



機械学習を活用した効率的なネオジム磁石の高特性化に成功

～限られた実験データから最小限の実験でネオジム磁石の最適な作製条件を予測～

配布日時：2021年11月15日14時

国立研究開発法人物質・材料研究機構

概要

1. 国立研究開発法人物質・材料研究機構（NIMS）は、電気自動車などの駆動モーター用磁石として需要が急増しているネオジム磁石について、その作製条件を変化させて得た実験データに機械学習を適用することにより、最小限の実験回数で磁石特性を最大化できることを実証しました。

2. カーボンニュートラルの実現に向け、自動車のみならず様々な輸送機器の電動化が進められているなかで、モーターに使われるネオジム磁石にも用途に応じた様々な特性が要求されるようになってきました。最強の磁石材料であるネオジム磁石は原料となる磁石粉末を成形して焼き固めたり、高温で加工するなど、複雑な工程によって作製されます。磁石の特性は原料合金の組成や製造工程での温度や加工条件によって大きく変化するため、ネオジム磁石の特性改善には上記条件の無数の組み合わせを最適化する必要があります。

3. 今回、NIMSの研究チームは、従来の焼結磁石よりも優れた高温特性が期待されている熱間加工ネオジム磁石に着目し、その作製条件と特性のデータを機械学習することにより、優れた磁気特性の発現が期待される作製条件を予測しました。また実際にその予測にしたがって作製すると、磁石としての特性を効率的に最大化できることを実証しました。通常、機械学習を行うには少ないとされる、わずか18点の初期データを用いて、アクティブラーニングによる特性予測と作製実験を繰り返すと、40回程程度の追加実験で磁気特性を大きく向上させることができました。

4. 今後、ネオジム磁石には、磁気特性に加えて力学特性や電気的特性など、用途に応じて様々な特性が要求されると予想されます。所望の磁気特性を持つネオジム磁石を迅速に開発できるよう、今回検討した作製条件に加え、合金組成や磁気特性をはじめとした諸特性のデータの蓄積をすすめ、アクティブラーニングを活用して、必要とされる磁気特性を発現させるための作製条件を高効率に予測することができる手法開発を目指します。

5. 本研究はNIMSのLambard Guillaume 主任研究員、佐々木泰祐 主幹研究員、袖山慶太郎 グループリーダー、大久保忠勝 副拠点長、宝野和博 フェローからなる研究チームにより、文部科学省元素戦略磁性材料研究拠点の一環として行われました。

6. 本研究成果は、Scripta Materialia 誌に2021年11月7日にオンライン掲載されました。

(DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2021.114341>)

研究の背景

ネオジウム磁石は 1982 年に佐川真人氏により発明された最強の永久磁石材料で、近年急速に普及している電気自動車の駆動モーターとしての需要が急増しています。今後、カーボンニュートラルの実現に向け、自動車に限らず大型トラックや航空機、船舶など様々な輸送機器の電動化が検討されていきますが、それぞれの用途に応じて最適な特性を発現するネオジウム磁石の効率的な開発が求められています。ネオジウム磁石の特性はミクロの結晶から構成される微細構造によって大きく変化するため、効率的な磁石開発のためには合金組成や製造条件の無数の組み合わせを最適化して磁石特性を最大化する必要があります。

ネオジウム合金に磁石としての優れた特性を発現させるには、磁性相である $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 結晶粒の向きが一方方向にきれいに揃った微細組織を創り込まなければなりません。これまでの大部分のネオジウム磁石は、合金を粉砕して作製した粉末を磁場中で成形してマイクロサイズの $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 結晶粒を一方方向に配向させた後、それを焼き固める焼結法で製造されてきました。一方、一部のメーカーでは液体急冷合金の粉を熱間加工することによりサブミクロンの超微細 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 結晶が一方方向に配向する熱間加工磁石を製造しており、そのサブミクロンの結晶サイズによって耐熱性の優れた磁石ができることが特徴となっています。

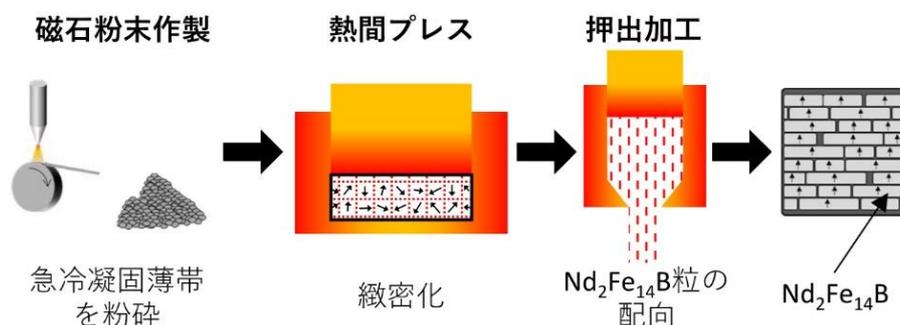


図 1: 熱間加工法によるネオジウム磁石の作製プロセスの模式図。図中の矢印は、 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 結晶粒の向きを示す。

このような熱間加工磁石の特性は合金組成、熱間プレス、押出加工などの一連の製造工程により変化する結晶のサイズや配向によって大きく変化します。これまでは、作製する人の勘や試行錯誤によって製造条件を最適化して磁気特性を向上させてきましたが、膨大な実験条件の組み合わせから最適な作製条件を選び出すには非常に多くの実験が必要です。今後さまざまな用途に適した磁石特性を発現して行くには、このような試行錯誤的な実験より効率的な条件探索手法の確立が必要不可欠です。

一方、実験条件とそれから得られる特性をデータセットとして、機械学習¹⁾により実験条件を最適化していくマテリアルズ・インフォマティクスの枠組みの中では、限られた数の実験データから特性を予測し、次に実施すべき実験条件を提案、実験を繰り返すことで効率的に適切な実験条件を見つけることができるアクティブラーニング²⁾の手法が近年提案されており、高分子材料など様々な材料系への応用が進んでいます。

研究内容と成果

NIMS 元素戦略磁性材料研究拠点の Lambard Guillaume 主任研究員との佐々木泰祐主幹研究員らは、複雑な工程を経て作製されるネオジウム磁石の作製工程の効率的な最適化には機械学習の活用が有効であると考え、ネオジウム磁石の作製条件の最適化にアクティブラーニング手法を適用することにより、限られた数の実験データからネオジウム磁石の応用上重要な特性である保磁力³⁾や最大エネルギー積⁴⁾などの特性を効率的に最大化することに成功しました。

本研究では、焼結法に比べ耐熱性に優れるが故にハイブリッド自動車の駆動モーターにも搭載されるようになった熱間押出磁石の作製条件の最適化に機械学習を適用し、図 2 の左上に示すような熱間押出磁石を作製しました。機械学習の適用前の磁石は、図 2 左下の低特性材で示す減磁曲線⁵⁾に示すように、製品化されている熱間加工ネオジウム磁石に比べると低い磁気特性（保磁力が 1.2 テスラ、残留磁化⁶⁾が 1.2 テスラ、最大エネルギー積が 250 kJ/m³）を示しましたが、この磁石を作製した前後に集めたデータをもとに機械学習を行い、作製条件の最適化と磁石の作製を繰り返し、その後 40 回程度の磁石試料を試作すると、

保磁力を 1.7 テスラ、残留磁化を 1.4 テスラ、最大エネルギー積を 380 kJ/m³ まで向上させることができました。これは同じ組成を有する磁石の中では最高クラスの特性に相当します。

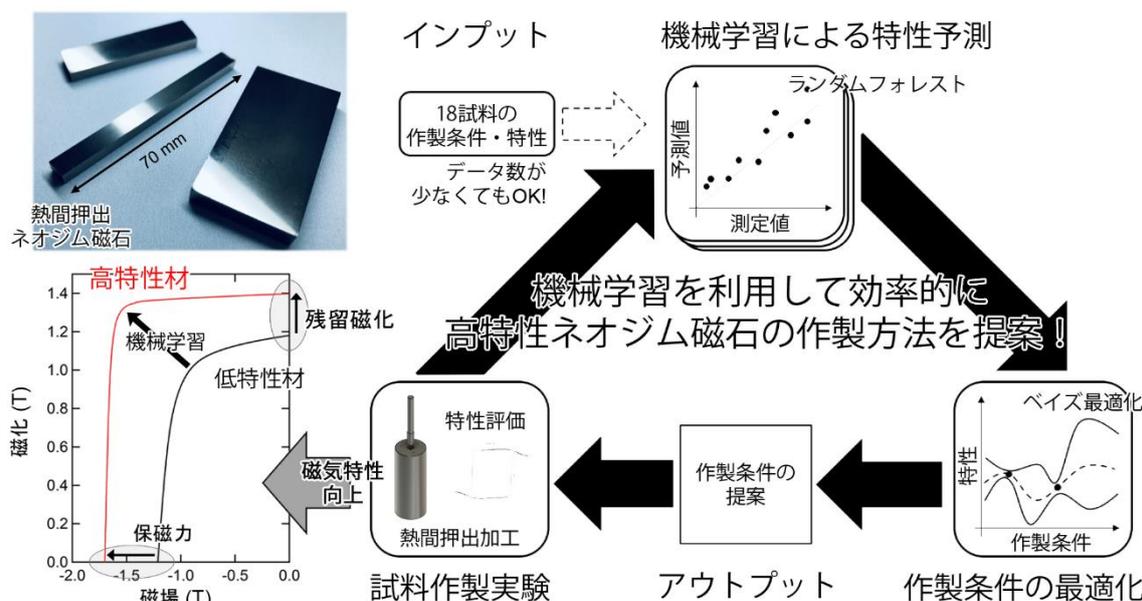


図 2: 作製した熱間押出ネオジウム磁石の外観写真および機械学習前後の試料の磁気特性と、アクティブラーニングによる実験条件最適化プロセス

今回の研究では、図 2 に示すように、実験で得たデータをもとに機械学習を行って特性予測と試料作製条件の提案を行い、提案された条件をもとに再度試料を作製して特性を評価することを繰り返すことで、特性を効率的に向上させることに成功しました。

まず、試料作製の際に設定する様々な作製条件を入力パラメータとして磁気特性予測を行いました。この予測結果から、各作製条件が特性に及ぼす影響の大きさを順位付けします。その結果から、磁気特性に影響を及ぼす作製条件を 6 条件から 3 条件程度に絞り込み、実験条件の取り得る組み合わせは 6600 万通りから 770 通りまで減らすことができました。

次に、最初の特性予測と作製条件の提案のために与えた実験データがわずか 18 回分しかない場合、与えたデータに偏りがあることも十分に考えられるので、必ずしも最適な作製条件を提案できない可能性があります。そこで、実験条件の最適化にむけたアクティブラーニングの第一段階として、ランダムフォレスト法と呼ばれる回帰手法を用いた磁気特性の予測モデルを 3 種の実験条件を用いて作りました。この予測モデルを用いて新規に 100 点の実験条件と磁気特性の予測結果のデータセットを作ります。次に、この 100 点をもとにベイズ最適化と呼ばれる手法で、より高い性能が得られることが予測される作製条件を 10 条件提案しました (図 3 ; 灰色四角 → 青色四角)。提案した条件を用いて実際に試料を作製し、その作製条件と、得られた磁気特性の実験結果を新たにデータに加えて再びランダムフォレスト法による予測モデルを作成します。続いて、新規 100 点のデータセットを作成し、ベイズ最適化による実験条件 10 パターンを提案するというサイクルを 3 回繰り返しました。その結果、アクティブラーニングを繰り返すことで比較的高い精度で磁気特性を予測できることを確認しました (図 3 ; 灰 → 青 → 赤 → 緑)。また、各サイクルで提案した作製条件をもとに実際に作製した試料の磁気特性は、初期値データとして用いた試料の磁気特性より高い特性を示す傾向が見られており、アクティブラーニングを用いることで少ないデータから効率よく特性向上に向けた実験条件を最適化出来ました。

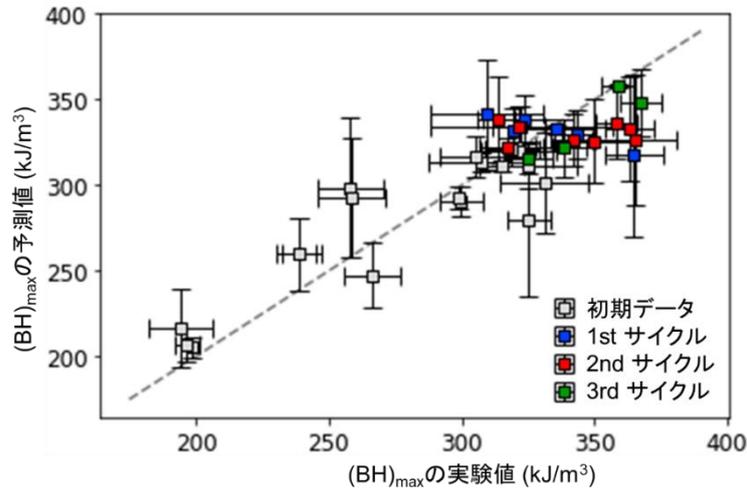


図 3: ランダムフォレスト法による $(BH)_{\max}$ の予測結果と実験値の比較 (灰色: 初期データ、青色: 1 回目のサイクルデータ、赤色: 2 回目のサイクルデータ、緑色: 3 回目のサイクルデータ)

優れた磁気特性が得られたポイントは、押出加工中に形成された微細組織にあります。図 4 は、今回作製に成功した優れた特性を有する磁石 (以下、高特性材) と、作製当初の特性の低い磁石 (以下、低特性材) の微細組織の走査型電子顕微鏡(SEM)像を示します。

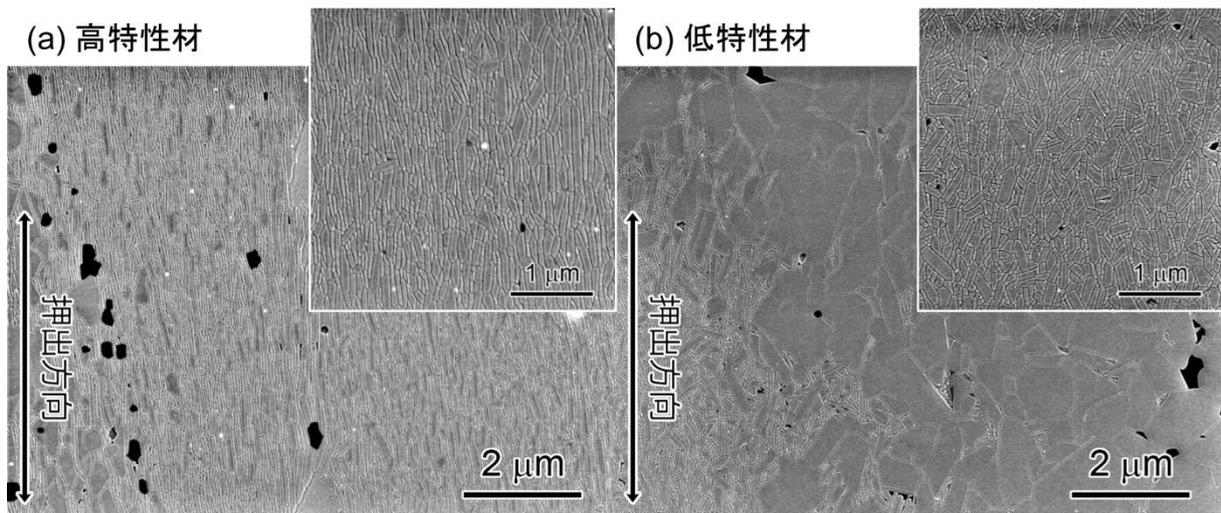


図 4: (a) 機械学習の提案に沿って作製した高特性材と、(b) 機械学習前の低特性材の微細組織の走査型電子顕微鏡(SEM)像。高特性材で $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 結晶粒が一方向に強く配向していることがわかる。

これらの SEM 像に見られるように、高特性材ではほぼ均一な大きさの $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 結晶粒があらゆる場所でほぼ一定の方向に配向しているのに対し、低特性材ではランダムに配向した粗大な結晶粒が存在することがわかります。これは、粉末を熱間で成形した試料に押出加工を施す過程で、原料合金粉末の表面であった領域にできるものです。こうした粗大 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 結晶粒の存在は、低い逆磁場を印加するだけで容易に磁化反転が起こるため、大きな保磁力低下の原因となります。また、各試料右上の高倍像に示すように、低特性材では、 $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 結晶粒がランダムに配列しているのに対し、高特性材では、板状の $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 結晶粒が整然と配列した様子が観察できます。これは、残留磁化の低下を抑制します。このように、微細かつ強く配向した微細組織の形成が、機械学習により最適化した作製条件で得た磁石が優れた特性を発現した要因だといえます。

今後の展開

本研究では、複雑な工程を経て作製されるネオジム磁石の磁気特性を効率的に向上させるには、アクティブラーニングの利用が極めて有効であることを実証しました。今回は、熱間押出法により作製した磁石

の作製条件の最適化に着目して研究を進めましたが、焼結法をはじめとしたその他の作製法や合金組成など、磁気特性に影響を及ぼすその他の様々なパラメータに対してもアクティブラーニングを含むデータ科学的手法を積極的に活用することで、広い視点から磁気特性の効率的な向上に向けた道筋を効率的に検討することができるようになることが期待されます。

今後、脱炭素社会の実現に向け、自動車のみならず様々な輸送機器や発電装置などの電動化が予想され、各種用途に応じて最適な特性を発現するネオジム磁石の迅速な開発が求められる時代が訪れます。その際、これまで検討してきた磁気特性に加え、強度や電気抵抗などの諸特性も用途に応じて異なる特性が求められるようになると予想されます。本研究で実証したアクティブラーニングを活用したプロセス最適化による磁気特性の効率的な向上の実証は、こうした未来志向の磁石開発の第一歩です。今後、様々なネオジム磁石を作製してプロセスや諸特性、微細組織などのデータ蓄積をすると同時に、そのデータを活用したプロセスインフォマティクスにより特性の予測精度の向上に取り組み、求められる特性を発現するネオジム磁石の合金組成や作製条件の高効率な探索を行います。まずは実験室レベルで社会の需要に応じた特性を有するネオジム磁石を迅速に開発できることを実証し、その成果の産業界への還元を目指します。

掲載論文

題目： Optimization of direct extrusion process for Nd-Fe-B magnets using active learning assisted by machine learning and Bayesian optimization

著者： G. Lambard, T.T. Sasaki, K. Sodeyama, T. Ohkubo, K. Hono

雑誌： Scripta Materialia Vol. 209, 2022, 14341.

doi: <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2021.114341>

掲載日時： 2021年11月7日

用語解説

- (1) **機械学習**：線形回帰や決定木などのモデルを、既知のデータを用いて学習させ、入力された特徴量からラベルやスカラー値を予測する手法です。
- (2) **アクティブラーニング**：欲しい目標値を得るために、データを連続的に更新していく手法です。目標値は機械学習モデルと既知のデータを使って予測され、次に取得すべきデータの取得条件はベイズ最適化によって提案されます。新規に得られたデータは既知データと合わせて機械学習による予測に利用され、このサイクルを欲しい目標値に到達するまで繰り返します。
- (3) **保磁力**：永久磁石の性能を表す指標の一つで、磁性体がもつ磁化の向きに反対方向の磁場を印加して、磁化がゼロになるときの外部磁場の値。外部磁場に対する抵抗力を表し、耐熱性を表す指標として使われます。
- (4) **最大エネルギー積**：永久磁石の性能を表す指標の一つで、単位体積当たりの磁石から取り出すことができる最大磁束量を示す値で、磁石としての強さを表します。
- (5) **減磁曲線**：磁性体が持つ磁化の向きに反対方向の磁場を印加した時の磁化の変化を表す曲線。磁気ヒステリシス曲線における第2象限に相当します。
- (6) **残留磁化**：磁気ヒステリシス曲線において、外部磁場を飽和磁化の状態となる高い値からゼロに戻した時に残る磁化の値です。
- (7) **ベイズ最適化**：探索したいパラメータ空間とそれに伴う観測値を、事前のデータとそれに関する不確実性に基づいて効率的に探索する数学的フレームワークです。

本件に関するお問い合わせ先

(研究内容に関すること)

国立研究開発法人物質・材料研究機構 磁性・スピントロニクス材料研究拠点磁性材料解析グループ

主幹研究員 佐々木泰祐 (ささきたいすけ)

E-mail: SASAKI.Taisuke@nims.go.jp

TEL: 029-859-2466

URL: https://www.nims.go.jp/mmu/index_j.html

(報道・広報に関すること)

国立研究開発法人物質・材料研究機構 経営企画部門 広報室
〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1
TEL: 029-859-2026, FAX: 029-859-2017
E-mail: pressrelease@ml.nims.go.jp

(補助事業に関する問い合わせ先)

国立研究開発法人物質・材料研究機構 磁性・スピントロニクス材料研究拠点
元素戦略磁性材料研究拠点 企画室
〒305-0047 茨城県つくば市千現 1-2-1
TEL: 029-859-2634, FAX: 029-859-2709
E-mail: info-esicmm@ml.nims.go.jp