

研究種目：若手研究（B）

研究期間：2008～2009

課題番号：20760054

研究課題名（和文）強誘電・強弾性体に対するマルチスケール解析手法の開発

研究課題名（英文） Development of multi-scale analysis procedure  
for ferroelectrics and ferroelastics

研究代表者

永井 学志（NAGAI GAKUJI）

岐阜大学・工学部・准教授

研究者番号：90334359

研究成果の概要（和文）：電気と変形が相互に連成する機能性材料の挙動予測を目的として、計算機による 3 次元シミュレーション手法の開発を行った。これまでの手法では電気と変形の連成が線形でなく非線形となる場合には対応できないことが多かったが、本研究で開発した手法を用いると非線形の場合でも安定的にシミュレーション可能となった。これにより、加速度センサやインクジェットプリンタ部品の挙動予測の高精度化が期待できる。

研究成果の概要（英文）：We developed a numerical procedure in three dimensions to predict electro-mechanical behavior of smart materials such as ferroelectrics and ferroelastics. Proposed procedure has ability to simulate their nonlinear electro-mechanical behavior without numerical instability, which was quite hard for conventional procedures. Promising applications of the present procedure are more accurate simulation for acceleration sensor, injector of ink-jet printer, and so on.

交付決定額

（金額単位：円）

	直接経費	間接経費	合計
2008年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2009年度	1,100,000	330,000	1,430,000
年度			
年度			
年度			
総計	2,100,000	630,000	2,730,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：応用物理学・工学基礎」・工学基礎

キーワード：有限要素法，ドメインスイッチング，多結晶体，電気機械的挙動，辺要素，ランダウの現象論モデル，動的解析

### 1. 研究開始当初の背景

(1) 強誘電体や強弾性体は、機械場と電場が構成則レベルで強連成する材料であり、特に線形となる場合には圧電体と称されることが多い。この線形の圧電体に対する有限要素解法(FEM)は現在、数多くの商用 FEM プログラムに実装済みである。しかし、この定式化においては求解すべき場の未知量を、物理的な理解の容易さから変位ベクトルと電位(スカラーポテンシャル) スカラ型 FEM に選んでいるために、変分法の視点からは按点求解型の問題となっていた。したがって、熱力学的な視点から非線形材料構成則のモデリングにおいて、ルジャンドル変換前の熱力学関数には凸性が要求されていた。

(2) 一方で、物性物理学の分野では、強誘電体や強弾性体の一般的な構成則モデリングでは、相転移に起因する現象であることから、準安定状態を記述するために、その熱力学関数を複数の井戸がある不完全なものとすることが多い。すなわち、スカラ型 FEM の定式化を用いる限り、ルジャンドル変換の制約から、この種の構成則モデリングは一切使用できない。これが、強誘電体材料もしくは強誘電デバイスの非線形解析が未だに一般化しない理由の1つであると考えている。

(3) 上記のことを踏まえ、研究代表者はこの研究に先立ち、求解すべき場の未知量を変位ベクトルはそのままに、電位に替えて電気変位を導くベクトル電気ポテンシャルとする有限要素解法 ベクトル型 FEM の開発をはじめ、一定の成果を得ている。この定式化は、熱力学の基礎に立ち戻り、物理状態量の分類に示量量(一般化変位)と示強量(一般化力)という視点を導入することで、材料のマルチフィジクス問題を見通し良くするものである。

### 2. 研究の目的

(1) 強誘電体や強弾性体は多結晶材料であることから、各結晶における材料構成則を非凸な熱力学関数としてモデリングすることにより、均質化された応答を求める数値計算手法を開発する。特に、(a) これまでの研究の展開として、本研究開始時にまだ未展開であったベクトル型 FEM による3次元非線形計算を実施し、それに伴い生じる諸問題を解決していくとともに、(b) 入力として与える熱力学関数の決定についても検討する。

### 3. 研究の方法

(1) 本研究で用いる3次元ベクトル型 FEM では、電気に関して、計算電磁気学分野におけるベクトルポテンシャル場に対する辺要素を用いた FEM 定式化を参考にする。この定式化は四半世紀前にブレイクスルーしたものであるが、機械場と電場が構成則レベルで連

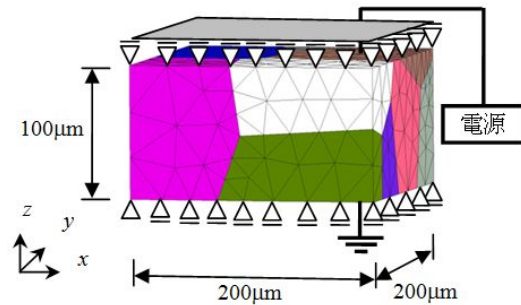


図1 チタン酸バリウム多結晶体のモデル

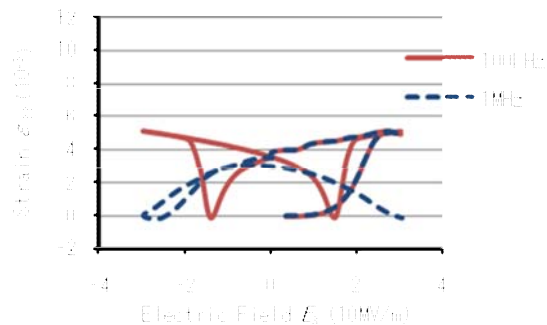


図2 均質化された電界 - ひずみ関係

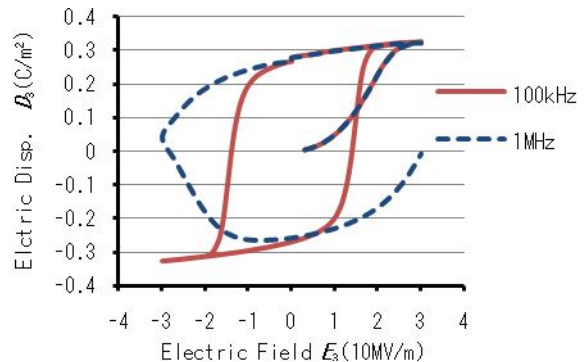


図3 均質化された電界 - 電気変位関係

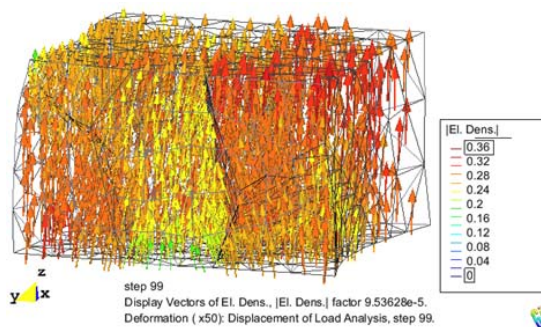


図4 電気変位分布

成する問題への適用性については検討されていない。そこで、これに関連する事柄も含めて研究を行う。

(2) 構成則モデルには、物性物理学の分野で一般的な相転移を現象論的に記述する非凸な熱力学関数として、ランダウの現象論モデル 自由エネルギーを秩序変数に関してマクローリン展開し、その係数を実現象に合致するようにフィッティングするものを流用する。具体的には、まずは多結晶のチタン酸バリウムについて計算する。なお、ランダウの現象論モデルを用いる理由は、よりミクロな第一原理計算のような計算法との接続を考えた場合、最も自然な接続法であると考えられるためである。

#### 4. 研究成果

##### (1) 3次元非線形計算

チタン酸バリウムの3次元多結晶について、各結晶の構成則にランダウの現象論モデルを用いて、巨視的なドメインスイッチング現象の動的解析を行った。図1に示す問題について、その均質化された巨視的応答として、図2, 3に示すようなバタフライカーブとヒステリシスカーブを定性的に再現できた。また、図4にある時刻における電気変位の分布を示す。この動的解析の結果は、構成則モデルに非凸な熱力学関数を用いて数値的に安定に解いたものとしては、新規性が高いものと考えられる。

##### (2) 連立1次方程式の求解法

3次元非線形問題は、計算に時間がかかるため、その主要部である連立1次方程式の求解を安定かつ高速に行うことが重要となる。動的非線形計算の際、共役勾配法による連立1次方程式の求解過程で残差ノルムが発散することがあった。この問題は、辺要素でベクトルポテンシャル場を離散化すると全体剛性行列が半正定値行列となることに起因する。そこで、残差ノルムが発散せずにソフトランディングするMRTR法(3項漸化式に基づく残差最小化法)を適用することでこの問題を解決した。図5にMRTR法による残差ノルムの履歴を示す。また、GPU(Graphic Processing Unit)を用いた計算の高速化も実施し、数倍の速度向上を得た。

##### (3) 6面体の辺・節点混合要素の開発

本研究では主に四面体の辺・節点混合要素のみを用いていたが、本ベクトル型FEMをより汎用化しようとしたとき、四面体要素のみでなく六面体要素も使用できることが望ましい。一般的な六面体形状の辺要素は、パッチテストを満足しないことが知られているにも関わらず、計算電磁気学の分野ではよく用いられている。そこで、六面体要素の圧電問題への流用にあたりパッチテストを実施したところ、圧電問題に対しては許容でき

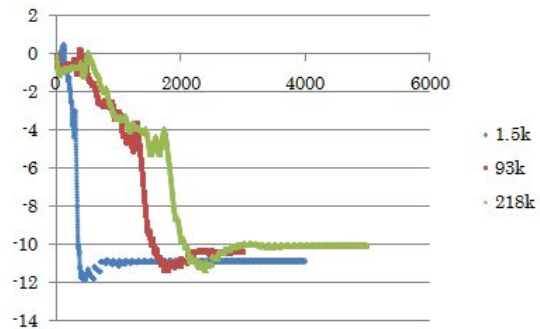


図5 MRTR法による残差履歴(片log)

ないものであった。この問題に対して、既往の文献を参考に、要素のベクトル補間関数として非適合なものを選ぶことで、圧電問題に対するパッチテストを厳密には満足しないものの、実用上の問題がない六面体要素を開発できた。

##### (4) 材料構成則モデリングについて

本研究では、示量量(一般化変位)を未知量とするために熱力学的に有利なモデリングとなっている。そこで、本研究を開始するにあたり可能性として、第一原理計算の計算結果を用いて、ランダウの現象論モデルの係数決定ができると考えた。しかし、研究実施期間中に文献調査を実施し、これが原理的に可能であることは確信したものの、取り組むべき課題が多いことに加えて、工学上の有用性という観点から、ミクロにはあまり立ち入らないで構成則のレベルに留めるべきとの考えに至った。

したがって以上を総括すると、強誘電体の本当の意味でのマルチスケール解法については課題を残したままであるが、2スケールの数値解法の開発については十分に実施できた。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

##### [雑誌論文](計5件)

永井学志, 梅村公博, 佐藤司: 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, 日本機械学会論文集, 査読有, 76巻, 2010, pp.34-43

永井学志, 佐藤司: ランダウの現象論モデルの三次元強誘電体への適用性, 査読無, 計算工学講演会論文集, 14巻, 2009, pp.941-944

G. Nagai, T. Hayashi and T. Takekawa: Numerical Procedure for Polycrystalline Ferroelectric / Ferroelastic Problems Using Landau's Phenomenological Model, J. Solid Mechanics and Material Engineering, 査読有, Vol.2, 2008, No.10, pp. 1307-1317

永井学志, 林孝昌, 武川峻久: 多結晶強誘電体に対する動的非線形解析法, 査読無, 計算工学講演会論文集, 13 巻, 2008, pp.393-396

佐藤司, 永井学志: 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, 査読無, 計算工学講演会論文集, 13 巻, 2008, pp.389-392

[学会発表](計8件)

G. Nagai, Finite element framework for nonlinear piezoelectric/magnetostrictive problems, 2nd International Workshops on Advances in Computational Mechanics, 2010年3月31日, パシフィコ横浜(横浜)

永井学志, 高井陽介: 共役勾配法計算のGPUによる高速化, 加速法ワークショップ, 2009年11月27日, 東京女子大学(東京)

永井学志, 佐藤司, ランダウの現象論ポテンシャルを用いた多結晶性強誘電材料の数値解析手法, 第22回計算力学講演会, 2009年10月11日, 金沢大学(金沢)

G. Nagai: Application of CG method to electromechanical problem with vector potential formulation, Int'l Kyoto-Forum on Krylov Subspace method, 2008年9月11日, 京都大学(京都)

G. Nagai: Numerical procedure for polycrystalline ferroelectrics using Landau's potential and vector-nodal finite element, 8th. World Congress on Computational Mechanics, 2008年7月3日, ベニス(イタリア)

[図書](計1件)

山田貴博[監訳], 永井学志[訳], 松井和己[訳](J. Fish[著] and T. Belytschko[著]), 丸善出版: 有限要素法, 2008, pp.157-291

6. 研究組織

(1) 研究代表者

永井 学志 (NAGAI GAKUJI)

岐阜大学・工学部・准教授

研究者番号: 90334359

(2) 研究分担者

(3) 連携研究者