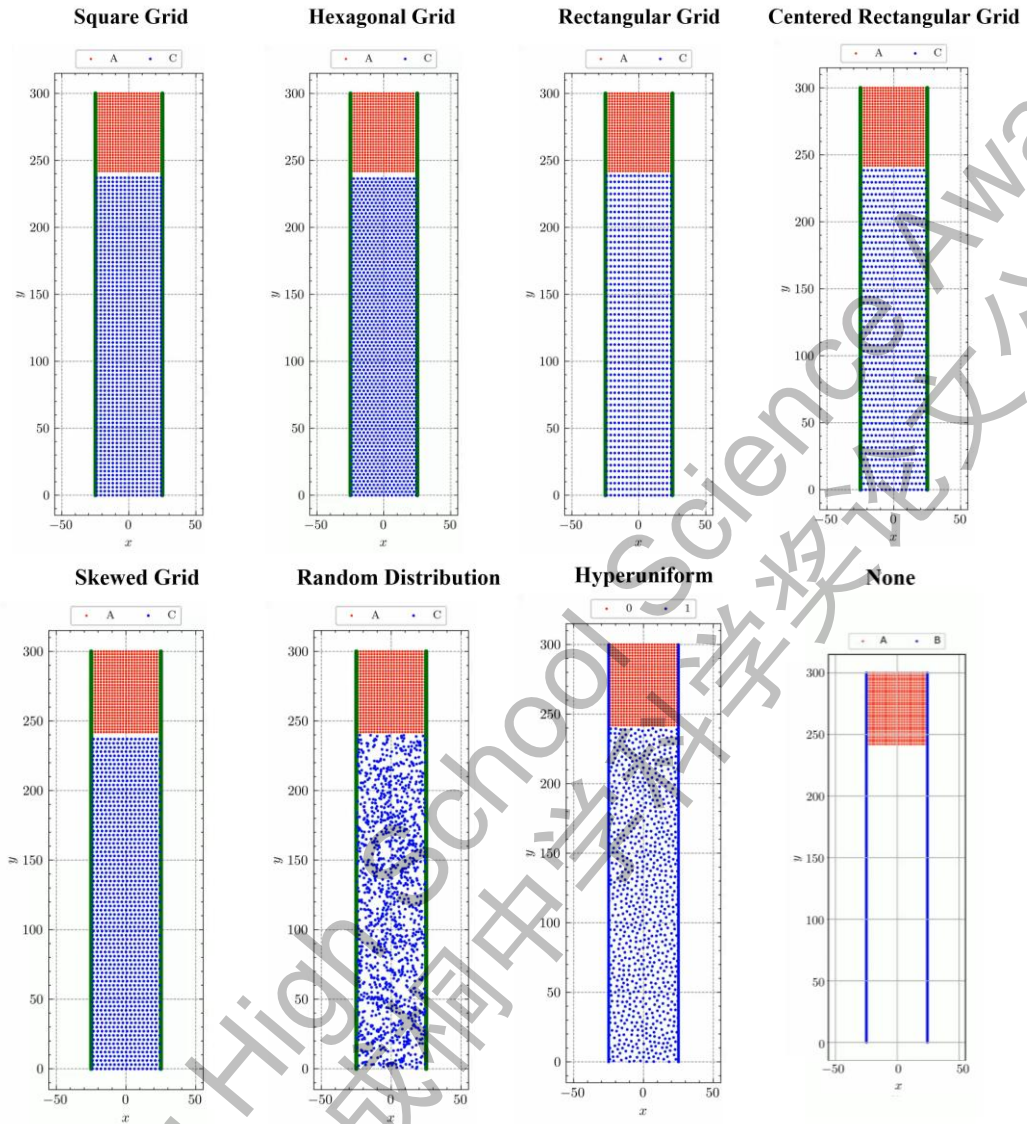


图 2.6 粒子间间距  $\rho = 0.007/\text{mm}^2$  时不同障碍物粒子分布的初始状态

Fig. 2.6 Initial state of particle distribution when  $\rho = 0.007/\text{mm}^2$

### 3 模拟结果与讨论

#### 3.1 布朗运动模拟结果与讨论

在本文模拟中，通过绘制动画观察了粒子在不同类型障碍物中的扩散过程，这有助于直观地理解不同环境下粒子的动态行为。图 3.1 展示了某一时刻的粒子状态，可以清楚地看到，在相同的时间点，粒子在不同分布的障碍物中表现出显著不同的扩散速度和分布情况。通过比较均方位移（Mean Square Displacement,  $MSD$ ）可以发现，粒子在不同障碍物排列下的扩散特征存在明显差异。这些差异可能源于障碍物的排列方式、密度、形状等因素对粒子运动的影响，导致了扩散速率和路径的变化。

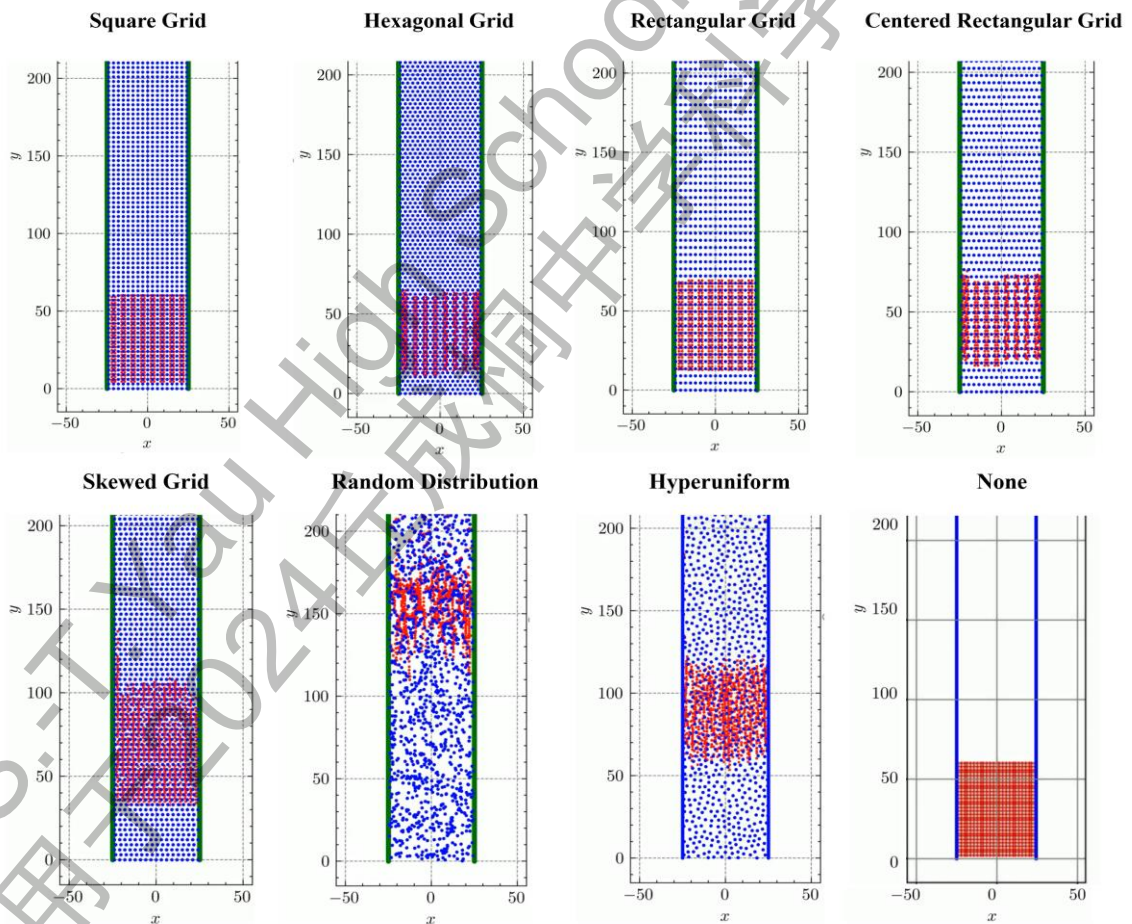


图 3.1 粒子在特定时刻的空间分布及不同障碍物排布方式对粒子在二维空间中扩散行为的影响

Fig. 3.1 Spatial distribution of particles at a given moment and the effect of different obstacle alignments on the diffusion behavior of particles in 2D space



均方位移是量化粒子在一段时间内平均运动距离的统计量，它常用于分析粒子在介质中的扩散特性。在一个系统中， $MSD$  可以通过计算所有粒子从初始位置到某一时刻的位置变化的平方平均值来获得。对于一个正常的扩散过程， $MSD$  与时间呈线性关系，这意味着粒子的运动是随机的且均匀分布的。在存在障碍物或其他复杂介质的情况下， $MSD$  可能会显示出不同的时间依赖性，例如次线性增长，反映了粒子受到的限制或阻碍。通过计算系统的  $MSD$ ，可以深入了解粒子在不同环境中的扩散行为及其背后的物理机制。

$$MSD(\Delta t) = \left\langle (\mathbf{r}(t + \Delta t) - \mathbf{r}(t))^2 \right\rangle_t \quad (3.1)$$

图 3.2 给出了粒子在相同密度的不同障碍物环境中  $MSD$  的变化情况，可以发现，粒子在不同障碍物排列下的扩散特征存在明显差异。在给定的时间，例如  $\Delta t=30$ ，我们可以看到红色曲线表示的晶格结构， $MSD$  增速最快，表明粒子的扩散程度最高。蓝色曲线表示的随机结构， $MSD$  增速最低，扩散程度最慢。黄色曲线表示超均匀结构， $MSD$  增速介于随机结构和晶格结构之间。

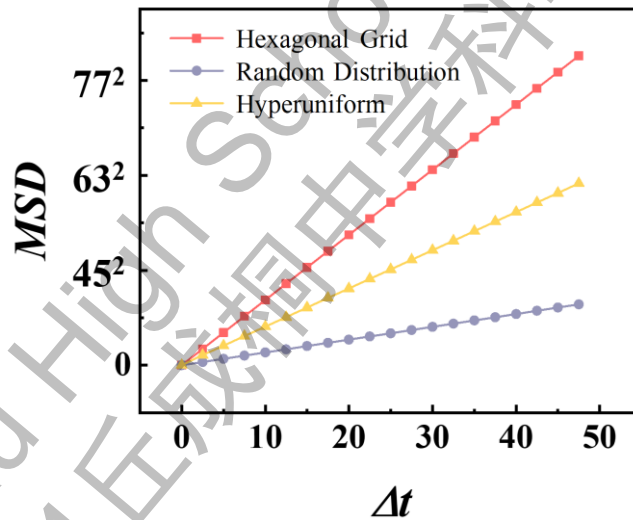


图 3.2 三种障碍粒子分布结构（六角晶格、随机分布、超匀分布）对粒子在二维空间  $MSD$  分布的影响

Fig. 3.2 Effect of three obstacle particle distribution structures (hexagonal grid, random distribution, and hyperuniform distribution) on the  $MSD$  distribution of particles in 2D space

除此之外，分析不同时间步长下粒子在  $X$  和  $Y$  方向的分布对于理解粒子的时间依赖性运动行为至关重要。范霍夫自关联函数 (van Hove self-correlation function) 是描述粒子在流体或其他多体系统中运动的时间依赖性的一种重要工具。它用来研究系统中的动态行为和时间演化，特别是在研究分子动力学和液体结构时非常有用。范霍夫自关联函数  $G(r, t)$  描述的是某个特定粒子在时间  $t=0$  处于位置  $r_0$  后，在时间  $t$  时出现在位置  $r$  的概率密度函数。它的定义由公式 3.2、公式 3.3 给

出<sup>[34]</sup>。时间步长决定了模拟中粒子的运动轨迹细节。较小的  $\Delta t$  能够捕捉粒子更精细的运动细节，展现出粒子在短时间尺度上的微观行为，而较大的  $\Delta t$  则可能忽略掉一些细节，只表现出较长时间尺度上的宏观行为。通过对比不同  $\Delta t$  下粒子在  $X$  和  $Y$  方向上的分布，可以分析粒子的运动是否在不同时间尺度上表现出一致性或各向异性。这种分析有助于优化模拟参数，确保在不同时间步长下捕捉到系统的本质特征，并且对理解复杂系统中的时间依赖性扩散行为、粒子相互作用以及外部场影响具有重要参考价值。

$$G(\Delta x, \Delta t) = \langle \delta\{\Delta x - [x(t + \Delta t) - x(t)]\} \rangle \quad (3.2)$$

$$G(\Delta y, \Delta t) = \langle \delta\{\Delta y - [y(t + \Delta t) - y(t)]\} \rangle \quad (3.3)$$

图 3.3 给出了相同密度 ( $\rho = 0.007$ ) 下，三种不同障碍物分布（六角晶格、随机分布、超匀分布）对粒子运动的影响。从图中可以看出，六角晶格结构下的  $G(\Delta x, \Delta t)$  峰值最高，表明粒子运动具有较强的集中性，运动路径较为确定；超匀分布的曲线峰值介于六角晶格和随机分布之间，说明粒子运动既受到一定程度的限制，但仍保留了一定的规则性；而随机分布的峰值最低，曲线相对平缓，表明在随机分布中，粒子的运动更加无序且分散，表现出较大的扩散范围和更低的集中度。

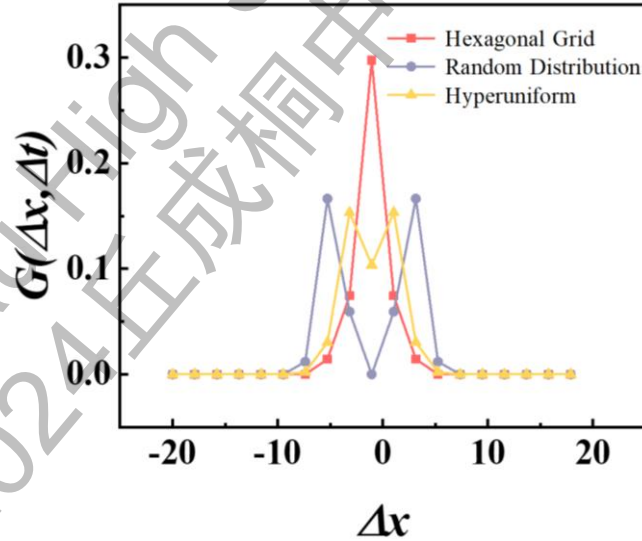


图 3.3 三种障碍粒子分布结构（六角晶格、随机分布、超匀分布）中，沿  $X$  方向的时间平均范霍夫函数在  $\Delta t=180$  时刻的变化的情况

Fig. 3.3 Time-averaged van Hove function along the  $X$ -direction for the three obstacle-particle distribution structures (hexagonal grid, random distribution, and hyperuniform distribution) at  $\Delta t = 180$  moments

在此基础上，进一步探究了密度对粒子在  $X$  方向扩散的影响，图 3.4 展示了在六角晶格结构下，不同障碍物密度 ( $\rho = 0.0080$ 、 $\rho = 0.0075$ 、 $\rho = 0.0070$ ) 下粒子

运动的变化情况。可发现：随着密度的增加，峰值逐渐减小，曲线变得更加尖锐，说明粒子运动受到的限制越来越强，扩散行为更加局限。

总体来看，障碍物的分布结构和密度显著影响粒子在多孔介质中的扩散行为。六角晶格结构由于其规则性，提供了更大的自由扩散空间；超匀结构介于六角和随机分布之间，它在保持一定规则性的同时，增加了局部的均匀性，抑制了部分无序的扩散行为；而随机分布则导致粒子运动更加无序且分散，扩散性最强。当障碍物密度增加时，粒子运动受到的限制更加明显，扩散速率随之减缓。

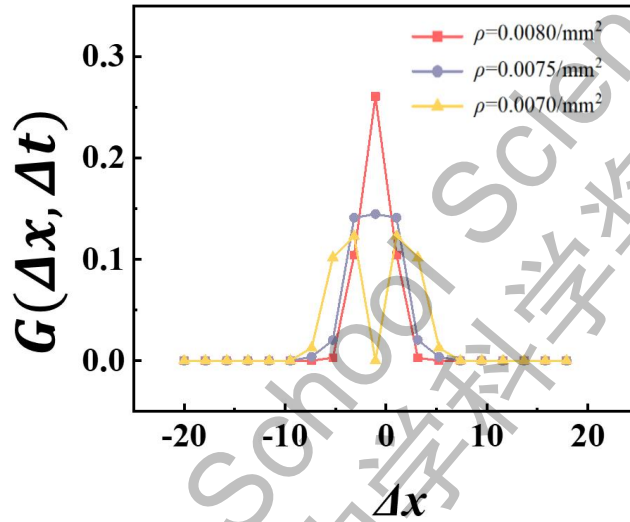


图 3.4 在不同密度的六角晶格中  $X$  方向的范霍夫关联函数变化情况

Fig. 3.4 Variation of the van Hove correlation function in the  $X$ -direction in hexagonal grids of different densities

同样的，在  $Y$  方向上，图 3.5 展示了三种不同障碍物分布结构（六角晶格、随机分布、超匀分布）中，沿  $Y$  方向的时间平均范霍夫函数随时间步长变化的情况。可以看出，不同结构对粒子在  $Y$  方向的扩散行为产生了显著影响。

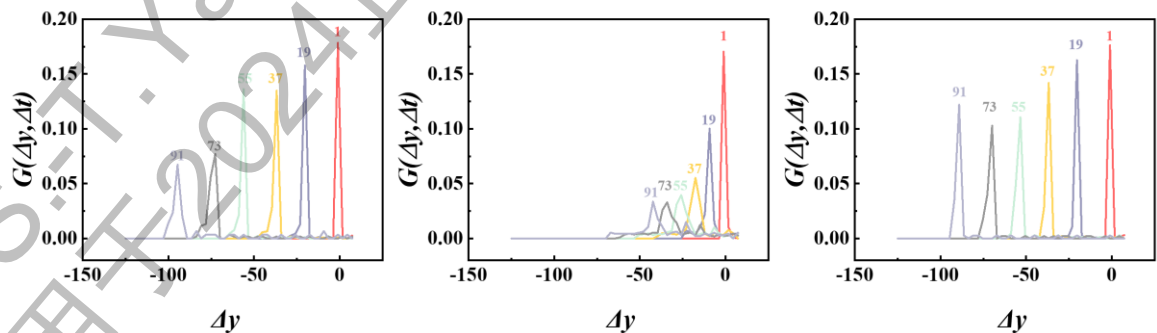


图 3.5 三种障碍粒子分布结构（六角晶格、随机分布、超匀分布）中沿  $Y$  方向的时间平均范霍夫函数随时间步长变化的情况

Fig. 3.5 Time-averaged van Hove function along the  $Y$ -direction as a function of the time step for three obstacle-particle distribution structures (hexagonal grid, random distribution, and hyperuniform distribution)

基于范霍夫关联函数中对  $Y$  方向的分析，本文进一步讨论了在三种不同的多孔介质结构（六角晶格、随机分布和超匀结构）下粒子随时间的  $Y$  方向位移和速率的变化情况。图 3.6 左图显示了粒子在  $Y$  方向上的平均位移随时间增大的趋势。在三种结构中，六角晶格的位移下降最快，表明粒子在该结构中的扩散速度最高；随机分布的位移下降最慢，说明扩散受阻较多；超匀结构的位移变化介于两者之间，反映出中等扩散行为。右图展示了粒子速率随时间的变化，随机分布结构中的速率始终保持最低，六角晶格的速率则接近 1，而超匀结构的速率变化相对较小，略高于随机分布。整体来看，这些结果说明多孔介质的结构显著影响粒子的扩散行为，其中六角晶格提供了最快的扩散路径，随机分布的结构由于“陷阱”效应导致扩散最慢。

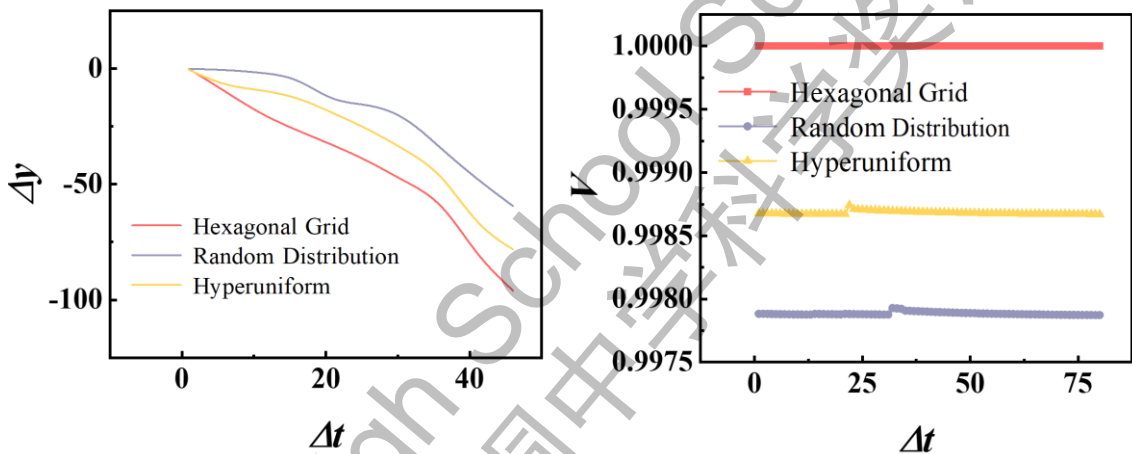


图 3.6 在三种多孔介质结构（六角晶格、随机分布和超匀结构）下粒子随时间的（左） $Y$  方向位移和（右）速率的变化情况。

Fig. 3.6 Variation of displacement in  $Y$ -direction (the left figure) and rate (the right figure) of particles with time for three different porous medium structures (hexagonal grid, random distribution, and hyperuniform distribution).

### 3.2 惯性运动模拟结果与讨论

本节设计了一个演示实验来验证布朗运动的原理和机制。为了更好地模拟宏观世界的现象，在传统布朗运动的基础上引入了惯性运动的模拟。这种结合考虑了在宏观尺度上，粒子还会表现出一定的惯性特性，从而更符合现实中的运动轨迹。通过这种模拟，能够更精确地捕捉到宏观粒子在复杂介质中渗透的动力学特征。这将为设计和优化实验提供有效的理论指导，确保实验过程中能更直观地展示布朗运动的本质及其在宏观系统中的表现。此外，惯性效应的加入使本文能够探索布朗运动与经典力学运动之间的过渡过程，进一步丰富对粒子运动行为的理解，为之后



的实验开发和实际应用奠定坚实基础。这意味着粒子的速度不仅由当前时间步的力决定，还受到之前时间步中速度的影响。与仅基于力更新位移的渗透模型不同，惯性模型考虑了粒子在短时间内保持其运动状态的趋势，即“惯性”。惯性的增加反映了对系统中粒子质量的重新表征和调整，体现了粒子在运动过程中的惯性效应，即其保持原有速度状态的趋势。通过引入惯性，不仅在力的作用下更新粒子的速度，还充分考虑了粒子质量对其运动的影响。质量的增加意味着粒子对外力的响应更为缓慢，从而使其速度变化更加平滑，这种调整为粒子运动引入了更具物理现实性的动力学特征。这一表征不仅提升了模型对粒子质量的计量精度，还更准确地模拟了实际实验中的粒子运动行为，特别是在有外力或阻力存在的复杂系统中。这使得模拟结果更接近现实中粒子的运动行为，尤其是在存在外力作用的情况下。为了确保模拟的稳定性和准确性，本文选择了合适的时间步长。这种包含惯性效应的模拟方法特别适用于描述在外力作用下的粒子运动，如重力场中的渗透、带有黏性阻力的流体中的颗粒运动等。由于惯性效应的考虑，粒子在模拟中表现出的运动路径和渗透行为更接近实际物理实验中的情况。图 3.7 给出了 3 种典型的障碍物分布情况。

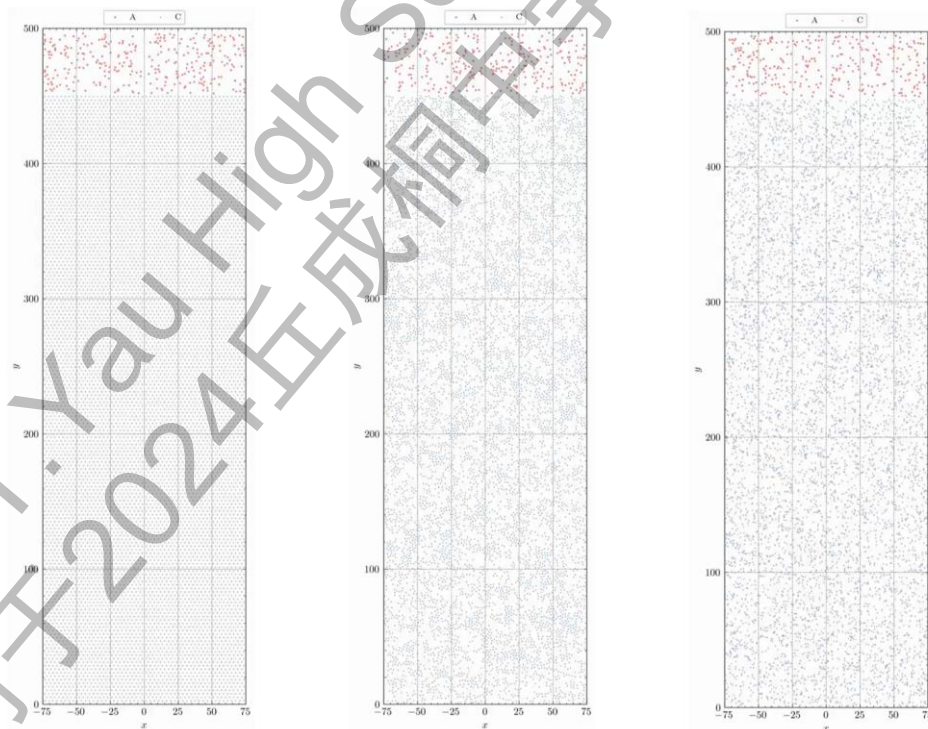


图 3.7 三种典型的障碍物（六角，随机，超匀）初始分布情况

Fig. 3.7 Initial distribution of three obstacle structures (hexagonal grid, random distribution, and hyperuniform distribution)

图 3.8 展示了粒子在多孔介质中进行惯性运动时的平均平方位移 ( $MSD$ ) 随时间步长的变化情况, 并且与布朗运动的结果相似, 并对六角密排结构、随机分布结构、超均匀结构在不同密度条件下的  $MSD$  变化趋势进行了对比分析。

从图 3.8 左侧的线性坐标图可以看出, 六角密排结构下的粒子渗透速度最快, 其  $MSD$  值在相同时间步长内增长最快。这是因为六角密排结构的规则性使得粒子在多孔介质中的运动更加顺畅, 遇到的阻碍较少。相反, 随机分布结构中的粒子渗透速度最慢, 这是由于随机分布的无序性使得粒子在运动过程中容易遇到局部“陷阱”或障碍, 从而减缓其渗透速度。超均匀结构的粒子渗透速度介于六角密排和随机分布之间, 表现为一种较为稳定且均衡的渗透行为。

同时注意到了在不同障碍物密度下, 粒子在多孔介质中进行惯性运动时, 平均平方位移随时间步长的变化情况。图 3.8 右侧两个图分别对比了六角密排结构、随机分布结构在不同障碍物密度下的  $MSD$  曲线。

从图中可以明显看出, 随着障碍物密度的增加, 粒子的渗透速度逐渐变慢, 各结构下的  $MSD$  曲线整体呈下降趋势。这表明在障碍物密度较高时, 粒子在多孔介质中的运动路径受到更多的阻碍, 渗透过程更加艰难, 导致  $MSD$  减小, 说明高密度的障碍物显著减缓了粒子的渗透速度。这一现象反映了随着障碍物密度的增加, 介质对粒子运动的限制增强, 渗透效率显著降低。

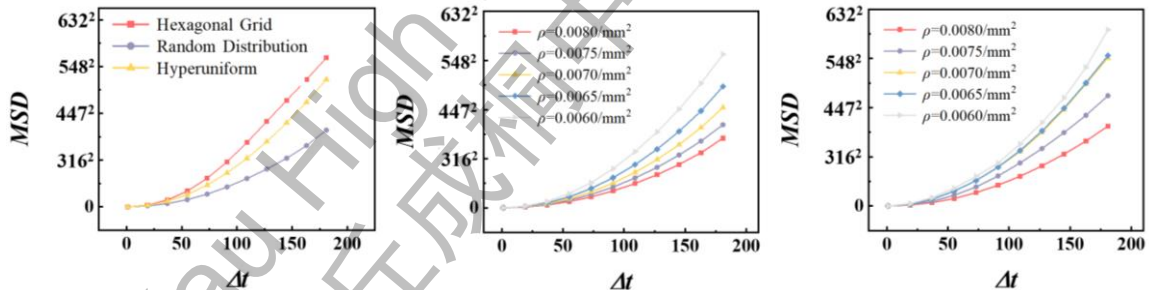


图 3.8 (左): 在三种障碍粒子分布 (六角晶格、随机分布、超匀分布) 情况下粒子的均方位移随时间步长的变化曲线; (中): 随机分布障碍物下, 不同密度条件对粒子均方位移随时间步长的影响; (右): 六角晶格障碍物下, 不同密度条件对粒子均方位移随时间步长的影响

Fig. 3.8 Curves of  $MSD$  (the left figure) of particles with  $\Delta t$  for different obstacle distributions (hexagonal grid, random distribution, and hyperuniform distribution), the effect of different densities on the  $MSD$  of particles with  $\Delta t$  under random distribution (the middle figure) and under hexagonal grid (the right figure)

这一结果对理解多孔介质中粒子的运动行为具有重要意义, 特别是在设计和优化涉及多孔介质的材料和过程时, 考虑到障碍物密度的影响是至关重要的。

在此基础上, 计算了最大  $\Delta MSD$  ( $\Delta t=180$ ), 即六角密排和随机分布之间的最

大  $MSD$  差异来描述不同密度下不同障碍物分布的差异。

通过分析不同障碍物密度下的  $\Delta MSD$  ( $\Delta t=180$ ) 值,可以发现,随着障碍物密度的增加, $\Delta MSD$  ( $\Delta t=180$ ) 值呈现出一定的增长趋势。这表明六角密排结构与随机分布结构在高障碍物密度下的渗透行为差异更为显著。在障碍物密度为  $\rho = 0.007/\text{mm}^2$  的情况下, $\Delta MSD$  ( $\Delta t=180$ ) 值较大,表明六角密排结构在该条件下的渗透效率相对较高,而随机分布结构则表现为较慢的渗透。这意味着在研究多孔介质中的惯性渗透时,障碍物密度为  $\rho = 0.007/\text{mm}^2$  的条件下,六角密排结构能够更好地展示介质的渗透性和粒子渗透的优势。

因此,从这些分析可以得出结论:在多孔介质中进行惯性运动时,六角密排结构能够显著提高粒子的渗透速度,特别是在障碍物密度为  $\rho = 0.007/\text{mm}^2$  的条件下。这表明  $\rho = 0.007/\text{mm}^2$  是研究和应用该类结构在多孔介质中渗透特性的最佳选择。

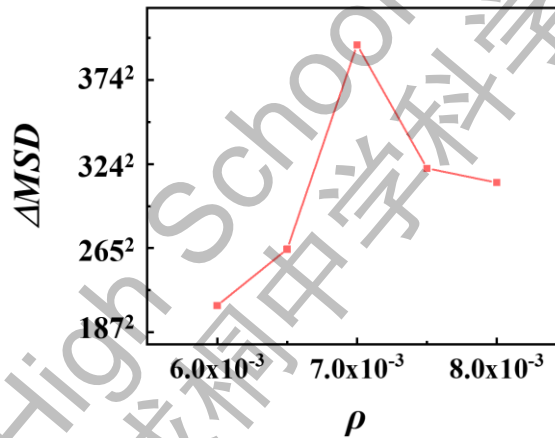


图 3.9 粒子在六角晶格与随机分布之间的在  $\Delta t=180$  时均方位移差值 ( $\Delta MSD$ ) 随密度的变化情况

Fig. 3.9 Maximum mean square displacement difference ( $\Delta MSD_{MAX}$ ) of particles between hexagonal grid and random distribution as a function of density

因此选择对  $\rho = 0.007/\text{mm}^2$  时粒子在不同多孔介质中的惯性运动过程进行更深入的探究。本文分析了  $\rho = 0.007/\text{mm}^2$  时粒子在不同多孔介质中的惯性运动的范霍夫关联函数在不同时间步长下的变化情况,分别对比了六角密排结构、随机分布结构、超均匀结构在  $X$  方向的渗透行为,如图 3.10 所示。可以看出,在密度  $\rho = 0.007/\text{mm}^2$  时,六角晶格峰值相对集中,反映了粒子渗透路径较为确定和规则;超均匀分布虽然渗透较集中,但与六角晶格相比,表现出一定的波动,说明其结构介于六角晶格和随机分布之间。随机分布的曲线更加平缓,表明粒子的运动更加无序,渗透范围更大。

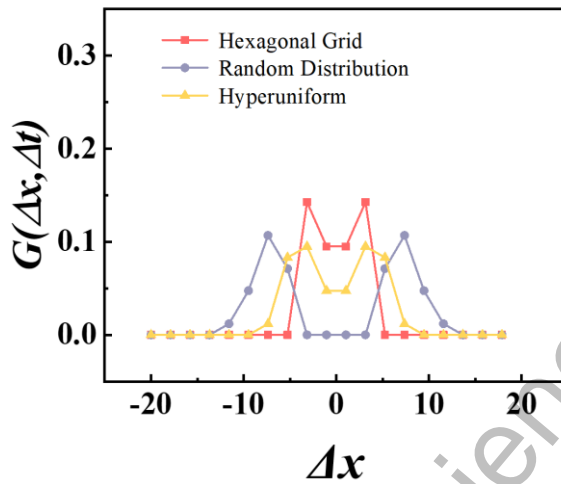


图 3.10  $X$  方向范霍夫关联函数在不同时间步长下的变化情况

Fig. 3.10 Van Hove correlation function in the  $X$ -direction for different time steps

在此基础上，进一步对比了在不同障碍物密度下  $\rho = 0.007/\text{mm}^2$  到  $\rho = 0.008/\text{mm}^2$ ，六角晶格结构中粒子的渗透行为。随着密度的增加从  $\rho = 0.007/\text{mm}^2$  到  $\rho = 0.008/\text{mm}^2$ ，粒子的渗透峰值逐渐变低，说明在较高密度下，粒子渗透受到的限制更大，运动范围减小，渗透路径也变得更加局限。

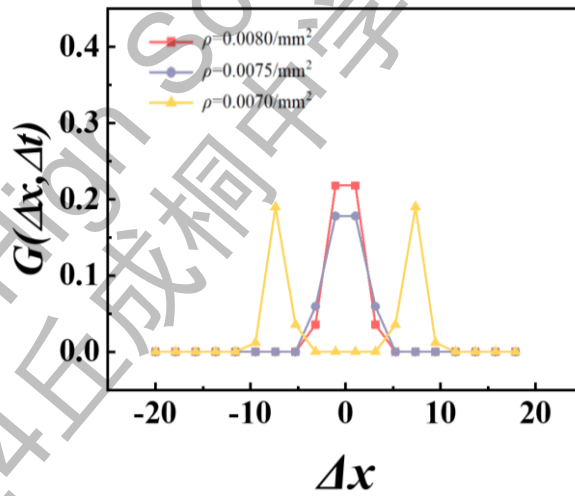


图 3.11 在不同密度 ( $\rho = 0.007/\text{mm}^2$  到  $\rho = 0.008/\text{mm}^2$ ) 六角晶格结构中粒子的范霍夫关联函数的变化

Fig. 3.11 Variation of the van Hove correlation function for particles in hexagonal grid structures at different densities ( $\rho = 0.007/\text{mm}^2$  to  $\rho = 0.008/\text{mm}^2$ )

在  $Y$  方向上，由于重力的作用，范霍夫关联函数显示出在不同结构中粒子渗透行为的显著差异。图 3.12 展示了三种不同障碍物分布（六角晶格、随机分布和超匀分布）下，沿  $Y$  方向的时间平均范霍夫关联函数随时间步长变化的情况。每张图分别展示了不同时间步长粒子在  $Y$  方向的渗透行为。

在六角晶格中，粒子的渗透行为呈现出较为集中的分布，尤其是在较小的时间



步长下，粒子的运动范围受限于障碍物的规则排列，显示出强烈的局限性。随着时间步长的增加，粒子的渗透范围逐渐扩大，但依然表现出较为有序的渗透行为。在随机分布中，粒子的渗透分布更加无序和分散。随着时间步长的增加，粒子在  $Y$  方向上的渗透范围显著减小，渗透行为呈现出较大的不确定性和无序性。超匀分布的渗透行为介于六角晶格和随机分布之间。

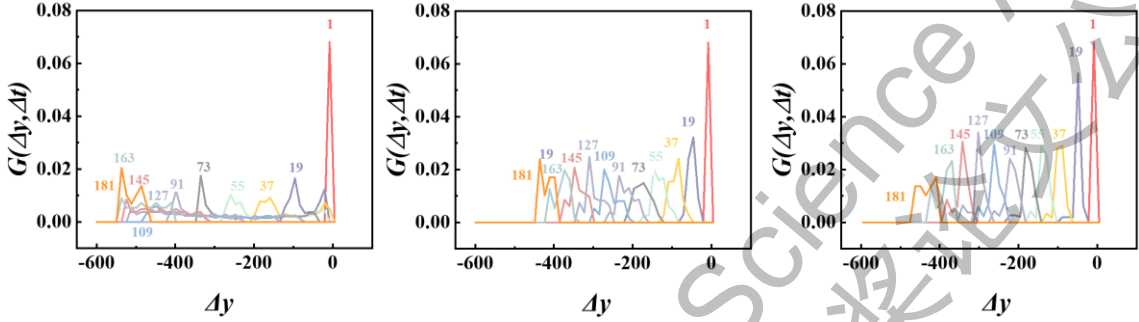


图 3.12  $Y$  方向范霍夫关联函数在不同时间步长 ( $\Delta t=1$  到  $\Delta t=181$ ) 下的变化情况  
Fig. 3.12 Van Hove correlation function in the  $Y$ -direction for different time steps ( $\Delta t=1$  to  $\Delta t=181$ )

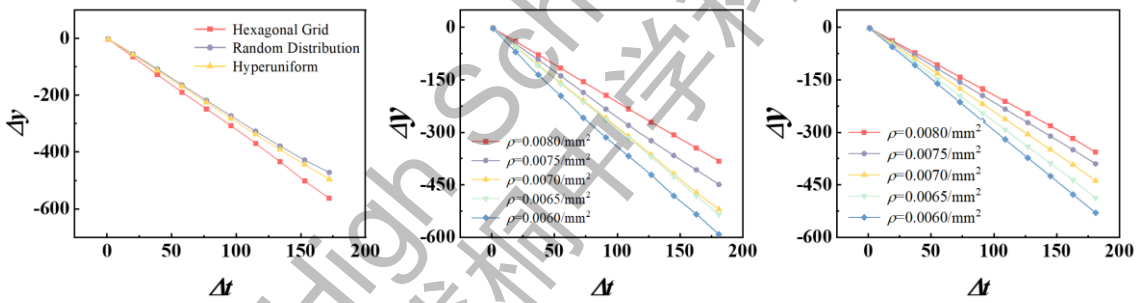


图 3.13 (左)：在相同密度下三种不同障碍物分布 (六角晶格、随机分布、超匀分布)  $\Delta y$  的影响；(中、右)：在不同密度下  $\rho = 0.006/\text{mm}^2$  到  $\rho = 0.008/\text{mm}^2$  六角晶格结构和随机分布中  $\Delta y$  的变化情况

Fig. 3.13 Effect of three different obstacle distributions (hexagonal grid, random distribution, and hyperuniform distribution) on  $\Delta y$  at the same density (the left figure) and variation of  $\Delta y$  of particles in hexagonal grid structure (the middle figure) and random distribution (the right figure) at different densities (from  $\rho = 0.006/\text{mm}^2$  to  $0.008/\text{mm}^2$ )

接下来，图 3.13 展示了粒子在  $Y$  方向的平均位移  $\Delta y$  随时间步长的变化情况，对比了不同障碍物分布 (六角晶格、随机分布、超匀分布) 和不同密度下的粒子运动行为。左图展示了在相同密度  $\rho = 0.007/\text{mm}^2$  下，六角晶格、随机分布和超匀分布的对比结果。可以观察到，虽然三种结构的渗透速率接近，但六角晶格结构下的粒子运动最为规则，其位移曲线相对更平滑。中图和右图展示了在不同密度下六角晶格和随机分布的粒子位移变化。随着障碍物密度的增加，粒子的平均位移减少，

说明密度越高，粒子在  $Y$  方向的运动受到的阻碍越大，渗透速率减小。随机分布的粒子位移曲线更加分散，表明粒子运动的无序性更强，而六角晶格中的粒子运动更加一致。

这些结果表明，不同障碍物结构和密度对粒子的运动轨迹产生了显著影响，六角晶格结构由于其高度的规则性，表现出最平稳的位移曲线，而随机分布的无序性导致了粒子位移的较大波动和不确定性。

之后，对粒子渗透的速度进行分析，在不同结构的粒子布置中，渗透速度的变化反映了各自独特的动力学特性。如图 3.14 所示，对比自由落体运动，在六角晶格中，由于粒子位置高度有序，粒子之间的相互作用力较为均匀，使得渗透速度初期增长较快，但随着时间的推移，粒子受到相邻粒子的约束，速度增速逐渐减缓并趋于稳定。相比之下，随机分布中的粒子由于位置的无序性，渗透过程中可能会陷入局部密度较高的区域，形成“陷阱”，导致这些粒子需要较长时间才能渗透出来，因而整体渗透速度较慢。超均匀结构的粒子渗透表现出一种介于六角晶格和随机分布之间的行为。虽然超均匀结构在大尺度上具有长程有序性，但在局部仍可能存在一定的无序性，使得粒子在渗透过程中同样可能遇到局部“陷阱”，导致速度增速相对缓慢。然而，由于整体结构的均匀性，粒子的渗透速度较为稳定，显示出线性或次线性的增长趋势。这种现象表明，尽管超均匀结构有效地减少了大尺度上的密度波动，但局部无序仍可能影响粒子的渗透动力学。

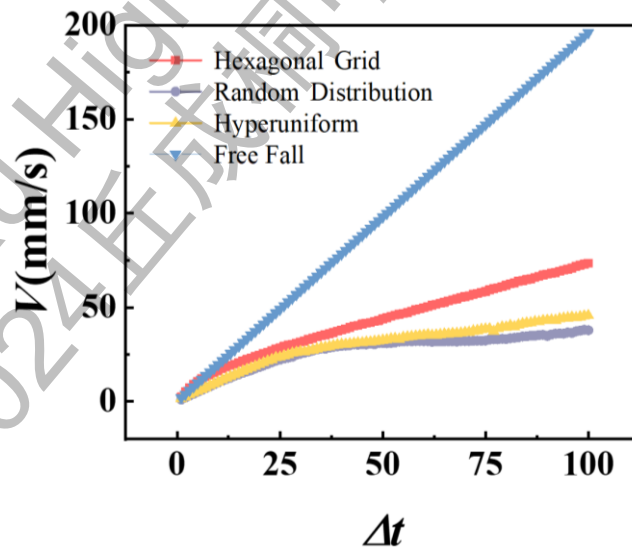


图 3.14 粒子在不同多孔介质中的惯性运动过程中速度随时间的变化情况

Fig. 3.14 The variation of particle velocity with time during inertial motion of different porous medium

最后，对不同超匀性下的渗透行为进行了探究，图 3.15 展示了粒子的均方位移随时间步长变化的情况，比较了在相同障碍物密度  $\rho = 0.007/\text{mm}^2$  条件下，六角

晶格、不同超匀性参数  $\zeta$  的超匀分布以及随机分布对粒子渗透行为的影响。

其中  $\zeta =$  粒子排斥距离/平均分布距离，超匀分布的粒子渗透行为介于六角晶格和随机分布之间，且随着超匀性参数  $\zeta$  的增大，粒子的  $MSD$  逐渐增大。超匀性越高，结构越接近六角晶格，粒子的渗透越接近六角晶格的自由渗透情况。因此，随着超匀性增强， $MSD$  也随之增大，体现出更高的渗透速率。超匀性较低时，粒子的渗透行为更接近随机分布， $MSD$  较小；而当超匀性较高时， $MSD$  接近六角晶格的情况，说明粒子受限较少。图中的五个小插图展示了六角晶格、不同  $\zeta$  值的超均匀排列（和随机分布的粒子空间排列。每个小插图都通过箭头与相应的  $MSD$  曲线相关联，以可视化不同排列方式下粒子的空间分布特点。这些排列方式在不同的  $\Delta t$  下表现出不同的渗透行为，进一步证明了粒子间排斥距离和排列方式对渗透速率的显著影响。

此图明确显示了粒子排列方式对渗透过程的影响。超均匀性结构通过不同的  $\zeta$  值控制了粒子排斥距离与平均分布距离的比例，从而改变了粒子在时间尺度上的渗透行为； $\zeta$  越大，粒子运动越自由，渗透越快。而随机分布与六边形格子在渗透表现上存在显著差异，这表明排列的规则性对渗透速率有直接影响。

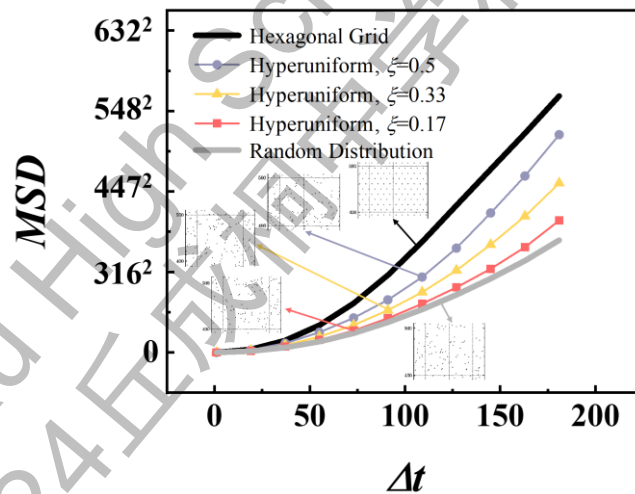


图 3.15 不同超匀性参数  $\zeta$  下粒子的均方位移随时间步长变化的情况

Fig. 3.15 The variation of Mean Square Displacement (MSD) of particles with time step for different hyperuniform parameter  $\zeta$

## 4 实验演示与验证

### 4.1 实验装置

伽尔顿板，也被称为伽尔顿钉板或钉子板，是由英国科学家弗朗西斯·伽尔顿（Francis Galton）于 19 世纪末发明的一个物理实验装置。它用于演示统计学中的正态分布和概率论的基本原理。伽尔顿板的设计非常简单，但它展示了复杂的统计现象。伽尔顿板的结构包括一个倾斜的平面，上面布满了规则排列的钉子，通常以三角形或六边形阵列形式排列。在平面的顶部有一个装置，可以释放小球（如钢珠或沙粒）。当小球从顶端释放后，它们会在重力作用下向下滚动。在下落的过程中，每当小球碰到一个钉子时，它会随机向左或向右偏移，继续下落到下一个钉子。在底部，小球最终会落入一系列的竖直槽中，这些槽用于收集和计数小球。

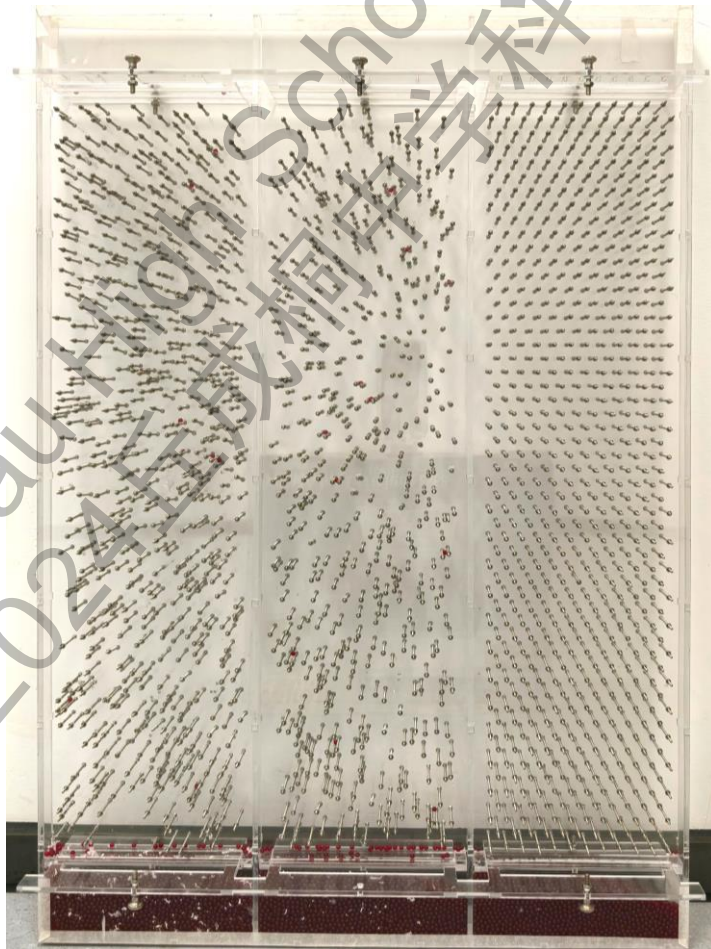


图 4.1 伽尔顿板

Fig. 4.1 Galton board



由于每个钉子的偏移方向是随机的，所以小球在多个钉子间的偏移可以看作是独立随机事件的累积结果。随着小球数量的增加，最终在底部形成的分布近似于正态分布（钟形曲线），即使每个单独的偏移方向是随机的。正态分布的形状由钉子的排列方式、钉子之间的间距、小球的数量和大小等因素决定。

伽尔顿板的实验揭示了两个重要的统计概念：大数定律和中心极限定理。大数定律表明，随着实验次数的增加，实验结果的频率分布会趋近于理论上的概率分布；而中心极限定理说明了即使个体事件的分布不是正态分布，多个独立随机变量的和在适当条件下也会近似正态分布。

伽尔顿板不仅在教育中被广泛应用，帮助学生直观理解概率论和统计学的基本概念，还在物理学、金融数学和其他领域中作为模型工具，用于模拟和分析复杂系统中的随机过程。

## 4.2 预实验

在正式实验之前，进行预实验是确保实验顺利开展的关键步骤。这不仅可以验证激光雕刻机的工作精度，还能评估伽尔顿板的设计是否符合实验需求。预实验过程中，需要使用小块材料进行雕刻测试，以确认雕刻精度、图案清晰度及各组件是否适配，从而减少后续实验中的潜在问题。

为了确保伽尔顿板在正式实验中的功能表现，在预实验中重点进行了以下几个方面的优化和确认：

### 1. 碰撞球与钉子的尺寸

通过多次测试，确定了实验所需的碰撞球直径和钉子的尺寸。这一过程至关重要，因为钉子与球的比例直接影响小球在伽尔顿板上运动的随机性及路径分布。最终选定的尺寸既能确保小球在钉子间顺畅通过，又能有效产生所需的碰撞效应。

### 2. 实验装置的整体尺寸

伽尔顿板的大小是实验设计中的另一个关键因素。根据实验的需求，分别对伽尔顿板的高度、宽度进行了调整，以确保整个装置既能提供足够的实验空间，又不至于占用过多实验室资源。通过预实验，确定了最适合的尺寸，从而为后续数据采集和分析打下基础。

### 3. 钉子的分布密度

钉子的分布密度直接影响实验结果的精度和数据的代表性。在预实验中，测试了不同密度的钉子布局，最终选定的布局既能够保证小球在下落时与钉子的充分碰撞，又能保证实验具有足够的统计意义，确保获得的结果能够体现预期的随机性和概率分布。

#### 4. 球的控制与释放装置

小球的释放装置设计也是实验成功的关键之一。预实验中，测试了多种小球释放机制，确保每次释放的小球都具备相同的初始条件。这包括控制小球释放的高度、速度以及角度，以确保每个实验的初始条件一致性，减少外部误差的干扰。

#### 5. 亚克力板材的厚度

亚克力板材作为伽尔顿板的主要材料，其厚度直接影响装置的稳定性和耐用性。在预实验中，对不同厚度的亚克力板进行了测试。较薄的板材虽然轻便，但容易在使用过程中产生弯曲或形变，影响实验结果的可靠性。而较厚的板材则提供了更好的结构稳定性，并能承受更长时间的实验使用，特别是在需要频繁放置和移除小球时。最终，选择了适中的厚度，既能确保板材坚固不易变形，又能兼顾装置的轻便性和易于加工的特性。

#### 6. 激光切割的精度和速度

激光切割的精度和速度是影响装置质量的核心参数。在预实验中，调整了激光雕刻机的功率、切割速度和焦距，以确保每一个钉子孔位和挡板边缘的切割都精准无误。切割精度的提高不仅确保了小球在穿过孔洞和钉子之间的顺畅流动，还能保证各部件间的严密配合，避免出现孔位偏差或不规则边缘的问题。

通过多次实验，发现适中的切割速度可以防止板材过热变形，而精细的功率调整则能够减少激光对板材的过度烧蚀，确保切割线条的平滑和清晰。最终确定的参数设定可以在保证亚克力板表面平整光滑的前提下，达到较高的加工效率。这不仅提高了整体实验装置的质量，还节省了加工时间，为大规模的正式实验提供了充足的时间保障。

#### 7. 装置的可视化与耐用性

选择亚克力作为材料的另一个优势是其透明性。透明的板材使得观察小球的运动轨迹更加直观，便于记录实验数据。此外，亚克力的耐用性较好，可以在长期使用中保持其性能稳定。通过预实验，还测试了装置在多次使用中的耐磨性和持久性，确保伽尔顿板可以应对多次重复实验而不影响结果。

最终，经过多次测试，在实验设计中，通过设置钉子的位置和间距，探索多种排列方式对粒子动力学特征和分布的影响。排列方式包括六边形阵列、随机分布和超匀排列。根据惯性模拟实验，设置了三种不同排布方式的伽尔顿板，分别为六角、超匀和随机排布。实验中使用了约 1000 个红色小球，直径为 0.38 cm，钉子的直径为 0.19 cm。伽尔顿板的设计区域为  $L_x = 15 \text{ cm}$ ， $L_y = 60 \text{ cm}$ ，总共覆盖的  $L_x = 45 \text{ cm}$ 。实验通过这些不同的排布方式来研究小球在碰撞和渗透过程中的行为，设计图如图所示。

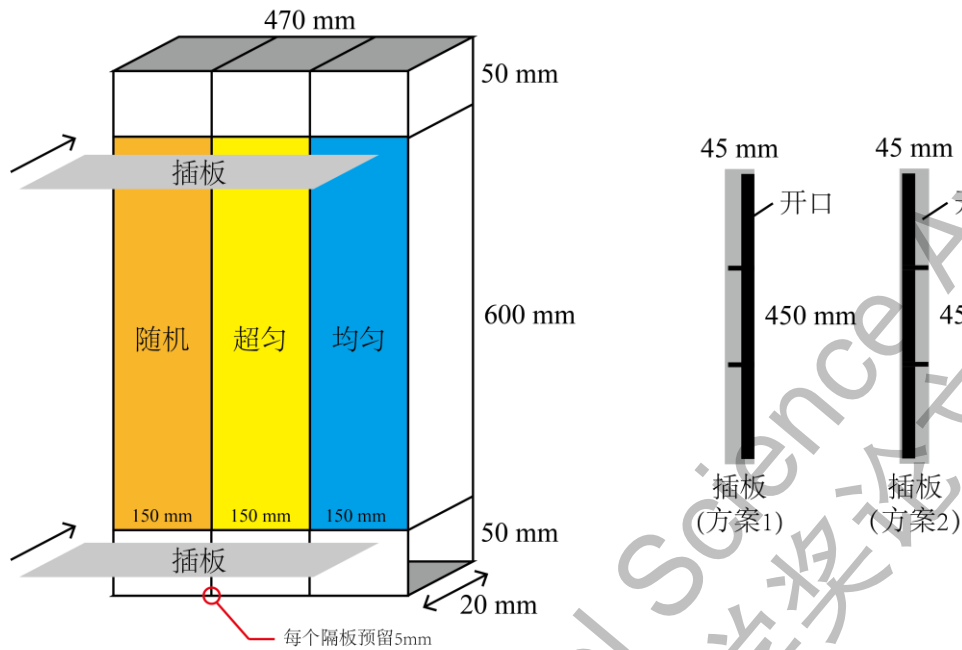


图 4.2 伽尔顿板设计图

Fig. 4.2 Layout of the Galton board

### 4.3 实验设计

通过以上几项重点实验环节的优化和验证，为正式实验奠定了坚实的基础。这不仅提高了伽尔顿板实验的精确度和可重复性，还确保了数据采集的可靠性。每一项预实验中的调整与改进都为本文带来了宝贵的数据和经验，确保正式实验能够顺利开展，并有效减少潜在的误差。在预实验中，逐步优化了各项关键参数，经过多次测试与调整，最终确定了正式实验的最优参数。接下来，根据这些参数，绘制了完整的实验装置 CAD 图纸。

#### 1. CAD 图纸的设计

基于预实验和计算机模拟结果中对尺寸、孔位、密度、材料厚度的最终确定，在 CAD 软件中进行了详细的设计。CAD 图纸不仅准确反映了每个钉子、孔洞的具体位置，还包括了支架、挡板等结构细节。通过计算机模拟，验证了整体结构的稳固性和兼容性，确保所有组件在组装后能够精确匹配。此外，还在设计中保留了适度的调整余地，以应对在正式实验中可能遇到的特殊情况。



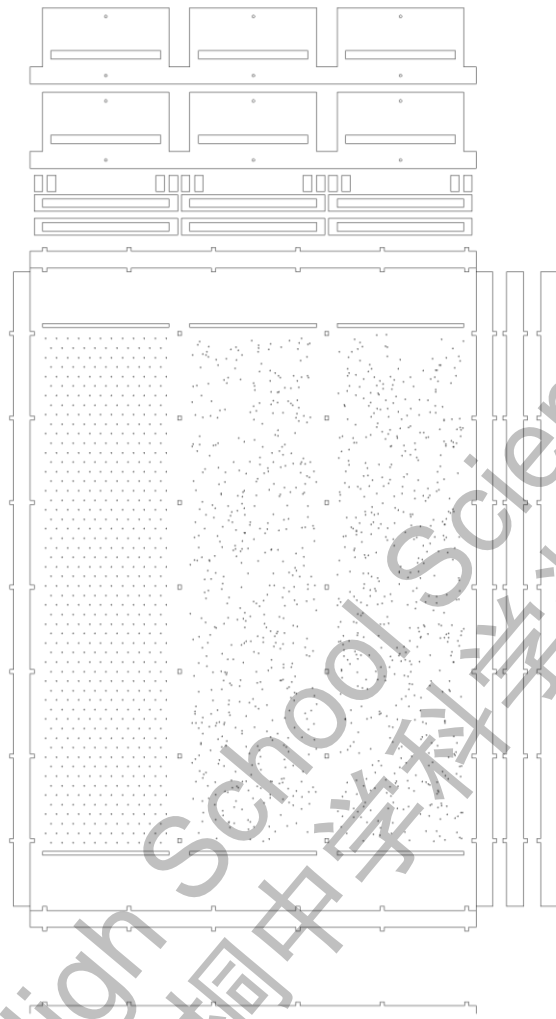


图 4.3 伽尔顿板 CAD 设计图

Fig. 4.3 Layout of the Galton board in CAD

## 2. 板材选择与激光切割

在正式实验中选择了厚度为 4.5mm 的亚克力板材。这一厚度的板材在实验装置中具有双重优势：一方面，它具备足够的机械强度，能够在实验过程中承受多次小球碰撞和长期使用；另一方面，4.5mm 的厚度也使得板材在激光切割过程中更加高效，既确保了切割的精度，又大幅缩短了加工时间。这种材料选择有效平衡了强度与加工便捷性的需求，为实验提供了稳固的基础。在完成 CAD 图纸设计后，将其上传至激光雕刻机，并严格按照预实验中确定的激光切割参数（包括功率、速度和焦距）进行切割。

激光功率的选择对于切割的深度和效果至关重要。功率过大可能导致材料过度烧蚀，切割线条粗糙且不规则；功率过小则可能无法切透材料。在这次实验中，考虑到亚克力板的厚度为 4.5mm，调节了适中的激光功率，确保每一刀切割都能干净利落地穿透板材，同时避免了过多的热量积累，减少了材料边缘的变形和烧焦

痕迹。

雕刻速度的调节同样至关重要。较高的雕刻速度可以缩短加工时间，但可能会影响切割的精度和光滑度；而较低的速度则能够提升切割质量，但会延长加工时间。在反复的测试与调整中，选择了一个平衡速度，既确保了切割线条的精细和准确，也保证了加工效率。在 4.5mm 的亚克力板上，这一速度有效避免了过度加热造成的材料变形，同时保持了较高的生产效率。

激光的焦距决定了光束聚焦点的精确度，从而影响雕刻的清晰度和深度。为了确保亚克力板在切割时每个孔洞和通道都能达到设计要求的深度和光滑度，精确调整了焦距。通过将激光聚焦在板材的表面，获得了理想的切割效果，使得孔洞边缘光滑整齐，极大地减少了后期打磨处理的需求。

### 3. 组装与调整

完成激光切割后，接下来便是装置的组装过程。根据 CAD 图纸中所规定的结构进行组装，确保每一个钉子和挡板都能牢固地固定在指定的位置。亚克力板的透明特性使得组装过程更加便捷，能够直观地检查每一个组件的安装是否精确，并及时进行调整。同时，使用专用的固定胶水和支架，确保板材之间的连接紧密而稳定。

在装配过程中，还反复检查了装置的平整度和钉子的分布精度，如图 4.4 所示。确保伽尔顿板在实验中可以提供足够的随机性，且装置整体结构稳固不易松动。组装完成后，进行了初步测试，通过模拟小球下落的实验，进一步验证了装置的可靠性和一致性。



图 4.4 装置组装与调整

Fig. 4.4 Assembly and adjustment of the device

通过预实验中优化的参数和正式实验装置的高精度组装，大幅提高了伽尔顿板实验的精确度和可重复性。每一次实验中，小球的下落轨迹都能在相同的条件下重复呈现，从而确保了数据采集的准确性。透明的亚克力板材不仅便于观察小球的运动轨迹，还能够在实验过程中及时发现和修正潜在的误差。正式实验装置的稳定性也有效减少了外界环境对实验结果的干扰，保证了实验结果的可控性和精度。

实验的可重复性大大提高，为后续的数据分析和理论验证提供了坚实的基础。通过多次实验，获取大量样本数据，最终建立一个统计学模型，以验证理论预测或发现新的实验现象。这些高质量的数据不仅能增强实验的科学价值，还为进一步的研究提供了可靠的依据。

总而言之，正式实验阶段的 CAD 图纸设计、材料选择、激光切割和装置组装都是建立在预实验优化成果的基础之上。每一个环节都经过了精细地调整与测试，确保实验装置的精准性、耐用性和操作便捷性。通过这样精确的准备，为实验结果的可靠性和可重复性提供了充分的保障，确保能够在接下来的实验中获得稳定且科学的结论。

#### 4. 正式实验

在伽尔顿板组装完毕后，检查整个装置的稳定性和功能性。根据实验设计进行实验，同时开启三个舱室活门，保证流体粒子同时开始进入各自的舱室。采用高速摄像手机拍摄实验过程。重复实验保证实验的规律的可复现性。记录每次实验的条件和数据，针对视频逐帧分析各个舱室中粒子的运动规律。

### 4.4 实验结果与讨论

在本实验中，制作了一个伽尔顿板，障碍粒子的排布分别为随机分布、超匀分布和六角排列。通过实验录像和过程快照，可以清晰地观察到不同排布方式对粒子运动的影响。

图 4.5 展示了一个伽尔顿板装置，时间分别标记为  $t = 0.1$ 、 $t = 0.2$ 、和  $t = 0.3$  的三个时刻。在不同时刻左侧随机分布栏中，粒子开始从顶部掉落，轨迹呈现出无规则的渗透路径，粒子的分布较为散乱。中间超匀分布栏中，粒子的掉落虽然也有一定的分散性，但相比随机分布，粒子间的路径更加有序，形成一定的规则性。右侧六角晶格分布栏中，粒子的掉落路径非常整齐，显示出明显的排列规律，粒子渗透更具方向性。

总体来看，图片中的实验结果清晰地显示出不同障碍粒子排列方式对粒子渗透行为的显著影响。六角排列的障碍物减少了粒子的停滞时间，显著加快了渗透速度，体现出高效的渗透过程；超匀分布尽管部分表现出“陷阱”效应，但其整体渗透效率优于随机分布；而在随机分布中，由于障碍物的不规则排列，粒子在渗透过程中频繁受到局部障碍的影响，造成显著的停滞和滞留现象，渗透速度明显低于其他两种排列方式。

上述实验结果与微观的计算模拟结果相一致，可进一步证明障碍物排布的几何结构对粒子渗透的调控作用。六角排列的规则性使粒子得以快速通过，而随机分

布的无序性则增加了粒子被困在局部“陷阱”中的概率。超匀分布作为一种介于随机和规则排列之间的结构，在保持一定随机性的同时，依然能有效提升粒子渗透的效率。这一结果为优化伽尔顿板等系统中的粒子运动提供了有价值的参考，这种分析对于理解复杂介质中粒子的传输行为以及优化材料设计具有重要意义。

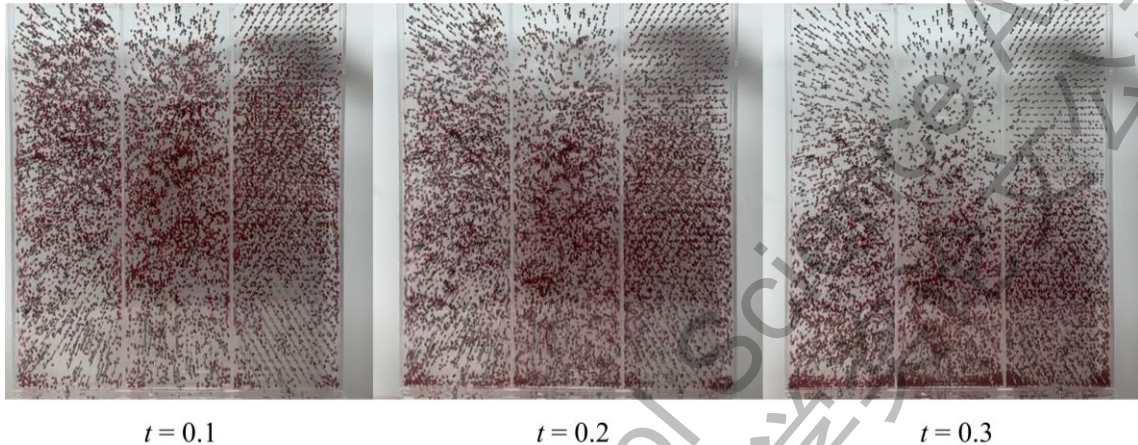


图 4.5 伽尔顿板实验中  $t=0.1$ 、 $t=0.2$ 、 $t=0.3$  时的粒子掉落过程，伽尔顿板从左到右分别为随机分布、超匀分布和六角排列的障碍粒子排布。

Fig. 4.5 Particle dropping process at  $t = 0.1$ ,  $t = 0.2$ , and  $t = 0.3$  in the Galton board experiment. From left to right, the obstacle particle rows are random distribution, hyperuniform distribution, and hexagonal grid, respectively.

从图 4.6 可以看到，在  $t=0.5$  时，粒子在伽尔顿板上同时经过随机分布、超匀分布和六角排列区域。在六角排列中，粒子的运动较为流畅，渗透速度明显高于随机分布区域，而超匀分布的渗透速度介于两者之间。在随机和超匀分布区域，粒子运动轨迹显示出明显的停滞现象，部分粒子被困在局部障碍形成的“陷阱”中。这种“陷阱”现象在随机分布中尤为突出，粒子在某些区域的停留时间显著增加，渗透过程因此变得更加缓慢。

与之相比，在六角排列区域，障碍物的规则排列减小了粒子被困的概率，粒子可以较快地通过整个区域，表现出更快的渗透速度和更均匀的运动轨迹。这一现象表明，障碍物的排列方式对粒子的渗透行为有着重要影响。超匀分布虽然也具有一定的规则性，但由于其排布在局部区域仍存在随机性，因此粒子的运动介于随机和六角排列之间，表现出部分停滞和“陷阱”效应，但整体渗透速度优于随机分布。



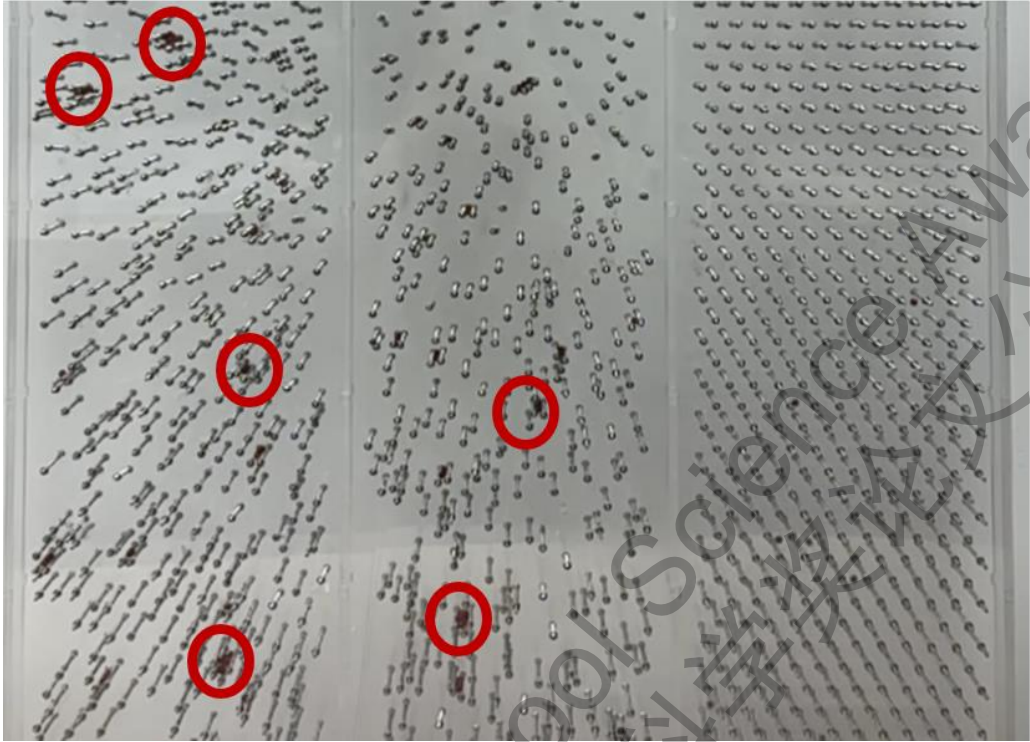


图 4.6 随机分布、超匀分布和六角排列的障碍粒子结构（红色圆圈标出了粒子在掉落过程中被困的“陷阱”现象）

Fig. 4.6 Particle structures of random distribution, hyperuniform distribution, and hexagonal grid. The red circles mark the “traps” in which the particles are trapped during the fall.

因此，在图 4.7 中总结了三种障碍物粒子排列：随机分布、超匀分布和六角排列中“陷阱”现象的变化情况。从实验结果可以看出，六角排列区域的粒子渗透最为顺畅，几乎没有形成“陷阱”，粒子的渗透速度快且轨迹非常有序。而在超匀分布区域，粒子初期会在局部形成“陷阱”，但随着时间推移，粒子逐渐渗透，“陷阱”现象消失。相比之下，随机分布区域最容易产生“陷阱”效应，粒子在局部障碍间滞留，虽然随着时间的延长，部分粒子也能够逐渐渗透开来，但其渗透效率明显低于其他两种排列方式，这表明障碍物的排列结构对粒子的渗透行为有着显著的影响。

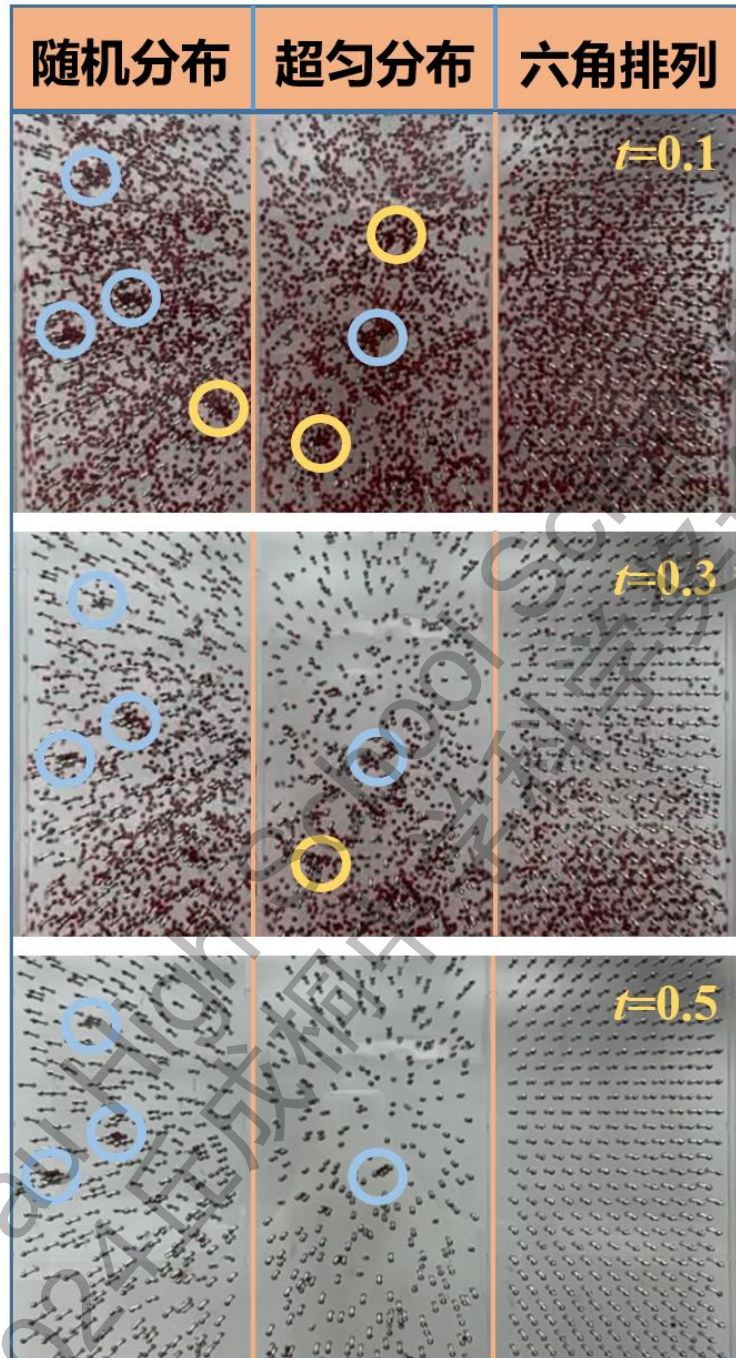


图 4.7 随机分布、超匀分布和六角排列的障碍粒子结构中“陷阱”现象的变化情况

Fig. 4.7 Variation of the “trap” phenomenon in the obstacle particle structures of random distribution, hyperuniform distribution, and hexagonal grid.

综上，基于伽尔顿板的宏观实验现象与微观的数值模拟结果相一致，表 4.1 总结了随机分布、超匀分布和六角排列三种障碍物排列方式下，粒子渗透的轨迹特征、渗透速度、“陷阱”效应以及各自的适用场景。可以清晰地看出，不同的排列方式对粒子的运动有显著影响。六角排列的粒子渗透速度最快且轨迹最有序，几乎没有



“陷阱”效应，适合高效渗透或传输的应用场景；超匀分布表现为部分规则性，渗透速度稍慢，适合多功能的材料设计；而随机分布则表现出无规则的轨迹和明显的“陷阱”效应，适合用于渗透受控或隔离的应用场景。

表 4.1 三种障碍物粒子排列对粒子渗透行为的影响

Table 4.1 Effect of three obstacle particle arrangements on particle diffusion behavior

障碍粒子排列方式	渗透轨迹特征	渗透速度	“陷阱”效应	应用场景
六角排列	轨迹非常整齐，显示出明显的方向性和规则性	最快	几乎没有“陷阱”现象，粒子能够顺利通过	快速渗透或传输的高效场景
超匀分布	轨迹较为有序，但仍有部分随机性	稍快	局部区域有少量“陷阱”现象，但不如随机明显	均衡随机性与规则性的多功能场景
随机分布	轨迹无规则，粒子运动分散无序	最慢	“陷阱”效应显著，粒子容易滞留在障碍物间	阻隔或控制渗透的场景

## 5 总结与展望

### 5.1 结论

本研究通过多尺度模拟与伽尔顿板实验相结合，深入探讨了多孔介质结构及密度对粒子扩散行为的影响。通过建立微观点阵模型，研究了有序六角晶格、随机分布和超匀结构对粒子扩散的影响。模拟结果表明，六角晶格提供了最佳的扩散通道，粒子运动最为顺畅；随机分布由于孔隙不规则，容易形成“陷阱”，导致扩散速率显著降低；超匀结构则在小尺度上表现出无规扩散，而在大尺度上具备类似晶格结构的渗透特性。进一步的均方位移和范霍夫关联函数分析定量验证了这些结构的扩散特性。

为了验证模拟结果，设计了基于伽尔顿板的宏观实验装置，模拟不同结构中的粒子运动行为。实验中，粒子在六角排列中展现出较快的渗透速度，随机分布中表现出明显的“陷阱”效应，而超匀结构则在局部无规则运动与大尺度快速扩散之间取得平衡。实验结果与模拟一致，证明了结构相关性对渗透的调控作用。

通过这些研究，不仅揭示了多孔介质中粒子扩散的微观机制，还为未来高效多孔材料的设计提供了理论依据，尤其是在过滤、催化、环境修复等工程领域，通过优化介质结构和密度，可以显著提升材料的渗透效率。

### 5.2 展望

以下是本研究未来工作的几个关键方向总结：

1. 扩展复杂多孔结构的模拟：未来的研究可以引入更加复杂的多孔介质模型，考虑孔隙形状、大小、分布的多样性，利用分形结构或多尺度模型，更好地反映实际系统中的扩散复杂性。
2. 探讨密度与孔隙拓扑的相互关系：进一步系统研究多孔介质的密度、孔隙大小和连通性，利用图论或网络科学量化孔隙网络的拓扑特性，以深入理解结构对扩散的影响。
3. 超匀结构的深入研究：探索不同超匀性程度对扩散的细微影响，尤其是在三维多孔介质中的表现。此外，研究其热力学和机械稳定性，了解其在实际应用中的扩展潜力。
4. 多物理场耦合研究：未来研究可以结合流体动力学、电场、磁场等外场效

应，模拟多孔介质中的多物理场耦合扩散行为，探索更复杂的扩散机制。

5. 改进实验平台：开发更具精确控制能力的实验平台，利用微纳加工和 3D 打印技术制造具有特定孔隙分布的多孔介质样品，提高实验的时空分辨率，从而更加精确地验证模拟结果。

6. 应用前景：优化多孔介质结构和密度在污染物扩散、储能材料设计、高效过滤器和催化剂开发等领域具有广泛的应用潜力，为相关工业应用提供理论支持。

这些未来研究方向将进一步深化对多孔介质扩散行为的理解，并推动其在实际工程中的广泛应用。

## 参考文献

- [1] Horcajada P, Chalati T, Serre C, et al. Porous Metal-Organic-Framework Nanoscale Carriers as a Potential Platform for Drug Delivery and Imaging[J]. *Nature Materials*, 2010, 9(2): 172-178. <https://doi.org/10.1038/Nmat2608>.
- [2] Gurson A. Continuum Theory of Ductile Rupture by Void Nucleation and Growth .1. Yield Criteria and Flow Rules for Porous Ductile Media[J]. *Journal of Engineering Materials and Technology-Transactions of the Asme*, 1977, 99(1): 2-15. <https://doi.org/10.1115/1.3443401>.
- [3] Mualem Y. New Model for Predicting Hydraulic Conductivity of Unsaturated Porous-Media[J]. *Water Resources Research*, 1976, 12(3): 513-522. <https://doi.org/10.1029/Wr012i003p00513>.
- [4] Cath T Y, Childress A E, Elimelech M. Forward Osmosis: Principles, Applications, and Recent Developments[J]. *Journal of Membrane Science*, 2006, 281(1-2): 70-87. <https://doi.org/10.1016/J.Memsci.2006.05.048>.
- [5] Elimelech M, Phillip W A. The Future of Seawater Desalination: Energy, Technology, and the Environment[J]. *Science*, 2011, 333(6043): 712-717. <https://doi.org/10.1126/Science.1200488>.
- [6] Jarvie D M, Hill R J, Ruble T E, et al. Unconventional Shale-Gas Systems: the Mississippian Barnett Shale of North-Central Texas as One Model for Thermogenic Shale-Gas Assessment[J]. *Aapg Bulletin*, 2007, 91(4): 475-499. <https://doi.org/10.1306/121906060608>.
- [7] Wang J, Wang S. Activation of Persulfate (PS) and Peroxymonosulfate (PMS) and Application for the Degradation of Emerging Contaminants[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2018, 334: 1502-1517. <https://doi.org/10.1016/J.Cej.2017.11.059>.
- [8] Shannon M A, Bohn P W, Elimelech M, et al. Science and Technology for Water Purification in the Coming Decades[J]. *Nature*, 2008, 452(7185): 301-310. <https://doi.org/10.1038/Nature06599>.
- [9] Fu F, Wang Q. Removal of Heavy Metal Ions from Wastewaters: A Review[J]. *Journal of Environmental Management*, 2011, 92(3): 407-418. <https://doi.org/10.1016/J.Jenvman.2010.11.011>.
- [10] Crini G. Non-Conventional Low-Cost Adsorbents for Dye Removal: A Review[J]. *Bioresource Technology*, 2006, 97(9): 1061-1085. <https://doi.org/10.1016/J.Biortech.2005.05.001>.
- [11] Zheng M, Reader G, Hawley J. Diesel Engine Exhaust Gas Recirculation - A Review on Advanced and Novel Concepts[J]. *Energy Conversion and Management*, 2004, 45(6): 883-900. [https://doi.org/10.1016/S0196-8904\(03\)00194-8](https://doi.org/10.1016/S0196-8904(03)00194-8).
- [12] Skalska K, Miller J S, Ledakowicz S. Trends in Nox Abatement: A Review[J]. *Science of the Total Environment*, 2010, 408(19): 3976-3989. <https://doi.org/10.1016/J.Scitotenv.2010.06.001>.

- [13] Nie L, Mei D, Xiong H, et al. Activation of Surface Lattice Oxygen in Single-Atom Pt/CeO<sub>2</sub> for Low-Temperature CO Oxidation[J]. *Science*, 2017, 358(6369): 1419-+. <https://doi.org/10.1126/Science.Aao2109>.
- [14] Callaghan P, Coy A, Macgowan D, et al. Diffraction-Like Effects in NMR Diffusion Studies of Fluids in Porous Solids[J]. *Nature*, 1991, 351(6326): 467-469. <https://doi.org/10.1038/351467a0>.
- [15] Chiar J, Tielens A. Pixie Dust: The Silicate Features in the Diffuse Interstellar Medium [J]. *Astrophysical Journal*, 2006, 637(2): 774-785. <https://doi.org/10.1086/498406>.
- [16] Liu H, Kang Q, Leonardi C R, et al. Multiphase Lattice Boltzmann Simulations for Porous Media Applications[J]. *Computational Geosciences*, 2016, 20(4): 777-805. <https://doi.org/10.1007/S10596-015-9542-3>.
- [17] Kelemen P, Hirth G, Shimizu N, et al. A Review of Melt Migration Processes in the Adiabatically Upwelling Mantle Beneath Oceanic Spreading Ridges[J]. *Philosophical Transactions of the Royal Society A-Mathematical Physical and Engineering Sciences*, 1997, 355(1723): 283-318. <https://doi.org/10.1098/Rsta.1997.0010>.
- [18] Steefel C, Lasaga A. A Coupled Model for Transport of Multiple Chemical-Species and Kinetic Precipitation Dissolution Reactions with Application to Reactive Flow in Single-Phase Hydrothermal Systems[J]. *American Journal of Science*, 1994, 294(5): 529-592. <https://doi.org/10.2475/Ajs.294.5.529>.
- [19] Scheutz C, Kjeldsen P, Bogner J E, et al. Microbial Methane Oxidation Processes and Technologies for Mitigation of Landfill Gas Emissions[J]. *Waste Management & Research*, 2009, 27(5): 409-455. <https://doi.org/10.1177/0734242x09339325>.
- [20] Zielinski M S, Choi J W, La Grange T, et al. Hollow Mesoporous Plasmonic Nanoshells for Enhanced Solar Vapor Generation[J]. *Nano Letters*, 2016, 16(4): 2159-2167. <https://doi.org/10.1021/Acs.nanolett.5b03901>.
- [21] Wang X, Yu J, Ho C, et al. Photocatalytic Activity of a Hierarchically Macro/Mesoporous Titania[J]. *Langmuir*, 2005, 21(6): 2552-2559. <https://doi.org/10.1021/La047979c>.
- [22] C.基泰尔. 固体物理导论(原著第8版)[M]. 固体物理导论(原著第8版), 2012.
- [23] 黄昆, 韩汝琦. 固体物理学[M]. 高等教育出版社, 1998.
- [24] Lei Q L, Ciamarra M P, Ni R. Nonequilibrium Strongly Hyperuniform Fluids of Circle Active Particles with Large Local Density Fluctuations[J]. *Science Advances*, 2019, 5(1) [2019-02-15]. <https://doi.org/10.1126/Sciadv.Aau7423>.
- [25] Oguz E C, Socolar J E S, Steinhardt P J, et al. Hyperuniformity of Quasicrystals[J]. *Physical Review B*, 2017, 95(5). <https://doi.org/10.1103/Physrevb.95.054119>.
- [26] Hexner D, Levine D. Hyperuniformity of Critical Absorbing States[J]. *Physical Review Letters*, 2015, 114(11): 110602. <https://doi.org/10.1103/Physrevlett.114.110602>.
- [27] Zachary C E, Torquato S. Hyperuniformity in Point Patterns and Two-Phase Random Heterogeneous Media[J]. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2009, 2009(12): P12015. <https://doi.org/10.1088/1742-5468/2009/12/P12015>.
- [28] Weijs J H, Jeanneret R, Dreyfus R, et al. Emergent Hyperuniformity in Periodically Driven Emulsions[J]. *Physical Review Letters*, 2015, 115(10): 108301. <https://doi.org/10.1103/Physrevlett.115.108301>.

- [29] 渥秋華, 紀露結, Others. 從鳥眼看見大自然的隱藏秩序[J]. 數理人文, 2017(12).
- [30] Egbuniwe I, Ayo J. Physiological Roles of Avian Eyes in Light Perception and their Responses to Photoperiodicity[J]. World'S Poultry Science Journal, 2016, 72(3): 605-614.
- [31] Torquato S, Stillinger F H. Local Density Fluctuations, Hyperuniformity, and Order Metrics[J]. Physical Review E, 2003, 68(4): 041113. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.68.041113>.
- [32] Melott A L, Shandarin S F. Generation of Large-Scale Cosmological Structures by Gravitational Clustering[J]. Nature, 1990, 346(6285): 633-635.
- [33] Gabrielli A, Joyce M, Labini F S. The Glass-Like Universe: Real-Space Correlation Properties of Standard Cosmological Models[J]. Physical Review D, 2002, 65(8): 083523. <https://doi.org/10.1103/PhysRevD.65.083523>.



## 致谢

### 一、选题来源与研究背景

粒子或流体在多孔介质中的渗透与扩散是环境保护与能源利用中的关键科学问题。随着工业活动对环境的影响日益加剧，尤其是在空气、水体和土壤污染治理问题，如何开发高效、低能耗的过滤材料成为亟需解决的技术难题。当前研究表明，提升材料的孔隙率或密度可以增强净化效率，但同时也会降低渗透速率，如何在两者之间找到平衡点是研究的重点之一。

在此背景下，本研究将重点探讨多孔介质中粒子与流体的扩散行为，并结合材料结构优化探索高效过滤与净化技术的新途径，为解决当前的环境和能源问题提供理论依据和技术支持。

### 二、指导老师简介

本研究指导教师一为雷祥翠老师，中国人民大学附属中学一级教师，与本人有师生关系。指导教师二为张兴华老师，北京交通大学物理与工程学院教授、北京市青年名师。在研究过程中，雷祥翠老师主要负责选题与论文写作指导，张兴华教授主要负责理论、实验、数据分析指导。两位老师的指导均是无偿的。

### 三、分工说明

本论文的选题、实验设计及实施、数据计算及分析、论文撰写等工作，均为本人在导师指导下独立完成的。对于研究过程中其他人的指导与帮助，如实验室师兄师姐的帮助，均已在下文的致谢做出了详细说明并表达了谢意。

### 四、致谢

首先，衷心感谢我的指导教师雷祥翠老师。通过对多孔介质在自然环境中的广泛应用的调研，我逐渐意识到其在土壤渗水、海水淡化和油页岩开发等领域的重要性，这引发了我对该课题的浓厚兴趣。雷祥翠老师凭借其广博的学识，不仅帮助我在课题初期明确了研究方向，还为我提供了在研究设计和实验方法上的诸多宝贵建议，并在论文撰写过程中给予了悉心的指导。

同时，我要特别感谢张兴华教授。张兴华教授在多孔介质扩散理论与实验研究方面有着深厚的学术造诣。研究过程中，张兴华教授详细地指导了我如何进行理论分析、模型构建以及实验设计，尤其是在超匀结构扩散问题研究中，张兴华教授的

专业见解使我得以更加深入理解这一领域。在每一次我遇到科研瓶颈时，张兴华教授总能以其丰富的科研经验为我指明方向，帮助我突破研究难题。

此外，我还要感谢张静博士。由于自己在实验操作方面缺乏经验，初期总是难以得到理想的实验数据。张静博士在实验设计和数据采集过程中，提供了许多宝贵的意见，显著提高了实验的精确度。还有赵胜达博士，在实验数据分析方面给予了我极大的帮助，尤其是在处理和使用分析软件时，赵胜达博士的细致指导让我能够顺利地完成实验数据的分析与呈现。

最后，我要感谢中国人民大学附属中学对我的培养和支持，感谢北京交通大学提供了先进的实验设备和优质的科研环境，支持我完成本次课题研究。

这次研究不仅让我加深了对多孔介质扩散问题的理解，也让我体会到了科研的艰辛与乐趣，再次感谢所有帮助过我的老师和同学。