

1218 圧電問題に対する三次元辺要素の開発

Development of 3-D Edge Element for Piezoelectric Problem

○正 永井 学志 (岐阜大) 梅村 公博 (名大)

Gakuji NAGAI, Gifu University, 1-1 Yanagido, Gifu, 501-1193
Kimihiro UMEMURA, Nagoya University, Furo-cho, Chikusa-ku, Nagoya, 464-8602

For piezoelectric problem, instead of the conventional finite element procedure, an alternative procedure has been proposed. Its advantage is that the resulting global stiffness matrix becomes positive definite. In the procedure, vector potential ψ deriving electric displacement is introduced with the restriction of no volumetric charge, while voltage ϕ (scalar potential) is discarded. Using the T-method in computational electro-magnetics, we discuss discretization and electric boundary conditions in three dimensions. The discretization should be done with edge finite elements, and the electric boundary conditions are limited to equipotential voltage on each electrode and no surface charge.

Key Words: Semi-Positive Definiteness, Electro-Mechanical Coupling, Vector potential

1. はじめに

圧電問題に対する解析手法としては、従来、変位 u と電位 ϕ —スカラポテンシャル— を未知変数とする有限要素法(以下、スカラ型 FEM)が用いられてきた^[1]。ところで、圧電材料には過大な電気・機械的な負荷により材料非線形性の生じることが知られている。この非線形性を熱力学的な系の安定・不安定問題と考えてモデル化しようとすると、従来のスカラ型 FEM によって導出される全体剛性行列は不定値、すなわち鞍点型の汎関数から導出されることから、解析手順の煩雑化は避け難い。

一方で最近になって、変位 u はそのままに、スカラポテンシャル ϕ に換えてベクトルポテンシャル ψ を未知変数とする有限要素法(以下、ベクトル型 FEM)が提案されている^[2]。この独立変数の入れ換えは、構造解析における変位法と応力法の双対性、回路解析における節点解析法と閉路解析法の双対性と同種のものである。このベクトル型 FEM の利点は、導出される全体剛性行列が半正定値行列になるという点にある。しかし、この手法に対する数値実験による検討は、2 次元問題までしかなされておらず、電気的境界条件の付与法に至ってはほとんど言及されていない。

そこで本稿では、3 次元圧電問題に対するベクトル型 FEM を、原著^[2]とは少し異なる視点で整理する。これにより、材料非線形性を熱力学的視点から扱う場合におけるベクトル型 FEM の優位性、3 次元問題における電気的境界条件の付与法、離散化における辺要素の必要性が明らかとなる。

2. 線形圧電構成則の各種形式とそれらの特徴

圧電問題における線形構成則(*e*-形式)は

$$\begin{aligned}\sigma &= \mathbf{c}^E : \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{e} \cdot \mathbf{E} \\ \mathbf{D} &= -\mathbf{e}^T : \boldsymbol{\varepsilon} + \kappa^E \cdot \mathbf{E}\end{aligned}\quad (1)$$

で与えられ、スカラ型 FEM に適合した形式である。ここに、 σ , $\boldsymbol{\varepsilon}$, \mathbf{D} , \mathbf{E} はそれぞれ応力テンソル、歪みテンソル、電気変位ベクトル、電界ベクトルであり、 \mathbf{c}^E , \mathbf{e} , κ^E はそれぞれ弾性テンソル、圧電テンソル、誘電テンソルである。一方、ベクトル型 FEM では、構成則(1)の電気変位 \mathbf{D} と電界 \mathbf{E} を入れ替えた次のもの(*h*-形式)が適合する。

$$\begin{aligned}\sigma &= \mathbf{c}^D : \boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{h} \cdot \mathbf{D} \\ \mathbf{E} &= -\mathbf{h}^T : \boldsymbol{\varepsilon} + \beta^E \cdot \mathbf{D}\end{aligned}\quad (2)$$

ここに、 \mathbf{c}^D , \mathbf{h} , β^E は *e*-形式(1)から導出される係数である。

圧電材料の材料非線形解析への熱力学に基づく拡張を前提とするとき、*e*-形式(1)ではなく *h*-形式(2)を用いるほうが有利であるという理由は、*h*-形式が内部エネルギー密度

$$U(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{D}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{c}^D : \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbf{h} \cdot \mathbf{D} + \frac{1}{2} \mathbf{D} \cdot \beta^E \cdot \mathbf{D} \quad (3)$$

の 1 階偏微分で定義されるためである。一般に、内部エネルギーは、熱力学における基本的要請からすべての独立変数に関して下に凸となる。したがって、*h*-形式(2)を行列・ベクトル表記したとき、その係数行列には正定値性がある。なお、熱力学では、内部エネルギーの独立変数を示量変数、それに共役な変数は力に関係していることから示強変数と呼ばれる。他方、*e*-形式(1)は、内部エネルギー密度(3)を電気に関してのみ部分的にルジャンドル変換したエネルギー密度

$$H^E(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{E}) = U(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{D}(E)) - \mathbf{E} \cdot \mathbf{D}(E) \quad (4)$$

から導出されるものである。この H^E は、示量変数 $\boldsymbol{\varepsilon}$ に関して下に凸、逆に示強変数 \mathbf{E} に関して上に凸となっている。したがって、構成則(1)を行列・ベクトル表記したとき、その係数行列は不定値行列となる。

そこで、最小性のある熱力学的に完全なエネルギー密度(3)に換えて、極小性しか言えない不完全なエネルギー密度を用いれば、圧電材料の非線形構成則を容易にモデル化できる。実際、物性物理学において相転移の現象論的記述は、ランダウモデルと呼ばれる不完全なエネルギー密度を用いてなされる^[3]ことが多いため、材料非線形解析のためにはスカラ型 FEM よりもベクトル型 FEM のほうが好都合である。

3. ベクトルポテンシャル型有限要素法の支配方程式

3.1. 圧電問題の支配方程式

\mathbf{b} を物体力ベクトル、 q^v を体積電荷密度とする。領域 V における変位場と電位場に関する基本式は、それぞれ

$$\nabla \cdot \sigma + \mathbf{b} = 0, \quad \sigma = \sigma(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{E}), \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \nabla^s \mathbf{u} \quad (5)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = q^v, \quad \mathbf{D} = \mathbf{D}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{E}), \quad \mathbf{E} = -\nabla \phi \quad (6)$$

で与えられる。ここに、式(5)、(6)それぞれの第2式は、線形ならば e -形式(1)となる。また、境界条件については、変位場に関して変位境界 S^u と応力境界 S^t 、電位場に関して電位境界 S^ϕ と電荷境界 S^q があり、それぞれ

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{on } S^u, \quad \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \bar{\mathbf{t}} \quad \text{on } S^t \quad (7)$$

$$\phi = \bar{\phi} \quad \text{on } S^\phi, \quad \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = \bar{q}^s \quad \text{on } S^q \quad (8)$$

で与えられる。ここに、 \mathbf{n} は境界 S の外向き単位法線ベクトル、 $\bar{\mathbf{t}}$ と \bar{q}^s はそれぞれ表面力ベクトルと表面電荷密度である。

3.2. 電気に関する微分方程式の書き替え

まず、式(6) 第3式について、ベクトル解析の定理から、

$$\exists \phi \text{ s.t. } \mathbf{E} = -\nabla \phi \Leftrightarrow \nabla \times \mathbf{E} = \mathbf{0} \quad (9)$$

すなわち、電界 \mathbf{E} の非回転が言える。さらに、摩擦やイオンドーピング等による帶電という特殊な場合を除けば、体積電荷密度は $q^v = 0$ に限定できる。このとき、式(6) 第1式について、再びベクトル解析の定理から、

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0 \Leftrightarrow \exists \psi \text{ s.t. } \mathbf{D} = \nabla \times \psi \quad (10)$$

すなわち、電位変位 \mathbf{D} を導くベクトルポテンシャル ψ の存在が言える。したがって、式(9)、(10) から、式(5)、(6) に $q^v = 0$ の制約を加えた微分方程式は、

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\epsilon}, \mathbf{D}), \quad \boldsymbol{\epsilon} = \nabla^s \mathbf{u} \quad (11)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{E} = \mathbf{E}(\boldsymbol{\epsilon}, \mathbf{D}), \quad \mathbf{D} = \nabla \times \psi \quad (12)$$

と書き換えることができる。ここに、式(11)、(12) それぞれの第2式は、線形ならば h -形式(2)となる。ただし、ベクトルポテンシャル ψ には、スカラ関数の勾配分の任意性があることから、別途 ゲージ固定の条件が必要となる。

3.3. 電気に関する境界条件の書き替え

電気的境界条件(8)に対応するベクトルポテンシャル ψ に関する境界条件への書き換えは、次の制約のもと可能である。すなわち、各電極 S_i^q に印加されるのは等電位のみ、かつ電荷境界 S^q で $\bar{q}^s = 0$ 、すなわち電極以外の表面からは電気変位 \mathbf{D} が漏れない、とする。なお、 $\bar{q}^s = 0$ の制約は、圧電体を取り巻く空気層まで考えると実用上の問題はない。このような制約は、ベクトル型 FEM が電気部分に関して応力法や閉路解析法に相当する手法であるためやむを得ず、熱力学的な構成則モデリングを優先させた代償と考えられる。

まずは、無漏れ境界条件 $\mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = \bar{q}^s = 0$ を書き換える。Fig.1 に示すように、解析領域 V を相異なる電極が二分されるように任意面 S_A で仮想的に切断する。このとき、仮想切断面から漏れ出す電荷の総量 Q は、無漏れ条件から切断面の位置に依存せずある一定値をとる。すなわち、

$$Q \equiv \int_{S_A} \mathbf{D} \cdot \mathbf{n}_A dS = \text{stairlike Func.} \quad (13)$$

である。ここに、 \mathbf{n}_A は注目する自由体側からみた仮想切断面 S_A の外向き法線ベクトルである。式(13)は、式(12) 第3式とストークスの定理より、

$$Q = \int_{S_A} (\nabla \times \psi) \cdot \mathbf{n}_A dS = \int_{l_A} \psi \cdot t_{l_A} dl \quad (14)$$

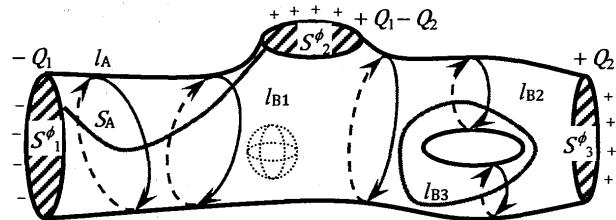


Fig.1 Electric boundary condition for vector potential

と变形できる。ここに、 l_A は電荷境界 S^q と切断面 S_A の交差線であり、 t_{l_A} はその単位接線ベクトル（注目する自由体側を外部からみたときに反時計回りとなる向きを正）である。

続いて、電極毎に等電位という境界条件を書き換える。電極面は等電位ゆえ、電極面と電界は直交する。すなわち、

$$\mathbf{E} \times \mathbf{n} = \mathbf{0} \quad \text{on } S^\phi \quad (15)$$

ただし、このままでは電位の情報が欠落するので、電極間の電位差 $\Delta \bar{\phi}_i$ の定義を用いて、これを保持する。すなわち、Fig.1 に示すように電極間を結ぶ任意の曲線を l_{Bi} すると、この曲線に沿って \mathbf{E} の曲線への射影を線積分して、

$$\int_{l_{Bi}} \mathbf{E} \cdot t_{l_{Bi}} dl = -\Delta \bar{\phi}_i \quad (16)$$

とできる。

4. 離散化と実装

変位 \mathbf{u} の場については通常の節点要素による補間のままでよい。一方、ベクトルポテンシャル ψ の場は、計算電磁気学における議論によると式(12)が curl-curl 型の方程式であるため、辺要素による補間が好ましい^[4]。なお、辺要素 e では、その辺 k の単位接線ベクトルを t_{ek} として、スカラ未知変数を

$$\psi_{ek} \equiv \int_{k-\text{th edge}} \psi \cdot t_{ek} dl \quad (17)$$

で定義する。離散化方程式は、これらの補間を用いて、式(11)、(12) それぞれの第1式と等電位境界条件(15)、(16) にガラーキン法を適用することにより得られる。なお、この定式化的過程から、電界 \mathbf{E} の精度がスカラ型 FEM に比べて悪化することは予想できる。

この離散化方程式を線形化して連立一次方程式とし、これを直接法で解く場合には、全体剛性行列の不定性をなくすため、ベクトルポテンシャル ψ に対するゲージ固定が陽に必要となる。そこで今回は、無漏れ境界上に各電極を結ぶ一要素幅のバンド領域を設けて、その内部の辺の自由度をすべて互いに従属させ、それ以外の無漏れ境界上の辺の自由度を固定する。また、曲線 l_{Bi} をこのバンド領域内に限定する。さらに、領域内部と電極内の辺に対して木・補木分解を行い、木に相当する辺の自由度を固定する。

参考文献

- 1) H. Alrik and T.J.R. Hughes, *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol.2, pp151-157, 1970
- 2) C.M. Landis, *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol.55, pp613-628, 2002
- 3) 中村編, 強誘電体と構造相転移, 裳華房, 1988
- 4) 五十嵐ほか, 新しい計算電磁気学, 培風館, 2003