

3次元圧電問題のベクトルポテンシャル型有限要素法における共役勾配法の性能

Efficiency of conjugate gradient solver for vector-potential finite element analysis of three-dimensional piezoelectric problem

佐藤司¹⁾, 永井学志²⁾

Tsukasa Sato and Gakuji Nagai

1)学士 岐阜大学大学院 工学研究科 数理デザイン工学専攻 (〒501-1193 岐阜県岐阜市柳戸1-1)

2)博(工) 岐阜大学 工学部 数理デザイン工学科 (〒501-1193 岐阜県岐阜市柳戸1-1)

An advantage of the vector-potential FEM, which has been proposed for piezoelectric problems, is the semi-positive definiteness of its resulting global stiffness matrix. The conventional conjugate gradient method for linear systems can be applied to this class of the problems. We show its applicability to three dimensional analyses through numerical experiments.

Key Words : Vector potential, Edge-nodal element, Conjugate gradient method

1. はじめに

圧電材料は圧力を加えると電圧が生じ(圧電効果), 電圧を加えると歪みが生じる(逆圧電効果)材料である。このような圧電材料は, 主にライターやガスコンロの着火装置, またスピーカーや水中ソナー, 超音波モータなどの振動素子として用いられている。

従来, このような圧電材料に対する数値解析手法として, 変位 \mathbf{u} と電位 — スカラポテンシャル — ϕ を未知変数とするスカラポテンシャル型有限要素法(以下, スカラ型 FEM) が用いられてきた。しかし, スカラ型 FEM によって導出される全体剛性行列は不正定値行列となるため, 連立 1 次方程式の解法として反復法を適用するには工夫が必要となる^[1]。

そのような中で近年, 変位 \mathbf{u} はそのままにし, 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 を未知変数とするベクトルポテンシャル型有限要素法(以下, ベクトル型 FEM) が提案されている^[2]。このベクトル型 FEM では, 対応する汎関数が下向きに凸となる長所がある。一方で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, これを有限要素法の範疇で適切に取り扱うためには辺・節点混合要素により離散化する必要がある。この離散化によるとき, 全体剛性行列は半正定値行列になるので連立 1 次方程式の解法として共役勾配法を使うことが可能となる。また 3 次元問題を解くという観点から見ても, 解くべき総自由度数が大きくなることから, 直接法を使うより共役勾配法に代表される反復法を使うのが望ましい。

そこで本論文では数値実験を通して, 3 次元圧電問題の辺・節点要素を用いたベクトル型 FEM に対する, 前処理付き共役勾配法の適用性について検討する。

2. ベクトル型 FEM の支配方程式

圧電問題は, 機械的な問題と電気的な問題におけるそれぞれの支配方程式および境界条件によって記述される境界値問題である。

従来から用いられているスカラ型の支配方程式は,

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{c}^E : \boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{e} \cdot \mathbf{E}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \nabla^s \mathbf{u} \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = q^v, \quad \mathbf{D} = \mathbf{e}^T : \boldsymbol{\varepsilon} + \mathbf{k}^E \cdot \mathbf{E} \quad \mathbf{E} = -\nabla \phi \quad (2)$$

で与えられる。ここで $\boldsymbol{\sigma}$ は応力テンソル, $\boldsymbol{\varepsilon}$ はひずみテンソル, \mathbf{D} は電束密度ベクトル, \mathbf{E} は電界ベクトルであり, \mathbf{c}^E は 4 階の弾性テンソル, \mathbf{e} は 3 階の圧電テンソル, \mathbf{k}^E は 2 階の誘電テンソルである。また境界条件は

$$\mathbf{u} = \bar{\mathbf{u}} \quad \text{on } S^u, \quad \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{t} \quad \text{on } S^t \quad (3)$$

$$\phi = \bar{\phi} \quad \text{on } S^\phi, \quad \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = q^s \quad \text{on } S^q \quad (4)$$

で与えられる。ここで $\bar{\mathbf{u}}$, $\bar{\phi}$, \mathbf{t} , q^s はそれぞれ既知の変位ベクトル, 電位, 表面力ベクトル, 表面電荷密度である。また \mathbf{n} は境界 S の外向き単位法線ベクトルである。

(1) 支配方程式の書き換え

スカラ型の支配方程式に電気的な制約条件を加え, 変数の入れ換えをすることでベクトル型の支配方程式に書き換えることができる。まず式(2)第3式について, ベクトル解析の定理より

$$\exists \phi \text{ s.t. } \mathbf{E} = -\nabla \phi \Leftrightarrow \nabla \times \mathbf{E} = \mathbf{0} \quad (5)$$

である。また摩擦などによる帯電という特殊な場合を除

けば体積電荷 q^v をゼロに制限できるので、このとき式(2) 第1式について、再びベクトル解析の定理より

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = 0 \Leftrightarrow \exists \psi \text{ s.t. } \mathbf{D} = \nabla \times \psi \quad (6)$$

である。これより電気変位 \mathbf{D} を導くベクトルポテンシャル ψ の存在がいえる。

以上でスカラ型の支配方程式の独立変数 ϕ を、ベクトル型の独立変数 ψ と入れ替えることが可能となり、式(1)、(2)の支配方程式は

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} = \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{c}^D : \boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{h} \cdot \mathbf{D}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \nabla^s \mathbf{u} \quad (7)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{E} = -\mathbf{h}^T : \boldsymbol{\varepsilon} + \boldsymbol{\beta}^E \cdot \mathbf{D}, \quad \mathbf{D} = \nabla \times \psi \quad (8)$$

と書き換えられる。ここで \mathbf{c}^D , \mathbf{h} , $\boldsymbol{\beta}^E$ は式(1), (2)第2式から導出できる材料定数である。

(2) 境界条件の書き換え

境界条件(4)から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、a) 各電極 S_{Ei} への印加は等電位のみ、かつ b) 電荷境界 S^q で $q^s = 0$, 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、という電気的な制約のもとで可能である。このとき、ストークスの定理などにより、式(4)は次式で書き換えられる。

$$Q = \int_{S_A} (\nabla \times \psi) \cdot \mathbf{n}_A dS = \oint_{l_A} \psi \cdot \mathbf{t}_A dl = \text{一定} \quad (9)$$

$$\mathbf{E} \times \mathbf{n} = \mathbf{0} \quad \text{on } S_{Ei} \quad (10)$$

$$\Delta \phi_j \equiv - \int_{l_{Cj}} \mathbf{E} \cdot \mathbf{t}_{Cj} dl \quad (11)$$

ここで、図1に示すように、 \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、 l_A は電荷境界 S^q と切断面 S_A の交差線、 \mathbf{t}_A はその単位接線ベクトルであり、 Q は S_A から漏れ出す電荷の総量である。 l_{Cj} は物体内部または物体表面の異なる二つの電極間を結ぶ任意の経路であり、 \mathbf{t}_{Cj} は経路 l_{Cj} の単位接線ベクトルである。また、 $\Delta \phi_j$ は \mathbf{t}_{Cj} が結ぶ二つの電極間の電位差である。以上でベクトル型の境界条件を定義することができる。

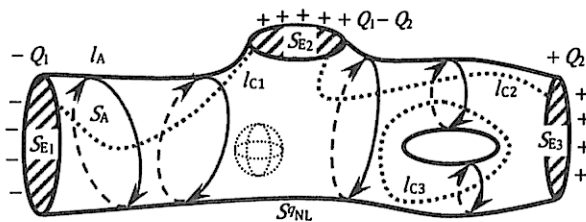


図1 ベクトル型FEMの電気境界条件

3. ベクトルポテンシャルと辺要素の冗長性

ベクトル型 FEM の独立変数 ψ には、次式で示すようなスカラ関数 a の勾配分の任意性がある。

$$\mathbf{D} = \nabla \times \psi = \nabla \times \psi', \quad \psi' = \psi + \nabla a \quad (12)$$

有限要素法による離散化では、 ∇a が行列の零空間に対応している必要がある。すなわち図2に示すように、 ψ の近似関数には ∇a を含んでいる必要がある。これを満たす有限要素は、辺にスカラ未知変数をおく辺要素であり、今回は図3に示す四面体一次要素を使用する。この要素 e の形状関数 N_{ei} ($i = 1, 2, \dots, 6$) は図4に示すようなベクトル関数であることがわかっている。

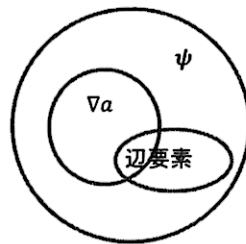


図2 辺要素と任意性

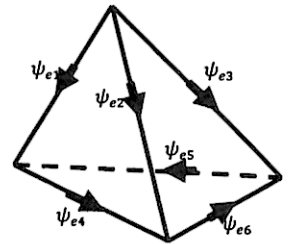


図3 四面体一次要素

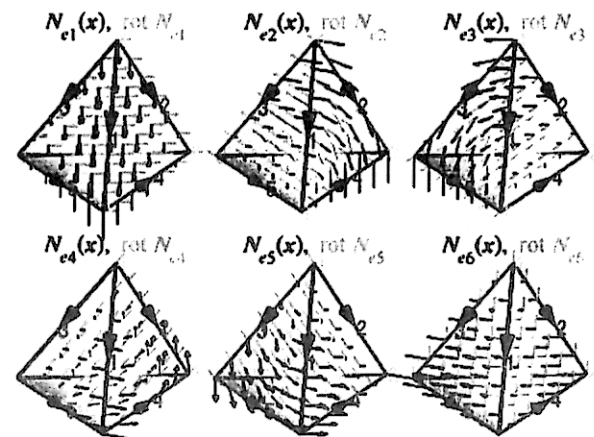


図4 四面体一次要素での形状関数と回転場

したがって要素辺のスカラ未知変数を ψ_{ei} とすると、要素 e 内でベクトルポテンシャルの近似関数 $\hat{\psi}_e$ と電気変位の近似 $\hat{\mathbf{D}}_e$ はそれぞれ

$$\hat{\psi}_e = N_{e1}\psi_{e1} + N_{e2}\psi_{e2} + \dots + N_{e6}\psi_{e6} \quad (13)$$

$$\hat{\mathbf{D}}_e = (\nabla \times N_{e1})\psi_{e1} + (\nabla \times N_{e2})\psi_{e2} + \dots + (\nabla \times N_{e6})\psi_{e6} \quad (14)$$

である。ここで、図4に示すように $\nabla \times N_{ei}$ は要素内で一定のベクトル場を成しているので、3辺に対する未知変数のみで任意の回転場を表すことができ、残りの3辺の冗長となっている。これが、全体剛性行列に零空間が存在して半正定値行列となる理由である。

4. 共役勾配法

ベクトル型FEMでは、辺・節点要素で離散化することにより、導出される全体剛性行列が半正定値行列になるため共役勾配法の適用が可能になる。正定値行列に対する共役勾配法のアルゴリズムを図5に示す^[3]。この行列・ベクトル積において、全体剛性行列の零空間は収束過程に寄与しないため、半正定値行列に対しても解の1つへの収束が保証される。本論文で必要なのは $\hat{\psi}_e$ でなく \hat{D}_e であるので、弱形式を満たす解のうちの1つを見付けばよい。

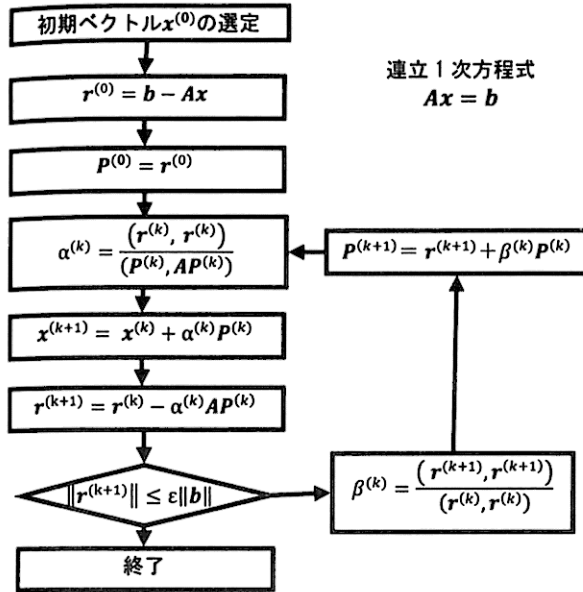


図5 共役勾配法のアルゴリズム

本論文では前処理付き共役勾配法において、前処理なし (None), 対角スケール前処理 (DSCG), 不完全コレスキー分解前処理 (ICCG) の3種類について反復回数と計算時間を比較する。対角スケール前処理因子 M は, $\text{diag}(A)$ を A の対角項だけを取り出した対角行列として $M = \text{diag}(A)$ である。また不完全コレスキー分解の前処理因子 M は, $A = M + R$ として $M = LL^T$ である。

5. 数値実験

共役勾配法の前処理因子による収束性の違いを検討する。数値実験では、有限要素分割に四面体一次要素を用いることとし、構成則の係数を以下のように設定する。

$$\begin{aligned}
 [c^E] &= \begin{bmatrix} 12.1 & 7.54 & 7.52 & 0 & 0 & 0 \\ & 12.1 & 7.52 & 0 & 0 & 0 \\ & & 11.1 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 2.3 & 0 & 0 \\ & \text{Sym.} & & & 2.1 & 0 \\ & & & & & 2.1 \end{bmatrix} \times 10^{10} \text{ (N/m}^2\text{)} \\
 [e]^T &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 12.3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 12.3 & 0 \\ -5.4 & -5.4 & 15.8 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ (C/m}^2\text{)} \\
 [k^e] &= \begin{bmatrix} 1.4343 & 0 & 0 \\ 0 & 1.4343 & 0 \\ 0 & 0 & 1.6283 \end{bmatrix} \times 10^{-8} \text{ (F/m)}
 \end{aligned} \quad (15)$$

(1) 貫入孔、空洞を有する圧電モデル

図6に示すモデルを考える。このモデルは貫入孔と空洞を有する一辺が1mmの立方体であり、底面をピン及びローラーで固定している。また、立方体上面の一部と立方体側面の一部に0.5kVの電位差を与える以外、境界すべてにベクトル型FEMの制約から電気変位の無漏れ条件が課される。この制約については環境領域との誘電率の違いから實際上ほとんど問題にならない。要素数18208, 節点数3917, 辺数23735であり、自由度数は31549である。図7に変形と電気変位の分布を、図8に共役勾配法の前処理因子ごとの収束過程を示す。

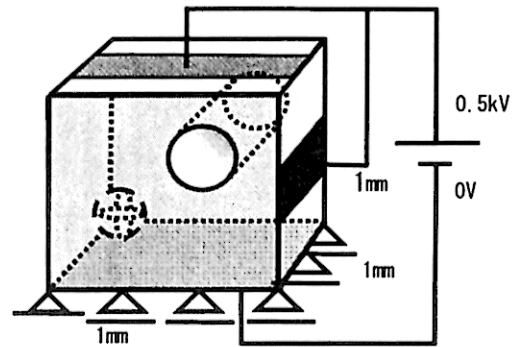


図6 貫入孔、空洞を有する圧電モデル

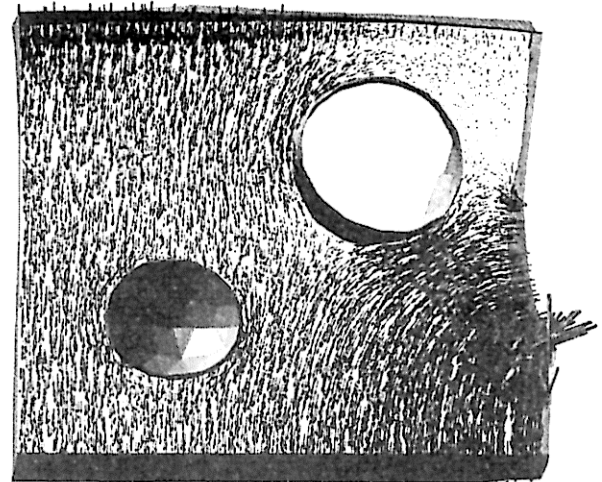


図7 変形と電気変位の分布 (断面スラブ)

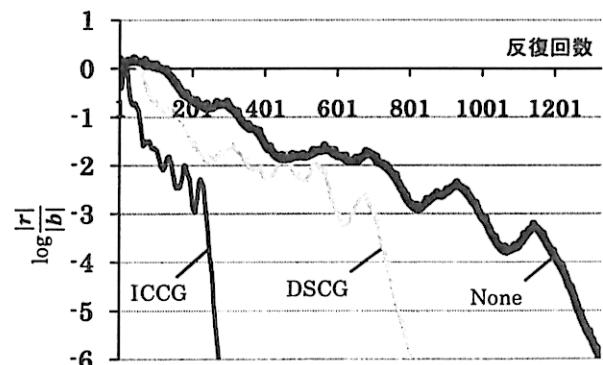


図8 前処理付き共役勾配法の収束性

図8より、いずれも収束しているが、収束判定までの反復回数は $ICCG < DSCG < None$ であることが分かる。一方で表1から、計算時間に関しては $ICCG$ と $DSCG$ に大きな差はなく、ともに $None$ の60%前後となっていることがわかる。

表1 前処理付き共役勾配法の計算時間

前処理因子	計算時間(S)	FLOPS
None	9.42	509M
DSCG	5.77	506M
ICCG	5.31	351M

(2) 多結晶モデル

図9に示すように、10個の結晶から成る多結晶体圧電モデルを考える。各結晶に異なる主軸方向をランダムに割り当てることにより多結晶構造を表している。この圧電モデルは縦横2mm、高さ1mmの立方体であり、底面をピン及びローラーで固定し、上面に10MPaの等分布荷重を与える。また立方体上下面に0.1kVの電位差を与え、それ以外の立方体側面には電気変位の無漏れ条件を課す。要素数1762、節点数485、辺数2574であり、自由度数は3325である。

図10に電気変位の分布を示す。各結晶の主軸方向が異なっていることから、電気変位の場には大きな乱れが生じていることがわかる。図11に共役勾配法の前処理因子ごとの収束の様子を示す。反復回数については、先ほどと同様に $ICCG < DSCG < None$ という傾向になったが、前処理なし($None$)の収束遅さが際立っている。これは、機械と電気という異種の物理問題を扱っていることから、双方の係数が大きく違ったためであると考えられる。また表2からは、一見すると計算時間は $ICCG$ が最小であると判断できる。しかし、問題の自由度の小規模さと浮動小数点数の演算回数(FLOPS)から、 $ICCG$ 用のデータの大部分がキャッシュメモリに入ったためであると予想できるため、 $ICCG$ と $DSCG$ の優劣は付けがたい。

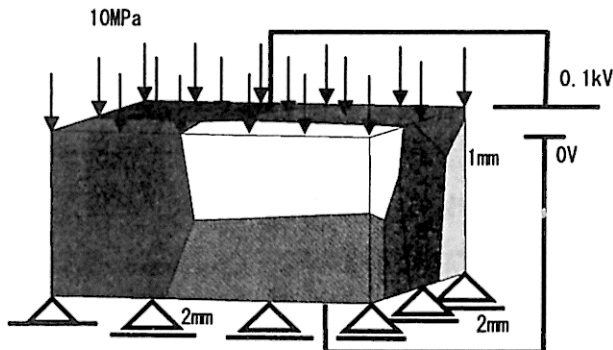


図9 多結晶体モデル

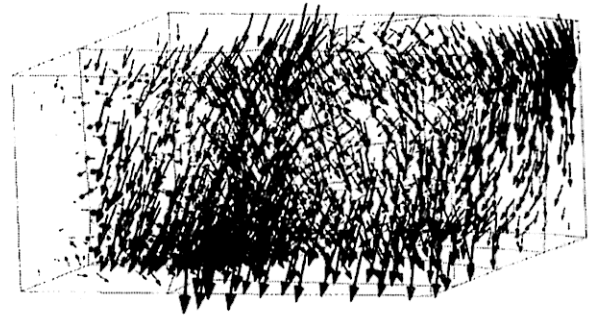


図10 電気変位の分布—多結晶体モデル

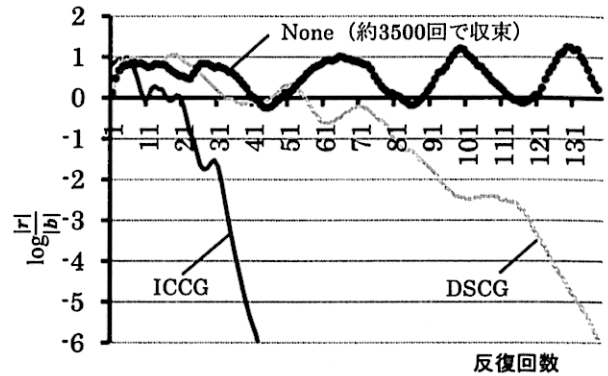


図11 前処理付き共役勾配法の収束性—多結晶体モデル

表2 前処理付き共役勾配法の計算時間—多結晶モデル

前処理因子	計算時間(S)	FLOPS
None	10.36	563M
DSCG	0.17	558M
ICCG	0.11	577M

6. おわりに

本論文では3次元圧電問題のベクトル型FEMに対する、前処理付き共役勾配法の適用性について検討した。数値実験により、ベクトル型FEMにおいて前処理付き共役勾配法が適用できることを確認した。また、このような連成問題をロバストに解くためには、何らかの反復法の前処理が必須であることがわかった。

参考文献

- 1) 浅井光輝, 高野直樹, 滝邦彦: ボクセル有限要素法による大規模圧電解析用ソルバーの開発, 計算工学講演会論文集, Vol.11, pp799-802, 2006
- 2) 梅村公博, 永井学志: 圧電問題に対する3次元辺要素の開発, 計算工学講演会論文集, Vol.12, pp43-46, 2007
- 3) E.F. Kaasschieter: Preconditioned conjugate gradients for solving singular systems, J. Comp. Appl. Math. 24, pp265-275, 1988