境界要素法論文集 Vol. 18 (2001 年 11 月), 論文 No. BEM2001_101714 JASCOME

圧電材料の基本解の計算に関する検討

A STUDY FOR CALCULATIONS OF THE FUNDAMENTAL SOLUTION OF PIEZOELECTRIC MATERIALS

松本　敏郎 [1)], 田中　正隆 [2)], 石川　真之 [3)]

Toshiro MATSUMOTO, Masataka TANAKA and Masayuki ISHIKAWA

1) 信州大学工学部機械システム工学科　(〒 380-8553　長野市若里 4-17-1,　E-mail: toshiro@gipwc.shinshu-u.ac.jp)
2) 信州大学工学部機械システム工学科　(〒 380-8553　長野市若里 4-17-1,　E-mail: dtanaka@gipwc.shinshu-u.ac.jp)
3) 信州大学大学院工学系研究科　(〒 380-8553　長野市若里 4-17-1,　E-mail: ishikawa@artist.shinshu-u.ac.jp)

This paper presents a study for calculations of the fundamental solution of piezoelectric materials. Two kinds of representation for the fundamental solution have been presented so far, the representation by an integral along a unit circle and the explicit one derived by means of evaluation of residues. In this paper, computational efficiency and accuracy of each representation are discussed through some numerical demonstrations.

Key Words: Piezoelectric Material, Fundamental Solution, Boundary Element Method

1. はじめに

圧電セラミックやポリマーなどの圧電材料が，航空宇宙，自動車，医療機器，電子機器等で，ますます重要になってきている．それに伴い，圧電材料の強度や振動特性などの力学的挙動の高精度な数値解析法の開発が必要となってきている．圧電材料 (1) は，弾性場と電場が互いに連成し，材料定数も異方性を示すため，その支配微分方程式はきわめて複雑な形となる．このため，圧電材料の変形・応力解析に対する境界要素法の定式化に必要な基本解を陽に得ることは最近まで困難とされ，単位円周上の積分として計算されていた．ところが近年，Radon 変換の逆変換の積分の評価を工夫することにより，Tonon(2) が Wang(3) の方法を用いて，留数の形でこの基本解の陽な表現を示している．そこで本論文では，現在知られているこれら 2 つの基本解の計算精度や計算時間について考察を行い，これらの基本解の境界要素法への適用可能性について検討する．

2. 圧電材料の基本解

2.1 支配微分方程式

圧電材料の静弾性問題における支配微分方程式は次の式 (1) と (2) を連立させた偏微分方程式となる．

$$C_{ijkl}\partial_l\partial_i u_k + e_{lij}\partial_l\partial_i\phi = -b_j \tag{1}$$

$$e_{ikl}\partial_l\partial_i u_k - \epsilon_{il}\partial_l\partial_i\phi = q \tag{2}$$

ただし，u_k は変位，ϕ は電位，C_{ijkl} は弾性定数テンソル，e_{lij} は圧電定数テンソル，ϵ_{il} は誘電率テンソルである．また，添字の範囲は 1, 2, 3 であり，繰り返し用いられる添字は総和規約に従う．ここで，式 (1) と (2) をまとめて，次式のように書くことにする．

$$\Gamma_{JK}(\partial_x)U_K = -B_J \tag{3}$$

ただし，

$$\Gamma_{JK}(\partial_x) = \begin{cases} C_{ijkl}\partial_l\partial_i, & J=1,2,3,\ K=1,2,3 \\ e_{lij}\partial_l\partial_i, & J=1,2,3,\ K=4 \\ e_{ikl}\partial_l\partial_i, & J=4,\ K=1,2,3 \\ -\epsilon_{il}\partial_l\partial_i, & J=4,\ K=4 \end{cases} \tag{4}$$

$$U_K = \begin{cases} u_k, & K=1,2,3 \\ \phi, & K=4 \end{cases} \tag{5}$$

$$B_J = \begin{cases} b_j, & J=1,2,3 \\ -q, & J=4 \end{cases} \tag{6}$$

である．ただし，大文字の添字は 1〜4 の範囲を取るものとする．

2.2 基本解の単位円周上の積分による表現

まず，Deeg(4) によって求められている基本解について示す．式 (3) に Radon 変換 (5) を用いることにより，基本解 U^*_{KP} が次式のように得られる．

$$U^*_{KP} = \frac{1}{8\pi^2}\int_{|\mathbf{n}|=1}\Gamma^{-1}_{KP}(\mathbf{n})\,\delta(s)\,dS(\mathbf{n}) \tag{7}$$

ただし，s は Radon 変換の変換パラメータである．ここで，単位球の表面上の座標系として次式を定義する (Fig. 1).

$$\mathbf{x} = r\,\mathbf{e}, \qquad r = |\mathbf{x}| \tag{8}$$

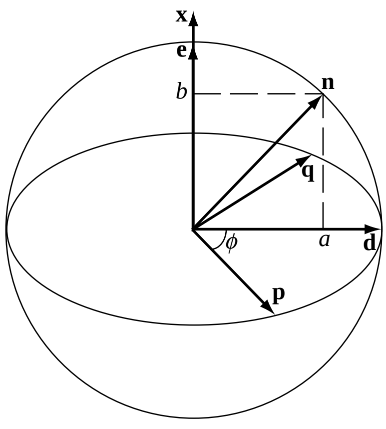

Fig. 1　Geometrical relation between **x**, **e**, **d** and **n**

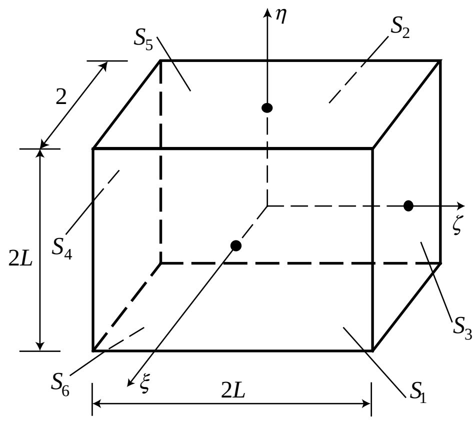

Fig. 2　A rectangular parallelepiped

$$\mathbf{d}(\phi) = \mathbf{p}\cos\phi + \mathbf{q}\sin\phi \tag{9}$$

ただし，$\mathbf{e}$ は単位ベクトルであり，$\mathbf{d}$ は $\mathbf{e}$ に垂直な面に存在する単位ベクトルである．また，$\mathbf{p}$ と $\mathbf{q}$ は $\mathbf{e}$ に垂直な平面内での正規直交ベクトルの組であり，$\mathbf{p}$ は $\mathbf{p}\cdot\mathbf{e} = 0$ を満足する単位ベクトルを一つ選ぶものとする．このとき，基本解 U^*_{KP} が次式のように得られる．

$$U^*_{KP} = \frac{1}{8\pi^2 r}\int_0^{2\pi} \frac{A_{KP}(\mathbf{d}(\phi))}{D(\mathbf{d}(\phi))}\,d\phi \tag{10}$$

ただし，

$$A_{KP}(\mathbf{d}(\phi)) = \mathrm{adj}[\,\Gamma_{KP}(\mathbf{d}(\phi))\,] \tag{11}$$

$$D(\mathbf{d}(\phi)) = \det[\,\Gamma_{KP}(\,\mathbf{d}(\phi))\,] \tag{12}$$

$$\Gamma_{JK}(\mathbf{d}(\phi)) = \begin{cases} C_{ijkl}d_l d_i, & J = 1,\,2,\,3,\ K = 1,\,2,\,3 \\ e_{lij}d_l d_i, & J = 1,\,2,\,3,\ K = 4 \\ e_{ikl}d_l d_i, & J = 4,\ K = 1,\,2,\,3 \\ -\,\epsilon_{il}d_l d_i, & J = 4,\ K = 4 \end{cases} \tag{13}$$

であり，adj[·] と det[·] は，それぞれ余因子行列と行列式を意味する．この式変形で単位球の表面上での積分が，単位円の円周上での積分へと変換されたことになる．表面力に関する基本解 T^*_{KP} を求めるためには，U^*_{KP} の勾配を求める必要がある．U^*_{KP} の勾配 $U^*_{KP,i}$ は次式のようになる．

$$U^*_{KP,i} = \frac{1}{8\pi^2 r}\left\{\int_0^{2\pi}\frac{1}{D(\mathbf{d}(\phi))}\left[A_{KP,i}(\mathbf{d}(\phi)) - \frac{A_{KP}(\mathbf{d}(\phi))D_{,i}(\mathbf{d}(\phi))}{D(\mathbf{d}(\phi))}\right]d\phi - \frac{r_{,i}}{r}\int_0^{2\pi}\frac{A_{KP}(\mathbf{d}(\phi))}{D(\mathbf{d}(\phi))}\,d\phi\right\} \tag{14}$$

上式を，構成方程式に代入することにより，表面力に関する基本解 T^*_{KP} を求めることができる．

2.3 基本解の陽な表現

基本解の陽な表現は，Tonon[(2)] が Wang[(3)] の方法を用いることにより求めた．式 (7) を Fig. 2 に示すような直交六面体の表面上での積分として考えて書き直すと次式のようになる．

$$U^*_{KP} = \frac{1}{8\pi^2}\int_\Omega \Gamma^{-1}_{KP}(\mathbf{n})\,\delta(\mathbf{n}\cdot\mathbf{x})\,d\Omega(\mathbf{n}) \tag{15}$$

ここで，ベクトル $\mathbf{n}$ の基底を以下の手順で定義する．まず，次式で基底 $\mathbf{e}$ を定義する．

$$\mathbf{e} = \frac{\mathbf{x}}{r}, \qquad r = |\mathbf{x}| \tag{16}$$

次に，$\mathbf{e}$ と異なる任意の単位ベクトル $\mathbf{v}$ を考えると，$\mathbf{e}$ に垂直な 2 つの単位ベクトルを次式のように得る．

$$\mathbf{p} = \frac{\mathbf{e}\times\mathbf{v}}{|\mathbf{e}\times\mathbf{v}|}, \qquad \mathbf{q} = \mathbf{e}\times\mathbf{p} \tag{17}$$

基底 $\mathbf{e}$，$\mathbf{p}$，$\mathbf{q}$ を用いてベクトル $\mathbf{n}$ を次式のように表す.

$$\mathbf{n} = \xi\mathbf{p} + \zeta\mathbf{q} + \eta\mathbf{e} \tag{18}$$

式 (18) の座標で式 (15) の積分を評価すると次式に帰着する．

$$U^*_{KP} = \frac{1}{4\pi^2 r}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{A_{KP}(\mathbf{p}+\zeta\mathbf{q})}{D(\mathbf{p}+\zeta\mathbf{q})}\,d\zeta \tag{19}$$

ここで，次式の根を求める．

$$D(\mathbf{p}+\zeta\mathbf{q}) = 0 \tag{20}$$

上式は 8 つの根を持ち，そのうち 4 つは残りの 4 つの共役複素数である．これらの根を用いて $D(\mathbf{p}+\zeta\mathbf{q})$ を次のように書き直す.

$$D(\mathbf{p}+\zeta\mathbf{q}) = \sum_{k=0}^{8} a_{k+1}\zeta^k = a_9\prod_{m=1}^{4}(\zeta-\zeta_m)(\zeta-\zeta^*_m) \tag{21}$$

ただし，ζ_m，ζ^*_m は，$D(\mathbf{q}+\zeta\mathbf{p}) = 0$ の根であり，a_9 は ζ^8 の係数である．上式を用いて，式 (19) に留数定理を適用すると次式を得ることができる．

$$U^*_{KP} = \mathrm{Re}\left[\frac{\mathrm{i}}{2\pi r}\sum_{m=1}^{4}\frac{A_{KP}(\mathbf{p}+\zeta_m\mathbf{q})}{a_9(\zeta_m-\zeta^*_m)\displaystyle\prod_{k=1\,(k\neq m)}^{4}(\zeta_m-\zeta_k)(\zeta_m-\zeta^*_k)}\right] \tag{22}$$

ただし，i は虚数単位である．式 (22) が，Tonon によって求

められた基本解である．Tonon は示してないが，式 (20) の根が n 重根（ただし，n=2 また 3）となる場合には，式 (22) の代わりに次式を用いる．

$$U^*_{KP} = \mathrm{Re}\left\{\frac{\mathrm{i}}{2\pi r}\left[\lim_{\zeta\to\zeta_1}\frac{d^{n-1}}{d\zeta^{n-1}}\left(\frac{A_{KP}(\mathbf{p}+\zeta\mathbf{q})}{a_9(\zeta-\zeta_1^*)^n\prod_{m=n}^{3}(\zeta-\zeta_m)(\zeta-\zeta_m^*)}\right) + \sum_{m=n}^{3}\lim_{\zeta\to\zeta_m}\left((\zeta-\zeta_m)\frac{A_{KP}(\mathbf{p}+\zeta_m\mathbf{q})}{D(\mathbf{p}+\zeta\mathbf{q})}\right)\right]\right\} \tag{23}$$

表面力に関する基本解 T^*_{KP} を計算するためには，変位に関する基本解 U^*_{KP} の勾配が必要となるが，同様の手順でその陽な表現を得ることはきわめて困難である．そこで Tonon は中心差分により勾配を求めている．すなわち，

$$\frac{\partial U^*_{KP}(x)}{\partial x_i} \approx \frac{U^*_{KP}(x+h)-U^*_{KP}(x-h)}{2h} \tag{24}$$

である．

一連の基本解の計算において，複雑な式変形が必要となるため，プログラム開発を容易に行うための検討を行う．たとえば，式 (23) を計算するためのプログラムを考えてみよう．この式の計算のためには，$\Gamma_{KP}(\mathbf{p}+\zeta\mathbf{q})$ の余因子行列と行列式の根を用いた多項式を含む項を，ζ で微分する必要があり，非常に複雑な式となることが予想される．そこで本研究では，このプログラム開発に数式処理ソフト Maple V を援用した．Maple V は，導出した式を，最適化された Fortran プログラムとして出力することができ，一連の処理で人為的ミスを最小にできるとともに，プログラムの開発効率を大幅に向上させることができる．式 (23) の計算では，まず，$\mathbf{p}+\zeta\mathbf{q}$ を次のように入力する．

```
n1:=P1+ZETA*Q1:
n2:=P2+ZETA*Q2:
n3:=P3+ZETA*Q3:
```

次に，$\Gamma_{KP}(\mathbf{p}+\zeta\mathbf{q})$ を次のように行列宣言してから入力する．

```
G:=array(1..4,1..4):
G[1,1]:=C11*n1*n1+C16*n2*n1+ ···
G[1,2]:=C16*n1*n1+C12*n2*n1+ ···
G[1,3]:=C15*n1*n1+C14*n2*n1+ ···
        ⋮
```

これらより，余因子行列を求め，最終的に式 (22) に対応する Fortran プログラムとして出力させた結果を，Fig. 3 に示す．この出力されたプログラムは，同じ計算を繰り返さない最適化された形になっている．それにも関わらず，約 1100 行にもなる膨大な式となっており，式 (22) の数式の複雑さが伺える．

3. 基本解の計算精度と計算時間の比較

以上に示した単位円周上の積分による表現（式 (10)，(14)），および，留数を用いた基本解の陽な表現（式 (22)，(23)，(24)）を用いて基本解の計算したときの精度と計算時間の比較を行う．計算には Apple Computer 社製の iMac G3 400MHz を用い，Pro Fortran 6.0 を用いてコンパイルして計算した．また，式 (20) の根の計算には，Jenkins-Traub によるアルゴリズムの IMSL ライブラリを用いた．

```
t1 = Q2**2
t3 = Q1**2
t5 = C46*Q1
t7 = C24*Q3
t9 = C62*Q2
t11 = C42*Q2
t13 = C26*Q1
t15 = C64*Q3
t17 = Q3**2
t19 = C22*t1+C66*t3+t5*Q3+t7*Q2+···
        ⋮
t3111 = t1862*t393
t3112 = 6.D0*t3019*t126+5.D0*t3034*···
t3121 = -t3100-t3101+t3102+t3103-···
t3129 = t3019*t568+t3034*t126+···
t3134 = t3129*t554
t3137 = t3134*t557
DifAD(1,1) = t551*t554*t557*t566-···
DifAD(1,2) = t919*t554*t557*t566-···
        ⋮
DifAD(4,4) = t3112*t554*t557*t566-···
```

Fig. 3　Optimized Fortran program list automatically generated by Maple V

Table 1　Relative error of U^*_{KP} for an isotoropic material

	Points=10	Points=12	Points=14	Explicit
U^*_{11}	1.262E-09	5.195E-13	0.000E-00	5.409E-14
U^*_{12}	1.618E-08	6.656E-12	7.158E-15	2.410E-13
U^*_{23}	3.518E-09	1.449E-12	2.386E-15	3.788E-14

3.1 計算精度の比較

まず，単位円周上の積分表現による基本解と，陽な式で示された基本解の計算結果を，それぞれ等方性弾性体の材料定数による計算で Kelvin の解と比較する．単位円周上の積分は，Gauss の数値積分を用いて評価し，その積分点数による精度の違いについても示す．解析条件は，Young 率を $E=200$ [GPa]，Poisson 比を $\nu=0.3$，ソース点の座標を (0, 0, 0)，観測点の座標を (1, 2, 3) とする．Table 1 には，U^*_{KP} における，単位円周上の積分表現による基本解の Gauss の数値積分点数ごとの計算精度と，陽な式で示された基本解の計算精度を相対誤差で示す．

次に，基本解 T^*_{KP} の結果の比較を行った．差分による計算では，$h=r\times10^{-6}$ として計算した．ただし，法線方向単位ベクトルを $(3/\sqrt{14},\ 2/\sqrt{14},\ 1/\sqrt{14})$ とした．その計算精度を相対誤差で Table 2 に示す．単位円周上の積分をする際の Gauss の数値積分点数は，U^*_{KP} の計算で精度の良い結果が得られている 14 点を用いている．U^*_{KP} に関しては，どちらも高精度な結果が得られたが，T^*_{KP} に関しては，差分による結果の精度は満足できるものではなかった．

Table 2　Relative error of T^*_{KP} for an isotoropic material

	Unit circle	Explicit solution
T^*_{11}	1.1198E-14	3.9413E-08
T^*_{12}	1.1554E-14	2.2473E-07
T^*_{13}	7.4110E-15	8.6855E-08
T^*_{22}	2.7360E-15	8.0827E-08
T^*_{33}	0.0000E-00	2.0612E-08

Table 3　Relative error of U^*_{KP} for an anisotoropic material

	Points=14	Points=28	Points=56	Explicit
U^*_{11}	5.602E-06	8.630E-08	4.780E-15	4.780E-15
U^*_{12}	1.066E-02	9.906E-05	3.670E-12	7.231E-12
U^*_{23}	1.365E-03	2.157E-08	1.262E-13	2.252E-14

次に，直交異方性材料とし，異方性が強い材料の場合の計算精度を，それぞれ陽な基本解を Maple V を用いて 50 桁の多倍長計算を行った結果と比較する．この場合の弾性定数は，C_{11}= C_{22}= 9.85 [GPa]，C_{12}= 0.691 [GPa]，C_{13}= C_{23}= 4.43 [MPa]，C_{33}= 0.412 [GPa]，C_{44}= C_{55}= 73.5 [MPa]，C_{66}= 4.58[GPa] とした．Table 3 には，U^*_{KP} における，単位円周上の積分表現による基本解の Gauss の数値積分点数ごとのの計算精度と，陽な表現で示された基本解の計算精度を相対誤差で示す．この場合，単位円周上の積分で基本解を計算する方法では，Gauss の数値積分点を 56 個まで増やして，陽な基本解の計算法と同程度の精度が得られた．

なお，観測点を x 軸上，y 軸上，z 軸上に置いた場合についても，同様の結果が得られた．

3.2 計算時間の比較

単位円周上の積分表現による基本解と陽な式で示された基本解の計算時間を比較する．ただし，1 回の計算時間が非常に短いため，同じ計算を 1000 回繰り返した結果を比較する．まず，Young 率を E= 200 [GPa]，Poisson 比を ν= 0.3 の等方性材料として計算した場合の計算時間を Table 4 に示す．ただし，単位円周上での積分をする際の Gauss の数値積分点数は 14 点とする．

次に，直交異方性材料における計算時間を Table 5 に示す．弾性定数を，C_{11}= C_{22}= 9.85 [GPa]，C_{12}= 0.691 [GPa]，C_{13}= C_{23}= 4.43 [MPa]，C_{33}= 0.412 [GPa]，C_{44}= C_{55}= 73.5 [MPa]，C_{66}= 4.58[GPa] とする．ただし，単位円周上での積分をする際の Gauss の数値積分点数は 56 とする．

最後に，圧電材料における計算時間を Table 6 に示す．材料は PZT-4 を想定し，弾性定数を，C_{11}= C_{22}= 139 [GPa]，C_{12}= 77.8 [GPa]，C_{13}= C_{23}= 74.3 [GPa]，C_{33}= 115 [GPa]，C_{44}= C_{55}= 25.6 [GPa]，C_{66}= 30.6 [GPa]，圧電定数を，e_{15}= e_{24}= 12.7 [C/m^2]，e_{31}= e_{32}= -5.2 [C/m^2]，e_{33}= 15.1 [C/m^2]，誘電率を，ϵ_{11}= ϵ_{22}= 6.461 [nC/(Vm)]，ϵ_{33}= 5.620 [nC/(Vm)] とする．単位円周上での積分をする際の Gauss の数値積分点数を 56 として計算を行った場合においてもやはり，単位円を用いた基本解の方が高速に計算されている．陽な式で示された基本解では，極の計算に大きな計算時間を必要 とするために，結果として単位円周上で数値積分を行う方法が高速に計算できることが分かった．また，表面力の基本解 T^*_{KP} の計算も，数値積分に基づく方法の方が容易で高精度であることが分かった．

Table 4　Comparison of computation time for an isotropic material [sec]

Method	U^*_{KP}	U^*_{KP} and T^*_{KP}
Unit circle	0.11621	0.54981
Explicit solution	1.7001	11.983

Table 5　Comparison of computation time for an anisotropic material [sec]

Method	U^*_{KP}	U^*_{KP} and T^*_{KP}
Unit circle	0.44995	2.1834
Explicit solution	0.81640	5.8828

Table 6　Comparison of computation time for a piezoelectric material [sec]

Method	U^*_{KP}	U^*_{KP} and T^*_{KP}
Unit circle	0.46668	2.2833
Explicit solution	0.96668	6.7334

4. 結　言

本論文では，圧電材料の基本解の 2 種類の計算方法について，計算精度と計算時間の比較を行うとともに，数式処理を援用することにより，プログラムの作成の効率化を図った．等方性材料として比較した場合，U^*_{KP} に関しては，いずれも高精度な計算結果が得られたが，T^*_{KP} に関しては，単位円周上の積分表現に比べて，陽な表現で示された基本解の計算は，差分に基づくため，精度の落ちる結果となった．計算時間の比較では，単位円周上の積分表現が高速であった．基本解を陽に表現することは魅力的であるが，この問題のように異方性材料や圧電材料に対しては，計算速度の点から必ずしも有利ではないことが示された．

参考文献

(1) B. Jaffe, W.R. Cook Jr., H. Jaffe：*Piezoelectric Ceramics*, Academic Press Limited, (1971).

(2) E. Pan, F. Tonon：Three-dimensional Green's functions in anisotropic piezoelectric solids, *International Journal of Solids and Structures* **37**, (2000), pp. 943–958.

(3) C.-Y. Wang：Elastic fields produced by a point source in solids of general anisotropy, *Journal of Engineering Mathematics* **32**, (1997), pp. 41–52.

(4) W.F. Deeg：The Analysis of Dislocation, Crack, and Inclusion Problems in Piezoelectric Solids, Ph.D. Thesis, Stanford Univ., Stanford, CA, May, (1980).

(5) I.M. Gel'fand, M.I. Graev, Y.N. Vilenkin：*Generalized Functions*, Vol. 5., Academic Press, New York, (1966).