

Xấp xỉ cốt liệu tương đương và mô phỏng số FFT xác định hệ số dẫn nhiệt vật liệu ba pha dạng nền - cốt liệu hai lớp

Using equivalent inclusion approach and FFT numerical simulation to determine the thermal conductivity of three phase material with doubly-coated inclusion

Nguyễn Văn Luật

Khoa Cơ khí, Đại học Công nghiệp Hà Nội

Email: nguyenvanluat@hau.edu.vn

Mobile: 0974368028i

Tóm tắt

Từ khóa:

Hệ số dẫn; cốt liệu tương đương; phương pháp biến đổi Fourier; Vật liệu composite.

Bài báo trình bày phương pháp cốt liệu tương đương (EI) và biến đổi Fourier (FFT) để tính hệ số dẫn nhiệt vĩ mô cho vật liệu ba pha dạng nền-cốt liệu tròn trong không gian hai chiều, trong đó các pha cốt liệu có hình dạng quả cầu lồng nhau hai lớp. Áp dụng xấp xỉ cốt liệu tương đương và mô phỏng số FFT cho một số mô hình vật liệu composite đẳng hướng trong không gian hai chiều. Các kết quả được so sánh với đánh giá của Hashin-Strikman (HS).

Abstract

Keywords:

Effective conductivity; equivalent inclusion; Fast fourier transformation method (FFT); Composite materials;

This article introduces the equivalent inclusion approach (EI) and Fast fourier transformation method (FFT) to calculate macroscopic conductivity for three phase material with doubly-coated circles inclusion in two-dimensional space. We applied equivalent approach and FFT methods to determine the effective conductivity for some isotropic composite material model in two-dimensional space. The results are compared with estimate of Hashin-Strikman (HS).

Ngày nhận bài: 06/07/2018

Ngày nhận bài sửa: 05/9/2018

Ngày chấp nhận đăng: 15/9/2018

1. GIỚI THIỆU

Đồng nhất hóa vật liệu không đồng nhất đang là hướng nghiên cứu quan trọng trong cơ học vật liệu và đã được nhiều nhà khoa học quan tâm nghiên cứu. Đối với các mô hình vật liệu tổ hợp dạng nền-cốt liệu trong tính toán và mô phỏng các hạt cốt liệu có thể được lý tưởng hóa hình học dưới dạng cốt liệu hình cầu hoặc trong không gian hai chiều là hình tròn [1]. Xác định tính chất hiệu quả hay tính chất vĩ mô của vật liệu tổ hợp có nhiều hướng tiếp cận khác nhau. Hướng tiếp cận đầu tiên là tính xấp xỉ cho các mô hình vật liệu như (Maxwel 1884, Voight 1928, Reuss 1929, Bruggeman 1935, Lewis and Nielsen 1970, Mori and Tanaka 1973....). Một hướng tiếp cận khác là xây dựng biên trên và biên dưới cho hệ số dẫn vĩ mô như (Hill 1952, Hashin and

Strikman 1962, Pham DC, 1994...). Ngoài ra các phương pháp số hiện nay cũng là cách tiếp cận hiệu quả trong việc xác định tính chất vĩ mô của vật liệu như phương pháp phần tử hữu hạn (FEM), phương pháp biến đổi Fourier (FFT). Trong bài báo này trình bày phương pháp xấp xỉ cốt liệu tương đương và phương pháp FFT để tính hệ số dẫn nhiệt vĩ mô cho một số mô hình vật liệu ba pha với pha cốt liệu có hình học dạng quả cầu lồng nhau hai lớp có cùng kích thước được sắp xếp tuần hoàn trong pha nền, trong đó có so sánh giữa các phương pháp và với đánh giá của Hashin-Strikman (HS).

2. XẤP XỈ CỐT LIỆU TƯƠNG ĐƯƠNG (EI)

Hệ số dẫn vĩ mô (C^{eff}) của vật liệu nhiều thành phần có thể được đánh giá nhờ giới hạn trên và giới hạn dưới, đối với vật liệu đẳng hướng nhiều thành phần trong không gian 2 chiều được viết dưới dạng [3]:

$$(C_R^{-1} - \bar{v}'_c \bar{\Lambda}_c^{-1} \bar{v}_c)^{-1} \leq C^{eff} \leq C_V - v'_c \Lambda_c^{-1} v_c \quad (1)$$

trong đó

$$v_c = \{v_1(C_1 - C_R), \dots, v_n(C_n - C_R)\}^T \quad (2)$$

$$v'_c = \left\{ \frac{1}{2} v_1 C_1, \dots, \frac{1}{2} v_n C_n \right\}^T \quad (3)$$

$$\Lambda_c = \{\Lambda_{\alpha\beta}^c\} \quad \alpha, \beta = 1, \dots, n$$

$$\Lambda_{\alpha\beta}^c = \frac{1}{2} v_\alpha C_\alpha \delta_{\alpha\beta} + \sum_{\gamma=1}^n \left(A_\gamma^{\alpha\beta} - v_\alpha C_R \sum_{\delta=1}^n C_\delta^{-1} A_\gamma^{\delta\beta} \right) C_\gamma \quad (4)$$

$$\bar{v}_c = \left\{ \frac{1}{2} v_1 (C_V^{-1} - C_1^{-1}), \dots, \frac{1}{2} v_n (C_V^{-1} - C_n^{-1}) \right\}^T \quad (5)$$

$$\bar{v}'_c = \left\{ -\frac{1}{2} v_1 C_1^{-1}, \dots, -\frac{1}{2} v_n C_n^{-1} \right\}^T \quad (6)$$

$$\bar{\Lambda}_c = \{\bar{\Lambda}_{\alpha\beta}^c\} \quad \alpha, \beta = 1, \dots, n$$

$$\bar{\Lambda}_{\alpha\beta}^c = \frac{1}{4} v_\alpha C_\alpha^{-1} \delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\gamma=1}^n \left(A_\gamma^{\alpha\beta} - v_\alpha C_V^{-1} \sum_{\delta=1}^n C_\delta A_\gamma^{\delta\beta} \right) C_\gamma^{-1} \quad (7)$$

Với C_V và C_R lần lượt là trung bình cộng số học Voigt và trung bình cộng điều hòa Reuss, C_α và v_α là hệ số dẫn và tỉ lệ thể tích của pha α . $A_\alpha^{\beta\gamma}$ là các tham số hình học pha bậc ba của vật liệu đã được xác định cho một số mô hình vật liệu.

Trong trường hợp vật liệu là các quả cầu lồng nhau hai pha (pha cốt liệu 1 được bọc bởi pha nền 2) trong không gian d chiều $A_\alpha^{\beta\gamma}$ có dạng [4]:

$$A_\alpha^{11} = A_\alpha^{22} = -A_\alpha^{12} = \frac{d-1}{d} v_1 v_2 \xi_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, \quad \xi_1 = 0, \xi_2 = 1. \quad (8)$$

mô hình này cận trên và dưới của (1) trùng nhau và trùng với một trong hai biên của HS tùy thuộc vào hệ số dẫn các pha [9], như vậy biểu thức chính xác để xác định hệ số dẫn hiệu quả:

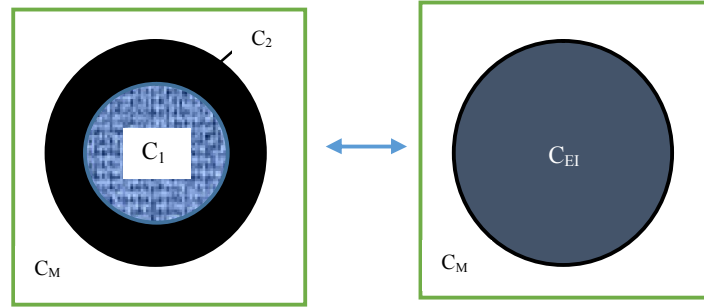
$$C^{eff} = C_V - v'_c \cdot \mathbf{\Lambda}_c^{-1} \cdot v_c \quad (9)$$

Thay (8) vào (9) nhận được biểu thức cho mô hình quả cầu lồng nhau hai pha trong không gian 2 chiều với pha nền (M) bao quanh pha cốt liệu (I):

$$C^{eff} = \left(\frac{v_I}{c_I + c_M} + \frac{v_M}{2c_M} \right)^{-1} - c_M \quad (10)$$

Xem xét mô hình vật liệu ba pha dạng nền-cốt liệu, trong đó cốt liệu bao gồm các quả cầu lồng nhau hai pha với tỉ lệ có thể tích các pha không thay đổi (hình 1). Thay cốt liệu hai lớp bằng cốt liệu tương đương với hệ số dẫn nhận được từ biểu thức (10) của mô hình quả cầu lồng nhau có dạng:

$$c_{EI} = \left(\frac{v_1^*}{c_1 + c_2} + \frac{v_2^*}{2c_2} \right)^{-1} - c_2, \quad \text{trong đó } v_1^* = \frac{v_1}{v_1 + v_2}, \quad v_2^* = \frac{v_2}{v_1 + v_2} \quad (11)$$



Hình 1. Mô hình square: cốt liệu hai lớp (bên trái) và cốt liệu tương đương (bên phải)

Từ đó hệ số dẫn vĩ mô cho vật liệu ba pha dạng nền-cốt liệu hai lớp trong không gian 2 chiều có thể tính theo công thức xấp xỉ cốt liệu tương đương:

$$C^{eff} = \left(\frac{v_{EI}}{c_{EI} + c_M} + \frac{v_M}{2c_M} \right)^{-1} - c_M \quad (12)$$

3. PHƯƠNG PHÁP BIẾN ĐỔI FOURIER (FFT)

Do tính chất tuần hoàn nên có thể xét trên một phần tử đặc trưng mà trên đó ứng xử của các vật liệu thành phần được mô tả bởi định luật Fourier:

$$\mathbf{J}(\mathbf{x}) = -\mathbf{C}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{x}) \quad (13)$$

trong đó, $\mathbf{E}(\mathbf{x})$ và $\mathbf{J}(\mathbf{x})$ lần lượt là trường gradient nhiệt độ và dòng nhiệt thỏa mãn phương trình cân bằng

$$\mathbf{E}(\mathbf{x}) = \nabla T(\mathbf{x}), \quad \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{x}) = 0 \quad (14)$$

Sử dụng các phép biến đổi Fourier cho các trường $\mathbf{E}(\mathbf{x})$, $\mathbf{J}(\mathbf{x})$ kết hợp với điều kiện cân bằng dẫn đến phương trình Lippman-Schwinger xem [10,11]. Từ đó nghiệm của phương trình (1) được tìm bởi sơ đồ lặp sau:

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{E}}^{i+1}(\xi) = -\hat{\Gamma}^0(\xi) \cdot [C(\xi) - C^0] * \hat{\mathbf{E}}^i(\xi), & \xi \neq 0 \\ \hat{\mathbf{E}}^{i+1} = \mathbf{E}^0, & \xi = 0 \end{cases} \quad (15)$$

$\Gamma^0(\xi)$ là toán tử Green phụ thuộc môi trường đồng nhất C_0 được xác định bởi $\Gamma^0(\xi) = \frac{\xi \otimes \xi}{\xi \cdot C^0 \xi}$

Chú ý rằng $\Gamma^0 \cdot C^0 * \mathbf{E}^i(\xi) = \mathbf{E}^i(\xi)$ với $\forall \xi \neq 0$ xem (Michel1999-[7]), phương trình (15) được viết lại dưới dạng sau:

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{E}}^{i+1}(\xi) = \hat{\mathbf{E}}^i(\xi) - \hat{\Gamma}^0(\xi) \cdot \hat{\mathbf{J}}^i(\xi), & \xi \neq 0 \\ \hat{\mathbf{E}}^{i+1} = \mathbf{E}^0, & \xi = 0 \end{cases} \quad (16)$$

trong đó \mathbf{E}^0 là gradient vĩ mô đồng nhất đối với phần tử đặc trưng, $\hat{\mathbf{J}}^i(\xi)$, $\hat{\mathbf{E}}^i(\xi)$ lần lượt là biến đổi Fourier của $\mathbf{J}^i(x)$, $\mathbf{E}^i(x)$. Liên hệ giữa trường dòng \mathbf{J} và trường gradient \mathbf{E} trong không gian Fourier được biểu diễn bằng biểu thức:

$$\hat{\mathbf{J}}(\xi) = C(\xi) * \hat{\mathbf{E}}(\xi) \quad (17)$$

trong đó ký hiệu "*" là tích "convolution". Biến đổi Fourier của tenxơ hệ số dẫn:

$$C(\xi) = \int_V C(\mathbf{x}) e^{-i\xi \cdot \mathbf{x}} d\mathbf{x} = \sum_{\alpha} C_{\alpha} I_{\alpha}(\xi) \quad (18)$$

với C_{α}, I_{α} lần lượt là tenxơ hệ số dẫn và hàm dạng của pha $\alpha, I_{\alpha}(\xi)$ được xác định theo Nemat-Nasser (1999-[8]):

$$I_{\alpha}(\xi) = \frac{1}{V} \int_{V_{\alpha}} e^{i\xi \cdot \mathbf{x}} dV \quad (19)$$

Thay các biểu thức (17), (18) vào (16) thu được

$$\begin{cases} \hat{\mathbf{E}}^{i+1}(\xi) = \hat{\mathbf{E}}^i(\xi) - \hat{\Gamma}^0(\xi) \cdot \sum_{\alpha} C_{\alpha} I_{\alpha}(\xi) * \hat{\mathbf{E}}^i(\xi), & \xi \neq 0 \\ \hat{\mathbf{E}}^{i+1} = \mathbf{E}^0, & \xi = 0 \end{cases} \quad (20)$$

Để xác định hệ số dẫn nhiệt vĩ mô của vật liệu composite, cho phần tử đặc trưng chịu tác dụng của gradient vĩ mô \mathbf{E}^0 . Khi quá trình lặp theo (20) hội tụ (số hạng đầu tiên $\mathbf{E}^1 = \mathbf{E}^0$), ta có

$$\mathbf{J}(\xi = 0) = C^{eff} \mathbf{E}^0 \quad (21)$$

trong đó, C^{eff} là hệ số dẫn hiệu quả của vật liệu composite. Từ đó rút ra thuật toán số để xác định hệ số dẫn nhiệt của vật liệu nhiều thành phần có cấu trúc tuần hoàn:

$$\text{Bước } i = 1: \hat{\mathbf{E}}^1(\xi) = 0 \quad \forall \xi \neq 0; \quad \hat{\mathbf{E}}^1(0) = \mathbf{E}^0$$

$$\hat{\mathbf{J}}^1(\xi) = C(\xi) * \hat{\mathbf{E}}^1(\xi)$$

$$\text{Bước } i: \quad \hat{\mathbf{E}}^i(\xi) \text{ và } \hat{\mathbf{J}}^i(\xi) \text{ đã biết}$$

Kiểm tra hội tụ

$$\hat{\mathbf{E}}^{i+1}(\xi) = \hat{\mathbf{E}}^i(\xi) - \hat{\Gamma}^0(\xi) \cdot \hat{\mathbf{J}}^i(\xi)$$

$$\hat{\mathbf{J}}^{i+1}(\xi) = C(\xi) * \hat{\mathbf{E}}^{i+1}(\xi)$$

Kiểm tra điều kiện hội tụ được xác định bằng biểu thức sau:

$$\frac{\|\hat{\mathbf{J}}^{i+1}(\xi) - \hat{\mathbf{J}}^i(\xi)\|}{\|\hat{\mathbf{J}}^i(\xi)\|} < \epsilon, \text{ với } \epsilon \text{ là sai số cho trước } (\epsilon = 10^{-3})$$

4. ĐÁNH GIÁ HASHIN-STRIKMAN (HS BOUND)

Hashin-Strikman dựa trên nguyên lý biến phân riêng đưa vào trường khả dĩ phân cực đã xây dựng được đánh giá trên và dưới cho hệ số dẫn vĩ mô của vật liệu nhiều thành phần (tỉ lệ thể tích mỗi pha là v_α) đẳng hướng trong không gian d chiều [5]

$$P_C((d-1)C_{min}) \leq C^{eff} \leq P_C((d-1)C_{max}), \quad (22)$$

trong đó, $P_C(C_*) = \left(\sum_{\alpha} \frac{v_{\alpha}}{C_{\alpha} + C_*} \right)^{-1} - C_*$, $C_{min} = \min\{C_1, \dots, C_n\}$, $C_{max} = \max\{C_1, \dots, C_n\}$

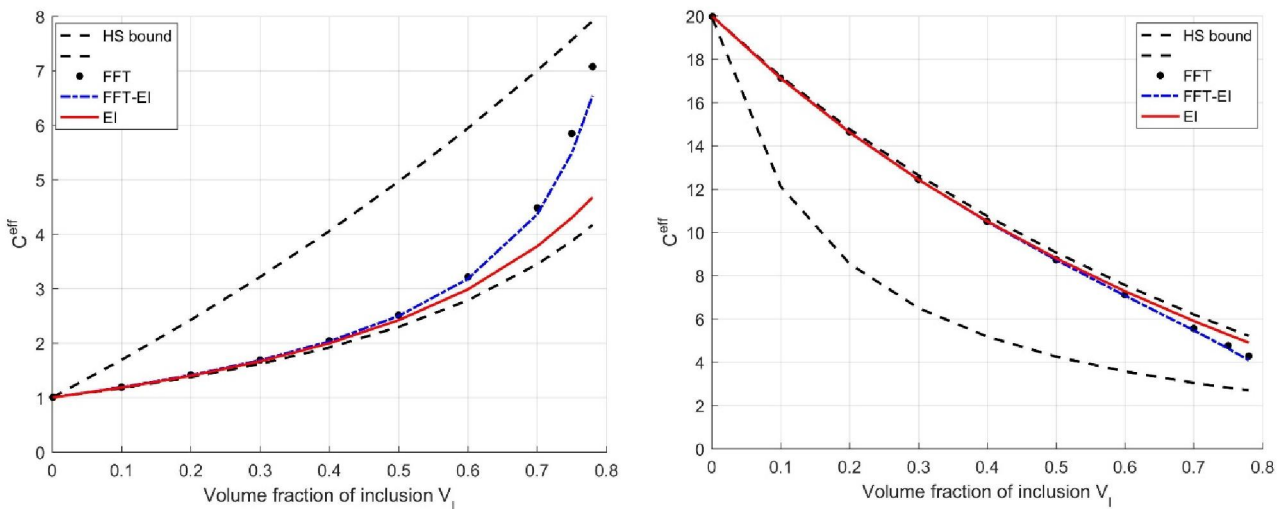
5. KẾT QUẢ SO SÁNH

Trong mục này đưa ra các kết quả tính và so sánh hệ số dẫn nhiệt vĩ mô giữa xấp xỉ cốt liệu tương đương (EI) với mô phỏng số FFT cho một số mô hình vật liệu nền-cốt liệu ba pha trong không gian 2 chiều. Trong đó pha cốt liệu hai lớp cùng kích thước được sắp xếp tuần hoàn dạng hình vuông (Square) hình 1, hình lục giác (Hexagonal) hình 3 và phân bố ngẫu nhiên (Random) hình 5. Ngoài ra dựa trên cách tiếp cận cốt liệu tương đương có thể kết hợp với FFT để cho ra kết quả FFT-EI, bằng cách thay cốt liệu hai lớp bằng cốt liệu tương đương sau đó áp dụng FFT cho mô hình vật liệu hai pha dạng nền-cốt liệu tròn [9].

Để minh họa cho các cách tiếp cận vừa trình bày ở trên, xét hai loại vật liệu ba pha với cốt liệu hai lớp có hệ số dẫn C_{I1}, C_{I2} nằm trong pha nền hệ số dẫn C_M có các thông số như sau:

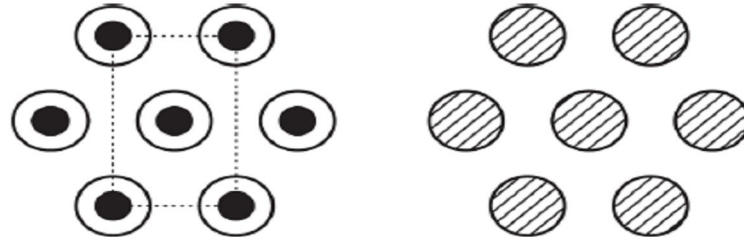
Vật liệu A: $C_M = 1, C_{I1} = 5, C_{I2} = 20$

Vật liệu B: $C_M = 20, C_{I1} = 1, C_{I2} = 5$

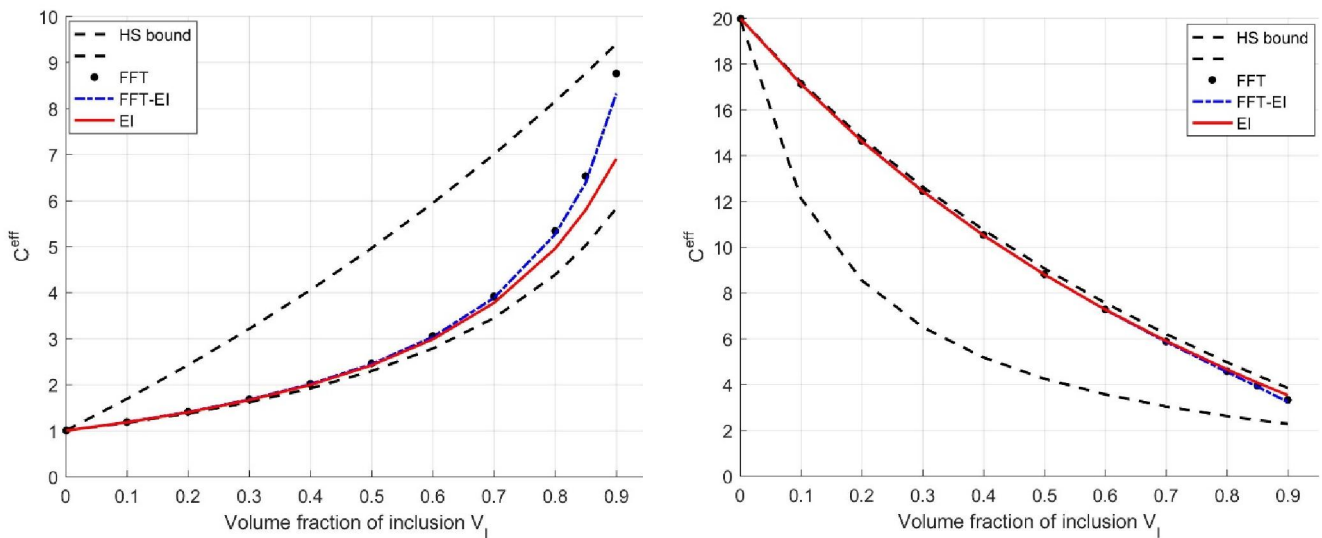


Hình 2. Kết quả so sánh cho mô hình Square: Vật liệu A (bên trái), vật liệu B (bên phải)

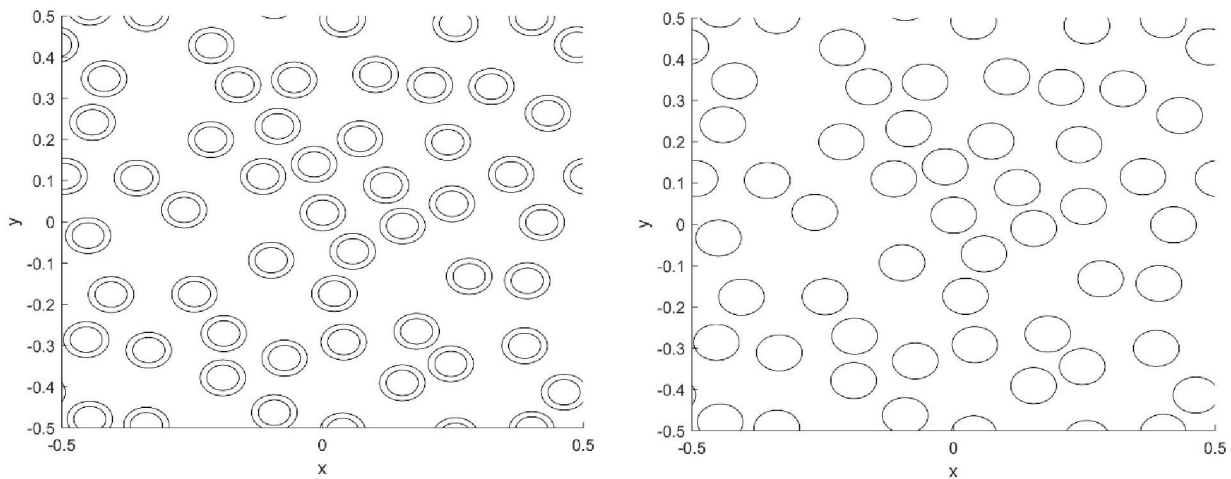
Kết quả so sánh cho các mô hình Square, Hexagonal, Random được thể hiện trên hình 2, 4 và 6 khi tỉ lệ thể tích cốt liệu $v_I = v_{I1} + v_{I2}$ thay đổi, $v_{I1} = v_{I2}$. Dễ thấy đối với vật liệu A, kết quả trực tiếp FFT và FFT-EI trong các mô hình đều rất gần nhau, xấp xỉ cốt liệu tương đương EI cũng luôn nằm trong đánh giá của HS và cho kết quả tốt khi cốt liệu có tỉ lệ thể tích các pha cốt liệu nhỏ. Đối với vật liệu B khi pha cốt liệu có hệ số dẫn nhỏ hơn pha nền thì kết quả giữa các phương pháp tiếp cận EI, FFT, FFT-EI gần như sát nhau và có sai lệch rất nhỏ. Điều đó chứng tỏ tính hiệu quả của các phương pháp tiếp cận được trình bày trong bài báo.



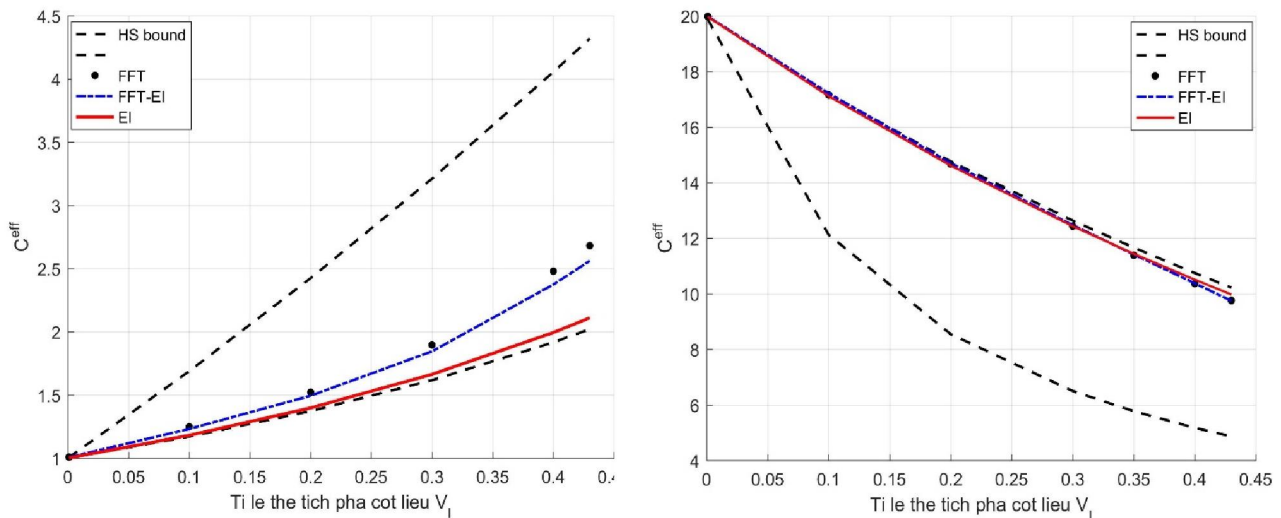
Hình 3. Mô hình cốt liệu tuần hoàn dạng Hexagonal (bên trái) và cốt liệu tương đương (bên phải)



Hình 4. Kết quả so sánh cho mô hình Hexagonal: Vật liệu A (bên trái), vật liệu B (bên phải)



Hình 5. Mô hình cốt liệu phân bố ngẫu nhiên Random (bên trái) và cốt liệu tương đương (bên phải)



Hình 6. Kết quả so sánh cho mô hình Random: Vật liệu A (bên trái), vật liệu B (bên phải)

6. KẾT LUẬN

Vật liệu nhiều thành phần dạng nền-cốt liệu rất phổ biến và trong thực tế thường gặp các vật liệu dạng nền-cốt liệu với cốt liệu có cấu trúc phức tạp hai lớp như trình bày ở trên. Có nhiều cách để đánh giá, xác định hệ số dẫn nhiệt vĩ mô của vật liệu. Trong cách tiếp cận của bài báo, cốt liệu hai lớp được thay bằng cốt liệu tương đương áp dụng cho mô phỏng số FFT và xây dựng được công thức xấp xỉ cốt liệu tương đương (EI) dựa trên mô hình quả cầu lồng nhau. Từ các kết quả so sánh cho thấy tính hiệu quả của phương pháp tiếp cận cốt liệu tương đương và mô phỏng số FFT, đặc biệt là công thức xấp xỉ cốt liệu tương đương được xây dựng tuy đơn giản nhưng cho kết quả tốt có thể áp dụng hiệu quả với một số mô hình vật liệu ba pha.

LỜI CẢM ƠN

Tác giả cảm ơn sự hỗ trợ của Trường Đại học Công nghiệp Hà Nội trong nghiên cứu, ngoài ra bài báo được thực hiện trong khuôn khổ đề tài nghiên cứu cơ bản mã số 107.02-2018.15 do quỹ Nafosted tài trợ.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. Azeem S, Zain-ul-Abdein M (2012). Investigation of thermal conductivity enhancement in bakelite-graphite particulate filled polymeric composite. *International Journal of Engineering Science* **52**, 30-40.
- [2]. Bonnet G (2007). Effective properties of elastic periodic composite media with fibers. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* **55**, 881-899.
- [3]. D.C.Phạm, L.D.Vũ, V.L.Nguyễn (2013). Bounds on the ranges of the conductive and elastic properties of randomly inhomogeneous materials. *Philosophical Magazine*, 2229-2249, Volume 93.
- [4]. Phạm D.C (1997). Estimations for the overall properties of some isotropic locally-ordered composites. *Acta Mechanica* **121**, 177-190.

- [5]. Hashin Z And Shtrikman S (1962). A variational approach to the theory of the effective magnetic permeability of multiphase materials. *J. Appl. Phys* **33**, 3125-3131.
- [6]. Mori T. and Tanaka K. (1973), Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metall.* **21**, 571-574.
- [7]. Michel J, Moulinec H, Suquet P (1999). Effective properties of composite materials with periodic microstructure: a computational approach. *Comput. Methods. Appl. Mech. Engrg* **172**, 109–143.
- [8]. Nemat-Nasser S, Hori M (1999). Micromechanics: overall properties of heterogeneous materials. *Amsterdam; New York: Elsevier*, 786p.
- [9]. Nguyen Trung Kien, Nguyen Van Luat, Pham Duc Chinh (2013). Estimating effective conductivity of unidirectional transversely isotropic composites. *Vietnam Journal of Mechanics*, 203-213, *Volume 35*.
- [10]. Nguyen Van Luat, Nguyen Trung Kien (2015). FFT-simulations and multi-coated inclusion model for macroscopic conductivity of 2D suspensions of compound inclusions. *Vietnam Journal of Mechanics*, 169-176, *Volume 37*.
- [11]. Nguyen Van Luat, Nguyen Trung Kien (2017). Mô phỏng số FFT hệ số dẫn vĩ mô vật liệu hai pha dạng nền-cốt liệu elliptic và các phương pháp xấp xỉ. *Tuyển tập công trình khoa học Hội nghị Cơ học toàn quốc lần thứ X, 12/2017, Tập 3, trang 749*.