

3 次元圧電問題に対する ベクトル電気ポテンシャル型の有限要素解析手法*

永井学志^{*1}, 梅村公博^{*2}, 佐藤 司^{*3}

Vector-Electric-Potential Finite Element Procedure for Three-Dimensional Piezoelectric Problems

Gakuji NAGAI^{*4}, Kimihiro UMEMURA and Tsukasa SATOH

^{*4} Department of Mathematical and Design Engineering, Faculty of Engineering, Gifu University,
1-1 Yanagido, Gifu-shi, Gifu, 501-1193 Japan

Alternative three-dimensional finite element for piezoelectric problems is formulated with three restrictions: no volumetric charge, equipotential electrodes, and no surface charge except for the electrodes. In the conventional formulation, independent variables are mechanical displacement and scalar electric potential so-called voltage but in the present formulation they are mechanical displacement and vector potential that derives electric displacement. From thermodynamic viewpoint, the present formulation is better for nonlinear ferroelectric problems and the resulting global stiffness matrix is at least semi-positive definite. For discretization, nodal-edge finite element is used to keep the arbitrariness of vector potential in null-space of the matrix. Numerical examples of three-dimensional piezoelectric problem are demonstrated. For solving the linear systems, direct method with tree-cotree decomposition gauge and conjugate gradient iterative method are used.

Key Words: Smart Material, Electomechanics, Finite Element Method, Nodal-Edge Element, Numerical Analysis, Semi-Positive Definiteness

1. はじめに

圧電材料は機械的挙動と電氣的挙動が構成則レベルで相互に連成する材料である。この連成現象を利用して、MEMS アクチュエータや加速度センサなどの電気-機械変換素子に 응용されている。従来、このような圧電問題を解くための手法としては、線形性を仮定し、変位ベクトル \mathbf{u} と電位 ϕ — スカラ電気ポテンシャル — を未知変数とする枠組みの有限要素解析手法 (以下、スカラ型 FEM) が用いられてきた⁽¹⁾。スカラ型 FEM は按点型の変分原理に基づくものである。この変分原理を熱力学的な視点からみると、方程式の未知変数として、機械に関しては一般化変位と解釈できる示量性状態量を、一方で電気に関しては一般化力と解釈できる仕事共役な示強性状態量を選んでいくことになっている。

ところで、圧電材料には過大な電氣的・機械的な負荷により材料非線形性 — これは相変態に由来する現

象であり、これに注目するとき「強誘電」と称されることが多い — の生じることが知られている。相変態の問題における構成則のモデル化では、示強性状態量 (静水圧 p や応力テンソル $\boldsymbol{\sigma}$, 電界ベクトル \mathbf{E} など) を示量性状態量 (体積 V やひずみテンソル $\boldsymbol{\varepsilon}$, 電気変位ベクトル \mathbf{D} など) の関数として表現するほうが一般に有利である。これは、構成則の数値モデル化では、相変態の性質上、示強性状態量を示量性状態量に関する一価関数とすることが多いが、この逆関係は多価関数となっていることが多いためである。したがって、按点型の変分原理に基づく従来のスカラ型 FEM を非線形問題に適用しようとする、未知変数に示量性状態量と示強性状態量が混在するので、多価関数の構成則を取り扱わざるを得ない可能性が高くなる。それゆえ解析手順が複雑化⁽²⁾したり、そもそも手順の構成自体が困難となることも考えられる。これは、線形問題のみを考えている限り顕在化しなかったスカラ型 FEM の欠点である。

たとえば、強誘電体の構成則を自由エネルギー密度から導出するモデル化⁽³⁾では、熱力学的な準安定を表現するためにエネルギー密度を示量性状態量 $\boldsymbol{\varepsilon}$, \mathbf{D} に関して複数の極小点をもつように考えるので、構成則は $\boldsymbol{\varepsilon}$,

* 原稿受付 2009 年 4 月 8 日 改訂原稿受付日 2009 年 9 月 30 日。

^{*1} 正員、岐阜大学工学部 (〒501-1193 岐阜市柳戸 1-1)。

^{*2} 名古屋大学大学院情報科学研究科 (〒464-8601 名古屋市中種区不老町)。

^{*3} 岐阜大学大学院工学研究科。

E-mail: gakuji@gifu-u.ac.jp

D に関する一価関数となる。また、複合則に基づく構成則のモデル化⁽⁴⁾では、相変態の進行中は複数の相が共存し、その間、示強性状態量 σ , E は一定値を保ち続ける一方で、示量性状態量 ϵ , D は各相の体積分率に応じて時々刻々異なる値をとるものとする。この構成則モデルも ϵ , D を独立変数として定式化される。

その他、線形問題であっても、スカラー型 FEM では示量性状態量と示強性状態量を混用していることに由来する問題が若干ある。すなわち、線形圧電構成則の係数行列成分の大きさが、基本単位系では $10^{15} \sim 10^{18}$ 倍も異なるので、この点に留意しておかないと、計算途中の桁落ちにより誤った数値解を出す可能性がある。また、導出される全体剛性行列が不定値となっているので、正定値行列の場合に比べて連立一次方程式の求解法に注意を払う必要もある。もし、線形構成則の独立変数を示量性状態量 ϵ , D に選ぶことができると、従属変数は力と解釈できる示強性状態量 σ , E — 電界ベクトルは 1C の電荷を空間においたときに受ける 1N の力で定義される — となるので、構成則の係数行列成分の大きさの違いを小さくすることができ、かつ熱力学的な視点から正定値性も保証できる。

以上の議論を踏まえて、示量性状態量 ϵ , D を独立変数とする構成則を使用できる有限要素解析手法が提案されている^(3,5)。この手法は、解くべき未知変数を、変位ベクトル u はそのままに、スカラー電気ポテンシャル ϕ に換えてベクトル電気ポテンシャル ψ とする枠組みの有限要素解析手法（以下、ベクトル型 FEM）である。このベクトル型 FEM により、今まで定石といえる数値解析手法が存在しなかった圧電材料の非線形問題を一般的に取り扱うことができると考える。

しかしながら、ベクトル型 FEM は 2 次元問題に対してしか詳しく検討されていない^(3,5)。したがって、3 次元問題に対して数値実験が未実施であり、電気に関する未知変数の入れ換えに伴う定式化上の制限についても未検討のままである。このような定式化上の制限は、構造解析における変位法と双対な応力法、あるいは電気回路解析における節点解析法と双対な閉路解析法においても見られるものである。ベクトル型 FEM の主な欠点は、スカラー型 FEM では存在しないこの定式化上の制限にあり、一般に 3 次元問題では 2 次元に比べて取り扱いが難しくなる。また、これらの制限は、対象とする物理問題のモデル化に応じて、無視できるほど些細なものとなったり、大きな問題点となったりするので、対象ごとに検討しておく必要がある。幸いにもベクトルポテンシャルの場合、この導入が不可欠な計算電磁気学の分野における研究成果^{(6)~(8)}を

参考にして議論できる素地が整っている。

そこで本論文では、離散化手法としての 3 次元圧電問題に対するベクトル型 FEM の定式化を、制限に注意しながら行う。そのうえで、いくつかの数値実験により、従来型のスカラー型 FEM との比較を含めて本手法の特徴を示す。なお、非線形性は構成則に起因するものであり、増分毎にニュートン法等により最終的に線形化されるので、線形問題を中心に考える。

2. 圧電構成則の形式と特徴

線形の圧電問題に対して、従来のスカラー型 FEM⁽¹⁾ で用いられている構成則 (e -形式⁽⁹⁾) は、

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

で与えられる。ここで、 c^E , e , κ^E はそれぞれ弾性テンソル (4 階)、圧電テンソル (3 階)、誘電テンソル (2 階) である。示量性状態量は ϵ と D 、示強性状態量は σ と E なので、式(1)の第 1 式と第 2 式では異なる状態量を返す関数となっている。

一方、本論文で述べるベクトル型 FEM では、構成則(1)の両式とも示量性状態量の関数として示強性状態量を返すように書き換える。つまり、第 2 式の左辺を電気変位 D に換えて電界 E とすることで、次の構成則 (h -形式⁽⁹⁾) とする。

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

ここで、係数 c^D , h , β^E は構成則(1)から導出できる。

e -形式(1)に対する h -形式(2)の利点は熱力学における基本要請、すなわち内部エネルギー密度は示量性状態量に関して凸関数であるとする前提に由来する。構成則(2)は、温度を一定としたヘルムホルツの自由エネルギー密度

$$\begin{aligned}A(\epsilon, D) &= \frac{1}{2} \epsilon : c^D : \epsilon \\ &\quad - \epsilon : h \cdot D + \frac{1}{2} D \cdot \beta^E \cdot D\end{aligned}\quad (3)$$

の 1 階偏微分で定義されるので、 h -形式(2)をまとめて行列表記したとき、その係数行列の正定値性が保証される。

他方、構成則(1)は、自由エネルギー密度(3)を電気に関してのみルジャンドル変換した自由エネルギー密度

$$G^E(\epsilon, E) = A(\epsilon, D(\epsilon, E)) - E \cdot D(\epsilon, E) \quad (4)$$

から導出される。この G^E は、示量性状態量 ϵ に関し

ては下に凸であるが、示強性状態量 \mathbf{E} に関して上に凸となる。したがって、構成則(1)に対応する係数行列は不定値となっている。

なお、非線形構成則について、たとえばフェーズフィールド法⁽¹⁰⁾で行っているように、複数の準安定状態を表現可能な疑似自由エネルギー密度により記述する場合、構成則は示量性状態量 $\boldsymbol{\varepsilon}$, \mathbf{D} に関する一価関数となる。しかし、その逆関係は多価関数となるので、その取り扱いが複雑化する。この観点から、非線形構成則についても e -形式(2)より h -形式(1)に相当するものが有利である。

3. 3次元圧電問題の強形式

3-1 通常の強形式 \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 における機械変位場と電位場に関する支配方程式は、それぞれ

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

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

で与えられる。ここで、式(5), (6)それぞれの第2式は、線形ならば e -形式(1)である。また、境界 S については、機械変位場に関して変位既定境界 S^u と応力既定境界 S^t , 電位場に関して電位既定境界 S^ϕ と電荷既定境界 S^q があり、それぞれにおける境界条件は

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

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

で与えられる。ここで、 \mathbf{n} は境界 S の外向き単位法線ベクトルである。また、変数への上付き棒は既定値であることを示し、 $\bar{\mathbf{t}}$ と \bar{q}^s はそれぞれ既知の表面力ベクトルと表面電荷密度である。

式(5)の第1式は力の平衡式であるが、式(6)の第1式は電気双極子に関する一種の適合条件式である。スカラ型 FEM では、これらの式に弱定式化を施す。

3-2 支配方程式の書き換え 支配方程式(5), (6)を h -形式(2)に適合させるために、式(6)を力に関する平衡式に変換することを考える。まず、式(6)第3式について、ベクトル解析の定理から、

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

が成り立つ。次に、圧電体へのイオン注入といった特殊な場合を除けば、体積電荷密度を $q^v = 0$ としてよい。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、

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

が成り立つ。すなわち、電気変位 \mathbf{D} を導くベクトル電気ポテンシャル $\boldsymbol{\psi}$ の存在が成り立つ。

したがって、式(9), (10)から、式(5), (6)に $q^v = 0$ の制限を加えた支配方程式は、次式のように書き換えることができる。

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

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

ここで、式(11), (12)それぞれの第2式は、線形ならば h -形式(2)である。ただし、ベクトル電気ポテンシャル $\boldsymbol{\psi}$ には、スカラ関数の勾配分の任意性

$$\nabla \times \boldsymbol{\psi} = \nabla \times (\boldsymbol{\psi} + \nabla a) \quad \text{for } \forall a \quad (13)$$

があるので、これを固定するために何らかのゲージ条件が別途必要となる。なお、2次元問題の場合、考えている平面に垂直な単位ベクトルを \mathbf{e}_z とすれば、 $\boldsymbol{\psi} = \psi_z \mathbf{e}_z$ と書くことができる。ここで ψ_z は流れ関数でありスカラなので、ベクトル型 FEM では2次元問題と3次元問題の取り扱い方が少し変わってくる。たとえば、2次元では式(13)に対するゲージ条件は不要となる^(3,5)。

3-3 電氣的境界条件式の書き換え 電氣的境界条件式(8)に対応する、ベクトルポテンシャル $\boldsymbol{\psi}$ に関する境界条件式を考える。これを行うために解析対象を次のように限定する。

(i) 電荷既定境界 S^q のうち開放電極を除いた閉包領域 $S_{NL}^q \subset S^q$ 上で $\bar{q}^s = 0$ とする。これは、境界 S_{NL}^q から電荷が漏れることはなく、境界直下の電気変位 \mathbf{D} はこの境界に常に平行となることを意味する。

(ii) それ以外の境界はすべて電極であり、単連結域 S_{Ei} ごとに等電位とする。ここで、 $U_i S_{Ei} = S^\phi \cup (S^q \setminus S_{NL}^q)$ である。いずれの電極も外部表面にあり、内部に孤立していないとする。外部表面から入り込んだ電極は、その電極に沿って領域 V を切り裂くことで外部表面として取り扱う。

なお、(i) の $\bar{q}^s = 0$ は、スカラ型 FEM でも暗黙のうちに仮定していることがほとんどである。圧電体の誘電率は、たとえば空気に比べて 10^3 倍ほど大きいことから、圧電体のみを解析領域としても、この制限は実用的に問題ないと考えられる。もっとも、圧電体を取り巻く領域まで解析領域に含めると問題でなくなる。また、(ii) の電極における等電位の制限も、ほとんどの場合、問題ないと考えられる。

まず、境界 S_{NL}^q 上の無漏れ条件から書き換える。図1に示すような領域 V を考え、境界 S_{NL}^q のみと交差する任意断面を S_A , その交差線を l_A とする。境界 S_{NL}^q の

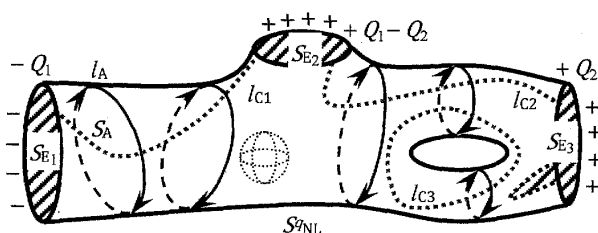


Fig. 1 Electric boundary conditions for vector potential

一部は内部に孤立してもよい。電荷の無漏れという制限から、どのような断面 S_A で仮想的に切断しても片方の切断面からにじみ出る電荷の総量 Q は、 S_{E_i} をまたぐか貫通孔により分枝されない限り、値は未知なものの一定値をとるので、次式が成り立つ。

$$Q = \int_{S_A} \mathbf{D} \cdot \mathbf{n}_A dS = (\text{const.}) \quad (14)$$

ここで、 \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。 $\mathbf{D} \cdot \mathbf{n}_A > 0$ ならば正電荷、 $\mathbf{D} \cdot \mathbf{n}_A < 0$ ならば負電荷ゆえ、電荷の正負はおのずと決まる。式(14)は、式(12)第3式とストークスの定理より、

$$\begin{aligned} Q &= \int_{S_A} (\nabla \times \boldsymbol{\psi}) \cdot \mathbf{n}_A dS \\ &= \oint_{l_A} \boldsymbol{\psi} \cdot \mathbf{t}_A dl = (\text{const.}) \end{aligned} \quad (15)$$

と変形できる。ここで、 \mathbf{t}_A は交差線 l_A の単位接線ベクトルであり、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とする。

次に、電極 $U_i S_{E_i}$ に関する条件を書き換える。等電位の電極では、電場 \mathbf{E} はその面に直交するので、

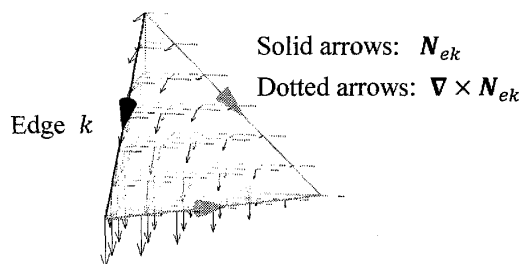
$$\mathbf{E} \times \mathbf{n} = \mathbf{0} \quad \text{on } U_i S_{E_i} \quad (16)$$

である。ただし、この条件だけでは電位の情報が欠落するので、電位差の定義を用いてこれを補う。

$$\Delta\phi_j \equiv - \int_{l_{c_j}} \mathbf{E} \cdot \mathbf{t}_{c_j} dl \quad (17)$$

ここで、 l_{c_j} は図1に示すように、相異なる電極 S_{E_i} と S_{E_k} ($i \neq k$) を領域 V 内あるいは境界 S_{NL}^q 上で結ぶ任意の有向線分(番号 j)である。また、 \mathbf{t}_{c_j} は l_{c_j} の単位法線ベクトル、 $\Delta\phi_j$ は線分 l_{c_j} の始点を基準とする電位差である。解析対象に貫通孔がある場合、 l_{c_j} はこれを周回する閉曲線として、 $\Delta\phi_j = 0$ とする。

以上より、ベクトル型FEMにおける強形式は、機械変位に関して式(11)と(7)、ベクトル電気ポテンシ

Fig. 2 Vector fields of N_{ek} and $\nabla \times N_{ek}$ in element

ルに関して、いくつかの制限を伴って式(12)と(15)～(17)に書き換えることができる。なお、独立変数を入れ換えたことにより電氣的境界条件については、独立変数そのものを既定するディレクレ境界と、その微分に関して既定するノイマン境界が入れ替わる。

4. 離散化

機械変位 \mathbf{u} は通常の節点要素を用いて近似するが、ベクトル電気ポテンシャル $\boldsymbol{\psi}$ については、節点要素ではなく辺要素を用いて近似する。これは、式(13)に示すベクトルポテンシャルの任意性を、Bマトリクスに零空間を含む補間関数によって厳密に表現⁽⁶⁾するためである。したがって、構成則(2)の係数行列は正定値であるものの、零空間を除去する工夫をしない限り導出される全体剛性行列は半正定値となる。もし、 $\boldsymbol{\psi}$ の近似に節点要素を用いると、全体剛性行列は特異に近いものとなり、かえって取り扱いが煩わしくなる。なお、2次元問題の場合には、この任意性の問題がないので、流れ関数 ψ_z を節点要素で近似すればよい^(3,5)。

以降の離散化では、説明を簡単にするために辺・節点混合型の四面体1次要素を用いる。また、電氣的境界条件式(15)と(17)は、任意の積分経路 l_A と l_{c_j} を特定の経路に制限したうえで離散化する。

4.1 辺要素の概要⁽⁶⁾ 要素 e について、有向な要素辺 k の単位接線ベクトルを \mathbf{t}_{ek} とし、スカラーの係数を

$$\psi_{ek} \equiv \int_{\text{edge } k} \boldsymbol{\psi} \cdot \mathbf{t}_{ek} dl \quad (18)$$

と定義する。この係数を用いて、要素内のベクトル補間関数を次のように構成する。

$$\boldsymbol{\psi}_e = \sum_{k=1}^6 \psi_{ek} \mathbf{N}_{ek} \quad (19)$$

ここで、 \mathbf{N}_{ek} は図2に示すようなベクトル形状関数であり、要素辺 k の始点と終点の節点を k_1 , k_2 とし、体積座標系 L_{ek_1} , L_{ek_2} を用いると、次式で表現される。

$$\mathbf{N}_{ek} = L_{ek_1} \nabla L_{ek_2} - L_{ek_2} \nabla L_{ek_1} \quad (20)$$

要素内の電気変位 \mathbf{D} は式(19)の回転で表されるが、四面体1次要素ではいずれか3項の和で表現できるので—図2に示すように $\nabla \times \mathbf{N}_{ek}$ は注目する要素辺 k の対角辺に平行なベクトルゆえ3項で間に合う—、残りの冗長な3項が式(13)に示す任意性を表現する。なお、ベクトル形状関数 \mathbf{N}_{ek} には次の直交性がある。

$$\int_{\text{edge } k} \mathbf{N}_{ej} \cdot \mathbf{t}_{ek} dl = \delta_{jk} \quad (21)$$

4.2 電氣的境界条件に対する離散化された十分条件
まず、閉曲線 l_A を無漏れ境界 S_{NL}^q 上の辺集合 L_{NL}^q から構成する。ある閉路 $l'_A \subset L_{NL}^q$ について、式(18)を用いて式(15)を離散化すると、

$$Q \approx \hat{Q} = \sum_{k \in l'_A} (\mathbf{t}_A \cdot \mathbf{t}_k) \psi_k \quad (22)$$

となる。ここで、 (\cdot) は (\cdot) の近似であることを表す。また、 ψ_k と \mathbf{t}_k はそれぞれ全体系における有向辺 k の未知係数と単位接線ベクトルである。なお、 $\mathbf{t}_A \cdot \mathbf{t}_k = \pm 1$ であり、実装上は単に閉路 l_A と辺 k の向きが一致する場合に $+1$ 、互いに逆の場合に -1 とする。しかし、この離散化に伴う誤差のために、本来は経路に依存しない値 Q が経路に依存するようになり、数値計算上の取り扱いが難化するので、次のような一案を考える。

図3に示すように、要素分割後の閉包な無漏れ境界 S_{NL}^q 上に各電極 S_{Ei} 間を唯一結ぶ、あるいは貫通孔を唯一一周回する1要素幅のバンド域 S_{NLBj}^q を意図的に設け、自己領域 $S_{NL}^q \setminus \bigcup_j S_{NLBj}^q$ をまたぐ辺の集合を L_{NLBj}^q とする。このとき、次の条件を課す。

$$\begin{aligned} \psi_k &= 0 \quad \text{for } \forall k \in L_{NL}^q \setminus \bigcup_j L_{NLBj}^q, \\ \hat{Q}_j &= (\mathbf{t}_k \cdot \mathbf{t}_A) \psi_k = (\text{const.}) \\ &\quad \text{for } \forall k \in L_{NLBj}^q \end{aligned} \quad (23)$$

この条件は、式(15)から l_A に沿った $\psi \cdot \mathbf{t}_A$ の周回積分値が一定であるものの、各点における $\psi \cdot \mathbf{t}_A$ の値には任意性があることを利用して構成したものである。条件(23)は式(15)に対する離散化された十分条件なので、近似解はバンド域 S_{NLBj}^q の選び方に依存することになるが、この第1式は次の条件に対応している。

$$\psi \times \mathbf{n} = \mathbf{0} \quad \text{on } S_{NL}^q \setminus \bigcup_j S_{NLBj}^q \quad (24)$$

なお、実装上、式(23)の第2式は従属自由度として取り扱うことで実現する。

次に、式(17)について、電位差 $\Delta \hat{\phi}_j$ を定義するため

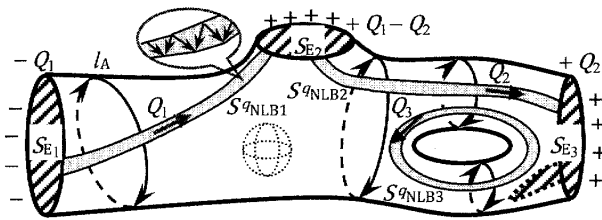


Fig. 3 Discretized sufficient conditions for electricity

の積分経路 l_{Cj} を、バンド域 S_{NLBj}^q 上の中央線に一致させる。すなわち、

$$\Delta \hat{\phi}_j \equiv - \int_{l_{Cj}: \text{Centerline of } S_{NLBj}^q} \hat{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{t}_{Cj} dl \quad (25)$$

とする。このように定義するのは、次に述べる弱定式化に整合させるためである。

4.3 離散方程式の導出 式(11)、(12)それぞれの第1式と式(7)の第2式、式(16)の離散化近似に対して、重み付き残差法を適用する。

$$\begin{aligned} \int_V \delta \hat{\mathbf{u}} \cdot (\nabla \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \mathbf{b}) dV \\ + \int_{S_t} \delta \hat{\mathbf{u}} \cdot (\mathbf{t} - \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{n}) dS = 0 \end{aligned} \quad (26)$$

$$\begin{aligned} \int_V \delta \hat{\boldsymbol{\psi}} \cdot (\nabla \times \hat{\mathbf{E}}) dV \\ + \int_{\bigcup_i S_{Ei}} \delta \hat{\boldsymbol{\psi}} \cdot (\hat{\mathbf{E}} \times \mathbf{n}) dS = 0 \end{aligned} \quad (27)$$

ここで、 $\delta \hat{\mathbf{u}}$ と $\delta \hat{\boldsymbol{\psi}}$ は重み関数である。

まず、式(26)にガウスの発散定理を適用し、 $\delta \hat{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$ on S^u を考慮すると次式を得る。

$$- \int_V \delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} : \hat{\boldsymbol{\sigma}} dV + \int_{S_t} \delta \hat{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{t} dS = 0 \quad (28)$$

ここで、 $\delta \hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \nabla^s \delta \hat{\mathbf{u}}$ である。

次に、式(27)に公式 $\nabla \cdot (\delta \hat{\boldsymbol{\psi}} \times \hat{\mathbf{E}}) = (\nabla \times \delta \hat{\boldsymbol{\psi}}) \cdot \hat{\mathbf{E}} - \delta \hat{\boldsymbol{\psi}} \cdot (\nabla \times \hat{\mathbf{E}})$ とガウスの発散定理を適用すると次式を得る。

$$\begin{aligned} \int_V \delta \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{E}} dV - \int_S (\delta \hat{\boldsymbol{\psi}} \times \hat{\mathbf{E}}) \cdot \mathbf{n} dS \\ + \int_{\bigcup_i S_{Ei}} \delta \hat{\boldsymbol{\psi}} \cdot (\hat{\mathbf{E}} \times \mathbf{n}) dS = 0 \end{aligned} \quad (29)$$

ここで、 $\delta \hat{\mathbf{D}} = \nabla \times \delta \hat{\boldsymbol{\psi}}$ である。上式は、スカラー3重積の公式 $(\delta \hat{\boldsymbol{\psi}} \times \hat{\mathbf{E}}) \cdot \mathbf{n} = \delta \hat{\boldsymbol{\psi}} \cdot (\hat{\mathbf{E}} \times \mathbf{n}) = -\hat{\mathbf{E}} \cdot (\delta \hat{\boldsymbol{\psi}} \times \mathbf{n})$ より、

$$\int_V \delta \hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{E}} dV + \int_{S_{NL}^q} \hat{\mathbf{E}} \cdot (\delta \hat{\boldsymbol{\psi}} \times \mathbf{n}) dS = 0 \quad (30)$$

となるので、式(24)に対応する $\delta\hat{\psi} \times \mathbf{n} = \mathbf{0}$ on $S_{NL}^q \setminus \cup_j S_{NLbj}^q$ を考慮し、再びスカラ3重積の公式を適用すると次式となる。

$$\int_V \delta\hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{E}} dV - \sum_j \int_{S_{NLbj}^q} (\delta\hat{\psi} \times \hat{\mathbf{E}}) \cdot \mathbf{n} dS = 0 \quad (31)$$

さらに、式(18)と式(23)の第2式それぞれに対応して

$$\delta\psi_k \equiv \int_{\text{edge } k} \delta\hat{\psi} \cdot \mathbf{t}_k dl \quad (32)$$

$$\delta\hat{Q}_j = (\mathbf{t}_k \cdot \mathbf{t}_A) \delta\psi_k = (\text{const.}) \quad \text{for } \forall k \in L_{NLbj}^q \quad (33)$$

であることを踏まえた上で、式(31)の第2項を書き下す。すなわち、バンド S_{NLbj}^q 内の辺集合 L_{NLbj}^q は要素面ごとに2辺なので、各要素辺の単位接線ベクトル \mathbf{t}_{e1} , \mathbf{t}_{e2} を、閉路 l_A の向きに、かつ $\mathbf{n} dS = (\mathbf{t}_{e1} \times \mathbf{t}_{e2}) dt_1 dt_2$ となるようにとると、次のように式変形できる。

$$\begin{aligned} & \int_{S_{NLbj}^q} (\delta\hat{\psi} \times \hat{\mathbf{E}}) \cdot \mathbf{n} dS \\ &= \sum_{e \in S_{NLbj}^q} \int_{\text{face } e} \{ (\delta\hat{\psi} \cdot \mathbf{t}_{e1}) (\hat{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{t}_{e2}) - (\delta\hat{\psi} \cdot \mathbf{t}_{e2}) (\hat{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{t}_{e1}) \} dt_1 dt_2 \\ &= \sum_{e \in S_{NLbj}^q} \frac{1}{2} (\delta\hat{Q}_j \hat{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{t}_{e2} \ell_{e2} - \delta\hat{Q}_j \hat{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{t}_{e1} \ell_{e1}) \\ &= \delta\hat{Q}_j \sum_{e \in S_{NLbj}^q} \hat{\mathbf{E}} \cdot \frac{-\mathbf{t}_{e1} \ell_{e1} + \mathbf{t}_{e2} \ell_{e2}}{2} \\ &= -\delta\hat{Q}_j \Delta\hat{\phi}_j \end{aligned} \quad (34)$$

ここで、公式 $(\delta\hat{\psi} \times \hat{\mathbf{E}}) \cdot (\mathbf{t}_{e1} \times \mathbf{t}_{e2}) = (\delta\hat{\psi} \cdot \mathbf{t}_{e1}) (\hat{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{t}_{e2}) - (\delta\hat{\psi} \cdot \mathbf{t}_{e2}) (\hat{\mathbf{E}} \cdot \mathbf{t}_{e1})$ 、要素内で $\hat{\mathbf{E}}$ が一定であること、 $\delta\hat{\psi} \cdot \mathbf{t}_{e1} = \delta\hat{Q}_j / \ell_{e1}$ 、 $\delta\hat{\psi} \cdot \mathbf{t}_{e2} = \delta\hat{Q}_j / \ell_{e2}$ (ℓ_{e1} , ℓ_{e2} は各要素辺の長さ)、さらには式(25)を用いた。したがって最終的に、式(31)は次式となる。

$$\int_V \delta\hat{\mathbf{D}} \cdot \hat{\mathbf{E}} dV + \sum_j \delta\hat{Q}_j \Delta\hat{\phi}_j = 0 \quad (35)$$

線形構成則(2)を用いる場合、式(28)と(35)から全体剛性方程式は、

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{uu} & \mathbf{K}_{u\psi} \\ \text{Sym.} & \mathbf{K}_{\psi\psi} \end{bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}_N \\ \mathbf{f}_E \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_N \\ \boldsymbol{\psi}_E \end{Bmatrix} \quad (36)$$

となる。ここで、 \mathbf{u}_N は節点変位の列ベクトル、 $\boldsymbol{\psi}_E$ はベ

クトル電気ポテンシャルに関するスカラ未知係数の列ベクトルであり、

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_{uu} &= \int_V \mathbf{B}_u^T [\mathbf{c}^D] \mathbf{B}_u dV \\ \mathbf{K}_{u\psi} &= - \int_V \mathbf{B}_u^T [\mathbf{h}] \mathbf{B}_\psi dV \\ \mathbf{K}_{\psi\psi} &= \int_V \mathbf{B}_\psi^T [\boldsymbol{\beta}^e] \mathbf{B}_\psi dV \\ \mathbf{f}_N &= \int_V \mathbf{N}_u^T \{\mathbf{b}\} dV + \int_{St} \mathbf{N}_u^T \{\mathbf{t}\} dV \\ \mathbf{f}_E &= \begin{cases} -\Delta\hat{\phi}_j & \text{for dependent edges in } L_{NLbj}^q \\ 0 & \text{for all other edges} \end{cases} \end{aligned} \quad (37)$$

である。また、 $[\cdot]$ はテンソル・の行列表現、 $\{\cdot\}$ はベクトル・の列ベクトル表現であり、 \mathbf{N}_u は節点変位に関する大域的な形状関数行列、 \mathbf{B}_u , \mathbf{B}_ψ は、それぞれ大域的な変位一ひずみ変換行列と、大域的なベクトル電気ポテンシャルー電気変位変換行列である。なお、式(36)の全体剛性行列は式(13)や(19)の任意性を反映して、零空間のある半正定値行列となっている。

4.4 零空間の取り扱い 電気変位 $\hat{\mathbf{D}}$ を算出するには、連立一次方程式(36)の不定解のうち一つだけ求めればよい。この求解に代表的な反復解法である共役勾配法を用いる場合、共役勾配法は半正定値問題に対して解の一つへの収束が証明されている⁽¹¹⁾ので、零空間への配慮は不要である。一方で、求解に直接解法を用いる場合には、あらかじめ全体剛性行列から零空間を除去して正定値とするほうが、数値計算上の取り扱いが容易になる。

そこで、直接解法の場合について、辺自由度に対する木・補木分解を用いて、この木に含まれる辺自由度をすべて零に固定することで、離散的なゲージ固定を行う^{(6)~(8)}。ここで、木とは閉路を構成しない最大の辺集合、補木とはその補集合である。木・補木分解の特性から、木となる辺の総数は零空間の次元に一致することが分かっているため、全体剛性行列の列空間に影響しない。この分解は唯一でないが、深さ優先探索や幅優先探索等⁽¹²⁾の基本的なアルゴリズムにより実行できる。

なお、木・補木分解によるゲージ固定は、式(18)から次のように表わされる。

$$\int_{\text{edge } k} \hat{\psi} \cdot \mathbf{t}_T dl = 0 \quad \text{for } \forall k \in l_T \quad (38)$$

ここで、 l_T は木であり、 \mathbf{t}_T はその単位接線ベクトルである。このゲージ固定は、次の条件に対する離散化

された十分条件と解釈できる。

$$\psi \cdot \mathbf{t}_T = 0 \quad \text{for any open path } l_T \subset V \quad (39)$$

実装上は、離散化された電気的境界条件も加味するために、あらかじめ境界のうち $S_{NL}^q \setminus U_j S_{NLBj}^q$ 上の辺 ($L_{NL}^q \setminus U_j L_{NLBj}^q$) を連結単位ごとにまとめて単一の辺自由度とみなす。その上で、残りの全領域にある辺自由度を含めた木を構成して、その成分をすべて零に固定する。また、荷重項である式(37)の最終式において、電位差 $\Delta \phi_j$ を課す従属な辺自由度は補木に属するので、右辺の荷重ベクトルは必ず列空間にある。

5. 線形問題に対する数値実験

本章の数値実験では、線形構成則(1)の係数を現実的な値として PZT-5 のものとし、直交異方性を仮定して次のように設定する⁽¹³⁾。

$$[c^E] = \begin{bmatrix} 12.1 & 7.54 & 7.52 & 0 & 0 & 0 \\ & 12.1 & 7.52 & 0 & 0 & 0 \\ & & 11.1 & 0 & 0 & 0 \\ & & & 2.30 & 0 & 0 \\ \text{Sym.} & & & & 2.10 & 0 \\ & & & & & 2.10 \end{bmatrix} \times 10^{10} \text{ (N/m}^2\text{)},$$

$$[e]^T = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 12.3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 12.3 & 0 \\ -5.4 & -5.4 & 15.8 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ (C/m}^2\text{)},$$

$$[\kappa^e] = \begin{bmatrix} 1.4343 & 0 & 0 \\ 0 & 1.4343 & 0 \\ 0 & 0 & 1.6283 \end{bmatrix} \times 10^{-8} \text{ (F/m)}$$

ここで、応力 $\{\sigma\}$ と工学ひずみ $\{\epsilon\}$ の成分の並びは、 $\{11, 22, 33, 12, 23, 31\}$ である。基本単位系において値の大きさが 10^{18} 倍も違う理由は、構成則の独立変数に性質の異なる示強性状態量 ϵ と示強性状態量 E を混用しているためと考える。これらの係数を線形構成則(2)用に変換すると、独立変数が示量性となるので、値の大きさは 10^2 倍ほどの違いに納まる。また、構成則(2)の次の係数行列が正定値となることを確認した。

$$\begin{bmatrix} [c^D] & -[h] \\ \text{sym.} & [\beta^e] \end{bmatrix}$$

以降では特に断りがない限り、異方性の主軸を全体座標系と一致させ、分極方向を z 軸正の向きとする。また、値は基本単位系のものを用いるが、比較のためのスカラ型 FEM による計算では、桁落ちを防ぎ、係数行列をスケールリングするため、電荷と電位に関する値のみ、それぞれ nC, GV の補助単位系で取り扱う。

5・1 パッチテスト まずは、作成したプログラムの検証も兼ねて、構成則から計算できる一様場の厳密解と比較する。

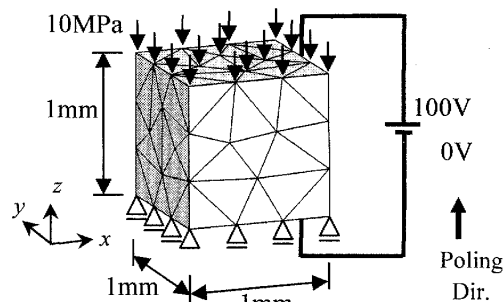


Fig. 4 Finite element model for patch test

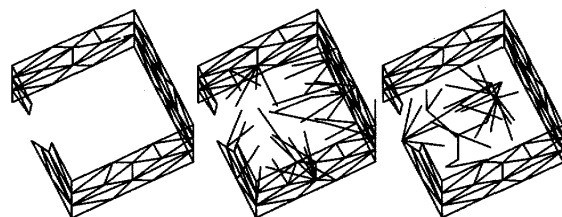


Fig. 5 Fixed edges for electric B.C. and gauge

図4に示すような 1mm^3 立方体の有限要素モデルに対する一軸の電氣的・機械的な負荷を考える。すなわち、機械的負荷として下面をピンとローラーで固定して上面に 10MPa の等分布圧縮荷重を、電氣的負荷として側面すべてを電荷無漏れとして下面を接地して上面に 100V を印加する。四面体要素数は 268、節点数は 83、辺数は 403 である。図5は、零固定される辺自由度を描画したものである。同図左が電氣的境界条件に対するもの、残りの2図が電氣的境界条件を加味したゲージ固定のための木・補木分解の結果であり、中央が幅優先探索、右が深さ優先探索によるものである。描画されていない辺が未知自由度であり、側面で描画されていない辺がバンド S_{NLBj}^q 上で互いに従属自由度となる辺 L_{NLBj}^q である。

直接解法により求めた全要素の有限要素解 $\hat{\mathbf{D}}, \hat{\epsilon}$ は、用いた木・補木分解のアルゴリズムに関わらず浮動小数点数の演算に起因するであろう誤差を除いて、厳密解に一致した。これは、形状関数に1次項が含まれていることから当然の結果であり、有限要素の細分化に伴いその近似解が厳密解に収束するための必要条件として知られている。

また、ゲージ固定をしない場合の半正定値性、すなわち全固有値が非負であること（全自由度数は 517、列空間の次元は 481、零固有値を除いた最大・最小固有値の比は 1.06×10^8 ）と、ゲージ固定のためのいずれの木・補木分解も零空間を適切に除去していることを数値的に確認した。零固有値が入るのはベクトルポテンシャル場の離散化に、その任意性を離散的にも表

現できる辺要素を用いたためであり、木・補木分解によるゲージ固定が零空間を適切に除去できるのは、4・4節で述べたように、木となる辺の総数が常に零固有値の数と一致しているためである。

5・2 バイモルフ型アクチュエータ

バイモルフ型アクチュエータは、圧電板の上下面と中立面にそれぞれ電極を設けることで、電位差により曲げ変形を生じさせることのできる素子である。

図6に示すような $2 \times 5 \times 10 \text{ mm}^3$ のモデルを考え、規則格子による有限要素分割（深さ優先探索によるゲージ固定後の自由度数は16230）とする。電気に関する境界条件を課すには、スカラー型FEMの場合は電極上の節点に電圧を定義するだけでよいが、ベクトル型FEMの場合には工夫が要る。すなわち、全側面は無漏れとするが、電極が中立面全面に入り込んでいるので、電気的には電極に沿って切り裂いて上下を別々に取り扱う。一方で、機械的には中立面上で重複した節点同士を互いに従属させて一体化した片持ちばり構造とする。

電極間に100Vの電位差を与えたときのメッシュ変形と x 方向直応力の分布を、図7に示す。右端の最大たわみは $0.95712 \mu\text{m}$ であり、はり理論を用いて導出される略算値 $1.2780 \mu\text{m}$ の約75%であった。本解法によるたわみが小さいのは、はり理論では表現できない中立面における y 方向の変形適合条件が自動的に課せられていること、また、四面体1次要素はよく知られているように、曲げに対して剛い解を出すためと考える。さらに述べると、本手法は最小型の変分原理に基づく手法となっているため、ディレクレ境界がすべて零固定である場合、内部エネルギーの評価値は真の値の下界となっている⁽¹⁴⁾。本例の境界条件はこの場合に該当するので、たわみも実質的に真の解の下界となっていると考える。参考のため、同一の要素分割を用いて按点型の変分原理に基づくスカラー型FEM（自由度数8970）により求めた右端の最大たわみは、 $1.0217 \mu\text{m}$ （略算値の約80%）であり、本解法による値より少し大きくなることを確認した。

5・3 貫通孔と空洞のあるモデル

ベクトル型FEMでは、電気に関する境界条件を課すことがスカラー型FEMに比べて煩雑化するので、少し複雑な問題に対する境界条件指定の具体例を示す。また、同一の要素分割において、各FEM解法による近似解の傾向について述べる。

図8に示すような貫通孔と空洞を有する 1 mm^3 の立方体モデルを考える。機械的境界条件として下面をピンとローラーで固定する。電気的境界条件としては上

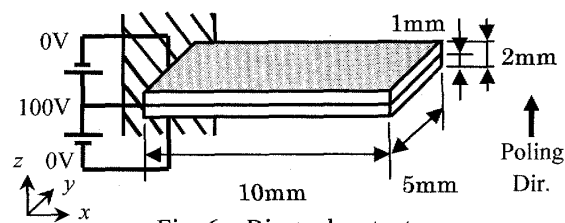


Fig. 6 Bimorph actuator

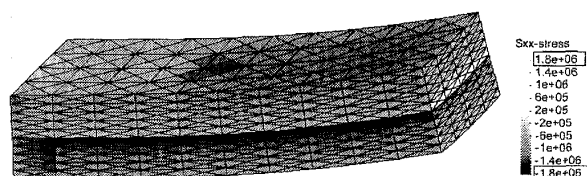


Fig. 7 Deformation ($\times 10^3$) and stress σ_{xx} (N/m^2)

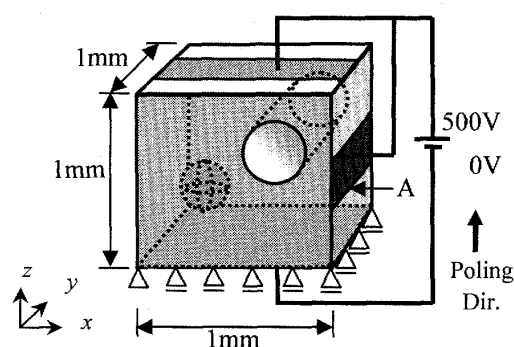


Fig. 8 Model with hole and void

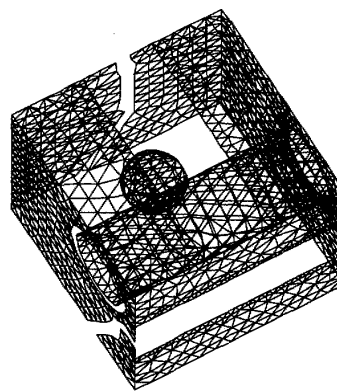


Fig. 9 Fixed edges for electric B.C.

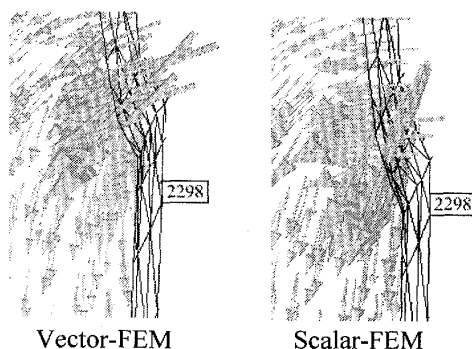


Fig. 10 Electric Disp. and Deformation ($\times 500$)

面の一部と立方体側面の一部に 500V の電位差を与える。また、圧電体の比誘電率は大きいので、貫通孔や空洞を含めたその他の境界すべてで電荷の無漏れを仮定する。図 9 に、ベクトル型 FEM において電氣的境界条件を課すために零固定された辺自由度を示す。本モデルのバンド域 $S_{NLB_j}^q$ は 3 本である。要素数は約 18k であり、自由度数は深さ優先探索によるゲージ固定後で約 29k である。一方で、同一の要素分割におけるスカラ型 FEM の自由度数は約 15k である。両 FEM モデルとも、ディレクレ境界とノイマン境界の取り扱い部はディレクレ境界条件を優先した。

図 10 に、側面の電極と無漏れ表面の取り扱い（図 8 中の点 A）近傍における、電気変位 $\hat{\mathbf{D}}$ の分布（矢印で表現）とメッシュ変形図を示す。図中の番号 2298 は変形の様子を比較しやすくするために描画した節点番号である。同図左がベクトル型 FEM によるものであり、右がスカラ型 FEM によるものである。この場合、電極端部で電界が特異となっているので、この近傍にある要素内の諸量の値そのものを議論することは物理的にあまり意味がないが、離散化手法としての各 FEM 解法の特徴がよく出ている。すなわち、ベクトル型 FEM では無漏れ条件の面を有する要素内で $\hat{\mathbf{D}}$ はこの面に平行となる一方で、等電位の電極面を有する要素内で $\hat{\mathbf{E}}$ （誘電率が等方ゆえ、 $\hat{\mathbf{E}}$ と $\hat{\mathbf{D}}$ の分布はほとんど同じ）はこの面に垂直とならない。これは、前者がディレクレ境界ゆえに離散化後も厳密に満たされるが、後者はノイマン境界ゆえに式(16)が重み付き残差の意味でしか満たすことができないためである。逆に、スカラ型 FEM では、等電位の電極を有する要素内で $\hat{\mathbf{E}}$ はこの面に垂直となる一方で、無漏れ条件の面を有する要素内で $\hat{\mathbf{D}}$ はこの面に平行とならない。これらが機械場に影響するために、変形や応力分布が少し異なったものとなる。すなわち、取り扱い部でディレクレ境界を優先したこともあるが、変形について、ベクトル型 FEM では取り扱い部で折れ曲がり、スカラ型 FEM ではその 1 要素下で折れ曲がっている。これから取り扱い部の応力分布も異なってくることも理解できる。

5・4 多結晶モデル 多結晶モデルを例に、共役勾配法による反復解法の収束性について示す。ここではゲージ固定を行わない。

図 11 に示すような、縦横各 2mm、高さ 1mm の直方体の有限要素モデルを考える。このモデルは 10 領域からなり、領域ごとに異なる主軸方向をランダムに割り当てることで多結晶構造を模擬したものである。電氣的・機械的境界条件については、上面の z 方向変

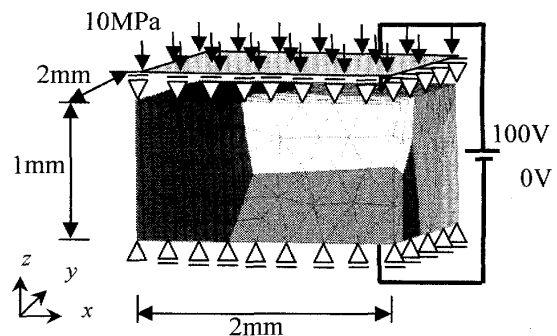


Fig. 11 Polycrystalline model (Mesh S)

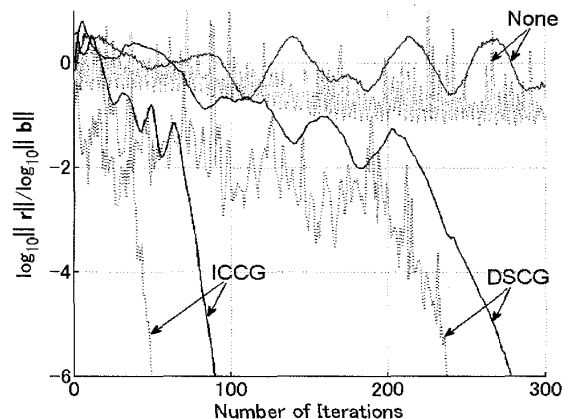
Fig. 12 CG iteration process for mesh S
(Solid line: vector-FEM, Dotted line: scalar-FEM)

Table 1 Number of CG iterations

Mesh	Vector FEM		Scalar FEM	
	DSCG	ICCG	DSCG	ICCG
S	279	91	238	50
M	828	262	841	140
L	1772	560	1944	289

位を一律にした以外、図 4 に示したものと同一である。細かさの違う要素分割を 3 種類用意する。具体的に、S（図 11）（節点数 0.5k、辺数 2.6k、自由度数 3.3k）、M（節点数 7k、辺数 47k、自由度数 66k）、L（節点数 56k、辺数 372k、自由度数 526k）である。また、3 種類の前処理因子（前処理なし（None）、対角前処理（DSCG）、緩和付き不完全コレスキ分解前処理（ICCG））を考える。全体自由度番号は Reverse Cuthill-McKee 法により付け替える。

図 12 に、要素分割 S に対するベクトル型 FEM の前処理因子ごとの収束過程（実線）を示す。横軸は反復回数、縦軸は残差ノルム $\|\mathbf{r}\|$ と外力ノルム $\|\mathbf{b}\|$ の比であり、収束判定基準を $\|\mathbf{r}\|/\|\mathbf{b}\| < 10^{-6}$ とした。参考のため、同図に同一の要素分割におけるスカラ型 FEM（自由度数 1.5k）の収束過程（点線）も併せて示

す。両 FEM の None については、自由度数以上の反復回数での収束を確認した。収束性に関して ICCG < DSCG < None となっている。前処理を行うと収束性が大きく改善するのは、電気と機械という複合物理問題ゆえの性質であると考ええる。すなわち、電気と機械の間で行列係数の大きさが一般に違うため、DSCG でこれらを揃えるだけでも収束性が大きく改善する。この係数行列の大きさの違いは、a) 構成則に由来するためと、b) 式(18)で辺に関する未知変数は線積分値で定義されている一方で、節点に関する未知変数はその点における値なので、両者を混合して解く本手法では要素サイズに依存するためである。節点に関する未知変数のみとなるスカラー型 FEM では、前者のみが係数行列の大きさの違いの原因である。なお、スカラー型 FEM の全体剛性行列は不定値となるので、収束の保証がないものの、本例では細かく振動しつつベクトル型 FEM よりある程度少ない回数で収束した。前処理を工夫すると、スカラー型 FEM でも共役勾配法で良く収束することが実験的に確かめられている⁽¹⁵⁾。

表 1 は、要素分割の細かさを変えたときの DSCG と ICCG の反復回数である。ゲージ固定をしない場合、ICCG では緩和係数 $(1 + \omega)$ の必要性が指摘されている⁽⁶⁾ので、ベクトル型 FEM では予備実験から $\omega = 0.1$ とした。実際、要素分割 L の場合に緩和係数がないと収束性が大きく悪化した。両 FEM の傾向は基本的に似ているが、スカラー型 FEM に比べてベクトル型 FEM で ICCG の反復回数が 2 倍弱となっている。これは、同一の要素分割でもベクトル型 FEM では約 2 倍の自由度数となっていることが一因と考える。自由度数の違いを考慮に入れると、ベクトル型 FEM では DSCG の効果が高いともいえる。計算時間に関しては ICCG \approx DSCG であることを確認した。したがって並列化や実装の容易さも考慮すると、圧電問題のベクトル型 FEM において共役勾配法を用いる場合、前処理が必須であるが、最も単純な DSCG で良いと考える。

6. おわりに

本論文では、ベクトル電気ポテンシャル型の 3 次元有限要素解析手法を提案した。2 次元問題の場合^(3, 5)と異なり、離散化に辺・節点混合要素を用いることで、定式化上の制限（体積電荷なし、電極は等電位、電極以外は表面電荷なし）と 3 次元問題に特有のゲージ条件に対応した。

本手法は、従来のスカラー電気ポテンシャル型の手法に比べて制限があり、電氣的境界条件の取り扱いも煩

雑化する。しかしながら、熱力学的な視点から示量性状態量を未知変数とするものであるため、非線形の圧電問題を取り扱うときに有利になると考える。したがって今後、相変態の構成則モデルを組み込むことで、3 次元非線形問題への適用を予定している。

参考文献

- (1) Allik, H., Hughes, T.J.R., Finite Element Method for Piezoelectric Vibration, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 2 (1970), pp. 151-157
- (2) Gudenzi, P., Bathe, K.J., An Iterative Finite Element Procedure for the Analysis of Piezoelectric Continua, *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, Vol. 6, No. 2(1995), pp.266-273
- (3) Nagai, G. et al., Numerical Procedure for Polycrystalline Ferroelectric/Ferroelastic Problems Using Landau's Phenomenological Model, *Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering* Vol. 2, No. 10(2008), pp.1307-1317
- (4) Huber, J.E. et al., A constitutive model for ferroelectric polycrystals, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol.47(1999), pp.1663-1697
- (5) Landis, C.M., A New Finite-Element Formulation for Electromechanical Boundary Value Problems, *Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 55(2002), pp.613-628
- (6) Igarashi, H., et al., *New Computational Electromagnetics* (in Japanese), (2003), Baifu-kan
- (7) Albanese, R., Rubinacci, G., Magnetostatic Field Computations in terms of Two-Component Vector Potentials, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 29(1990), pp.515-532
- (8) Goliias, N.A., Tsiboukis, T.D., Magnetostatics with Edge Elements: A Numerical Investigation in the Choice of the Tree, *IEEE Transactions on Magnetics*, Vol. 30, No. 5(1994), pp.2877-2880
- (9) Ikeda, T., *Fundamentals of piezoelectric materials Science* (in Japanese), (1984), Ohm-sya
- (10) Chen, L.Q., Phase-Field Models for Microstructure Evolution, *Annual Review of Materials Research*, Vol. 32 (2002), pp.113-140
- (11) Kaasschieter, E.F., Preconditioned Conjugate Gradients for Solving Singular Systems, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 24 (1988), pp.265-275
- (12) K. Ishihata, *Algorithm and Data Structure* (in Japanese), (1989), Iwanami shoten
- (13) Silva, E.C.N. et al., Design of Piezocomposite Materials and Piezoelectric Transducers Using Topology Optimization — Part I, *Archives of Computational Methods in Engineering*, Vol. 6, No. 2 (1999), pp.117-182
- (14) Washizu, K., *Introduction to Variational Methods in Elasticity* (in Japanese), (1972), Baifu-kan
- (15) Asai, M., et al., An Iterative Solver Applied to Strongly Coupled Piezoelectric Problems of Porous Pb(Zr,Ti)O₃ with Nondestructive Modeling of Microstructure, *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol.15(2007), pp.597-617