arXiv:2512.23296v1 [math.MG] 29 Dec 2025

体积变化分配的评估：呼吸系数及其在单轴等尺寸圆盘堆积膨胀中的应用 *

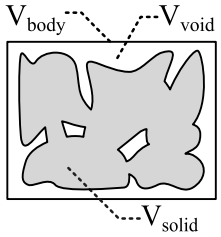
Théo Boivin†和 Olivier Gillia‡

格勒诺布尔-阿尔卑斯大学，*CEA-Liten*，法国格勒诺布尔，*F-38054*

摘要

本文分析了多孔体体积变化分配这一一般概念，引入了<style id='1'>呼吸系数，其定义为两个体积变化量之比。对于由固体体积和“空隙”体积组成的多孔体总体积，该比值可用于评估体积变化量在二者之间的分配。本文详细阐述了其物理解释，并进行了不确定性分析，明确说明了使用时的注意事项。作为应用示例，本文开展了二维等尺寸圆盘堆积膨胀的案例研究。解析模型揭示了取决于初始颗粒组织的<style id='3'>呼吸系数最小值点，展示了使颗粒材料呼吸最小化的可能途径。

如何更好地评估呼吸多孔体的体积分配?



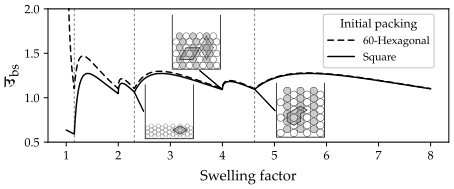
呼吸系数

$$\Delta V_{body} = \Delta V_{solid} + \Delta V_{void}$$

$$\text{उ}_{bs} = \frac{\Delta V_{body}}{\Delta V_{solid}}$$

不等同于
低密度或低孔隙率
呼吸振幅

该系数在案例研究中的应用：
单分散圆盘的理想单轴膨胀



主要结论：对于给定的颗粒膨胀，
颗粒的初始堆积组织可以使整个颗粒床的相对膨胀最小化。

* CC BY 4.0 许可协议发布。

†电子邮箱：theo.boivin@email.fr
‡电子邮箱：olivier.gillia@cea.fr

1 引言

如今，人们通常通过研究颗粒介质的颗粒 subjected to 体积变化来描述材料的“呼吸” [1–3]。这促使我们以更一般的方式分析体积变化，即不必局限于颗粒介质，而是针对一般的“多孔体”。“多孔体”在此定义为由两个相组成的系统：“固体”相和“空隙”相（其中填充有气体、液体或保持空隙状态）。本文使用“呼吸”一词来表示多孔体膨胀与收缩的连续交替。当需要管理此类物体的呼吸行为时，一个重要问题便是：固相体积变化如何转化为空隙体积变化或多孔体总体积变化（或者类似地，空隙如何转化为固体和总体积，或总体积如何转化为空隙和固体）。用于测量相对体积分数的常用量是孔隙率 $\varepsilon = V_{\text{void}}/V^{\text{body}}$ 或固相率 $\chi = V_{\text{solid}}/V^{\text{body}}$ （也称为“密度”），其中V_{void}、V_{solid}和V^{body} 分别为空相、固相和多孔体的体积。它们对于有效描述特定时刻的特定状态确实非常有用。然而，如何比较两个不同时间点的孔隙率或固相率数值？如果多孔体体积V^{body} 不发生变化，则不存在特别的问题。然而，如果该体积也发生变化，两个时刻之间的比较就会变得不明确。

将多孔体的概念限定在颗粒堆积床这一情形后，通过孔隙率和固相率进行体积分配的问题已得到充分研究。从这个意义上说，圆形填充研究领域已广泛探讨圆填充的静态状态 [4–6]。研究圆填充问题的一种常用方法是采用计算“压缩器”技术，逐步达到致密状态 [7–10]。然而，关注点大多放在最终状态，而非中间过程中的行为。本文提出的研究方向是将孔隙率和固相率的概念拓展至其导数形式：使用体积变化，而非瞬时体积。受此启发，Gomadam 与 Weidner（2005年） [11] 引入了“膨胀系数”，用于评估多孔电极的体积变化及其孔隙率变化。

本文旨在将“膨胀系数”简化到最基本的形式，以便将其推广为“呼吸系数”。 第2节介绍其定义以及若干解读指南。作为示例，第3节对等尺寸圆盘堆积的理想单轴膨胀进行了一个解析案例研究。

2 呼吸系数简介

2.1 定义

呼吸系数 是一种用于基本评估多孔体呼吸传递特性的提议。它基于体积的一般划分，将其分为固体体积变化和空隙体积变化，其中“空隙”指不存在固体的部分（由气体、液体或空隙填充）。基本划分如下：

$$V_{\text{body}} = V_{\text{solid}} + V_{\text{void}} \tag{1}$$

物体两种不同状态之间的体积变化划分直接得出：

$$\Delta V_{\text{body}} = \Delta V_{\text{solid}} + \Delta V_{\text{void}} \tag{2}$$

此处探讨的主要问题是评估各项贡献（ΔV_{solid}和 ΔV_{void}）占物体总体呼吸变化（ΔV_{body}）的比例，以评估体积变化的平衡情况。为此，本文提出“呼吸系数”，记作 u（梵文天城体元音，发音为 [u]），定义如下：

$$\text{उ} = \frac{\partial V_1}{\partial V_2} \tag{3}$$

其中，V_1 和 V_2 可以是V_{body}、V_{solid} 或 V_{void}。当然，实际上，如果V_1没有解析形式，这种形式便不适用。因此，可以使用简化的体积变化比作为等效导数：

$$\text{उ} = \frac{\Delta V_1}{\Delta V_2} \tag{4}$$

更一般地说，共有六种定义：

$$\begin{aligned} \text{उ}_{bs} &= \frac{\Delta V_{\text{body}}}{\Delta V_{\text{solid}}} \quad , \quad \text{उ}_{vs} = \frac{\Delta V_{\text{void}}}{\Delta V_{\text{solid}}} \\ \text{उ}_{vb} &= \frac{\Delta V_{\text{void}}}{\Delta V_{\text{body}}} \quad , \quad \text{उ}_{sb} = \frac{\Delta V_{\text{solid}}}{\Delta V_{\text{body}}} \\ \text{उ}_{sv} &= \frac{\Delta V_{\text{solid}}}{\Delta V_{\text{void}}} \quad , \quad \text{उ}_{bv} = \frac{\Delta V_{\text{body}}}{\Delta V_{\text{void}}} \end{aligned} \tag{5}$$

当然，这些定义彼此相当等价，选择其中一种取决于评估的具体情境和目标。提出这套定义旨在尽可能全面，以提供完整的工具箱。为便于快速换算，图 1 展示了这些不同定义之间的大部分关系。可以注意到，从数学上看，固体和空隙两种情况可以互换（v 可以是 s，反之亦然），因为它们都是同一个和式中的两项。

为了更直观地呈现体积变化分配，图2通过向量图展示了一种快速表示各种可能呼吸构型的方法。需要强调的是，只有相对方向才有意义：图中不表示负方向。这种表示方式揭示了三种不同的呼吸构型，我们将其命名为“固体反向呼吸”“定向呼吸”和“空隙反向呼吸”。此外，这些构型还存在若干极限情况：“空隙呼吸”“平衡呼吸”“固体呼吸”和“内部转移”。事实上，根据 ΔV_{solid} 和 ΔV_{void}的符号，“内部转移”可细分为两种情况：“固体消失”（$\Delta V_{\text{solid}} < 0$ 和 $\Delta V_{\text{void}} > 0$）以及“空隙消失”（$\Delta V_{\text{solid}} > 0$ 和 $\Delta V_{\text{void}} < 0$）。

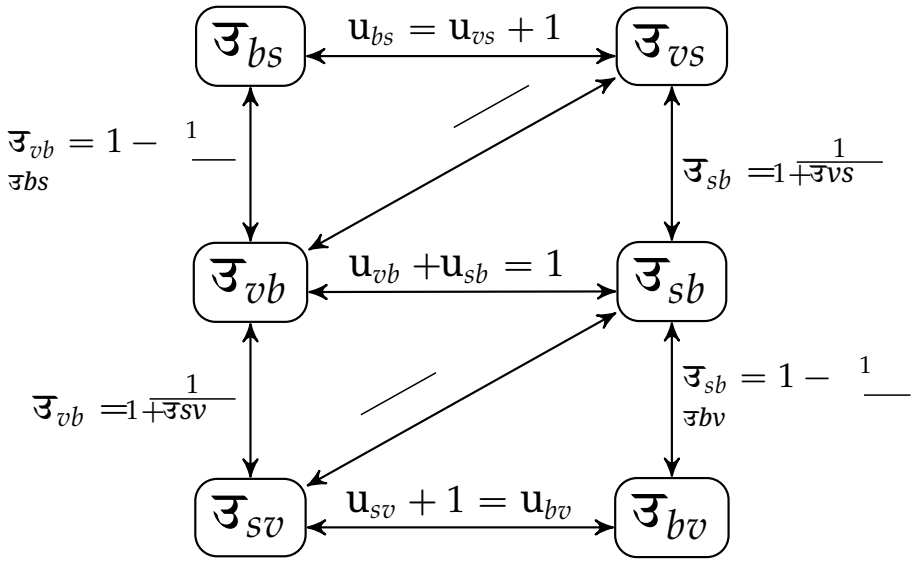


图 1： 呼吸系数不同定义之间的关系 .

该呼吸系数在理论上是一个实数。因此，它可以取$-\infty$至$+\infty$之间的任意值。其解释主要基于三个关键值：0、1 和$\pm\infty$。0。5 和 2 这两个值或许有助于引入平衡呼吸，但并不适用于所有呼吸系数定义。为便于解释这一数值，表1 将不同的极限情况与各种定义和值对应起来。

2.2 不确定性分析

与任何其他比值一样，对呼吸系数的不确定性应保持谨慎。事实上，计算和数据转储造成的不确定性会产生噪声，而除法可能会放大这种噪声。为理解这一问题，我们考虑由计算、随机数生成和数据转储中的多种误差所产生的不确定性范围 $\sigma \in \mathbb{R}_+$，其维度与 ΔV相同。我们还定义 γ_1，$\gamma_2 \in [0,1]$，这两个变量因不确定性而无法预测。实际中，我们得到的不是公式 (4)，而是：

$$\text{उ} = \frac{\Delta V_1 \pm \gamma_1 \sigma}{\Delta V_2 \pm \gamma_2 \sigma} \tag{6}$$

如果体积变化分别等于 $\lambda_1\sigma$和 $\lambda_2\sigma$，其中 $|\lambda_1|$，$|\lambda_2| \gg 1$，则有：

$$\text{उ} = \frac{\lambda_1\sigma \pm \gamma_1\sigma}{\lambda_2\sigma \pm \gamma_2\sigma} \approx \frac{\lambda_1\sigma}{\lambda_2\sigma} = \frac{\Delta V_1}{\Delta V_2} \tag{7}$$

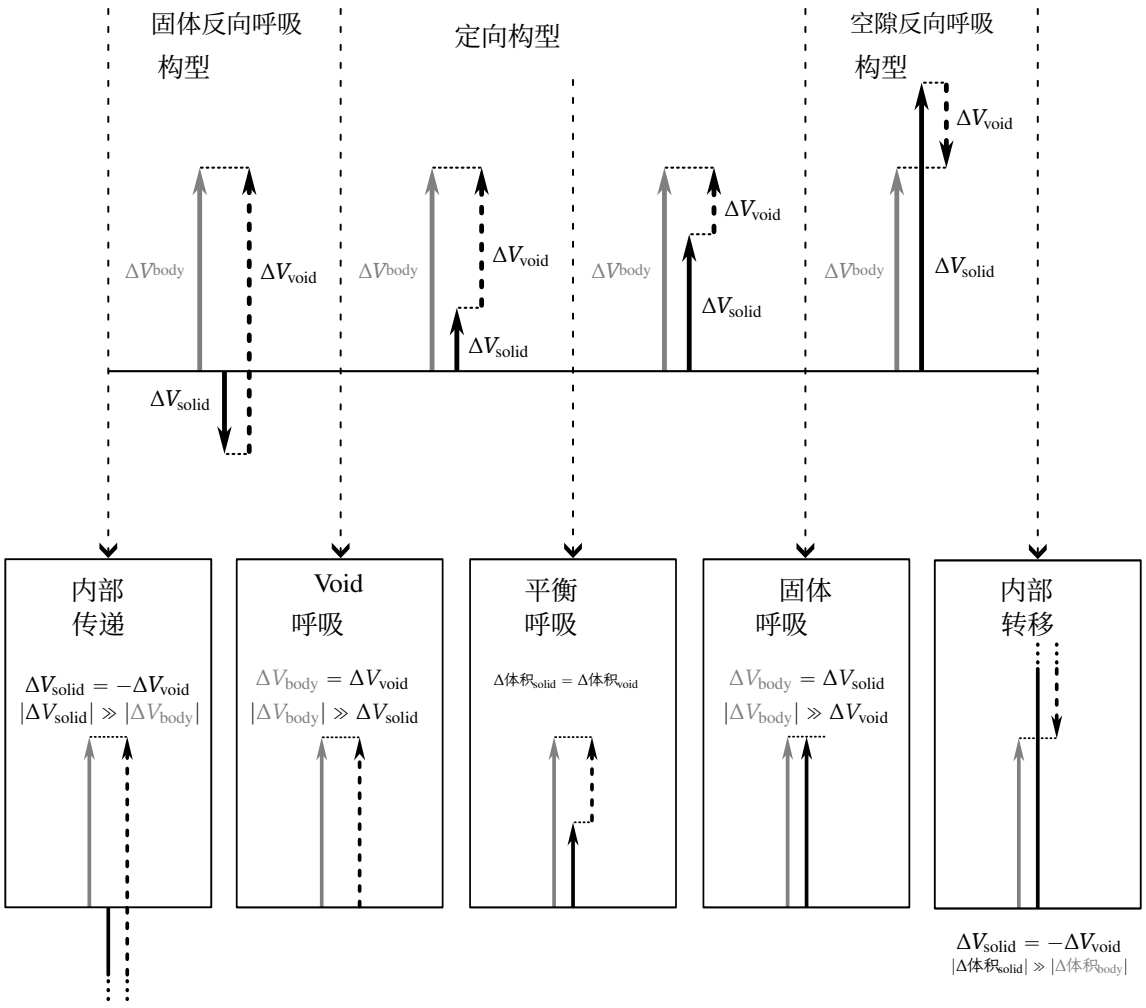


图2： 体积变化分区的不同配置和极限情况。这些示意图应作相对解读； ΔV_{body} 的参考量值仅为便于阅读（其量值可能接近于零）。只有相对方向重要（不存在负方向）。

此处不会出现特别的问题。不确定性仍可忽略，且遵循原始定义。此外，如果 ΔV_1 现在等于 $\mu_1\sigma$，其中 $|\mu_1| \ll 1$，则有：

$$\mathfrak{T} = \frac{\mu_1\sigma \pm \gamma_1\sigma}{\lambda_2\sigma \pm \gamma_2\sigma} \approx \frac{\mu_1 \pm \gamma_1}{\lambda_2} \to 0 \tag{8}$$

		ज
		$-\infty$	0	0.5	1	2	$+\infty$
Definition	bs	VBr	InTr	–	SBr	平衡呼吸	VBr
	vs	VBr	SBr	–	平衡呼吸	–	VBr
	vb	InTr	SBr	平衡呼吸	VBr	–	InTr
	sb	InTr	VBr	平衡呼吸	SBr	–	InTr
	sv	SBr	VBr	–	平衡呼吸	–	SBr
	bv	SBr	InTr	–	VBr	平衡呼吸	SBr

表1： 呼吸极限情况列线图 — ***InTr***：内部转移，***VBr***：空腔呼吸，***BalBr***：平衡呼吸，***SBr***：固体呼吸。

在这种情况下，仍然没有特别的问题。然而，反过来，如果 ΔV_2 等于 $\mu_2\sigma$，其中$|\mu_2| \ll 1$，则有：

$$ज = \frac{\lambda_1\sigma \pm \gamma_1\sigma}{\mu_2\sigma \pm \gamma_2\sigma} \approx \frac{\lambda_1}{\mu_2 \pm \gamma_2} \to \pm\infty \tag{9}$$

这一次，最终结果中出现了不确定性，更确切地说，是符号方面的不确定性。该值趋于 ∞，但其符号对不可预测的值 γ_2 高度敏感。这意味着，当 ΔV_2 的量级与不确定性相当时，仅通过分析呼吸系数，就不可能得出关于 ΔV_1 相对于 ΔV_2 的实际符号的任何结论。此外，当两个体积变化 ΔV_1 和 ΔV_2 的量级都具有不确定性时，问题尤其严重，即 它们分别等于 $\mu_1\sigma$ 和 $\mu_2\sigma$：

$$ज = \frac{\mu_1\sigma \pm \gamma_1\sigma}{\mu_2\sigma \pm \gamma_2\sigma} = \frac{\mu_1 \pm \gamma_1}{\mu_2 \pm \gamma_2} \tag{10}$$

在这种情况下，这是一个无法求解的极限情况，对不可预测的值 γ_1 和 γ_2 高度敏感。现在，不确定性不仅涉及符号，也涉及数值：整个结果都无法利用。因此，在使用呼吸系数 时，应采用系统化流程检查其有效性，以避免误解其结果。为了检查 u 的数值有效性（无论其符号如何），至少必须满足：

$$|\Delta V_1| \gg \sigma \quad \text{or} \quad |\Delta V_2| \gg \sigma \tag{11}$$

为检验数值和符号的有效性，我们必须有：

$$|\Delta V_2| \gg \sigma \tag{12}$$

3 呼吸系数的案例研究：等尺寸圆盘堆积的理想单轴膨胀

3.1 问题描述

本节通过对等尺寸圆盘堆积的理想单轴膨胀进行解析建模，介绍呼吸系数的一项具体应用，如图 3a所示。在术语方面，由于对固相/空相的考量是呼吸系数的核心，因此相较于常用的“圆盘堆积”一词，我们更倾向于使用“圆盘堆积”这一表述。不过，两者指的是同一研究领域。该问题在二维空间中进行考察，因此呼吸系数基于圆盘面积而非体积。对于这一案例研究，呼吸系数的定义采用“bs”形式：

$$\mathfrak{I}_{bs} = \frac{\Delta A_{\text{body}}}{\Delta A_{\text{solid}}} \tag{13}$$

该系统由一组初始半径为R_0的单分散圆盘构成。膨胀通过膨胀因子 $\xi > 1$ 定义如下：

$$\xi = \frac{R}{R_0} \tag{14}$$

其中，R 是均匀膨胀后圆盘的半径。忽略边界效应，圆盘按周期排列方式完美堆积。堆积由两个参数定义：类型和角度 α。类型可以是**“正方形”**、**“30°六角形堆积”**或**“60-六方”**，如图3b所示。角度 α 定义为水平线与连接两个相切圆盘中心的直线之间的最小正角。因此，正方形堆积满足 $\alpha = 0$ (i)，而30°六角形堆积满足 $\alpha = \pi/6$ (ii)。观察iii)可知，按定义，60-六方堆积满足 $\alpha = 0$，但它也代表了 $\alpha \to \pi/3$的极限情形。当然，初始堆积不一定始于图3b所示的某种特定堆积。因此，我们还定义了一个角度 α_0，用于描述 $\xi = 1$时的初始堆积状态。

如 图 3a所示，堆积沿垂直轴（y 轴）单轴膨胀，这意味着圆盘边缘相接的水平排列无法横向膨胀（沿 x轴）。在这种情况下，必然会发生颗粒重组。因此，乍看之下似乎等同的 30°六角形堆积和 60°六角形堆积实际上有所区别。膨胀由此引发三种主要堆积结构（正方形、30°六角形和 60°六角形）之间的转变。正方形堆积并非紧密堆积，因此只会作为初始堆积出现。此后，膨胀过程只会是 30°六角形堆积与 60°六角形堆积之间的一系列转变，因为对于单分散圆盘而言，这两种堆积结构最为紧密[12]。为了解不同的转变，图 4展示了圆盘膨胀过程中的不同状态，起始状态为正方形堆积。由于容器限制堆积只能垂直移动，圆盘膨胀会引发重组。每隔一列（即 也就是 图 b)中的彩色圆盘）向上移动，直至达到c)中的第一个 30°六角形堆积。此时，所有圆盘都可以通过向上移动自由膨胀。当膨胀达到 e)中的 60°六角形堆积时，新的水平

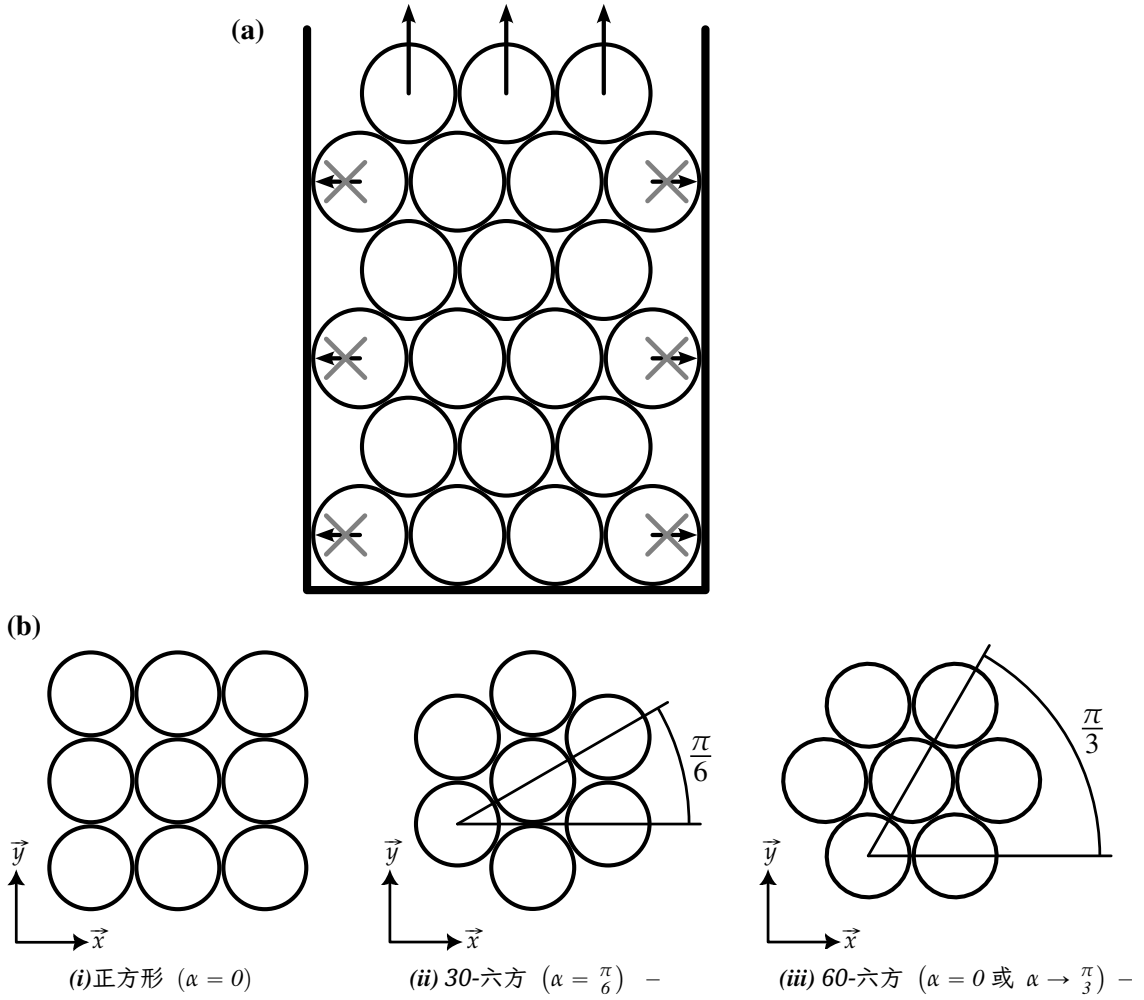
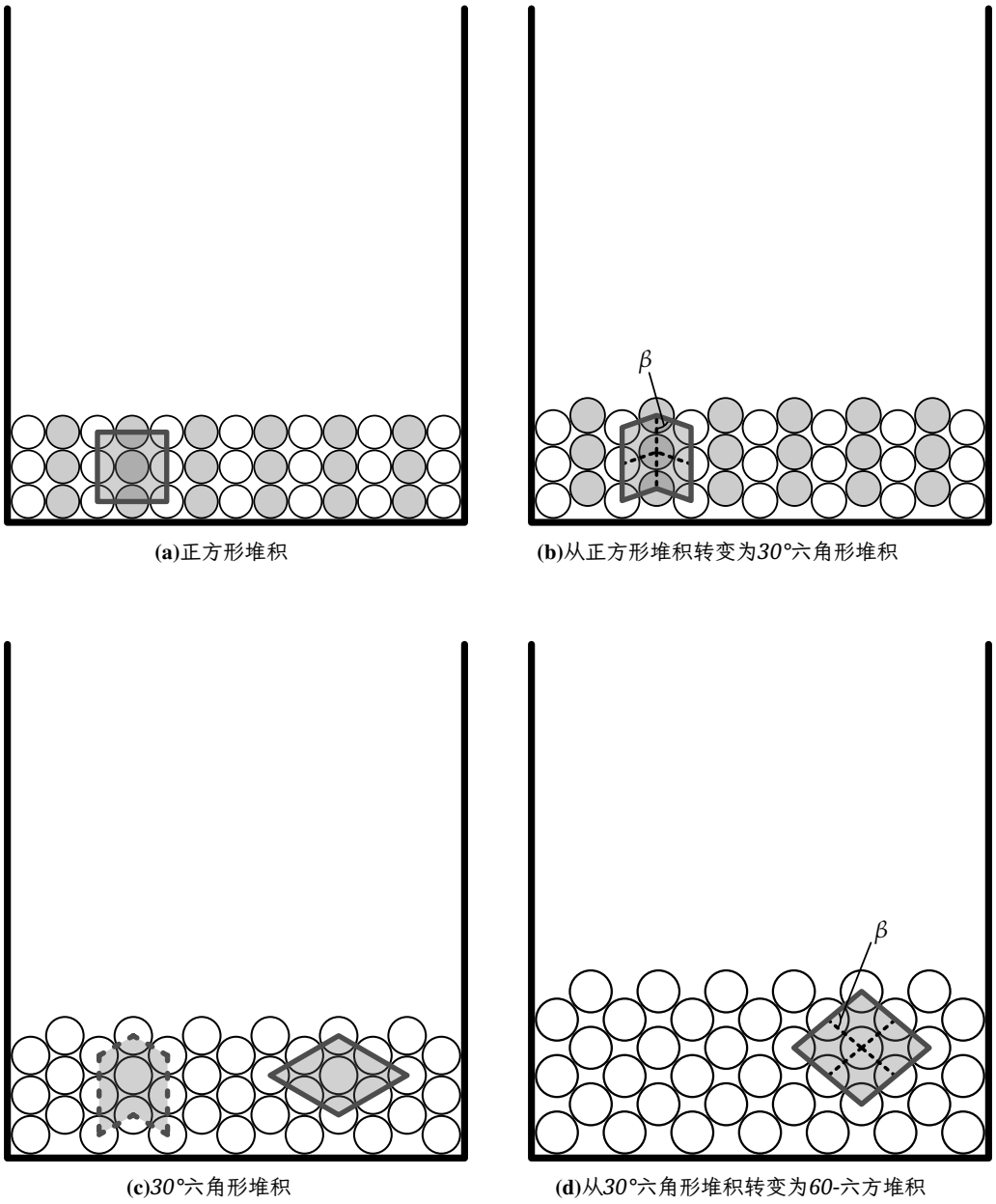


图3： 案例研究的示意图 — ***a)*** 问题示意图：一个装有等尺寸堆积圆盘的容器。圆盘膨胀时，壁会阻止水平排列从一侧边缘到另一侧边缘的横向移动。因此，整体膨胀是单轴的。***b)*** 案例研究的三种主要堆积类型。

排列随之出现，因此需要再次重组。这次重组与正方形堆积时的重组类似，不同之处在于每隔一行会横向移动一个半径的相对距离。随后形成另一种 30°六角形堆积，30°六角形堆积与 60°六角形堆积之间的转变再次开始。因此，描述这种膨胀行为时无需考虑大于 $\pi/3$ 的堆积角。

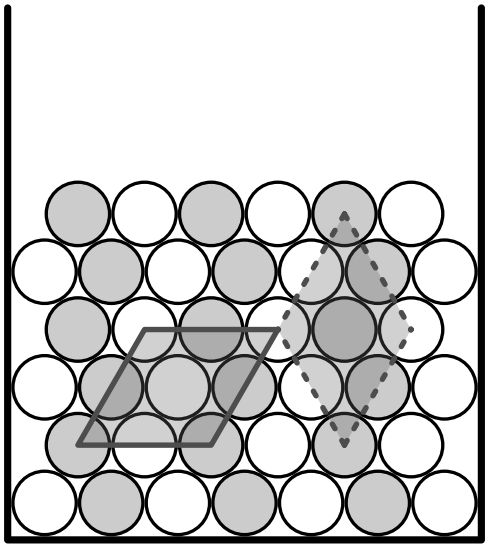
简而言之，我们有 $\alpha \in [0, \pi/3[$ 和 $\alpha_0 = \alpha(\xi = 1)$。



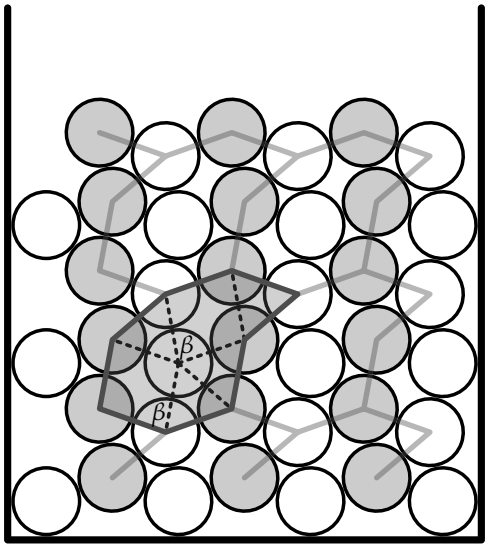
(a)正方形堆积　**(b)**从正方形堆积转变为*30°*六角形堆积

(c)*30°*六角形堆积　**(d)**从*30°*六角形堆积转变为*60-*六方堆积

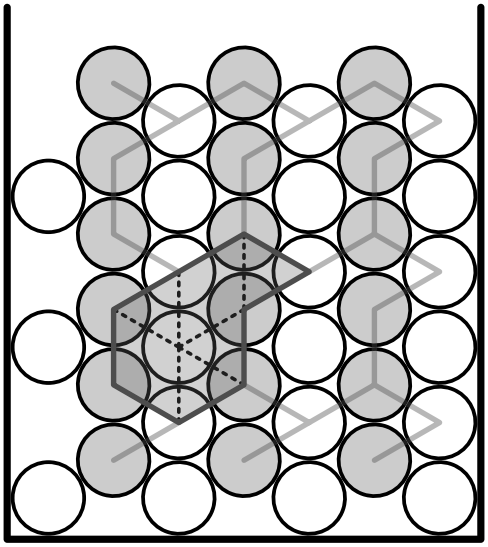
图4（第1部分）： 堆积类型之间的转变——实线多边形表示正方形堆积在***a)*** 和***b)*** 中的代表性瓦片，以及*30°*六角形堆积在***c)*** 和***d)***中的代表性瓦片。***d)*** 中的虚线多边形表示堆积转变引起形变后正方形堆积的代表性瓦片。在***b)*** 和***d)***中，代表性瓦片中的虚线标示出子瓦片（四个相等的平行四边形）。彩色圆盘表示相对向上移动的列。



(e)*60°*六角形堆积



(f)从*60°*六角形堆积转变为*30°*六角形堆积



(g)新的*30°*六角形堆积

图4（第2部分）： 堆积类型之间的转变——实线多边形对应于*60°*六角形堆积的代表性瓦片。***e)*** 中的虚线多边形对应于堆积转变引起形变后*30°*六角形堆积的代表性瓦片。在***f)*** 和***g)***中，代表性瓦片内的虚线显示了子瓦片（两个相等的平行四边形和四个相等的平行四边形）。半透明的复制瓦片有助于展示由代表性瓦片构成的镶嵌。彩色圆盘标示相对向上移动的列。

3.2 解析模型开发

u_{bs} 的计算只能用变量 ξ 和 α_0表示，以便使求解无量纲化（不受R数量级的影响）。此外，由于问题具有周期性，面积计算需要定义代表性瓦片，并满足以下两个条件：

➢ 它必须是一个独特的多边形，只需通过平移即可铺满整个圆盘堆积，且不受堆积角影响 α。➢ 在不同堆积结构转变期间，瓦片面积及其所含圆盘的面积必须连续变化。

所选代表性瓦片以粗实线绘于图 4 中，分别为a) 正方形堆积、c) 30°六角形堆积和e) 60°六角形堆积。图a)中的正方形堆积瓦片是一个中部会发生变形的正方形。图c) 中的30°六角形堆积瓦片是一个平行四边形，其边长（相对于圆盘半径）保持不变，但角度会变化。最后，图e) 中的60°六角形堆积瓦片形状更为复杂。它最初是一个平行四边形，但会根据所在行以不同方式变形。

首先，这些铺砌单元只有通过平移才能满足镶嵌条件。对于前两个铺砌单元，这一点显而易见；而f) 和g) 则有助于展示第三个铺砌单元的镶嵌方式。其次，采用这种选择的优点在于，无论 α取何值，这些代表性瓦片中的每一个都包含四个圆盘的面积。无论角度 α为何，我们都可以得到：

$$A_{\text{solid}} = 4\pi R^2 \tag{15}$$

为求得这些铺砌单元的面积，需要通过观察a)、d) 和f)中的中间示意图进行一些几何分析。第一个过渡铺砌单元（从正方形堆积转变为30°六角形堆积）可分解为四个平行四边形，其对称部分的面积可直接根据角度 α（我们有 $\beta = \pi/2 - \alpha$）求得。第二个过渡铺砌单元（从30°六角形堆积转变为60°六角形堆积）的推理过程相同，它也可分解为四个平行四边形，其中 $\beta = 2\alpha$。第三个过渡铺砌单元（从60°六角形堆积转变为30°六角形堆积）可分解为四个等边三角形和两个角度 $\beta = 2$（$\pi/3 - \alpha$）可变的平行四边形。通过这一分析，我们得到相应的表达式：A^{body} 等于各过渡铺砌单元的面积：

$$A_{\text{body}} = \begin{cases} 16R^2\cos(\alpha) & ,\text{if } \alpha \in \left[0, \dfrac{\pi}{6}\right[\quad \text{(square at } \alpha = 0) \\ 4R^2\left[\sqrt{3} + 2\sin\left(\dfrac{2\pi}{3} - 2\alpha\right)\right] & ,\text{if } \alpha \in \left[0, \dfrac{\pi}{6}\right[\quad \text{(60-hexagonal at } \alpha = 0) \\ 32R^2\cos(\alpha)\sin(\alpha) & ,\text{if } \alpha \in \left[\dfrac{\pi}{6}, \dfrac{\pi}{3}\right[\end{cases} \tag{16}$$

这里同样满足连续性条件。事实上，所有极限均等于 $8R^2\sqrt{3}$，只有正方形表达式在 0 处的极限例外；该极限并非转变值，而只是膨胀过程中不再出现的初始阶段。

最后一步是定义圆盘半径变化与角度之间的关系：$\alpha(\xi,\ \alpha_0)$。为此，将膨胀因子 ξ分解为三个子膨胀因子的乘积：

$$\xi = \xi_{\pi/3}\,\xi_n\,\xi_r = \frac{R_{\pi/3}}{R_0} \times \frac{R_n}{R_{\pi/3}} \times \frac{R}{R_n} \tag{17}$$

其中，$R^{\pi/3}$是首次达到 $\pi/3$时的半径，R_n是经过$n-1$次完整转变（0至 $\pi/3$）后的半径。换言之， $\xi_{\pi/3}$ 是首次达到 $\pi/3$ 所需的膨胀量， ξ_n是完成$n-1$次完整转变（0至 $\pi/3$）所需的膨胀因子，而 ξ_r则是不足以达到 $\pi/3$的剩余膨胀。n 被称为**“过渡指数”**，其定义为堆积结构达到60°六角形堆积（$\alpha \to \pi/3$）的次数。我们可以注意到，从圆盘的水平排列（$\alpha = 0$，正方形或60°六角形）开始时，两个中心之间的距离不会改变（相对于每条线而言，每两个圆盘中有一个向上移动，但不会发生横向移动）。正方形堆积结构与60°六边形堆积结构之间的唯一差异在于，后一种情况下，在转变为30°六角形堆积的过程中，每隔一条线会发生横向移动。因此，中心之间的初始水平距离d_h 保持不变，直到 α 达到 $\pi/3$:

$$d_h = 2\xi_{\pi/3}R_0\cos\left(\frac{\pi}{3}\right) = 2R_0\cos(\alpha_0) \implies \xi_{\pi/3} = 2\cos(\alpha_0) \tag{18}$$

其中，当 $\alpha_0 = 0$ 时，得到 $\xi_{\pi/3} = 2$。因此， α 从 0 转变为 $\pi/3$ （无论初始状态是正方形堆积还是 60-六方堆积），都需要将圆盘半径加倍。由此可知， ξ_n 的形式为:

$$\xi_n = 2^{n(\xi,\alpha_0)-1} \tag{19}$$

其中 n 取决于 ξ，并可通过算法1确定。剩余膨胀因子由最终堆积角直接定义 α:

$$\xi_r = \frac{1}{\cos(\alpha)} = \frac{\xi}{\xi_{\pi/3}\xi_n} \tag{20}$$

由此得到堆积角的最终表达式 α:

$$\alpha = \arccos\left(\frac{2^{n(\xi,\alpha_0)}\cos(\alpha_0)}{\xi}\right) \tag{21}$$

由此可得该案例研究中呼吸系数 的最终形式。由于存在比值，可通过除以 $4R_0^2$，使用无量纲面积（与半径值无关）对其进行简化:

$$\mathfrak{I}_{bs} = \frac{\widetilde{\Delta A}_{\text{body}}}{\widetilde{\Delta A}_{\text{solid}}} \tag{22}$$

其中:

$$\begin{cases} \widetilde{\Delta A}_{\text{body}} = \widetilde{A}_{\text{body}} - \widetilde{A}_{\text{body},0} \\ \widetilde{\Delta A}_{\text{solid}} = \pi(\xi^2 - 1) \end{cases} \tag{23}$$

算法1： n 计算

输入： ξ, α_0

$n = 0$

$\xi' = \frac{\xi}{\cos(\alpha_0)}$ # 将角度重置为零

当 $\xi' > 2$ **时执行**

  $n \leftarrow n+1, \xi' \leftarrow \frac{\xi'}{2}$

输出： n

$\widetilde{A}$ 的表达式 ΔA^{body} 基于公式 (16)，取决于堆积角 α，通过算法2得出。最后，一个有趣的常用参数是固相率，它直接根据无量纲面积定义：

$$\chi = \frac{\widetilde{A}_{\text{solid}}}{\widetilde{A}_{\text{body}}} \tag{24}$$

3.3 结果讨论

作为模型的一个特例，图5展示了呼吸系数 u_{bs}、固相率 χ 和堆积角 α 随膨胀因子 ξ变化的情况。具体而言，这里仅考察初始堆积角为零的情况，涵盖方形和60-六边形初始堆积。从图中大致可以看出，u_{bs} 的量级在1到1.5之间，接近“固体呼吸”（解释见表1）。换言之，物体的大部分膨胀由圆盘膨胀引起，空隙面积的增加相对较少。然而，在60-六边形初始堆积的起始阶段（图5中的虚线），出现了一种特殊行为：当膨胀因子 ξ较小时，u_{bs} 趋于无穷大。在这种情况下，膨胀主要是由空隙面积变化造成的。这与以下事实相符：60°六角形堆积是单分散圆盘最紧密的堆积，因此在这种状态下，圆盘面积的微小变化必然会导致空隙面积的大幅变化。相反，方形初始堆积在膨胀量较小时，呼吸系数较低，并且当 $\xi \to 1$ 时，其极限值为 $2/\pi \approx 0.634$。此时，膨胀处于“内部转移”与“固体呼吸”的转变阶段（解释见表1）：圆盘面积的变化由空隙面积的反向变化所抵消。当膨胀足以达到30°六角形堆积时（$\alpha = \pi/6$），这些特殊行为会发生变化。对于方形和60°六角形堆积，呼吸系数都会随膨胀因子 ξ突然增大；再次考虑到30°六角形堆积的紧密特性，这一现象是合理的。当膨胀因子 ξ 达到2时，第一个转变阶段结束。从这一点开始，方形和60-六边形初始堆积呈现出相似的行为：在每个60-六角形堆积处的 ξ值以及每个30°六角形堆积处的 $2^{n+1}\sqrt{3}/3$ 值上，呼吸系数均出现局部极小点（ 2^n ）。在

算法2： $\widetilde{\Delta A}_{\mathrm{BODY}}$ 计算

输入： ξ， α_0

$\alpha =$ 公式（21）

如果 $\alpha \leqslant \frac{\pi}{6}$ **则**

  如果 方形初始堆积 **且** $n = 0$ **则**

    $\widetilde{A}_{\mathrm{body}} = 4\xi^2 \cos(\alpha)$

  else

    $\widetilde{A}_{\mathrm{body}} = \xi^2 \left[\sqrt{3} + 2\sin\left(\frac{2\pi}{3} - 2\alpha\right)\right]$

否则

  $\widetilde{A}_{\mathrm{body}} = 8\xi^2$ 余弦(α) 正弦(α)

若 $\alpha_0 < \frac{\pi}{6}$ **则**

  若方形初始堆积**则**

    $\widetilde{A}_{\mathrm{body},0} = 4$余弦$(\alpha_0)$

  如果*60*-六边形初始堆积**则**

    $\widetilde{A}_{\mathrm{body},0} = \sqrt{3} + 2$ 正弦 $\left(\frac{2\pi}{3} - 2\alpha_0\right)$

否则

  $\widetilde{A}_{\mathrm{body}} = 8$ 余弦(α_0) 正弦(α_0)

$\widetilde{\Delta A}_{\mathrm{body}} = \widetilde{A}_{\mathrm{body}} - \widetilde{A}_{\mathrm{body},0}$

输出： $\widetilde{\Delta A}_{\mathrm{body}}$

事实上，对于任何利用颗粒呼吸的过程而言，这些局部极小点都可能相当重要，因为体积变化的估算可能会影响容器设计。例如，以60-六边形初始堆积为例（图5中的虚线），当膨胀因子介于2和4之间时，u_{bs} 的最小值约为1.103（对应 $\xi = 4$），最大值约为1.298（对应 $\xi = 2.802$）。按照呼吸系数的“vs”定义计算，相应数值分别为0.103和0.298。换言之，在 $\xi = 4$时，圆盘的膨胀程度高于 $\xi = 2.802$时，但产生的空隙面积比例较低（10.3%，而非29.8%）。因此，对于例如颗粒材料密度至关重要的过程，似乎有必要进行优化。具体而言，从固相分数曲线 χ来看， $\xi = 4$ 和 $\xi = 2.802$ 处的相应数值约为0.907和0.785。在$\xi = 4$ 时，该六角构型被证明是等尺寸圆盘堆积中最致密的，此时 $\chi_{\max} = \pi/\sqrt{12}$、 [12]。

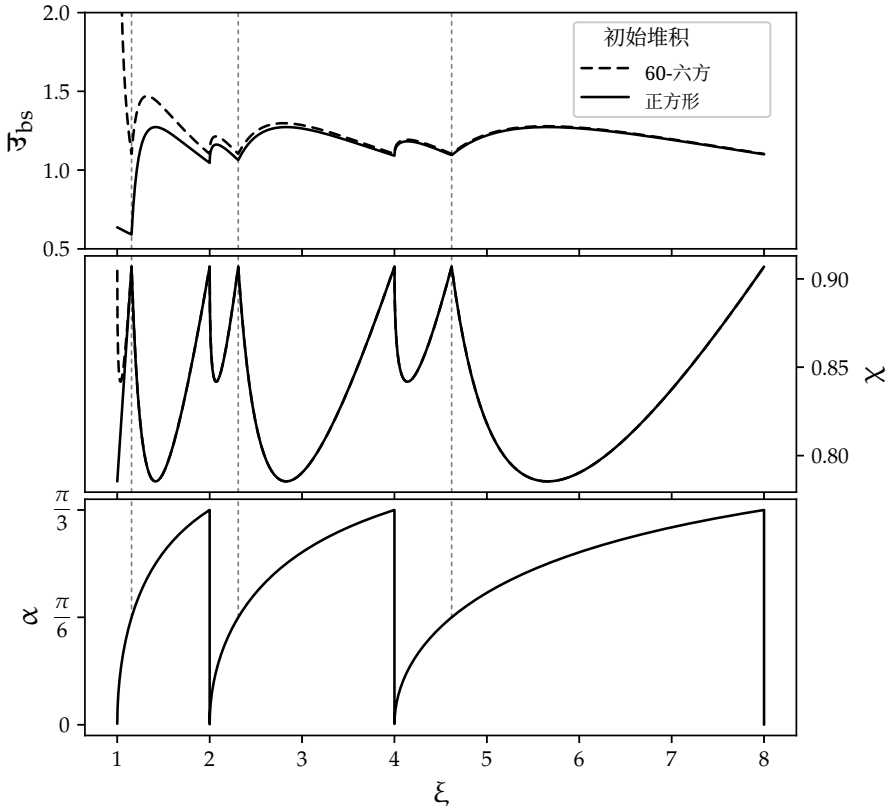


图5： 呼吸系数 u_{bs}、固相率 χ 和堆积角 α 随膨胀因子 ξ 和初始堆积的变化（实线表示正方形，虚线表示*60*-六方），其中 $\alpha_0 = 0$。竖直点线对应*30*°六角形堆积（$\alpha = \pi/6$）。

初始角 α_0 也会显著影响呼吸系数局部极小点的分布。就此而言，图6展示了呼吸系数 u_{bs} 和堆积角 α 随膨胀因子 ξ变化的情况，其中初始角 α_0取若干不同值。呼吸系数的图中同时展示了方形和60°六边形初始堆积。正如预期，方形与60°六边形初始堆积之间的差异仅出现在 $\alpha_0 < \pi/6$。实际上，当超过 $\pi/6$时，即使是方形初始堆积，堆积结构也已呈六边形。如上所述，当膨胀因子 ξ 介于1和2之间时，这种差异更为明显；此时方形初始堆积会产生较低的呼吸系数值，尤其是在 $\alpha < \pi/6$的情况下。一般而言，对于方形和60°六边形初始堆积，增大 α_0 会导致曲线向左相移，如 α 曲线上的箭头所示。因此，30°六角形或60°六角形堆积的形成不会发生在相同的膨胀量下。更准确地说，这些点通常出现在 $2^n\cos(\alpha_0)$的每个 ξ 值处（在

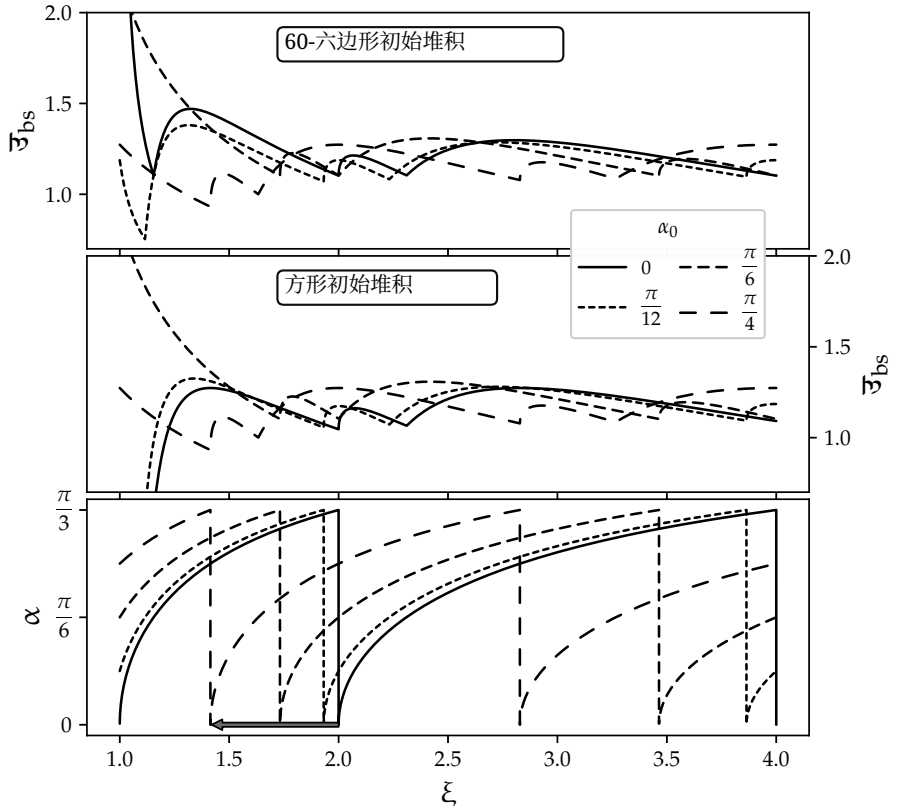


图6： 呼吸系数 u_{bs} 和堆积角 α 随膨胀因子 ξ 和初始角 α_0的变化关系。对于呼吸系数，上方曲线表示*60*-六边形初始堆积，下方曲线表示方形初始堆积。水平箭头表示由初始角 α_0的变化引起的相移。

每个60°六角形堆积处），以及 $2^{n+1}\cos(\alpha_0)\sqrt{3}/3$ （在每个30°六角形堆积处）。这一表述包含了上文讨论的特殊情况，即 $\alpha_0 = 0$。这一发现对于最大膨胀因子受到限制的实际应用颇有意义。在这种情况下，审慎选择初始颗粒组织（通过 α_0）可使最大膨胀量下的呼吸系数 最小。

正如我们所观察到的，该模型与膨胀因子 ξ并非线性关系，而是以 2 为底的对数关系（每隔 2^n就会出现一次新的α 转变）。这些转变的呼吸系数 的局部极小点位于六边形堆积结构（$\alpha = 0$ 和 $\alpha = \pi/6$）。更确切地说，这些点处的呼吸系数 表达式分别为：

$$\begin{cases} \mathfrak{Z}_{bs}(\alpha=0) = \dfrac{2^{2n+1}\sqrt{3}\cos^2(\alpha_0) - \widetilde{A}_{\text{body},0}}{\pi(2^{2n}\cos^2(\alpha_0)-1)} \\ \mathfrak{Z}_{bs}\left(\alpha=\dfrac{\pi}{6}\right) = \dfrac{2^{2n+3}\sqrt{3}\cos^2(\alpha_0) - 3\widetilde{A}_{\text{body},0}}{\pi(2^{2n+2}\cos^2(\alpha_0)-3)} \end{cases} \tag{25}$$

从这些表达式中，可以得出一个在过渡指数n较大时出现的特定极限值：

$$\lim_{n\to\infty}\mathfrak{Z}_{bs}(\alpha=0) = \lim_{n\to\infty}\mathfrak{Z}_{bs}\left(\alpha=\frac{\pi}{6}\right) = \frac{\sqrt{12}}{\pi} \approx 1.102\,657\,791 \tag{26}$$

考虑到单分散圆盘在六边形堆积结构中重组时所假定的较大膨胀量，这一数值可视为呼吸系数的理论局部最小值。需要注意的是，呼吸系数可以取得显著更低的数值，但仅限于膨胀量较低时（$n<4$）。然而，在膨胀量较高时（$n\geq 4$），最小化至$\sqrt{12}/\pi$这一结果尤其成立。从这个角度看，图 7 展示了呼吸系数随堆积角变化的关系 α，比较了初始堆积角 α_0为零的正方形和 60-六方初始堆积结构，并考察了不同过渡指数n。正方形与 60-六方初始堆积结构之间存在差异：正方形情况下，趋近最小化值$\sqrt{12}/\pi$时取值较低；而 60-六方情况下，趋近该值时取值较高。在图 7中，$n>4$ 对应的曲线（此处未显示）与$n=4$对应的曲线几乎重合，这证实了上文所述的过渡指数极限。当$n=4$之后，正方形与 60-六方初始堆积结构之间的差异变得可以忽略不计。

事实上，$\sqrt{12}/\pi$ 的这个极限值一点也不令人意外，因为它对应于理论最大固相率的倒数：

$$\lim_{n\to\infty}\mathfrak{Z}_{bs}(\alpha=0) = \frac{1}{\chi_{\max}} \tag{27}$$

这一观察揭示了孔隙率、固相率与呼吸系数之间几乎等价。查看式（23）可明显看出：

$$\lim_{\xi\to\infty}\mathfrak{Z}_{bs} = \frac{1}{\chi} \tag{28}$$

此外，根据“vs”的定义，还可以得到它与孔隙率之间的等价关系：

$$\lim_{\xi\to\infty}\mathfrak{Z}_{vs} = \frac{1}{\varepsilon} \tag{29}$$

换言之，当初始面积A_0（或者更一般地说，初始体积V_0）与各自的变化量相比可以忽略不计时，呼吸系数 便失去作用，与传统的孔隙率和固相率相比毫无额外价值。乍看之下，孔隙率或固相率似乎与呼吸系数 等同，

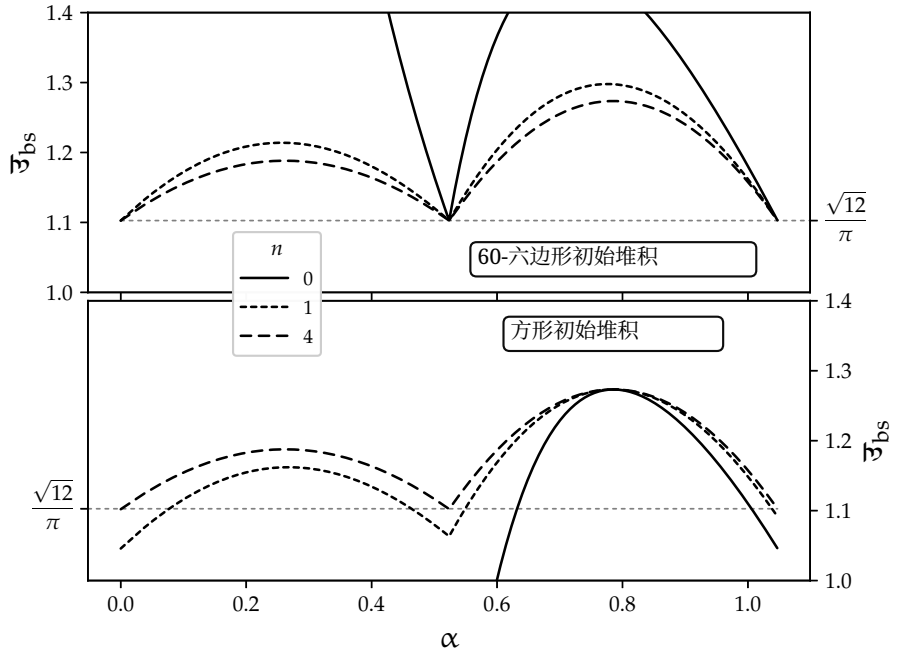


图7： 呼吸系数 u_{bs} 随堆积角 α 和初始堆积的变化。水平虚线表示 $\sqrt{12}/\pi$ 的极小值极限。初始堆积角α_0 为空。

这种想法油然而生。事实上，只有在 $\Delta V_1 \gg V^{1,0}$ 且 $\Delta V_2 \gg V^{2,0}$，时才是如此，其中$V^{1,0}$ 和$V^{2,0}$ 表示初始体积。实际上，体积变化若不处于同一数量级，通常远小于绝对体积（例如，颗粒床的热膨胀，或混合多孔材料内的气体储存）。在这种情况下，物体、固体与空隙之间的体积变化分布仍难以理解。因此，呼吸系数 促使我们从体积变化而非绝对体积的角度进行思考。

4 结论

本文旨在介绍呼吸系数的解析描述，该系数记作 u，定义为 $\Delta V_1/\Delta V_2$, ，其中 ΔV_1 和 ΔV_2 是两个体积变化。它主要适用于总体积因固体体积变化以及“空隙”（由气体、液体或空隙填充）的体积变化而改变的多孔体。基于基本的体积变化分配，该参数有六种不同的定义，具体选择取决于所研究的问题。该参数的作用在于评估一种体积变化向另外两种体积变化的转换。结合

对解释指南的描述，本文对该参数进行了不确定性分析。对于给定的不确定性 σ，我们建议采用系统化流程来检验呼吸系数的有效性：用 $|\Delta V_1| \gg \sigma$ 或 $|\Delta V_2| \gg \sigma$ 验证其数值，用 $|\Delta V_2| \gg \sigma$ 验证数值和符号。

作为应用示例，我们使用二维解析模型，对等尺寸圆盘堆积的理想单轴膨胀进行了案例研究。在该案例研究中，圆盘的膨胀会使圆盘床整体膨胀，并呈现周期性堆积类型。围绕定义 $\mathrm{u}_{bs} = \Delta V_{\mathrm{body}}/\Delta V_{\mathrm{solid}}$展开分析后发现，随着膨胀因子的变化，系统呈周期性演化，并产生规律分布的呼吸系数局部极小点（此时圆盘堆积呈六边形）。在考察膨胀因子的取值时，这种周期性每隔 $2^n\cos(\alpha_0)$ 和 $2^{n+1}\cos(\alpha_0)\sqrt{3}/3$ 出现一次，其中 α_0 为初始堆积角。呼吸系数局部极小点的位置取决于 α_0。这一发现为设计能够自行吸收其固相膨胀的多孔材料提供了有趣的思路。当膨胀因子较大（$\geq 2^4$）时，呼吸系数局部极小点的极限值为 $\sqrt{12}/\pi$，这对应于等尺寸圆盘堆积最大固相率的倒数。

—

符号表

4.1 主要符号

u 呼吸系数，$-A$ 面积，$\mathrm{m}^3 d$ 距离，mn 过渡指数，$-R$ 半径，mV 体积，$\mathrm{m}^3 \alpha$ 堆积角，$-\beta$ 中间角，$-\gamma$ 未定义变量 $\gamma \in [0,1]$，$-\lambda$ 显著因子 $|\lambda| \gg 1$，$-\mu$ 可忽略因子 $|\mu| \ll 1$，$-\xi$ 膨胀系数，$-\varepsilon$ 孔隙率，$-\sigma$ 体积不确定性，$\mathrm{m}^3 \chi$ 固相率，$-$

4.2 下标

0 初始值（在 $\xi = 1$ 时） 1 分子项 2 分母项 物体多孔体bs 固体上的主体bv 空隙上的主体h 水平最大值 最大值n 达到$n-1$ 个完整转变所需 固相 “空隙”相（含气体、液体或空隙）vb 空隙在物体上vs 空隙在固体上r 剩余膨胀 sb 固体在物体上 sv 固体在空隙上 $\pi/3$ 首次达到 $\alpha = \pi/3$ 所需

4.3 运算

Δy 变化量，$[y]y'$ 次级值，$[y]|y|$ 绝对值，$[y]\tilde{y}$ 无量纲等效量，$-\partial y_1/\partial y_2$ 偏导数，$[y_1/y_2]$

致谢

作者感谢 Umicore 公司团队的合作，该团队由 Du-ancheng Ma、Michal Tulodziecki 和 Jacob Locke 组成。他们还由衷感谢 Benoît Mathieu 和 Willy Porcher 对论文项目的积极参与。

作者贡献声明

T.B. 设计了图，起草并撰写了手稿；O.G. 负责监督这项工作；T.B. 和 O.G. 开发了解析模型、讨论了结果并审阅了手稿。

写作过程中使用生成式人工智能和人工智能辅助技术的声明

在准备这项工作期间，T.B. 偶尔使用“*DeepL*”将法语中的个别词语或短语（最多五个词）翻译成英语。T.B. 还使用“*LanguageTool*”进行语法和拼写检查。使用该工具后，作者对内容进行了必要的审阅和编辑，并对已发表文章的内容承担全部责任。

利益冲突声明

作者声明，对本稿件不存在任何利益冲突。

数据可用性

支持本研究结论的数据已在 Gitlab 代码库 [13] 中公开。

参考文献

[1] Nahia Sassine。《颗粒介质的热-力学行为及介质-储罐相互作用研究》。博士论文。格勒诺布尔阿尔卑斯大学，2018年11月。网址：https://theses.hal.science/tel-02043455。[2] O. Gillia。《氢化物呼吸及其对容器所受应力的影响：综述》。载于：《国际氢能杂志》（2021年），第35594–35640页。数字对象标识符：10.1016/j.ijhydene.2021.07.082。[3] Théo Boivin 等。《硅基负极的呼吸：采用离散元法的离散力学方法》。载于：《电化学学会杂志》171.1（2024年），第010505页。数字对象标识符：10.1149/1945-7111/ad14cf。[4] D. J. Cumberland 和 R. J. Crawford。《颗粒堆积》。Elsevier Science Pub. Co. Inc.，阿姆斯特丹，纽约州，1987年。网址：https://openlibrary.org/books/OL15084426M/The_堆积_of_particles。[5] Philip L. Bowers。《圆填充导论：综述》。载于：《圆填充：离散解析函数理论》。2008年，第1–16页。网址：https://api.semanticscholar.org/CorpusID:16173679。[6] Mhand Hifi 和 Rym M’Hallah。《圆填充与球填充问题的文献综述：模型与方法》。载于：《运筹学进展》2009年（2009年），第150624页。数字对象标识符：10.1155/2009/150624。[7] Boris D. Lubachevsky 和 Ronald L. Graham。《包围全等且互不重叠圆的最小周长矩形》。载于：《离散数学》309.8（2009年），第1947–1962页。数字对象标识符：10.1016/j.disc.2008.03.017。[8] E. Specht。《可变纵横比矩形中的等圆高密度堆积》。载于：《计算机与运筹学》40.1（2013年），第58–69页。数字对象标识符：10.1016/j.cor.2012.05.011。[9] Mihály Csaba Markót。《求解单位正方形圆填充问题的改进区间方法》。载于：《全球优化杂志》81.3（2021年），第773–803页。数字对象标识符：10.1007/s10898-021-01086-z。[10] Paolo Amore。《正多边形中的圆填充》。载于：《流体物理学》35.2（2023年），第027130页。数字对象标识符：10.1063/5.0140644。[11] Parthasarathy M. Gomadam 和 John W. Weidner。《多孔电极中的体积变化建模》。载于：《电化学学会杂志》153.1（2005年），A179。数字对象标识符：10.1149/1.2136087。

[12] Hai-Chau Chang 和 Lih-Chung Wang。 关于 *Thue* 定理与圆填充的一个简单证明。康奈尔大学，2010年。数字对象标识符： 10.48550/arXiv.1009.4322。[13] *GitLab – Théo Boivin* – 文章 – 呼吸系数。版本 1.0.0。 网址：https://gitlab.com/TheoBoivin/ articles/Breathing-Coefficient。