

# Phương pháp số xác định hệ số dẫn ngang của vật liệu cốt sợi đồng phương

■ TS. NGUYỄN THỊ HƯƠNG GIANG  
Trường Đại học Giao thông vận tải

**TÓM TẮT:** Bài báo có mục tiêu xác định hệ số dẫn ngang của vật liệu cốt sợi đồng phương theo phương pháp số sử dụng phần tử hữu hạn dưới sự hỗ trợ của phần mềm có mã nguồn mở Cast3m. Kết quả đạt được sẽ so sánh với kết quả theo công thức giải tích có sẵn để kiểm tra tính đúng đắn.

**TỪ KHÓA:** Hệ số dẫn ngang hiệu dụng, cốt sợi đồng phương.

**ABSTRACT:** The article determines the transverse conductivity of unidirectional fiber composites of using the finite element under the support of the open source software Cast3m. The results will compare with the results of the formula available to check the correctness.

**KEYWORDS:** Effective conductivity, unidirectional fiber composites.

## 1. ĐẶT VẤN ĐỀ

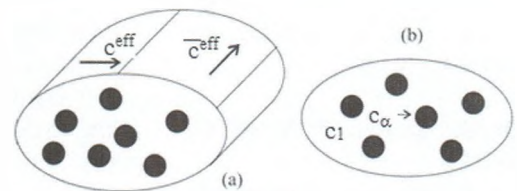
Vật liệu cốt sợi đồng phương là loại vật liệu nhân tạo được sử dụng rộng rãi trong các ngành công nghiệp cũng như trong ngành Xây dựng với các loại vật liệu sử dụng sợi các bon, sợi thủy tinh, sợi kim loại... Ở cấp độ vi mô, các thành phần vật liệu có tính chất khác nhau. Tuy nhiên, khi xem xét ở cấp độ vĩ mô có thể coi vật liệu là đồng nhất và được đặc trưng bởi các giá trị hiệu dụng. Các giá trị đó phụ thuộc vào tính chất của từng pha, tỉ lệ thể tích, cấu trúc hình học, liên kết giữa các pha. Nghiên cứu hệ số dẫn của loại vật liệu này luôn là mối quan tâm của nhiều nhóm nghiên cứu trong và ngoài nước với các cách tiếp cận khác nhau. Với xấp xỉ trung bình có thể kể đến các nghiên cứu của Voight [1], Reuss [2]. Phương pháp sơ đồ vi phân được đề xuất bởi Bruggeman [3] và Roscoe [4]. Phương pháp tự tương hợp với ý tưởng ban đầu được cho là của Einstein [5], sau đó Bruggeman [3] đã mở rộng và thực hiện đánh giá với các hệ số dẫn và hệ số đàn hồi của vật liệu composite. Phương pháp Mori - Tanaka [6] áp dụng cho kĩ thuật và kim loại học khi xem xét vật liệu nhiều pha dạng nền - cốt. Phương pháp đường bao với nghiên cứu nổi bật của Hashin - Strikman [7], Duc Chinh Pham [8].

Ngày nay, với sự phát triển của khoa học máy tính, các phương pháp số được áp dụng nhiều cho bài toán đồng nhất hóa vật liệu. Trong khuôn khổ của bài báo này, tác

giả muốn trình bày cách xác định hệ số dẫn ngang của vật liệu cốt sợi đồng phương theo phương pháp số sử dụng phần tử hữu hạn với sự hỗ trợ của phần mềm có mã nguồn mở Cast3m. Kết quả đạt được sẽ so sánh với kết quả ở các phương pháp khác để kiểm tra tính đúng đắn.

## 2. HỆ SỐ DẪN NGANG CỦA VẬT LIỆU COMPOSITE CỐT SỢI ĐỒNG PHƯƠNG

Hình 2.1a minh họa vật liệu cốt sợi đồng phương, các cốt có dạng hình học là trụ tròn. Các pha cấu thành được giả thiết là đồng nhất, đẳng hướng. Vật liệu có hệ số dẫn hiệu dụng dọc trục  $\bar{c}^{eff}$ , hệ số dẫn ngang hiệu dụng  $c^{eff}$ . Hình 2.1b thể hiện mặt cắt ngang của vật liệu với pha nền có hệ số dẫn  $c_1$ , tỉ lệ thể tích  $v_2$ , pha cốt hệ số dẫn là  $c_0$  ( $\alpha = 2, \dots, n$ ), tỉ lệ thể tích  $v_\alpha$ .



Hình 2.1: Vật liệu cốt sợi đồng phương

Kết quả đánh giá theo phương pháp đường bao của Hashin - Strikman [7], hệ số dẫn ngang hiệu dụng của vật liệu cốt sợi đồng phương có dạng:

$$P_{c_{vn}}(c_{\min}) \leq c^{eff} \leq P_{c_{vn}}(c_{\max}) \quad (1)$$

$$P_{c_{vn}}(c_0) = \left( \sum_{\alpha=1}^n \frac{v_\alpha}{c_\alpha + c_0} \right)^{-1} - c_0, \quad (2)$$

$$c_{\min} = \min(c_1, c_2, \dots, c_n); c_{\max} = \max(c_1, c_2, \dots, c_n).$$

Các công thức xấp xỉ phần lớn dựa trên nền tảng phân bố thưa của Eshelby [9]. Eshelby đã tách một hạt cốt liệu ellip đặt trong miền vô tận của pha nền (bỏ qua sự tương tác giữa các hạt). Trên cơ sở đó, ông xây dựng hệ số dẫn vĩ mô trong vùng thể tích pha cốt nhỏ. Với vật liệu 2 thành phần, hệ số dẫn hiệu dụng của phân bố thưa được biểu diễn:

$$c^{eff} = c_1 \left[ 1 + v_2 D(c_1, c_2) + 0(v_2^2) \right] \quad v_2 < 1, \quad (3)$$

Trong đó:  $D(c_1, c_2)$  - Ten-xơ Eshelby, với cốt tròn có dạng:

$$D(c_1, c_2) = 2 \frac{c_2 - c_1}{c_2 + c_1} \quad (4)$$

Sử dụng xấp xỉ vi phân, Pham [10] tính hệ số dẫn cho vật liệu 2 pha với cốt liệu tròn có tỉ lệ thể tích tùy ý. Phương trình vi phân có dạng:

$$\frac{dc}{dt} = \frac{cv_2}{1-v_2t} D(c, c_2) \quad (5)$$

Hàm  $D$  trong biểu thức (5) có dạng giống như biểu thức (4), nên:

$$D(c, c_2) = 2 \frac{c_2 - c}{c_2 + c} \quad (6)$$

Với điều kiện:

$$c(1) = c^{eff}, \quad c(0) = c_1, \quad 0 \leq t \leq 1 \quad (7)$$

Kết hợp (5), (6), (7) ta có  $c^{eff}$  là nghiệm của phương trình:

$$\left( \frac{c_1}{c^{eff}} \right)^{1/2} \frac{c_2 - c^{eff}}{c_2 - c_1} = v_1 \quad (8)$$

Một đánh giá khá chính xác nữa cho vật liệu hai thành phần có thể kể đến là xấp xỉ tương tác 3 điểm (3 - point correlation approximation) của Pham và Torquato [11]. Ở đó đã bao gồm tính chất, tỉ lệ thể tích của các thành phần cũng như thông tin hình học bậc ba  $\xi_1, \xi_2$  của các cấu trúc vi mô của vật liệu:

$$c^{eff} = P_{\sigma_2}(c_0) = \left( \frac{v_1}{c_0 + c_1} + \frac{v_2}{c_0 + c_2} \right)^{-1} - c_0, \quad (9)$$

$c_0$  là lời giải của phương trình:

$$c_0 = P_{\xi_2}(c_0)$$

$P_{\xi_2}$  có dạng giống như  $P_{cv\alpha}$  trong (9), với  $\xi_\alpha$  tương ứng như  $v_\alpha$  ( $\alpha = 1, 2$ ). Các giá trị thông tin hình học bậc ba  $\xi_\alpha$  ( $0 \leq \xi_2 \leq 1, \xi_1 + \xi_2 = 1$ ) được xác định bằng phương pháp số của Torquato [12].

### 3. PHƯƠNG PHÁP SỐ

Để xác định các đặc trưng cơ lý tính của vật liệu, chúng ta xét trên phân tử thể tích đặc trưng RVE. Cấu trúc vi mô của RVE là phân bố ngẫu nhiên của các cốt cũng như vết nứt (lỗ rỗng). Tuy vậy, trong nhiều trường hợp RVE có cấu trúc vi mô có thể coi là phân bố tuần hoàn. Một phân bố hoàn toàn đều đặn như vậy không tồn tại trong các trường hợp thực tế, nhưng mô hình này được coi là gần đúng và trong phần này tác giả xây dựng mô hình phân tử hữu hạn dựa trên vật liệu tuần hoàn, với nhân tử hình vuông.

Để tìm hệ số dẫn, giả sử tác dụng lên phân tử thể tích đặc trưng RVE của vật liệu nghiên cứu ( $\Omega$ ) trường gradient nhiệt vi mô  $\nabla T$ . Theo định luật Fourier :

$$\mathbf{Q} = -c^{eff} \nabla T \quad (10)$$

Với  $\mathbf{Q}$  là vector dòng nhiệt vi mô, được xác định bằng trung bình thể tích của các vector dòng nhiệt vi mô trên ( $\Omega$ ):

$$\mathbf{Q} = \langle \mathbf{q}(\mathbf{x}) \rangle_\Omega \quad (11)$$

Trên nhân tuần hoàn là  $U$ , kích thước các cạnh trong mặt phẳng lần lượt là  $a_1, a_2$ . Trường dòng nhiệt vi mô tuần hoàn và có dạng:

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = \mathbf{q}(\mathbf{x} + n_1 a_1 \mathbf{e}_1 + n_2 a_2 \mathbf{e}_2) \quad (12)$$

Do điều kiện tuần hoàn của dòng nhiệt vi mô, nên ta có trung bình của dòng nhiệt trên  $U$  bằng với trung bình dòng nhiệt trên RVE.

$$\langle \mathbf{q}(\mathbf{x}) \rangle_U = \langle \mathbf{q}(\mathbf{x}) \rangle_\Omega = \mathbf{Q} \quad (13)$$

Trên nhân tử tuần hoàn phải thỏa mãn các phương trình:

$$\nabla \cdot \mathbf{q}(\mathbf{x}) = 0 \quad \in U. \quad (14)$$

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}) = -c(\mathbf{x}) \cdot \nabla T(\mathbf{x}) \quad \in U. \quad (15)$$

$$T(\mathbf{x}) = T^0 + \nabla T \cdot \mathbf{x} + T^*(\mathbf{x}), \quad \in U, \quad (16)$$

Trong đó:  $T^0$  - Nhiệt độ bên trong vật liệu;  $T^*(\mathbf{x})$  - Trường nhiệt nhiễu loạn do các cốt sinh ra và thỏa mãn điều kiện tuần hoàn:

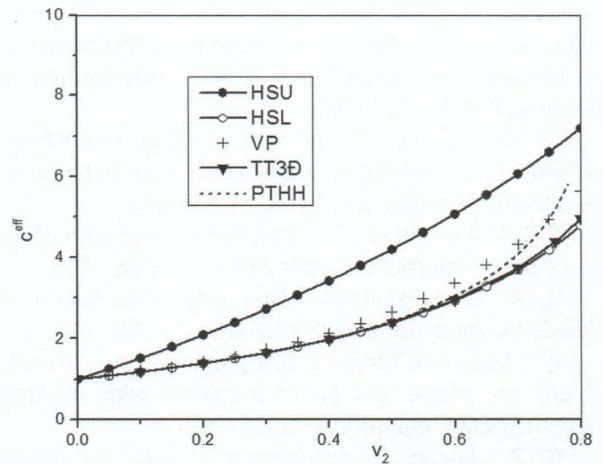
$$T^*(\mathbf{x}) = T^*(\mathbf{x} + n_1 a_1 \mathbf{e}_1 + n_2 a_2 \mathbf{e}_2), \quad (17)$$

$$\text{và } \mathbf{q}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}: \text{phân tuần hoàn } \in \partial U. \quad (18)$$

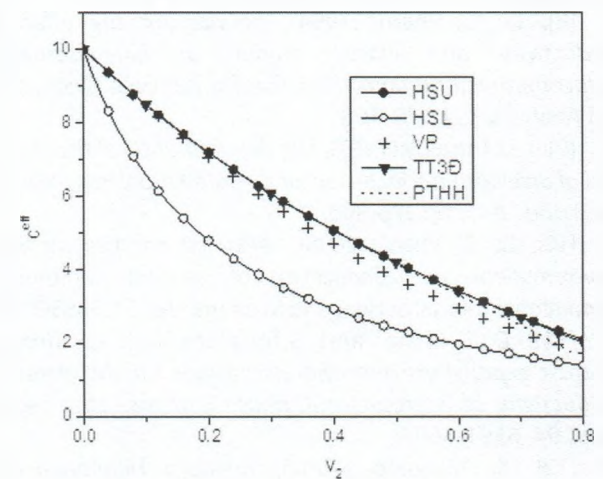
Giải các phương trình từ (14) - (18) sẽ xác định được trường dòng nhiệt trên các pha và dòng nhiệt trung bình trên  $U$ . Từ đó, thay vào (10) để các định hệ số dẫn hiệu dụng.

Trong bài báo này sử dụng phần mềm hỗ trợ là phần mềm có mã nguồn mở Cast3M. Cũng như cấu trúc của một chương trình tính toán theo phương pháp PTHH thông thường, chương trình tính toán cho bài toán hệ số dẫn hiệu dụng gồm các bước như sau:

- Thông số cơ bản (bài toán nhiệt, đẳng hướng);
- Xây dựng phần tử và tạo lưới;
- Đặc trưng hệ số dẫn của mỗi pha;
- Đặt tải và điều kiện tuần hoàn;
- Giải hệ các phương trình và xuất kết quả.



a)



b)

Hình 3.1: Hệ số dẫn ngang hiệu dụng

Lấy ví dụ vật liệu có hệ số dẫn các pha lần lượt là:  $c_1 = 1, c_2 = 10$  và  $c_1 = 10, c_2 = 1$ . Kết quả thể hiện trên Hình 3.1a và 3.1b với HSU và HSL là kết quả đường bao trên và dưới của Hashin-Strikman theo công thức (1), (2); VP - kết quả theo

phương pháp sơ đồ vi phân (8); TT3Đ - kết quả theo xấp xỉ tương tác 3 điểm (9) và PTHH - kết quả theo phương pháp PTHH. Kết quả theo PTHH nằm trong giới hạn của đường bao và gần trùng sát với kết quả theo tương tác 3 điểm khi tỉ lệ thể tích pha cốt nhỏ hơn 0,6.

#### 4. KẾT LUẬN

Bài báo có nội dung chính là xây dựng mô hình số theo phương pháp PTHH để xác định hệ số dẫn ngang của vật liệu cốt sợi đồng phương. Để kiểm nghiệm tính đúng đắn, kết quả số theo phương pháp phần tử hữu hạn đã được so sánh với kết quả theo phương pháp giải tích của các nghiên cứu trước. Phương pháp này cung cấp thêm một công cụ để đánh giá bước đầu hệ số dẫn ngang của vật liệu cốt sợi đồng phương.

#### Tài liệu tham khảo

- [1]. W. Voigt (1928), *Lehrbuch der Krystallphysik.*, Teuber, Leipzig.
- [2]. A. Reuss (1929), *Berechnung der Fließgrenze von Mischkristallen auf Grund der Plastizitätsbedingung für Einkristalle*, ZAMM 9, pp.49-58.
- [3]. D. A. G. Bruggeman (1935), *Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen I*, Annalen der Physik, 24, 636-663.
- [4]. R. Roscoe (1952), *The viscosity of suspensions of rigid spheres*, British Journal of Applied Physics, 3, 267-269.
- [5]. A. Einstein (1905), *Eine neue Berechnung der Molekuldimention*, Annales de Physique, 19, 289-306.
- [6]. T. Mori, & K. Tanaka (1973), *Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions*, Acta Metallurgica, 21, 571-574.
- [7]. Z. Hashin, S. Shtrickman (1962), *A variational approach to the theory of the effective magnetic permeability of multiphase materials*, J. Appl. Phys., 33, 3125-3131.
- [8]. D. C. Pham (1994), *Bounds for the effective conductivity and elastic moduli of fully-disordered multicomponent materials*, Archive for Rational Mechanics and Analysis, 127, 191-198.
- [9]. J. D. Eshelby (1957), *The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems*, Proc. R. Soc. Lond., A41, pp.376-396.
- [10]. D. C. Pham (2008), *Weighted effective medium approximations for conductivity of random composites*, International Journal of Heat and Mass Transfer, 51, 3355-3361.
- [11]. D.C. Pham and S.Torquato (2003), *Strong-contrast expansions and approximations for the effective conductivity of isotropic multiphase composites*, J. Appl. Phys., 94, 6591-6602.
- [12]. S. Torquato (2002), *Random Heterogeneous Materials*, Springer-Verlag, New York.

**Ngày nhận bài: 12/4/2021**

**Ngày chấp nhận đăng: 04/5/2021**

**Người phản biện: TS. Vũ Thị An Ninh**

**TS. Nguyễn Thị Quỳnh Trang**