The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	データ駆動型軟磁性材料開発のための大規模シミュレーションと機械学習の活用
Author(s)	小野, 寛太; 塚原, 宙
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2025, 15, p. 36-38
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/102549
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

データ駆動型軟磁性材料開発のための大規模シミュレーションと機械学習の活用

小野 寛太、塚原 宙

大阪大学 大学院工学研究科

1. はじめに

軟磁性材料は、電力変換機器の効率化やデバイスの小型化を実現する不可欠なコア素材である。特にモーターやトランスを高周波領域（数 kHz～MHz）で駆動する際、飽和磁束密度（Bs）の向上と共にヒステリシス損失、渦電流損失、余剰損失の低減が要求される。

従来、多くの研究では材料の組成や製造条件の試行錯誤によって性能改善を図ってきた。しかしながら、試料作製と評価のサイクルが長期化し、最適条件の絞り込みには膨大な実験工数を要していた。

近年注目を浴びているナノ結晶軟磁性材料について、われわれはその微細構造と磁歪が高周波でのエネルギー損失に与える影響に着目し研究を進めている。大規模シミュレーションにより、低エネルギー損失のナノ結晶軟磁性材料の設計指針を計算機シミュレーションにより確立することができれば、実験工数を大幅に削減できる。

また、近年の HPC 技術の飛躍的進化と機械学習アルゴリズムの高度化により、従来では解析困難であった大規模データから隠れた相関を抽出し、材料設計にフィードバックすることが現実的となっている。

本研究では LLG 方程式に基づく大規模シミュレーションと機械学習解析を融合し、「材料微細構造 ⇔ 高周波エネルギー損失」の関係性をデータから明らかにし、データ駆動型の新たな材料設計指針を確立することを目的としている。

2. 計算モデル

磁化ダイナミクスは下記の Landau–Lifshitz–Gilbert（LLG）方程式に従う。本研究では、磁壁の運動と磁歪効果を同時に記述可能な数値モデルを構築した。

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{m}}{\mathrm{d}t} = -\gamma \mathbf{m} \times \mathbf{H}_{\mathrm{eff}} + \alpha \mathbf{m} \times \frac{\mathrm{d}\mathbf{m}}{\mathrm{d}t}$$

ここで有効磁界 Heff には、交換相互作用、双極子相互作用に加え、磁歪による弾性エネルギー項を含める。弾性エネルギー項は以下のように表される：

$$E_{\mathrm{el}} = \frac{1}{2}\sum_{i,j} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}\varepsilon_{kl},\ \varepsilon_{ij}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\partial_i u_j + \partial_j u_i\right) - \varepsilon_{ij}^0$$

ここで ε_{ij}^0 は磁歪による自由ひずみテンソルである。本モデルでは、結晶粒内部の磁歪定数の異方性と多結晶性を考慮するため、各結晶粒をランダムに配向させたボクセルメッシュを生成し、座標変換行列を用いて磁歪テンソルを局所的に回転させて実装している

3. 大規模並列計算

大規模シミュレーションでは、有限差分法を用い、大規模並列計算を実行した。図 1 はナノ結晶軟磁性材料モデルの歪み分布を表している。図 1 に示すようにランダムに配向した多結晶モデルでは、結晶粒ごとに異なる歪みを示している。このモデルに外部から交流磁界を印加し、このときの磁化分布と歪み分布

を上述した大規模シミュレーションにより計算し、ナノ結晶軟磁性材料の動的挙動を解明することを目的とした研究を行なった。

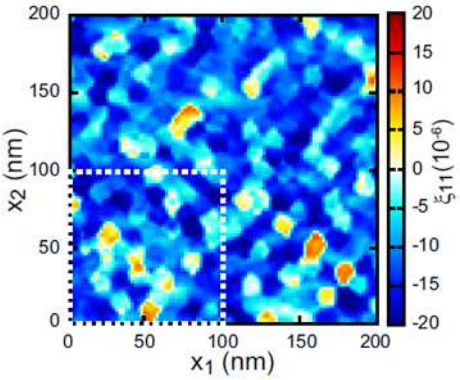

図 1　ナノ結晶軟磁性材料モデルの歪み分布

4. 結果と考察

ナノ結晶軟磁性 α-Fe 系材料の高周波におけるコア損失に対する磁歪の影響を解析した。その結果、有効異方性定数⟨K⟩の結晶径依存性について実測値と高精度で一致した。具体的には、結晶径 D が約 10 nm 以下の領域では、不均質歪みに起因する第 1 項が支配的となり、⟨K⟩ が D^6 にほぼ比例して急激に増大する様子が確認された。一方、結晶径が約 30 nm 以上に成長すると、不均質歪みの寄与が飽和し、均質歪みによる定数項に漸近して緩やかな変化に収束した。これにより、結晶粒径を 20–40 nm の領域に制御することで、異方性起源のエネルギー寄与を最小化しつつ飽和磁束密度を維持できる材料設計の指針が得られた。

次に、損失の周波数依存性について、Bertotti–Sühl モデルを組み合わせた理論予測式に従って、50 kHz から 1 MHz までの高周波領域で実験的に評価した結果、すべての試料において余剰損失が $f^{1.5}$ でスケーリングすることがわかった。特に、飽和磁歪 λ_s が増大するにつれて損失が増大し、モデルパラメータとして導入した粘性係数 η は増大と高い相関を示した。このことは、磁壁が変調磁界に追従する際の遅延現象が、磁歪を介したエネルギー散逸の主要因であることを明確に示唆している。従来の単純なうず電流抑制のための電気抵抗向上や磁気異方性制御だけでは説明困難だった余剰損失成分を、磁歪を起源とする粘性の散逸モデルとして定式化した。

さらに、結晶径と磁歪パラメータの複合効果を評価したところ、ナノ結晶軟磁性材料の最適設計領域が明確化された。すなわち、λ_s を可能な限り小さく抑えつつ、結晶径 D を約 30–40 nm にチューニングすることで、異方性寄与と粘性による散逸のトレードオフを最適化できる可能性が示された。

また、図 2 に示すように 100 と 111 方向の磁歪定数を制御することが可能であれば、バルクでの見かけ上の磁歪定数をゼロに近づけられることがわかった。このように物理パラメータを自由に振って、材料特製の応答を観察できるところが大規模シミュレーションの利点であり、このような手法により材料設計指針を得ることが可能となる。

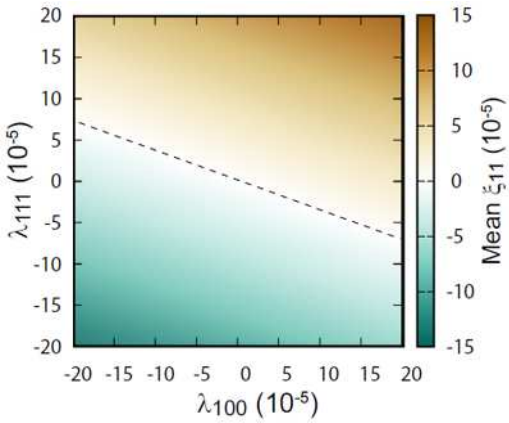

図 2　100 と 111 方向の磁歪定数と平均磁歪定数

マルチスケールモデリングと実験とを統合的に行うことで、シミュレーションと実際のマテリアルとの間に存在する乖離を大幅に縮小し、データ駆動型の材料開発プロセスの信頼性が高くなることが示唆される。

5. おわりに

本研究により、ナノ結晶軟磁性α-Fe 系材料における高周波でのコア損失の微視的起源を、理論モデルによる大規模シミュレーションと実験データとの連携により明らかにした。結晶径依存性を定量化し、磁壁運動に伴う磁歪を起源とするエネルギー散逸が余剰損失の支配的メカニズムであることを明らかにし、その周波数依存性を実測データと比較し、高い整合性が得られることがわかった。これらを統合した評価から、材料設計指針を得ることができた。今後は、本手法を量子ビーム実験データとのマルチモーダル統合解析に拡張し、さらに他系材料（フェライト、メタマテリアルなど）への展開を行うことで、汎用的なデータ駆動型材料開発プラットフォームの実用化を加速することが期待される。本研究成果は、高周波電力変換システムの高効率化と省エネルギー化に貢献する技術基盤として、産業応用への展開に大きく寄与すると考えられる。

参考文献

1. G. Herzer, Acta Materialia 61, 718 (2013).
2. R. Parson et al., J. Magn. Magn. Mater. 476, 142 (2019).
3. S. Bhattacharyya et al., Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 19, 035002 (2011).
4. J. X. Zhang and L. Q. Chen, Acta Materialia 53, 2845 (2005).
5. Hiroshi Tsukahara, Haodong Huang, Kiyonori Suzuki & Kanta Ono, NPG asia materials **16**, 19 (2024).