

金属薄膜磁気異方性の検定的手法によるモデル選択

[1] 要旨

機械学習によって機能性の高い物質・材料を探索する研究はマテリアルインフォマティクスとよばれ、現在、多くの研究者から注目を集めている。本研究ではサンプルデータ全体の回帰を行うのではなく、サンプルデータの一部が分布の偏りを与える条件を見出すことでモデル選択を行う手法とその可視化手法を開発した。具体的に磁気異方性の分布偏りを与える金属薄膜の原子配置条件を求め、正の分布と負の分布を与える条件が大きく異なることを示した。

[2] 本文

近年は物理化学理論に加えてデータ科学手法を併用し優れた物性を持つ物質の探索が行われており、実際に新規物質が発見されており注目が集まっている。しかし、データ科学手法は万能ではなく、最も大きな問題点はモデル構築に用いるサンプルデータの偏りである。例えば、超伝導転移温度 (T_c) の回帰モデルを考えてみると、現在では銅酸化物高温超伝導物質の物質数は多いが、この物質系の発見初期に回帰モデルを作成したとすると当時大多数だった BCS 系超伝導物質のモデルが出来上がり、純粋にデータ科学的な作業としては銅酸化物の探索を系統的に行うことにはならなかっただろう。また、たとえ予測・実験評価の繰り返しを行っても T_c が高い銅酸化物を重点的に行うようにまでに多くの時間を費やすことになっただろう。このようにサンプルデータの大多数を説明するモデルと、良い物性特徴量を示してもごく一部のサンプルを説明するモデルとが異なる場合には回帰手法では問題が生じる。この欠点に対応するために本研究ではサンプル全体を回帰するのではなく、サンプル内で良い物性特徴量を与える分布の条件（モデル）を求めるという手法を取っている。また、データ科学によるモデルは工学的目的としてはモデルの中身が不明でも予測を行えばよいが、学理を求める者としてはモデル内部の説明を行い、その知見を活かしたい。

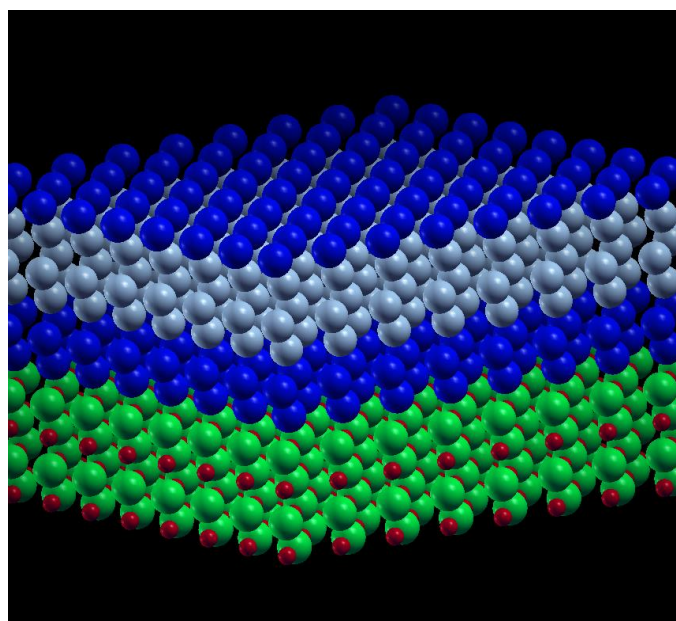


図 1. 鉄コバルト薄膜構造模式図（赤：酸素、緑：マグネシウム、青：鉄、灰色：コバルトの例）

直接的に良い特徴量を与える分布の条件を与え、説明が容易なモデルを作成する分解木分類手法が存在するが、分類の性能指標は分類の割合であり、分布偏りを性能指標とはしてこなかった。また、偏った特徴量分布を得るための条件を満足が行く形で調整できるわけではない。

最近、物質・材料研究機構統合型材料開発・情報基盤部門の木野日織らのメンバーを中心とする研究グループは、分布偏りを評価する性能指標を明らかにし、更に理解・説明のための可視化手法を開発した。本手法の具体的な適用先として第一原理計算で得られた MgO 上の鉄コバルト 6 層薄膜 (図 1) の磁気異方性 (MCA) で分布の偏りを得る条件を全探索により求めている。この成果は、日本物理学会が発行する英文誌 Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ) の 2020 年 6 月号に掲載された。

本研究では自然言語で用いられる文字表記の記述子 (個々の物質を表現するパラメタ) を用いて、論理和と論理積が 2 つまでの条件で偏った分布を与える条件を得た。例えば、MCA が正でもっとも偏る分布を与える原子配列は「鉄・コバルト配置が全体の半分未満で真空表面側が鉄である」もしくは「MgO 界面側が鉄・鉄」という配置であることが示されている。一方、MCA が負の最も偏る分布は正側とは大きく異なり表面・界面原子に依らず鉄の割合とコバルトコバルト配置の割合により決まり、MCA が正側と負側で全く異なる条件になることを示した。また、該当条件下では選択データ数が少ないほど偏りの評価指標が大きいわけではなく最適な個数があることも示している。

本研究の適用データは 6 層薄膜の組み合わせ全てであるため本手法を検定として実行していないが、検定に用いられる t 値も分布偏りの良い性能指標であることも示しており、検定という古典的な手法でもモデル選択が可能であることを本研究は示したと言えるだろう。手法の高速化を含め今後の展開が期待される。

原論文(5月11日公開済)

[Maximum Separated Distribution with High Interpretability Found Using an Exhaustive Search Method
—Application to Magnetocrystalline Anisotropy of Fe/Co Films—](#)

Hiori Kino, Kohji Nakamura, Koji Hukushima, Takashi Miyake, and Dam Hieu Chi, J. Phys. Soc. Jpn. **89**, 064802 (2020).

<情報提供：木野 日織 ((国)物質・材料研究機構 統合型材料開発・情報基盤部門) >