



ANALYTICAL APPROXIMATION AND NUMERICAL SIMULATION OF TRANSPORT IN TWO-DIMENSIONAL PRIMITIVE SURFACE ARCHITECTED MATERIALS

Hoang Thi Minh Hai, Tong Anh Tuan, Tran Anh Tuan, Truong Dinh Thao Anh, Tran Bao Viet

University of Transport and Communications, No 3 Cau Giay Street, Hanoi, Vietnam

ARTICLE INFO

TYPE: Research Article

Received: 09/09/2025

Revised: 17/11/2025

Accepted: 10/12/2025

Published online: 15/12/2025

<https://doi.org/10.47869/tcsj.76.9.7>

* *Corresponding author*

Email: viettb@utc.edu.vn; Tel: +84911451080

Abstract: With the advancement of additive manufacturing technologies, architected materials are playing an increasingly important role in various practical applications. This study therefore focuses on the relationship between the geometry of two-dimensional Primitive triply periodic minimal surface (TPMS) structures and the effective transport properties of materials. The influence of the geometric parameter is investigated through its correlation with porosity (density), which serves as a key structural descriptor. A comprehensive set of numerical simulations is performed using the finite element method, in which the volume fraction of the inclusion phase varies from 0 to 1 and the conductivity contrast is extended to large values in order to capture different transport regimes. From these simulations, the effective conductivity is determined and compared with classical analytical models derived from micromechanics. The results indicate that classical formulations remain predictive, where the Hashin–Shtrikman lower bound (for cases with low reinforcement phase volume fraction) and the classical self-consistent approximation (for cases with high reinforcement phase volume fraction) exhibit good accuracy compared to other models in describing the conductivity behavior of the Primitive structure. This study contributes to a deeper understanding of the structure–property relationship in TPMS-based materials and proposes a reliable, simple, and practical analytical–numerical framework for the design of architected materials.

Keywords: Architected materials, permeability, conductivity, finite element method, micromechanics.



XẤP XỈ GIẢI TÍCH VÀ MÔ PHỎNG SỐ BÀI TOÁN LAN TRUYỀN TRONG VẬT LIỆU CẤU TRÚC MẶT CONG PRIMITIVE HAI CHIỀU

Hoàng Thị Minh Hải, Tống Anh Tuấn, Trần Anh Tuấn, Trương Đình Thảo Anh, Trần Bảo Việt*

Trường Đại học Giao thông vận tải, Số 3 Cầu Giấy, Hà Nội, Việt Nam

THÔNG TIN BÀI BÁO

CHUYÊN MỤC: Công trình khoa học

Ngày nhận bài: 09/09/2025

Ngày nhận bài sửa: 17/11/2025

Ngày chấp nhận đăng: 10/12/2025

Ngày xuất bản Online: 15/12/2025

<https://doi.org/10.47869/tcsj.76.9.7>

* Tác giả liên hệ

Email: viettb@utc.edu.vn; Tel: +84911451080

Tóm tắt. Với sự tiến bộ của công nghệ chế tạo bồi đắp, vật liệu có cấu trúc đặc biệt ngày càng đóng vai trò quan trọng trong nhiều ứng dụng thực tế. Nghiên cứu này tập trung vào mối quan hệ giữa hình học của cấu trúc tuần hoàn mặt cong tối thiểu (TPMS) dạng Primitive hai chiều và các đặc tính truyền dẫn hiệu dụng của vật liệu. Ảnh hưởng của tham số hình học được khảo sát thông qua mối quan hệ với độ rỗng (mật độ), vốn đóng vai trò như một chỉ số đặc trưng quan trọng của cấu trúc. Một bộ mô phỏng số toàn diện được thực hiện bằng phương pháp phân tử hữu hạn, trong đó tỷ lệ thể tích pha cốt thay đổi từ 0 đến 1 và hệ số dẫn có độ tương phản lớn nhằm phân ánh nhiều chế độ truyền dẫn khác nhau. Từ kết quả mô phỏng, hệ số dẫn hiệu dụng được xác định và so sánh với các mô hình giải tích kinh điển dựa trên cơ học vi mô. Kết quả cho thấy các công thức cổ điển vẫn giữ giá trị dự báo, trong đó cận dưới Hashin–Shtrikman (cho trường hợp mật độ pha cốt nhỏ) và xấp xỉ tự tương hợp cổ điển (cho trường hợp mật độ pha cốt lớn) thể hiện độ chính xác tốt so với các mô hình khác khi mô tả khả năng truyền dẫn của cấu trúc Primitive. Nghiên cứu này đóng góp vào việc hiểu sâu hơn mối quan hệ cấu trúc – tính chất trong vật liệu TPMS, đồng thời đề xuất một khung mô hình giải tích – số tin cậy, đơn giản và có tính ứng dụng cao trong thiết kế vật liệu cấu trúc.

Từ khóa: Vật liệu cấu trúc, hệ số thấm, hệ số dẫn, phân tử hữu hạn, cơ học vi mô.

@ 2025 Trường Đại học Giao thông vận tải

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Trong khoa học và kỹ thuật vật liệu, việc tìm kiếm những vật liệu có hiệu năng vượt trội và khả năng đa chức năng từ lâu đã trở thành một chủ đề trung tâm. Trước đây, các phương pháp chế tạo truyền thống như đúc, rèn hay gia công cơ khí thường chỉ thích hợp để tạo ra các khối vật liệu lớn, nhưng lại gặp hạn chế khi phải xử lý các cấu trúc bên trong phức tạp. Sự phát triển mạnh mẽ của công nghệ Chế tạo bồi đắp (Additive Manufacturing – AM) đã mở ra một cuộc cách mạng căn bản. Với nguyên lý xây dựng vật thể theo từng lớp trực tiếp từ mô hình số, AM đã loại bỏ phần lớn những ràng buộc của các công nghệ truyền thống, mang lại mức độ tự do hình học cao [1]. Điều này đã thúc đẩy sự ra đời của lĩnh vực vật liệu kiến trúc hoặc vật liệu có cấu trúc (architected materials) hay metamaterials, trong đó tính chất không còn được xác định chủ yếu bởi thành phần hóa học, mà phụ thuộc vào cấu trúc hình học vi mô được thiết kế chính xác. Nhờ khả năng này, vật liệu có thể được tùy chỉnh để đạt những tính chất độc đáo và đôi khi trái ngược với trực giác, chẳng hạn như tỷ số độ cứng – khối lượng vượt trội, hệ số Poisson âm (auxetic), hay khả năng hấp thụ năng lượng được lập trình. Những đặc tính mới mẻ này đã mở ra các cơ hội ứng dụng có tính chuyển đổi trong hàng không vũ trụ, y sinh học, và công nghệ robot [2,3].

Trong nhóm vật liệu kiến trúc, cấu trúc mạng dựa trên bề mặt tối thiểu tuần hoàn ba chiều (Triply Periodic Minimal Surfaces – TPMS) là chủ đề nghiên cứu hấp dẫn [4–6]. Về mặt toán học, TPMS là các bề mặt có độ cong trung bình bằng không tại mọi điểm và tuần hoàn theo ba phương trục giao. Đặc tính tối thiểu hóa diện tích này khiến chúng vừa nhẹ vừa hiệu quả về mặt cơ học. Một ưu thế nổi bật của TPMS so với các cấu trúc mạng thanh (strut-based lattice) truyền thống nằm ở hình học liên tục của chúng: trong khi mạng thanh chứa nhiều nút giao gây tập trung ứng suất và dễ khởi phát nứt gãy, thì TPMS được tạo thành từ các bề mặt liên tục, trơn và không tự cắt nhau. Chính “tính không nút” này cho phép phân bố ứng suất đồng đều hơn, cải thiện khả năng chịu tải, tăng độ bền hư hỏng và kéo dài tuổi thọ. Đồng thời, hệ thống lỗ rỗng (vật chất) liên thông giúp các cấu trúc TPMS đạt được hiệu quả vượt trội trong việc dẫn dòng chất lỏng và lan truyền. Nhờ vậy, TPMS được xem là nền tảng lý tưởng cho nhiều ứng dụng đa chức năng, bao gồm trao đổi nhiệt, dẫn dòng hoặc các tính chất cơ lý đặc biệt khác.

Mặc dù có nhiều nghiên cứu tập trung vào các đặc tính cơ học, nhiệt học và động học chất lưu của cấu trúc TPMS ba chiều (3D), thì các cấu trúc TPMS hai chiều (2D) – điển hình là cấu trúc Primitive (P-surface) – vẫn chưa nhận được sự quan tâm tương xứng. Về mặt hình học, chúng đơn giản hơn so với cấu trúc 3D, song lại đóng vai trò như những “khối xây dựng cơ bản” (fundamental building blocks) cho việc hiểu và phát triển các thiết kế phân cấp hoặc biến thiên phức tạp hơn [7,8]. Không chỉ có ý nghĩa lý thuyết, các cấu trúc 2D còn mang lại lợi ích thực tiễn rõ rệt: chi phí tính toán thấp trong mô phỏng số, tốc độ chế tạo cao hơn trong thực nghiệm, và đặc biệt phù hợp cho các ứng dụng dạng màng hoặc tấm, nơi hiệu năng cơ học trong mặt phẳng là quan trọng. Nhờ những đặc tính đó, chúng có tiềm năng ứng dụng trực tiếp trong các lĩnh vực như màng lọc tiên tiến, lõi nhẹ cho kết cấu sandwich ...

Bên cạnh vai trò trong cơ học, một đặc trưng nổi bật khác của các cấu trúc TPMS chính là khả năng lan truyền vật chất và dẫn dòng hiệu quả [9]. Các mạng lỗ rỗng liên thông và hình học đơn giản của cấu trúc Primitive cho phép chất lỏng, khí hoặc ion di chuyển qua lại với trở lực thấp, tạo điều kiện thuận lợi cho các ứng dụng trong lọc, khuếch tán, trao đổi ion hoặc lưu trữ năng lượng. Điều này mở ra triển vọng cho việc phát triển các màng lọc thế hệ mới có độ chọn lọc cao, các điện cực có khả năng trao đổi nhanh trong pin, hay các hệ thống trao đổi nhiệt – khối hiệu quả hơn.

Xuất phát từ khoảng trống nghiên cứu này, bài báo hiện tại tập trung khảo sát cấu trúc Primitive 2D với mục tiêu làm rõ vai trò của hình học trong việc chi phối các đặc tính chức năng quan trọng. Kết quả nghiên cứu được kỳ vọng sẽ không chỉ đóng góp cho nền tảng khoa học của vật liệu kiến trúc, mà còn mở hướng ứng dụng cho các hệ thống cần sự kết hợp giữa khả năng chịu cơ học và hiệu quả trong vận chuyển – lan truyền vật chất. Bài báo gồm 4 phần chính. Đầu tiên, tại Mục 2, bài báo sẽ giới thiệu tính chất cơ bản về cấu trúc mặt cong Primitive cho vật liệu tuần hoàn mặt cong tối thiểu (TPMS). Tiếp theo là phương trình cơ bản của hiện tượng truyền dẫn gồm dòng chảy Darcy, truyền nhiệt dạng Fourier và định luật truyền điện cơ bản (Mục 3). Các tính toán số trên cơ sở lý thuyết đồng nhất hoá vật liệu tuần hoàn được thực hiện tại Mục 4. Xấp xỉ giải tích nhằm dự báo các kết quả số được trình bày tại Mục 5. Cuối cùng là kết luận và một số kiến nghị.

2. VẬT LIỆU TUẦN HOÀN VỚI CẤU TRÚC PRIMITIVE

2.1 Phương trình mặt cong Schwarz Primitive

Các bề mặt tối thiểu tuần hoàn ba chiều (Triply Periodic Minimal Surfaces – TPMS) là những cấu trúc toán học tinh tế, có ý nghĩa quan trọng trong thiết kế vật liệu nhờ đặc tính hình học và vật lý đặc thù. Một trong những nghiên cứu có hệ thống đầu tiên về các bề mặt này được thực hiện bởi Hermann Amandus Schwarz vào thế kỷ 19, trong đó tác giả đã phân loại nhiều họ bề mặt tối thiểu tuần hoàn, bao gồm các dạng Primitive (P), Diamond (D) và Gyroid (G) ...

Mỗi bề mặt TPMS được xác định gián tiếp thông qua tập hợp các điểm thỏa mãn điều kiện:

$$F(x, y, z) = 0 \quad (1)$$

trong đó $F(x, y, z)$ là một hàm vô hướng có độ cong trung bình bằng 0.

Đối với bề mặt Primitive (P-surface) – một trong những dạng cơ bản và tiêu biểu nhất của TPMS – phương trình được viết như sau:

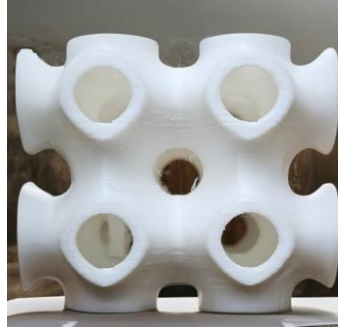
$$F(x, y, z) = \cos(2\pi x) + \cos(2\pi y) + \cos(2\pi z) - c = 0 \quad (2)$$

trong đó x, y, z là tọa độ Descartes, còn c là tham số điều chỉnh ảnh hưởng trực tiếp đến hình thái và độ rỗng của cấu trúc. Với giá trị điển hình $c = 0$, bề mặt Primitive phân chia không gian thành hai vùng rỗng liên thông nhưng không giao nhau, mỗi vùng chiếm thể tích bằng nhau. Mặc dù TPMS vốn là cấu trúc ba chiều, song có thể xây dựng các dạng hai chiều (2D) bằng cách xét mặt cắt hoặc giảm chiều phương trình. Đối với Primitive, dạng 2D có thể biểu diễn như:

$$F(x, y) = \cos(2\pi x) + \cos(2\pi y) + 1 - c = 0 \quad (3)$$

tương ứng với lát cắt tại mặt phẳng $z = 0$. Kết quả là mạng đường cong tuần hoàn, liên tục phản ánh bản chất topo đặc trưng của bề mặt P trong không gian 2D.

Các cấu trúc Primitive 2D có nhiều ứng dụng thực tiễn. Trong thiết kế kết cấu, chúng có thể được sử dụng làm lõi nhẹ cho tấm sandwich, nơi độ cứng trong mặt phẳng và khả năng hấp thụ năng lượng là những chỉ tiêu quan trọng. Cấu trúc Primitive – 2D có thể tạo hiệu ứng auxetic (vật liệu có hệ số nở ngang âm) cho phép hấp thụ năng lượng cao. Trong các hệ thống chất lỏng, mạng kênh liên tục giúp tăng cường vận chuyển khối và truyền nhiệt, phù hợp cho màng lọc và vi lưu chất. Trong lĩnh vực tản nhiệt, cấu trúc lỗ rỗng tuần hoàn cung cấp diện tích bề mặt lớn và đường dẫn vận chuyển có kiểm soát. Như vậy, cấu trúc Primitive 2D vừa là mô hình toán học đơn giản, vừa là kiến trúc vật liệu tiềm năng cho nhiều ứng dụng công nghệ.



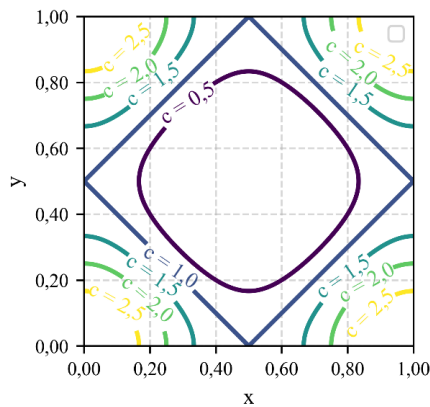
Hình 1. Mẫu cấu trúc tuần hoàn Primitive nhựa PLA chế tạo bằng in 3D.

2.2 Ảnh hưởng của tham số hình học và mối quan hệ với độ rỗng vật liệu

Tham số vô hướng c trong phương trình bề mặt Primitive quyết định trực tiếp hình dạng, và tính chất cơ học của cấu trúc. Giả sử vật liệu một pha, miền $F(x, y) < 0$ là phần rỗng, phần còn lại là khung đặc (xem Hình 1). Bằng cách thay đổi c , ta có thể kiểm soát kích thước cũng như mức độ liên thông của lỗ rỗng. Có thể phân biệt ba miền đặc trưng:

- Giá trị lớn: lỗ rỗng lớn, thành mảnh, dẫn tới độ rỗng cao và khối lượng riêng thấp. Cấu hình này có lợi cho thiết kế nhẹ và tăng cường tính thấm, song độ cứng và khả năng chịu tải giảm rõ rệt.
- Giá trị trung bình: kích thước lỗ rỗng và bề dày thành đạt trạng thái cân bằng. Đây thường là miền tối ưu giữa tính cơ học và tính thấm. Ứng suất phân bố đồng đều hơn và hiện tượng phá hỏng diễn ra chậm hơn so với miền c nhỏ.
- Giá trị nhỏ: vùng đặc chiếm ưu thế, lỗ rỗng thu hẹp và có thể biến mất. Khi đó độ rỗng giảm, khối lượng riêng tăng, cho độ cứng và độ bền cao hơn nhưng làm suy giảm khả năng vận chuyển môi chất.

Sự nhạy cảm của đặc tính cấu trúc đối với tham số c đặc biệt hữu ích cho bài toán tối ưu thiết kế. Bằng cách điều chỉnh c , có thể tạo ra các cấu trúc biến thiên chức năng (functionally graded), trong đó độ rỗng thay đổi theo không gian nhằm thỏa mãn đồng thời yêu cầu chịu tải và yêu cầu truyền dẫn. Ngoài ra, trong các mô phỏng số, việc thay đổi c cung cấp một phương pháp hệ thống để nghiên cứu mối quan hệ giữa hình học và các tính chất hữu hiệu như mô đun đàn hồi, độ bền gãy và khả năng hấp thụ năng lượng. Hình 2 miêu tả mặt cong cho các giá trị c khác nhau.



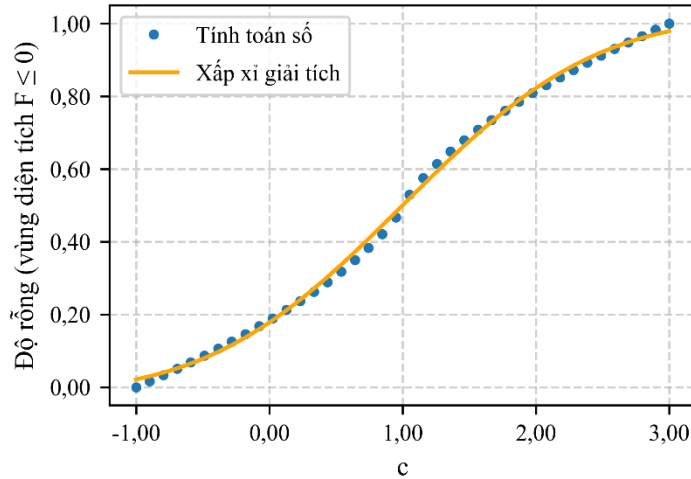
Hình 2. Mặt cong Primitive trong trường hợp 2D với các giá trị c thay đổi.

Nếu giả thiết mặt cong Primitive chia không gian thành 2 miền và miền bên trong là miền rỗng (với bài toán thấm) hoặc tổng quát là miền có đặc trưng lan truyền lớn hơn. Miền này sẽ được xác định bởi phương trình

$$F(x, y, z) < 0. \tag{4}$$

Tích phân không gian hàm $F(x, y, z)$ ta sẽ thu được mối quan hệ giữa độ rỗng và hệ số hình dạng (Hình 3). Quan hệ này có thể xấp xỉ bởi hàm lỗi (error function) như phương trình (5) với

$$f(c) \approx 1/2 + 0,52 \cdot erf(0,62(c - 1)). \tag{5}$$



Hình 3. Quan hệ độ rỗng (mật độ diện tích) và c .

3. PHƯƠNG TRÌNH TRUYỀN DẪN Ở TRẠNG THÁI DỪNG

Trong các hệ vật chất và kỹ thuật, quá trình truyền dẫn xuất hiện dưới nhiều dạng khác nhau như dòng chảy chất lỏng trong môi trường rỗng (định luật Darcy), dẫn nhiệt trong vật rắn (định luật Fourier), và dẫn điện trong vật liệu dẫn (định luật Ohm). Dù biểu hiện ở những lĩnh vực khác nhau, các hiện tượng này có bản chất chung: sự vận chuyển một đại lượng vật lý (khối lượng, năng lượng nhiệt, hoặc điện tích) dưới tác dụng của một gradient thế (áp suất, nhiệt độ, hay điện thế). Ở trạng thái dừng, trường vật lý liên quan không thay đổi theo thời gian, và phương trình chi phối thường có dạng tổng quát:

$$\mathbf{q} = -K\nabla T \tag{6}$$

trong đó \mathbf{q} là mật độ dòng (lưu lượng thế tích, dòng nhiệt, hay dòng điện), ∇T là gradient của thế truyền dẫn (áp suất, nhiệt độ, hoặc điện thế), và K là hệ số đặc trưng cho khả năng dẫn (độ thấm thủy lực, hệ số dẫn nhiệt, hoặc độ dẫn điện). Biểu thức này cho thấy sự tương đồng sâu sắc giữa các hiện tượng, đồng thời cung cấp cơ sở lý thuyết chung để xây dựng mô hình, phân tích và tính toán trong thiết kế vật liệu cũng như cấu trúc kỹ thuật.

Như đã nêu, trong trạng thái dừng/ổn định (steady state), các đại lượng vật lý không thay đổi theo thời gian, tức là:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\cdot) = 0. \tag{7}$$

Điều này dẫn đến việc phương trình chi phối chỉ còn phụ thuộc vào sự cân bằng không gian giữa dòng vào và dòng ra, thông qua phương trình bảo toàn

$$\nabla \cdot \mathbf{q} = -\nabla \cdot (K\nabla T) = \mathbf{S}. \quad (8)$$

Với \mathbf{S} là nguồn hút, trong trường hợp \mathbf{S} bằng không ta có dạng phương trình Laplace, ngược lại ta có một trong những phương trình căn bản của vật lý là phương trình Poisson. Bảng 1 liệt kê một số dạng bài toán truyền dẫn cơ bản và các đại lượng tương ứng. Mặc dù dạng toán học của phương trình (8) là tương đối đơn giản, việc giải quyết bài toán phụ thuộc rất lớn vào cấu trúc cụ thể của vật liệu. Cần lưu ý thêm rằng, hiện tượng thấm trong Bảng 1 mô tả phương trình thấm theo quy luật Darcy và bỏ qua tổn thất cục bộ.

Bảng 1. Một số hiện tượng truyền dẫn cơ bản.

| Hiện tượng | Đại lượng thế (T) | Đại lượng dòng (q) | Hệ số dẫn (K) | Nguồn \mathbf{S} |
|---------------------|-----------------------|------------------------|-------------------------------------|---------------------------------------|
| Thấm (Darcy) | Áp suất | Lưu lượng thể tích | Hệ số thấm ($m^2 \cdot s$) | Nguồn bom/hút ($m^3/(m^3 \cdot s)$) |
| Dẫn nhiệt (Fourier) | Nhiệt độ | Mật độ dòng nhiệt | Hệ số dẫn nhiệt ($W/(m \cdot K)$) | Nguồn nhiệt thể tích (W/m^3) |
| Dẫn điện (Ohm) | Thế điện | Mật độ dòng điện | Hệ số dẫn điện (S/m) | Nguồn dòng/kích thích (A/m^3) |

4. TÍNH TOÁN SỐ BÀI TOÁN LAN TRUYỀN

Để mô phỏng tính chất dẫn hiệu dụng của vật liệu tuần hoàn dạng TPMS bằng phương pháp phần tử hữu hạn (FEM), trước hết cần xây dựng phần tử đặc trưng (unit cell) đại diện cho cấu trúc tuần hoàn, thường được trích xuất từ phương trình bề mặt ẩn và sau đó tạo lưới phần tử 2D/3D trong các ứng dụng tạo lưới, có thể trực tiếp dùng ABAQUS hoặc các ứng dụng tạo lưới chuyên biệt [10]. Vật liệu được gán ở đây là hai pha, với các miền rắn và rỗng (hoặc pha nền và pha cốt) có hệ số dẫn khác nhau. Bài toán tính toán thường được thiết lập dưới dạng phân tích tĩnh tuyến tính, trong đó đặt điều kiện biên tuần hoàn hoặc tương đương bằng cách áp gradient thế đại diện (ví dụ: nhiệt độ, điện thế, áp suất) trên các mặt đối diện của ô cơ sở. Sau khi giải, phân bố trường thế và trường dòng được xuất ra, từ đó tiến hành tính trung bình thể tích để thu được quan hệ giữa thông lượng trung bình và gradient áp đặt để xác định hệ số dẫn hiệu dụng K^{eff} .

Theo lý thuyết đồng nhất hóa vật liệu, các tính toán được tính trên nhân tử tuần hoàn hình vuông (U). Giả sử đặt lên (U) một trường thế có gradient ∇T , véc tơ dòng \mathbf{q} , khi đó mối quan hệ giữa \mathbf{q} và ∇T có thể xác định trên miền U , dựa vào các quan hệ sau:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{q}(\mathbf{x}) &= 0 && : (U) \\ \mathbf{q}(\mathbf{x}) &= -K(\mathbf{x})\nabla T(\mathbf{x}) && : (U) \\ T(\mathbf{x}) &= T_0 + \nabla T \cdot \mathbf{x} + T^*(\mathbf{x}) && : (U) \\ T^*(\mathbf{x}) &: \text{tuần hoàn} && : (\partial U) \\ (\mathbf{q}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n})\mathbf{n} &: \text{tuần hoàn} && : (\partial U) \end{aligned} \quad (9)$$

Với $T(\mathbf{x}), T_0, T^*(\mathbf{x})$ lần lượt là trường thế ban đầu và trường hỗn loạn tuần hoàn gây ra bởi sự bất đồng nhất của vật liệu, \mathbf{n} là véc tơ pháp tuyến ngoài trên biên ∂U , \mathbf{x} ký hiệu vị trí điểm vật chất.

Áp dụng giải hệ phương trình (9) cho cấu trúc hình học: (1) -pha nền với $K_1 = 1$ và $F(x, y, x) > 0$; (2) – pha cốt với $K_2 = 10$ và $F(x, y, x) \leq 0$ ta thu được các kết quả tương ứng tại Bảng 2 với các giá trị c thay đổi như mô tả tại Hình 2, 3. Việc tính toán dựa trên phần mềm ABAQUS với sự hỗ trợ thông qua các giao diện mã hoá bằng PYTHON. Toàn bộ quá trình tính được thực hiện bằng tệp mã PYTHON, gồm tạo lưới phần tử, tính chất vật lý, tính toán thông qua ABAQUS CEA, xuất kết quả và vẽ hình. Chi tiết các bước như sau:

- Tạo Hình học cơ sở, gồm: tạo mô đun, gán vật liệu, tạo vùng, tạo lưới;
- Áp điều kiện biên tuần hoàn;
- Tạo bước tính, tạo công việc, tính toán.
- Xuất kết quả trường NT11, tính dòng, tính hệ số dẫn hiệu dụng và các hình vẽ.

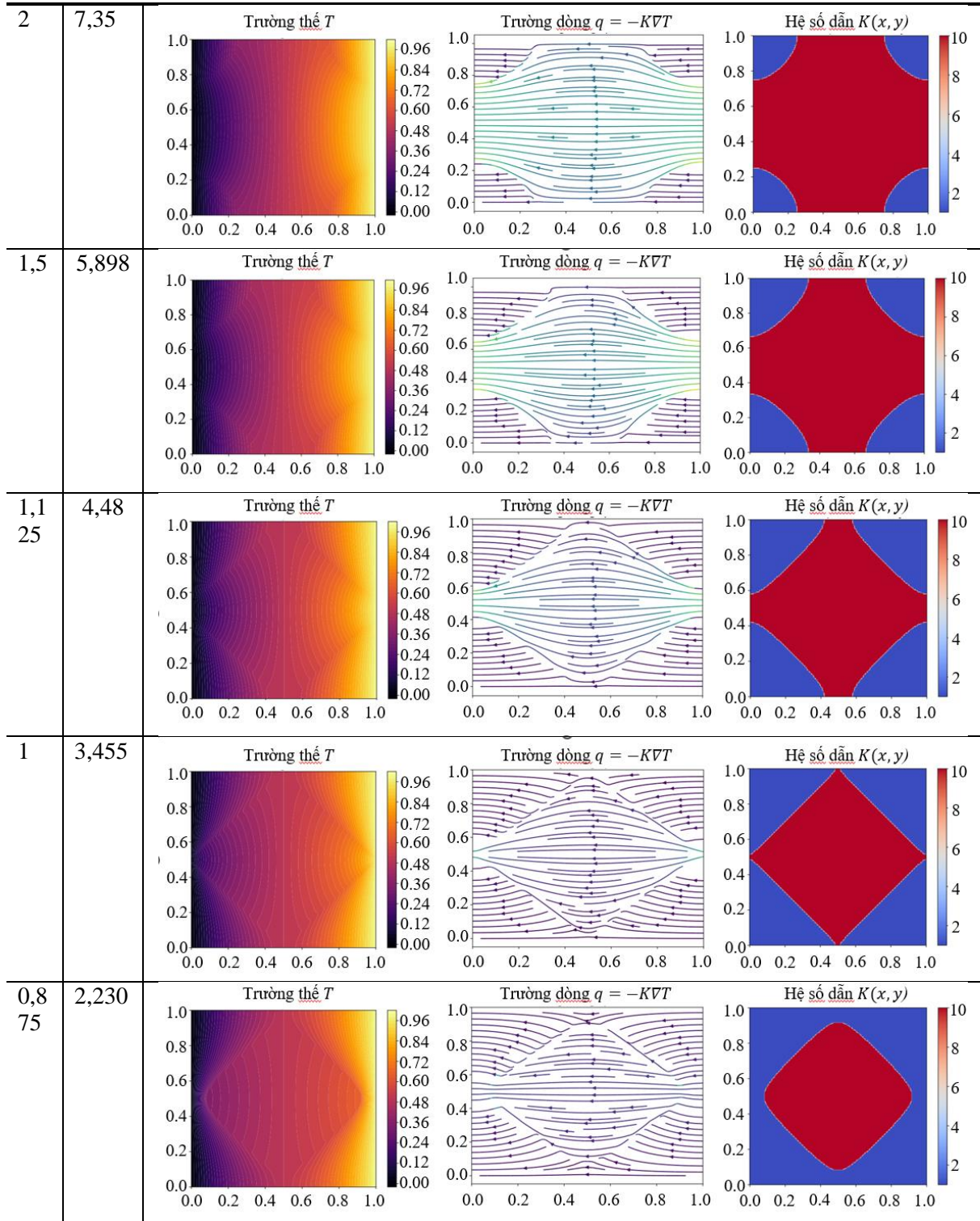
Hệ số dẫn hiệu dụng tính cho phương x được tính theo công thức

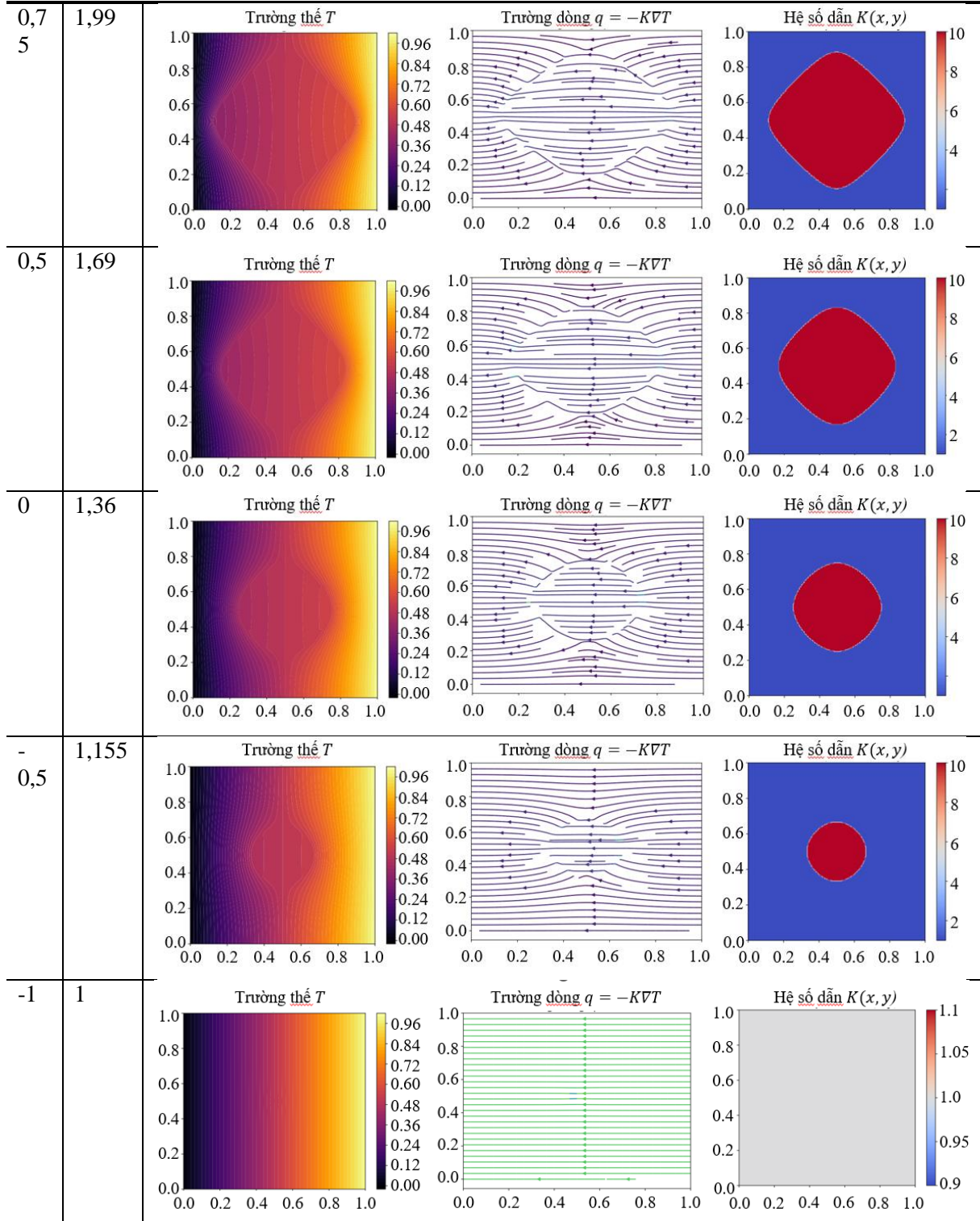
$$K^{eff} = -\langle q \rangle / \langle \nabla T \rangle . \quad (10)$$

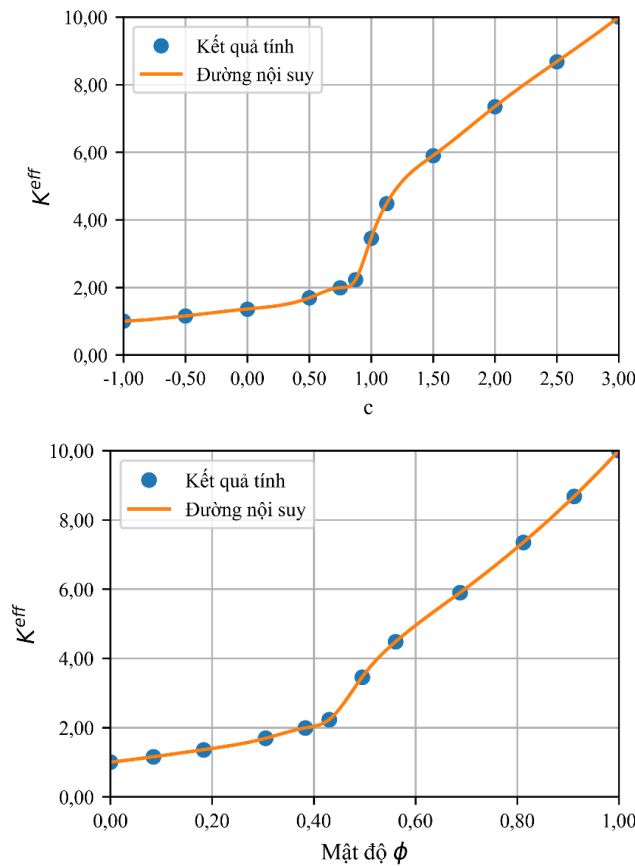
Trong đó $\langle \rangle$ thể hiện giá trị trung bình theo miền diện tích. Kết quả mối quan hệ K^{eff} với độ rỗng (mật độ) và tham số hình dạng được thể hiện trên Hình 4. Dễ dàng nhận ra rằng trong trường hợp một pha có độ dẫn lớn, độ dẫn hiệu dụng sẽ tăng theo độ tăng của mật độ diện tích của pha cốt. Cần lưu ý thêm công thức (9, 10) mô tả tính toán bài toán dẫn theo một phương x . Trong khi cấu trúc vật liệu tại Bảng 2 là cấu trúc dị hướng. Việc tính toán cần áp đặt cho các trường hợp cụ thể. Ngoài ra, với điều kiện ở trạng thái dừng và các tính chất vật liệu không thay đổi, các lời giải số của hệ (9) có thể thực hiện được không khó khăn bằng các kỹ thuật tính toán phần tử hữu hạn thông thường trong trường hợp vật liệu có độ tương phản cao (trường hợp hệ số dẫn của pha cốt K_2 tiến tới giá trị 0 hoặc tỉ số K_2/K_1 tiến tới giá trị rất lớn).

Bảng 2. Kết quả phân bố trường thế, trường dòng, hệ số dẫn cho các giá trị c thay đổi.

| c | K^{eff} | | | |
|-----|-----------|--|--|--|
| 3 | 10 | | | |
| 2,5 | 8,68 | | | |







Hình 4. Quan hệ giữa hệ số dẫn hiệu dụng với c và mật độ diện tích.

5. XẤP XỈ GIẢI TÍCH HỆ SỐ DẪN HIỆU DỤNG

Trong nghiên cứu vật liệu cấu trúc, việc xác định giá trị hiệu dụng của các tính chất cơ học hoặc dẫn nhiệt là rất quan trọng để thiết kế và tối ưu hóa ứng dụng thực tế. Do hình học của các cấu trúc TPMS là phức tạp và không đồng nhất theo không gian, nên việc tìm lời giải chính xác cho các phương trình truyền dẫn hoặc ứng suất – biến dạng trong toàn bộ cấu trúc là rất khó khăn hoặc gần như không khả thi. Vì vậy, việc xây dựng và kiểm tra các công thức xấp xỉ khả thi trở thành bước cần thiết. Các công thức xấp xỉ này giúp ước lượng giá trị hiệu dụng dựa trên dữ liệu thực nghiệm hoặc dữ liệu tính toán số học, mà không cần giải trực tiếp toàn bộ bài toán trường không gian phức tạp.

Dựa trên quan hệ tại Hình 4, cũng như sự biến đổi cấu trúc không gian tại Bảng 2, chúng ta có thể nhận thấy sự thay đổi rõ rệt trạng thái quanh giá trị $c=1$ (độ rỗng 0,5). Điều đó dẫn đến việc khá khó để có công thức phù hợp cho toàn bộ sự thay đổi của mật độ. Việc sử dụng hàm mũ hoặc lượng giác xấp xỉ cũng không đạt được độ chính xác cao. Trong bài báo này chúng tôi đề xuất hướng xem xét áp dụng các công thức xấp xỉ vi mô cổ điển để đánh giá kết quả giá trị hiệu dụng phụ thuộc mật độ. Các phương pháp được xem xét gồm các đánh giá Hashin-Shtrikman cũng như phương pháp tự tương hợp và tự tương hợp mở rộng. Đây là các phương pháp theo đánh giá sơ bộ là phù hợp với tập dữ liệu thu được từ mô phỏng số. Một số công thức cơ bản sẽ được giới thiệu tiếp theo đây, chi tiết hơn có thể tham khảo tại các tài liệu gần đây.

Trong nghiên cứu vật liệu đa pha, việc ước lượng giá trị hiệu dụng của các tính chất cơ học hoặc dẫn nhiệt là rất quan trọng. Khi hình học vi cấu trúc phức tạp, các lời giải chính xác thường khó hoặc không khả thi, do đó cần áp dụng các mô hình xấp xỉ dựa trên lý thuyết vi cơ học. Một trong những phương pháp phổ biến là phương pháp Tự tương hợp (Self-Consistent, viết tắt SC) [11], trong đó mỗi pha được xem như nằm trong một môi trường hiệu dụng đại diện cho toàn bộ vật liệu. Giả thiết này cho phép mô phỏng tương tác giữa các pha, từ đó ước lượng giá trị hiệu dụng thông qua hệ phương trình phi tuyến:

$$\sum_i f_i (K_i - K^{eff}) A_i = 0. \quad (11)$$

Trong đó f_i là tỷ lệ thể tích của pha i , K_i là hệ số dẫn, A_i là hàm dạng phụ thuộc hình học và tính chất vật liệu. Chi tiết về cách tính hàm dạng này có thể tham khảo tại tài liệu phù hợp về cơ học vi mô [12]. Cụ thể, A_i trong bài toán 2 chiều với cốt liệu hình tròn có thể tính theo công thức như sau:

$$A_i = \frac{2K^{eff}}{K_i + K^{eff}}. \quad (12)$$

Xấp xỉ tự tương hợp có những hạn chế nhất định đặc biệt khi tính toán trong trường hợp hệ số dẫn của pha cốt hướng tới giá trị 0, hoặc trong các trường hợp vật liệu rỗng. Để khắc phục, phương pháp Generalized Self-Consistent (GSC) [13] hay Tự tương hợp tổng quát mở rộng, khái quát ý tưởng của phương pháp Tự tương hợp bằng cách nhúng một hạt trong một lõi bao quanh (coated inclusion) và môi trường hiệu dụng, giúp mô phỏng tương tác pha chính xác hơn và tăng độ chính xác khi tỷ lệ pha thay đổi hoặc khi có nhiều pha. Công thức GSC cho độ dẫn hiệu dụng có dạng:

$$(1 - f_M)(K_1 - K^{eff})A_1 + \sum_i f_i (K_i - K^{eff})A_i = 0. \quad (13)$$

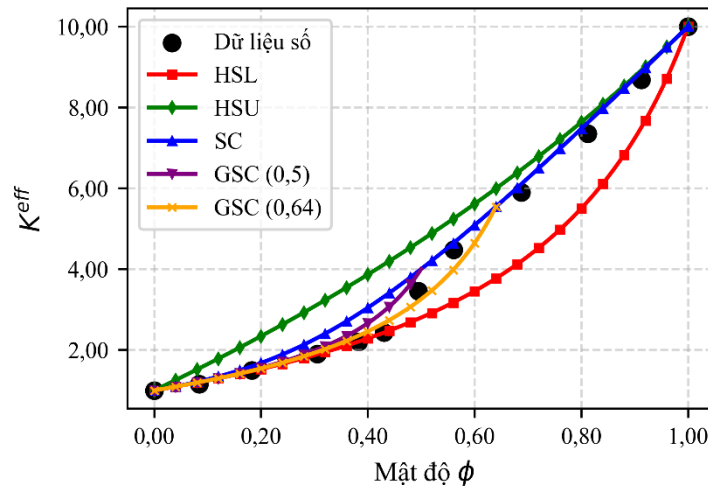
Trong đó K_1 là độ dẫn pha nền, f_M là độ chặt tối đa phụ thuộc hình học hạt và sự phân bố pha, nhiều trường hợp được xem như hệ số tự do trong phương trình.

Để đánh giá khoảng giá trị hợp lý, các giới hạn Hashin-Shtrikman (HS) [14] được sử dụng, cung cấp giới hạn trên và dưới chặt chẽ cho giá trị hiệu dụng. Công thức Hashin-Shtrikman cho độ dẫn hai pha ($K_2 > K_1$) với tỷ lệ thể tích pha cứng f trong trường hợp 2 chiều là:

$$Upperbound (HSU): K_{HS}^+ = ((1 - f)/(K_1 + K_2) + f/(2K_2))^{-1}, \quad (14)$$

$$Lowerbound (HSL): K_{HS}^- = ((1 - f)/(2K_1) + f/(K_1 + K_2))^{-1}. \quad (15)$$

Việc kết hợp các phương pháp trên cho phép ước lượng giá trị hiệu dụng trong phạm vi hẹp, đồng thời cung cấp cơ sở so sánh với các dữ liệu thực nghiệm hoặc các hàm xấp xỉ khác. Các phương pháp này đặc biệt hữu ích khi trường không gian phức tạp, như trong vật liệu TPMS, ở đó lời giải chính xác gần như không khả thi. Chi tiết tính toán được thể hiện ở Hình 5, trong đó SC, HSU, HSL, GSC (0,5), GSC (0,64) lần lượt ký hiệu của đánh giá trên, dưới, phương pháp Tự tương hợp, và phương pháp Tự tương hợp tổng quát mở rộng với độ chặt là 0,5 và 0,64. Với phương pháp tự tương hợp, giả thiết rằng cốt liệu là hình tròn. Khi đó hàm A_i không phụ thuộc vào giá trị hình dạng của cấu trúc Primitive. Từ Bảng 2 và Hình 5, thấy rằng với vật liệu cấu trúc Primitive, hai chiều, đánh giá HSL và xấp xỉ GSC cho kết quả khá tốt khi giá trị mật độ nhỏ (nhỏ hơn 0,4). Trong khi đó với giá trị mật độ từ 0,6 trở lên, xấp xỉ SC và đánh giá HSU cho kết quả tốt. Kết quả này là quan trọng, cho phép định hướng các nghiên cứu tiếp theo liên quan đến việc sử dụng các hàm đánh giá trong dự báo hệ số hiệu dụng của dạng vật liệu có cấu trúc.



Hình 5. Xấp xỉ giải tích dự báo liên hệ giữa hệ số dẫn hiệu dụng với mật độ diện tích.

6. KẾT LUẬN

Nghiên cứu này đã phân tích mối quan hệ giữa hình học của cấu trúc Primitive hai chiều và đặc tính truyền dẫn hiệu dụng của vật liệu thông qua mô phỏng số và so sánh với các công thức giải tích kinh điển. Kết quả cho thấy tham số hình học có mối quan hệ phi tuyến với độ rỗng, qua đó ảnh hưởng trực tiếp đến hệ số dẫn hiệu dụng K^{eff} . Các mô phỏng phần tử hữu hạn với nhiều mức thể tích pha và độ tương phản hệ số dẫn đã cung cấp cơ sở dữ liệu toàn diện, qua đó khẳng định độ chính xác của một số mô hình vi cơ học. Trong đó, đánh giá HSL và xấp xỉ GSC cho kết quả khá tốt khi giá trị mật độ nhỏ (nhỏ hơn 0,4), và xấp xỉ SC và đánh giá HSU cho kết quả tốt khi mật độ pha cốt lớn (từ 0,6 trở lên).

Bên cạnh những kết quả đạt được, nghiên cứu này cũng mở ra nhiều triển vọng phát triển. Việc mở rộng phân tích sang cấu trúc ba chiều sẽ phản ánh sát thực tế hơn của các vật liệu TPMS và cho phép khảo sát sâu hơn sự tương tác giữa hình học và tính chất truyền dẫn. Ngoài ra, việc nghiên cứu các dạng hình học khác như Gyroid, Diamond hay Neovius sẽ giúp làm rõ sự khác biệt trong đáp ứng truyền dẫn giữa các loại TPMS. Một hướng quan trọng khác là kết hợp các kết quả mô phỏng với thí nghiệm, như chế tạo mẫu bằng công nghệ in 3D để đo đạc và kiểm chứng các đặc tính truyền dẫn. Sự kết hợp giữa giải tích, mô phỏng số và kiểm chứng thực nghiệm sẽ tạo nên một khung nghiên cứu toàn diện trong tiếp cận vấn đề, nâng cao độ tin cậy và tính ứng dụng của các mô hình. Những kết quả này không chỉ đóng góp vào hiểu biết cơ bản về mối quan hệ cấu trúc – tính chất của TPMS mà còn gợi mở tiềm năng ứng dụng rộng rãi trong các lĩnh vực như thoát nước, vật liệu trao đổi nhiệt, và năng lượng.

LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Trường Đại học Giao thông vận tải (ĐH GTVT) trong đề tài mã số T2025-CT-013.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. K. Tran Quoc, L.B. Nguyen, V.H. Luong, H. Nguyen Xuan, Machine learning for predicting mechanical behavior of concrete beams with 3D printed TPMS, Vietnam Journal of Mechanics, 44 (2022) 538–584. <https://doi.org/10.15625/0866-7136/17999>

- [2]. M. Benedetti, A. du Plessis, R.O. Ritchie, M. Dallago, S.M.J. Razavi, F. Berto, Architected cellular materials: A review on their mechanical properties towards fatigue-tolerant design and fabrication, *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 144 (2021) 100606. <https://doi.org/10.1016/j.mser.2021.100606>
- [3]. A. Garg, A. Sharma, W. Zheng, L. Li, A review on artificial intelligence-enabled mechanical analysis of 3D printed and FEM-modelled auxetic metamaterials, *Virtual and Physical Prototyping*, 20 (2025) e2445712. <https://doi.org/10.1080/17452759.2024.2445712>
- [4]. F.L. Rashid, N.M.L. Al Maimuri, M.A. Al-Obaidi, M.A. Eleiwi, A. Ameen, S. Ahmad, A. Chibani, M. Kezzar, E.B. Agyekum, Enhancing heat transfer across applications with triply periodic minimal surface (TPMS) structures: A comprehensive review, *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, 216 (2025) 110460. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2025.110460>
- [5]. I. Mat Samudin, N.A. Mohd Radzuan, A.B. Sulong, Q. Ma, A.H. Azman, W.F.H. Wan Zamri, Stress strain curve analysis of sheet based TPMS structures in quasi static compression test: A review, *Journal of Materials Research and Technology*, 36 (2025) 5757–5796. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2025.04.168>
- [6]. B.A. Le, B.V. Tran, T.S. Vu, Q.B. Nguyen, H.Q. Nguyen, X. Chateau, Anisotropy and Mechanical Characteristics of Ultra-High Performance Concrete and Its Interpenetrating Phase Composite With Triply Periodic Minimal Surface Architectures, *Journal of Applied Mechanics*, 91 (2024) 091008. <https://doi.org/10.1115/1.4065901>
- [7]. N.K. Choudhry, T.K. Nguyen, V. Nguyen-Van, B. Panda, P. Tran, Auxetic lattice reinforcement for tailored mechanical properties in cementitious composite: Experiments and modelling, *Construction and Building Materials*, 438 (2024) 137252. <https://doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2024.137252>
- [8]. Y. Xu, B. Šavija, Auxetic cementitious composites (ACCs) with excellent compressive ductility: Experiments and modeling, *Materials & Design*, 237 (2024) 112572. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2023.112572>
- [9]. Y. Xu, Z. Meng, R.J.M. Bol, B. Šavija, Spring-like behavior of cementitious composite enabled by auxetic hyperelastic frame, *International Journal of Mechanical Sciences*, 275 (2024) 109364. <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2024.109364>
- [10]. B.V. Tran, D.C. Pham, T.H.G. Nguyen, Equivalent-inclusion approach and effective medium approximations for elastic moduli of compound-inclusion composites, *Archive of Applied Mechanics*, 85 (2015) 1983–1995. <https://doi.org/10.1007/s00419-015-1031-6>
- [11]. B.V. Tran, D.C. Pham, M.D. Loc, M.C. Le, An adaptive approach for the chloride diffusivity of cement-based materials, *Computers and Concrete*, 23 (2019) 145–153. <https://doi.org/10.12989/CAC.2019.23.2.145>
- [12]. L. Dormieux, D. Kondo, F.J. Ulm, *Microporomechanics*, John Wiley & Sons, 2006.
- [13]. B.V. Tran, A simple model to predict effective conductivity of multicomponent matrix-based composite materials with high volume concentration of particles, *Composites Part B: Engineering*, (2019) 106997. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2019.106997>
- [14]. S. Torquato, *Random heterogeneous materials: microstructure and macroscopic properties*, Springer Science & Business Media, 2013.