

統数研・共同利用・重点研究
「統計的機械学習の新展開」研究会

TDAによる強磁性体 磁区パターン形成過程の分析

本武 陽一¹, 水牧仁一郎², 福水健次¹
¹統計数理研究所, ²JASRI

2020年1月30日
統計数理研究所

自己紹介

福岡県福岡市出身

学歴:

2008/3 東北大学 理学部 物理学科卒業

2010/3 北海道大学 大学院理学院 宇宙理学専攻

修士課程修了 指導教官:石川健三 教授(素粒子物理学、テーマ:波束のダイナミクス)

2013/3 東京大学 大学院総合文化研究科 広域科学専攻

修士課程修了 指導教官:植田一博 教授(認知科学、テーマ:脳活動を用いたHAI評価)

2016/3 東京大学 大学院総合文化研究科 広域科学専攻

博士課程修了 指導教官:池上高志 教授(複雑系科学、テーマ:深層学習、群れ)

職歴:

2016/5 ~ 2019/3 東京大学 大学院新領域創成科学研究科 複雑理工学専攻

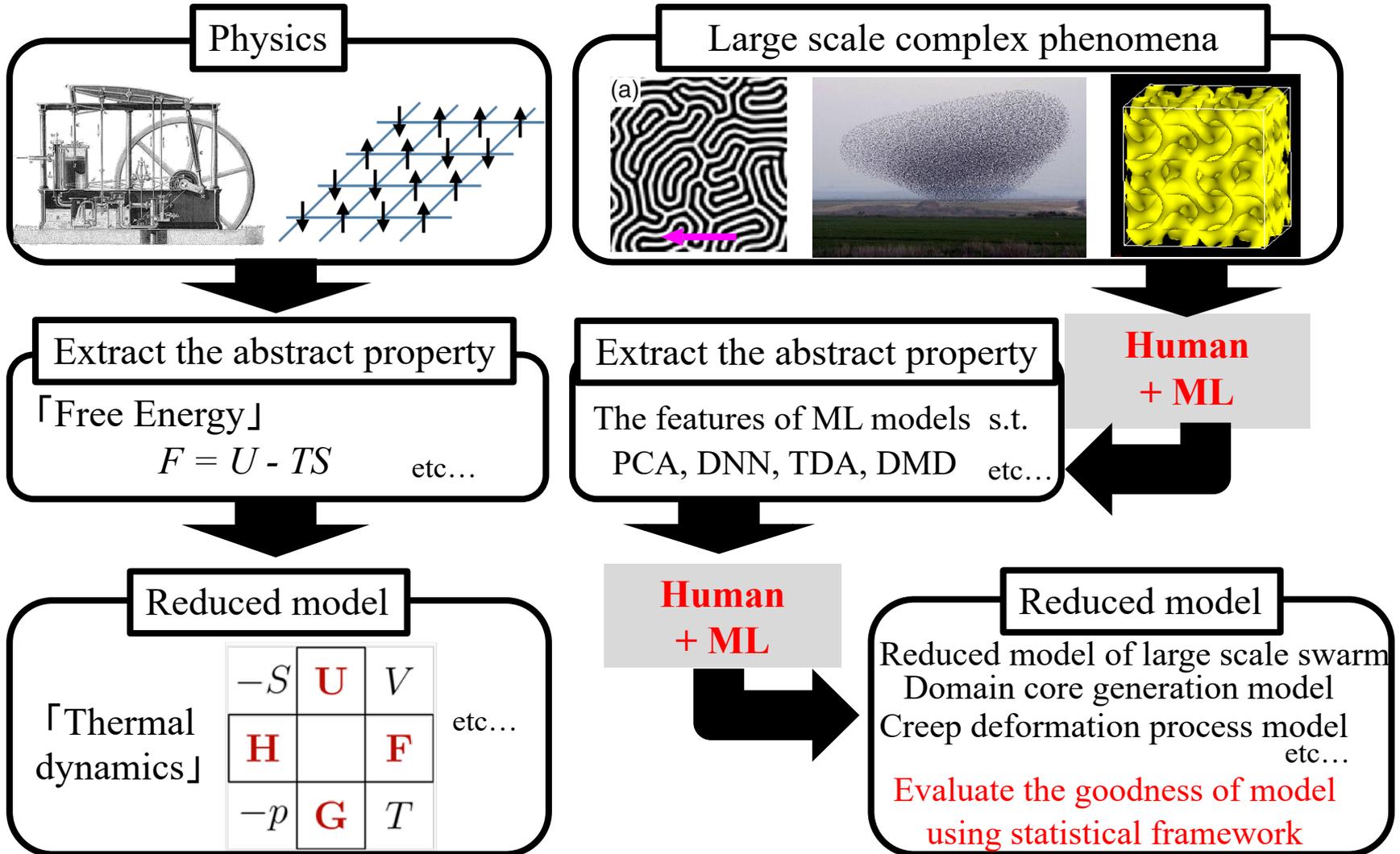
特任研究員 (岡田真人教授、テーマ:データ駆動科学)

2019/4 ~

統計数理研究所 統計的機械学習研究センター

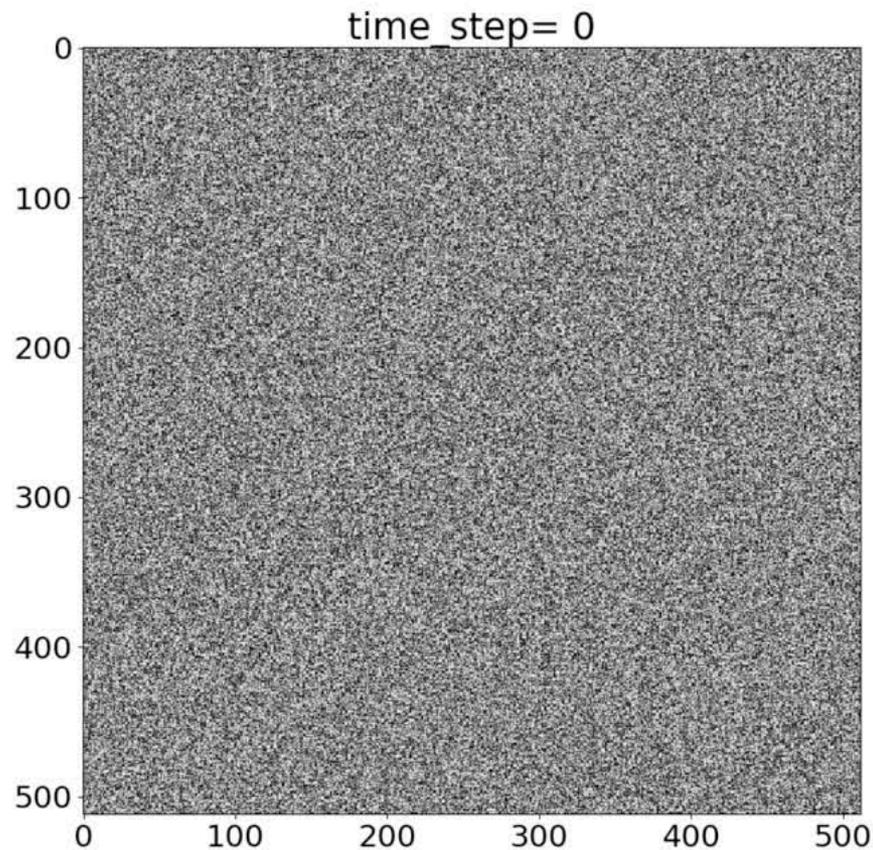
特任助教 (福水健次教授)

自己紹介



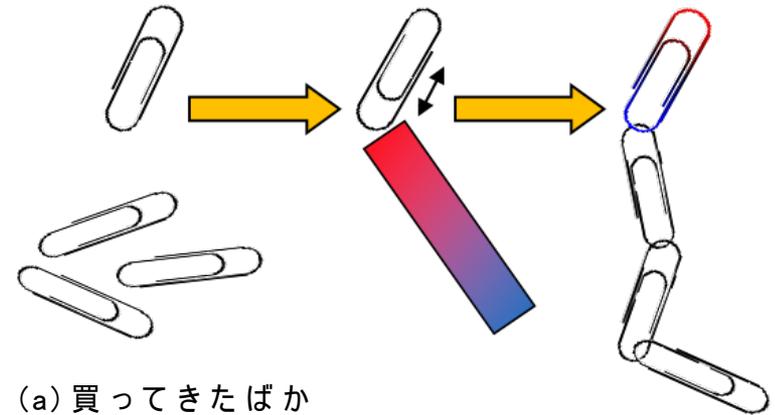
今回のターゲットのパターン

磁区構造：短距離相関と長距離相関の拮抗により生成されるパターン構造



磁性体と磁区構造

買ってきたばかりの鉄のクリップはほかのクリップをくっつけて持ち上げることができません。けれども、磁石をもってきて鉄クリップをこすると、クリップは磁気を帯び、磁石のようにほかのクリップをくっつけることができます。どうしてこんなことができるのでしょうか。



(a) 買ってきたばかりのクリップは他のクリップをひきつけない

(b) 磁石でこすったクリップは他のクリップをひきつけるようになる

図. 鉄のクリップを磁石でこすると磁気を帯びる

[佐藤勝昭著「ようこそ、まぐねの国に」より引用]

磁性体と磁区構造

1. クリップの鉄を偏光顕微鏡で拡大して見ると右図に模式的に示すように磁石の向きが異なるたくさんの領域に分かれていることがわかります。
図の場合は磁気モーメントのベクトル和はゼロに成り、全体として磁化を打ち消しています。
2. クリップを磁石でこすり磁界を加えると、磁界の方向を向いた磁気領域が大きくなり、磁界を取り去っても完全にはもとに戻らないため、クリップは磁石のように磁気を帯びます。
3. 磁気モーメントが同じ方向を向いている領域のことを「磁区」と呼びます。

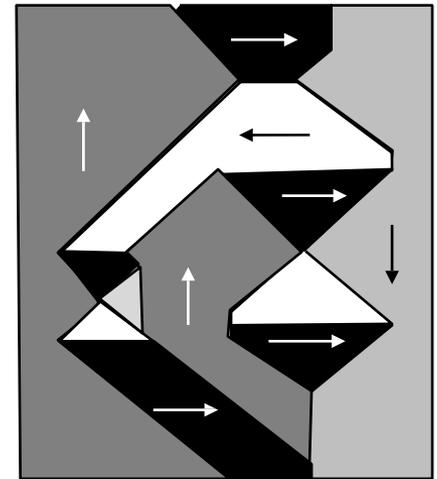
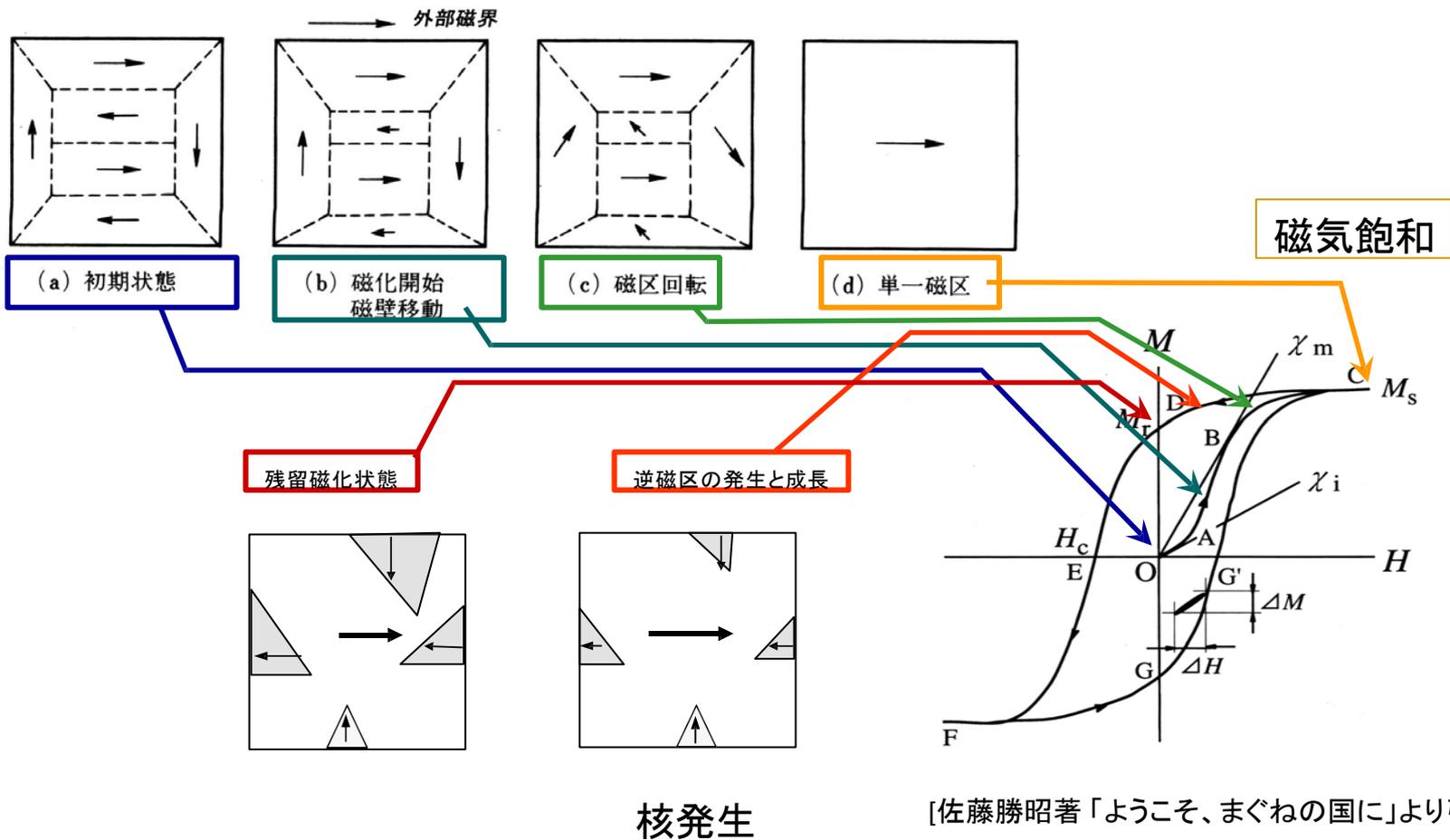


図4.2 磁化前の磁性体の磁区構造の模式図

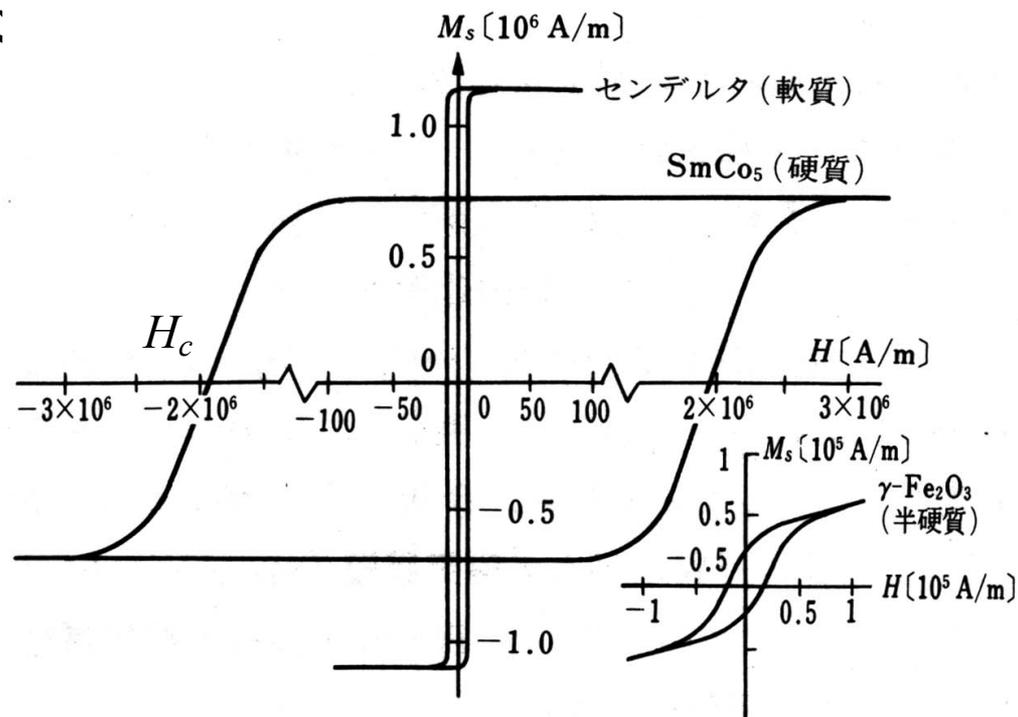
[佐藤勝昭著「ようこそ、まぐねの国に」より引用]

ヒステリシスと磁区構造



磁気ヒステリシスと応用

- 保磁力のちがいで用途が違う
- H_c 小: 軟質(ソフト)磁性体
 - 磁気ヘッド、変圧器鉄心、磁気シールド
- H_c 中: 半硬質(セミハード)
 - 磁気記録媒体
- H_c 大: 硬質(ハード)磁性
 - 永久磁石



[佐藤勝昭著「ようこそ、まぐねの国に」より引用]

ソフト磁性体

- 変圧器、電磁石などに使う磁心材料では、磁場と磁気分極が比例する必要がある。
- この目的には、保磁力 H_c が小さく、飽和磁気分極 M_s の大きなソフト磁性体が使われる。

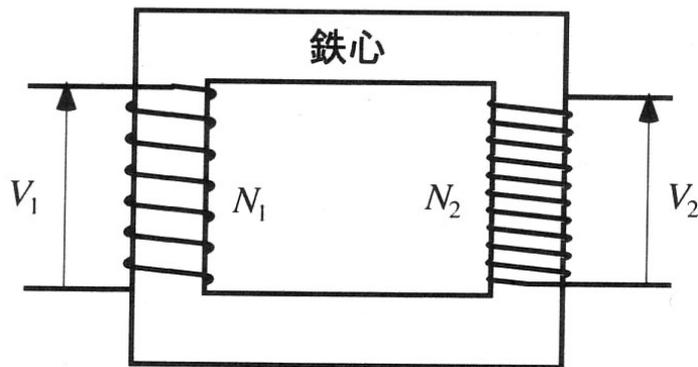
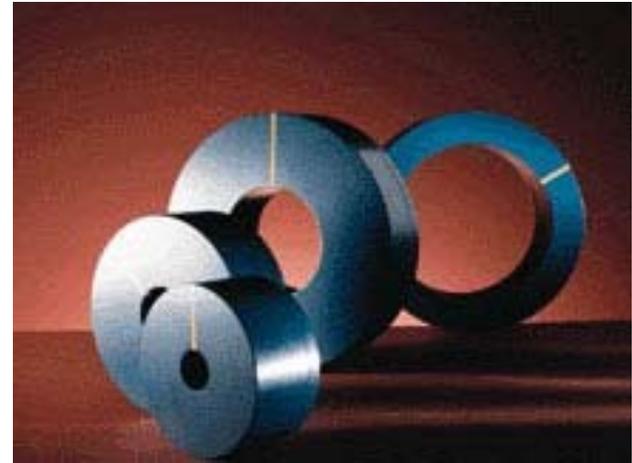


図 17.3



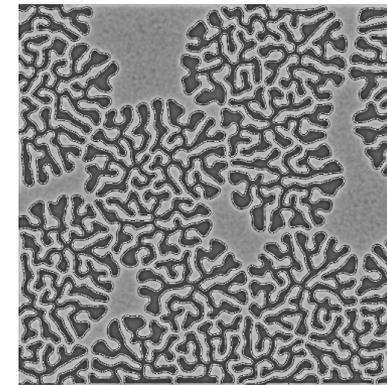
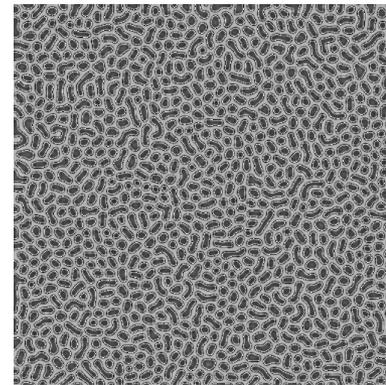
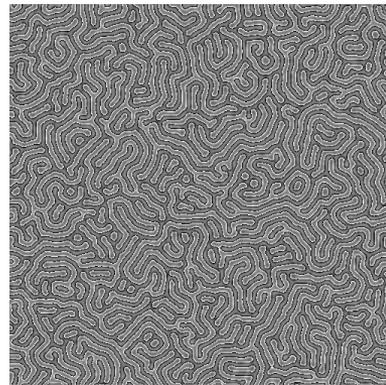
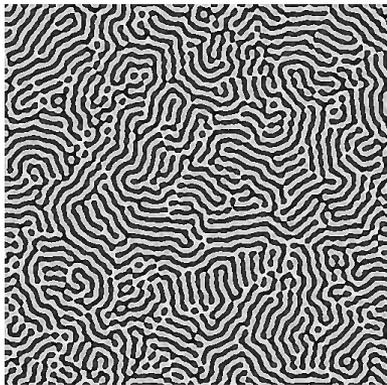
ハード磁性体

- 永久磁石、磁気記録材料などでは、磁気ヒステリシスが利用される。
- 永久磁石に蓄えられるエネルギーはヒステリシスの囲む面積 BH_{\max} で与えられる



研究の背景

磁区構造：短距離相関と長距離相関の拮抗により生成されるパターン構造



⇒磁性材料において、必要とされる機能にパターンが強い関係性を持っている。

⇒従来、永久磁石(焼結磁石)の磁区構造が磁気特性の重要な構成要素であることは理解されてきたが、磁区構造と、たとえば「保磁力」が具体的にどのように相関するかの説明は「あいまい」である。 [小林久理真先生「磁石の内部磁場分布とMFM及びMOKEによる表面磁区構造の相関性の検討」より引用]

研究の目的

磁区構造形成過程を記述する特徴量は未解明

目的1:

磁区構造(パターン)から物理特性を推定する

目的2:

パターン形成ダイナミクスを理解する

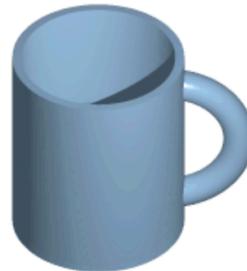
⇒構造のトポロジカルな特徴に着目したTopological data analysisによって実現されるのではないか？

Topological data analysis

● Topology



\cong



Topological data analysis

● Persistent homology

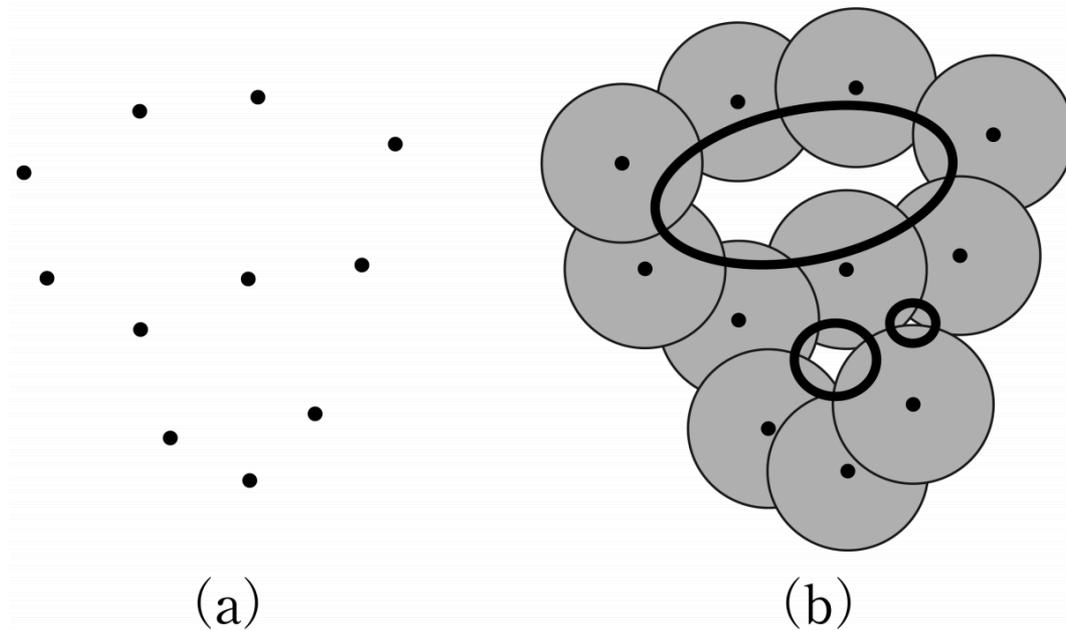


図 1 点集合に円を貼り付ける

[大林一平. "パーシステンス図の逆問題." *応用数理* 26.4 (2017)]

Topological data analysis

● Persistent homology

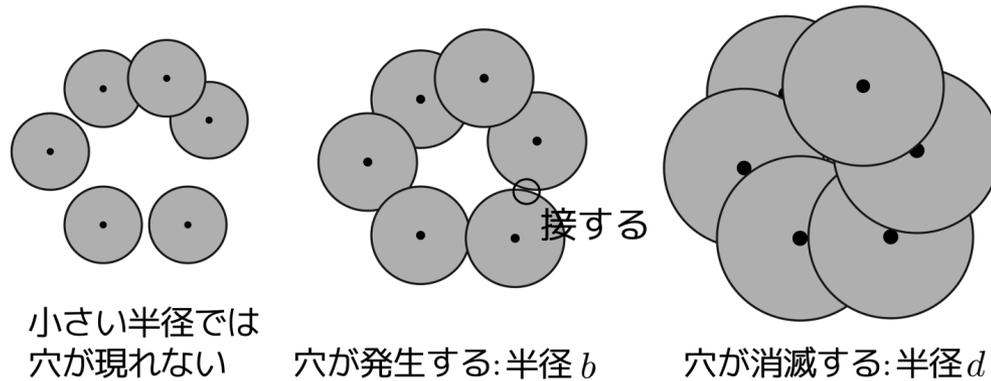
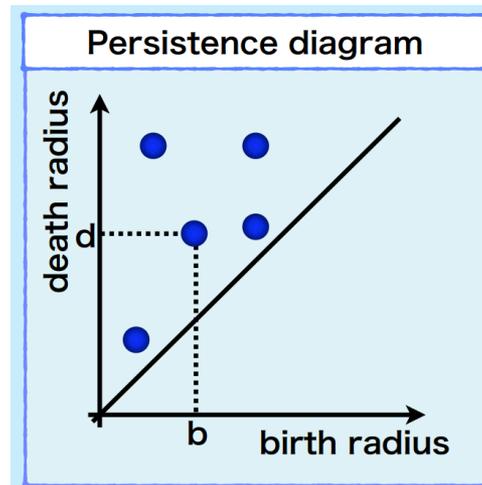


図2 半径を変えたときの穴の生成と消滅

[大林一平. "パーシステンス図の逆問題." 応用数理 26.4 (2017)]

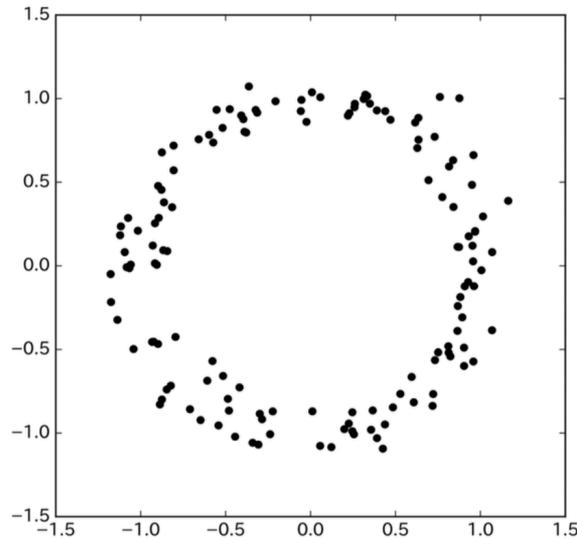


平岡先生スライド:「パーシステントホモロジーとその応用」

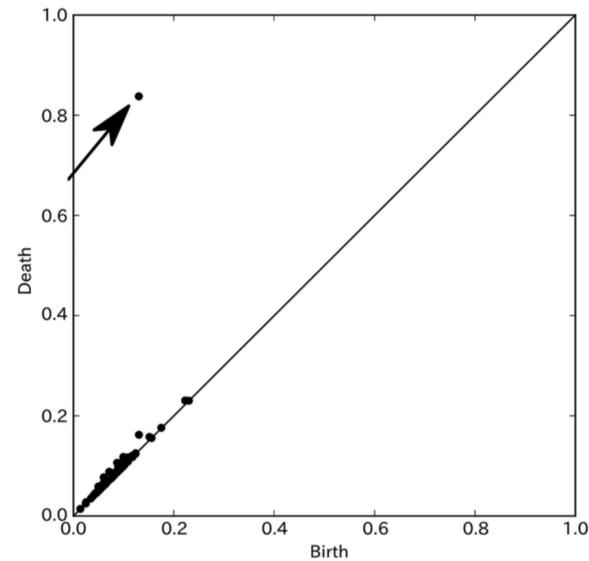
http://www.math.chuo-u.ac.jp/ENCwMATH/EwM70_Hiraoka.pdf

Topological data analysis

● Persistent homology



(a)

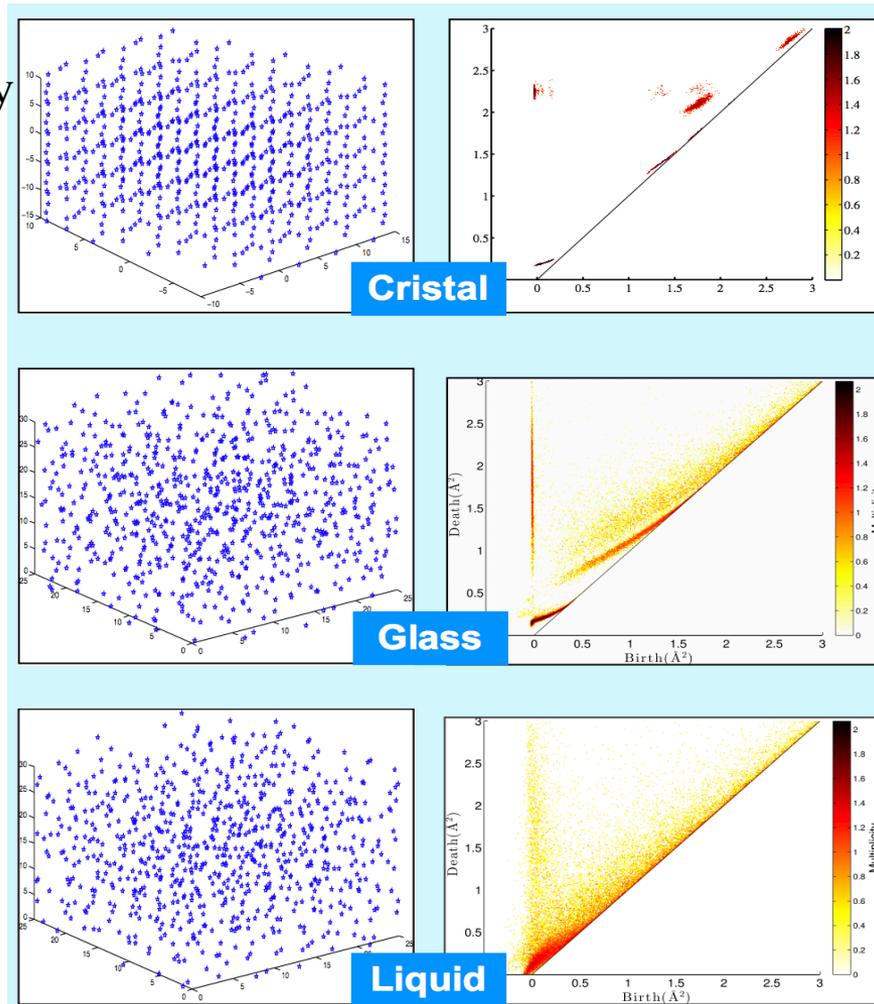


(b)

[大林一平. "パーシステンス図の逆問題." *応用数理* 26.4 (2017)]

Topological data analysis

● Persistent homology



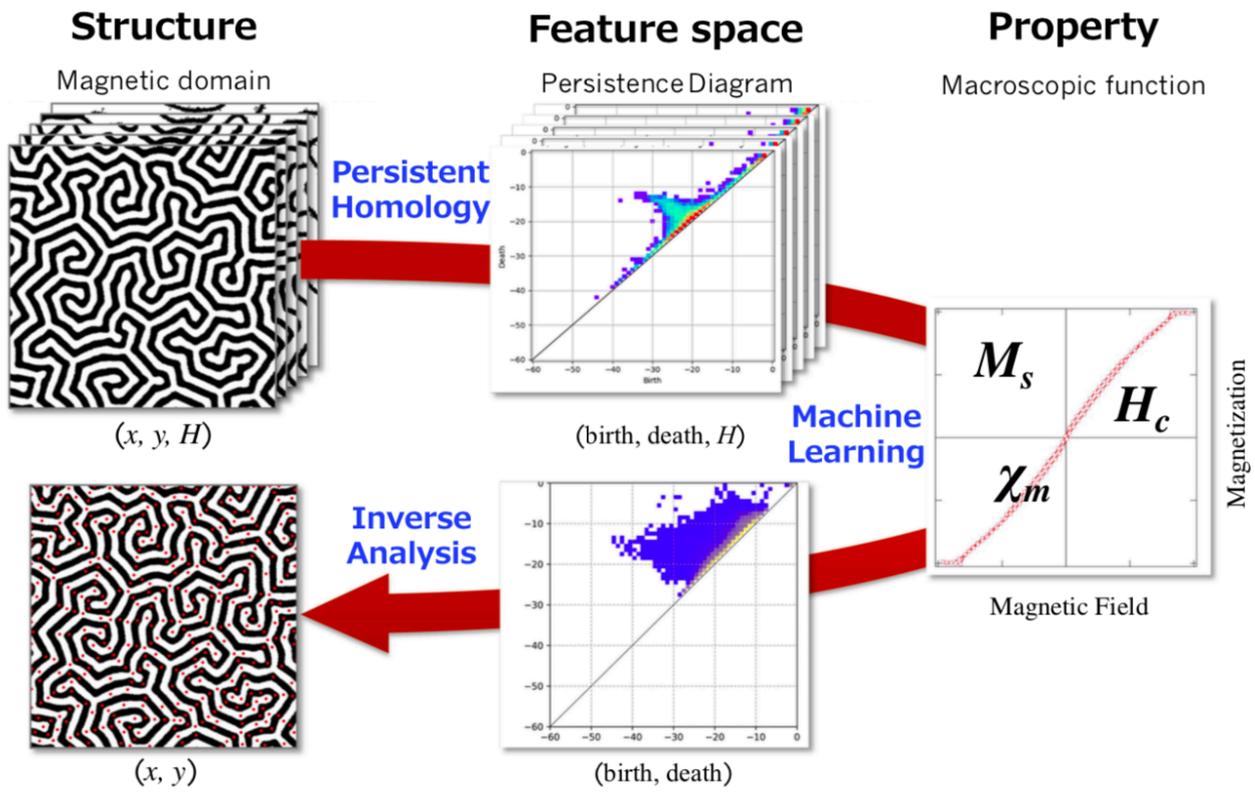
平岡先生スライド:「パーシステントホモロジーとその応用」

http://www.math.chuo-u.ac.jp/ENCwMATH/EwM70_Hiraoka.pdf

パーシステントホモロジーを用いた迷路状磁区構造におけるトポロジカル欠陥の可視化

山田拓洋^{1,2}・鈴木雄太¹・三俣千春²・小野寛太^{2,3}

上野哲朗⁴・大林一平^{5,6}・平岡裕章^{2,5,6,7}・小嗣真人^{1,2,*}

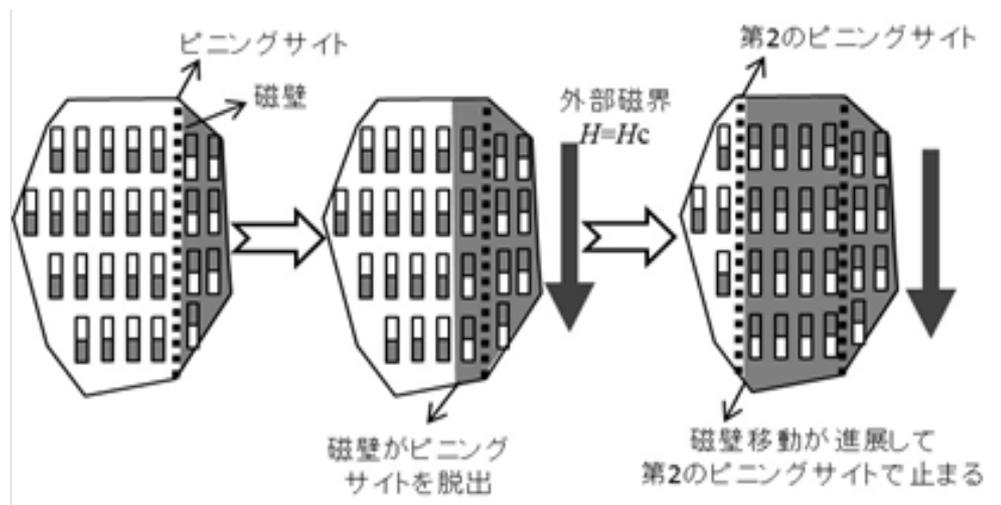


ピンニングサイトと磁性体

1.図に示すように、磁壁はピンニングサイトにトラップされていますが、いったんそのサイトから脱出すると磁化反転が進行し、第2のピンニングサイトで磁壁がトラップされて止まります。

ピンニングサイトと周りとの磁壁のエネルギーに差があることがトラップされる原因です。このエネルギーの差は異方性エネルギーの差であると考えられます。

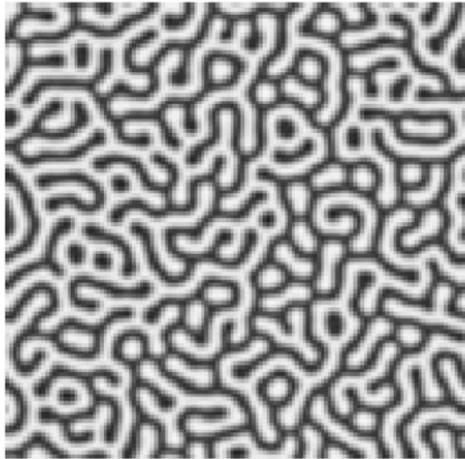
2.ピンニングサイトは結晶粒界、格子欠陥や不純物などによってもたらされるため、材料作製プロセスに依存します。



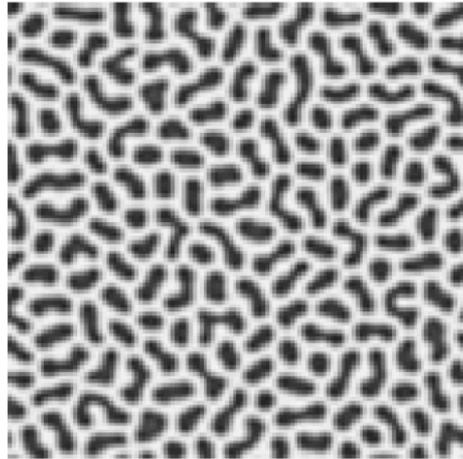
[佐藤勝昭著「ようこそ、まぐねの国に」より引用]

図 4.15 ピンニング型磁性体の反転機構の模式図

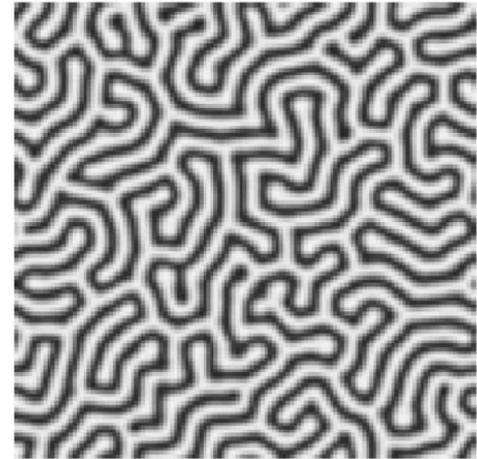
様々な磁区構造



(a)



(b)



(c)

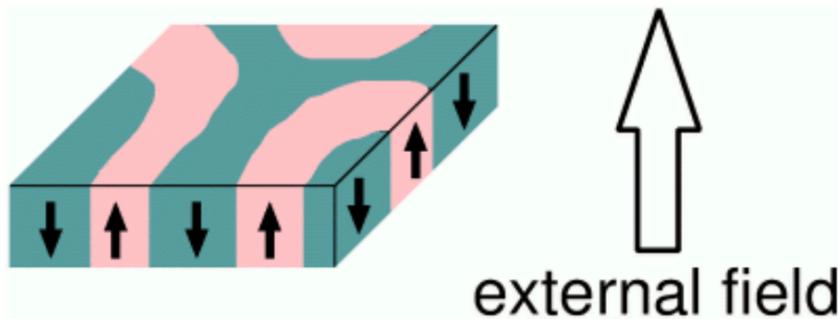
- 初期に $-1 < \phi(\mathbf{r}) < 1$ の一様乱数を振り、ゼロ磁場で生成したパターン。(比較のためゼロ磁場のままで生成した。)
- 初期に $\phi \simeq 1$ の状態から、速さ $v = 10^{-2}$ で磁場を下げた場合。 [$h(t) = h_{\text{ini}} - vt$; $h_{\text{ini}} = 1.4$]
- 同様に、速さ $v = 10^{-4}$ で磁場を下げた場合。

[工藤 和恵 先生 研究紹介HPより引用]

分析対象とする現象（シミュレーション）

磁区構造形成モデル

磁区構造：短距離相関と長距離相関の拮抗により生成されるパターン構造



$$\phi(\mathbf{r}) = \pm 1$$

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r})}{\partial t} = - \frac{\delta(H_{\text{ani}} + H_J + H_{\text{di}} + H_{\text{ex}})}{\delta \phi(\mathbf{r})}$$

磁区構造形成モデル

- 異方性 … $\phi = \pm 1$ をとる傾向。

$$H_{\text{ani}} = \alpha \lambda(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r} \left(-\frac{\phi(\mathbf{r})^2}{2} + \frac{\phi(\mathbf{r})^4}{4} \right)$$

ここで、 $\lambda(\mathbf{r})$ はdisorderをあらわし、次のように与えられる：

$$\lambda(\mathbf{r}) = 1 + \mu(\mathbf{r})/4$$

μ は、平均0で分散 μ_0^2 のガウス乱数とする。

磁区構造形成モデル

- 交換相互作用 … 近所は近い値をとる。(近距離の引力的相互作用)

$$H_J = \beta \int d\mathbf{r} \frac{|\nabla\phi(\mathbf{r})|^2}{2}$$

磁区構造形成モデル

- 双極子相互作用 … 遠くとは異符号に。(長距離の斥力的相互作用)

$$H_{\text{di}} = \gamma \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \phi(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$$

ここで

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = 1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3$$

ただし、近距離では発散するので適当な長さでカットオフを入れる。

磁区構造形成モデル

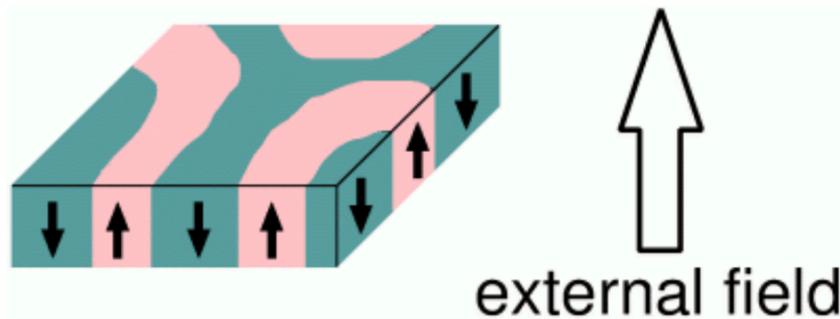
- 外部磁場との相互作用

$$H_{\text{ex}} = -h(t) \int d\mathbf{r} \phi(\mathbf{r})$$

時間変化する外場

磁区構造形成モデル

磁区構造：短距離相関と長距離相関の拮抗により生成されるパターン構造

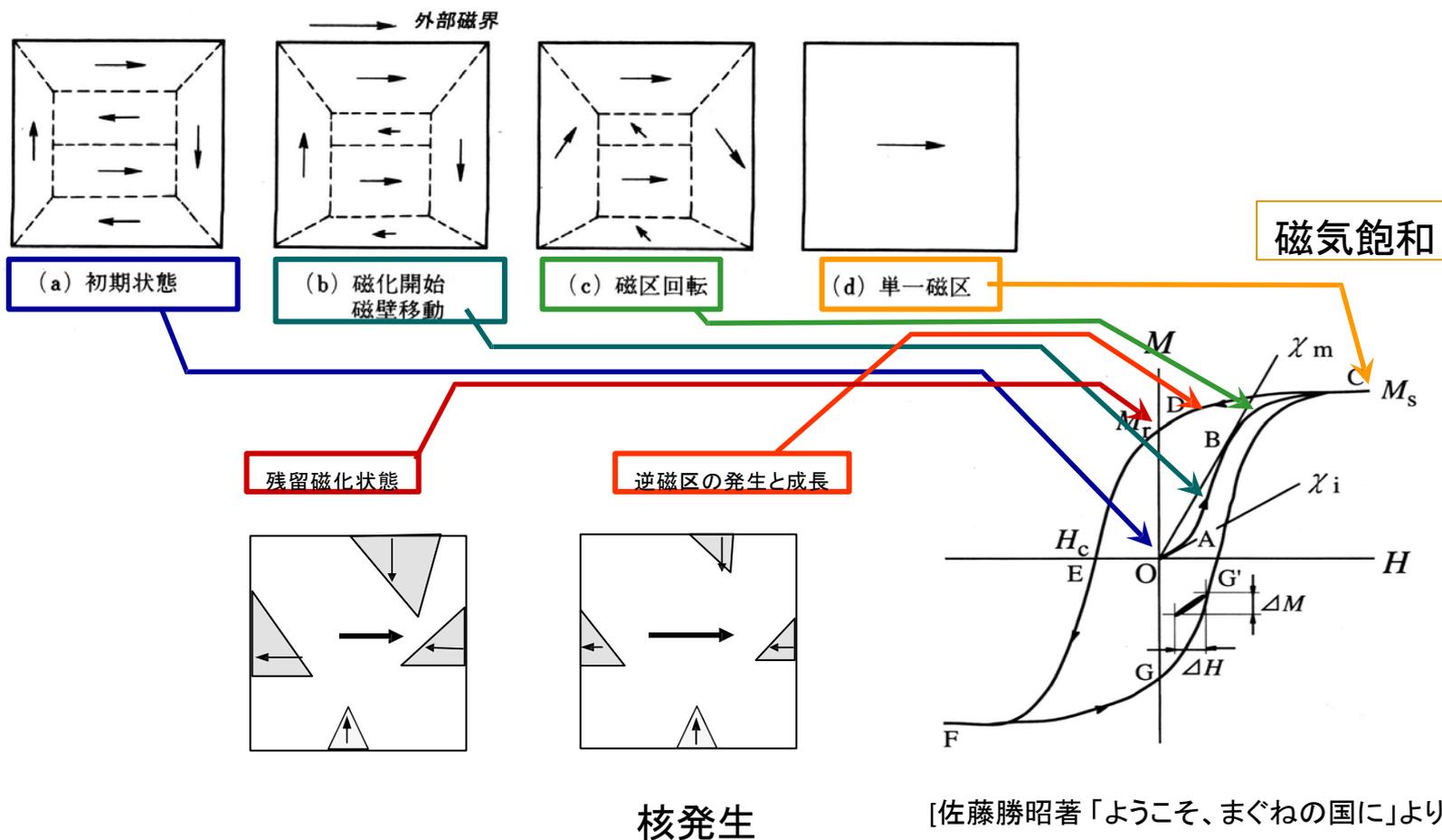


$$\phi(\mathbf{r}) = \pm 1$$

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{r})}{\partial t} = - \frac{\delta(H_{\text{ani}} + H_J + H_{\text{di}} + H_{\text{ex}})}{\delta \phi(\mathbf{r})}$$

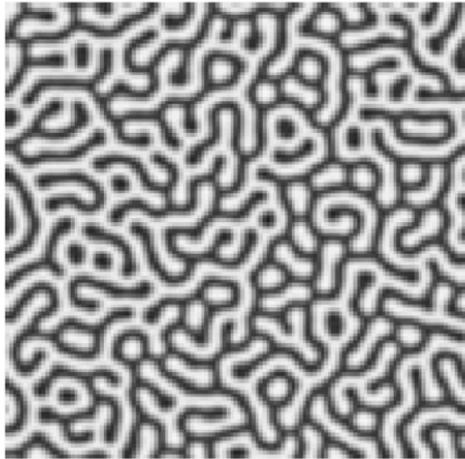
磁区構造形成モデル

●分析対象：素早く外場を変化させる非平衡な系

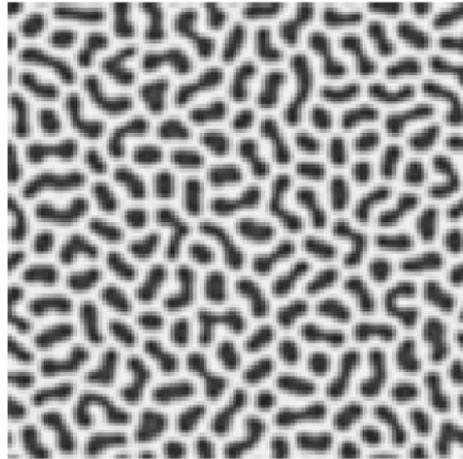


[佐藤勝昭著「ようこそ、まぐねの国に」より引用]

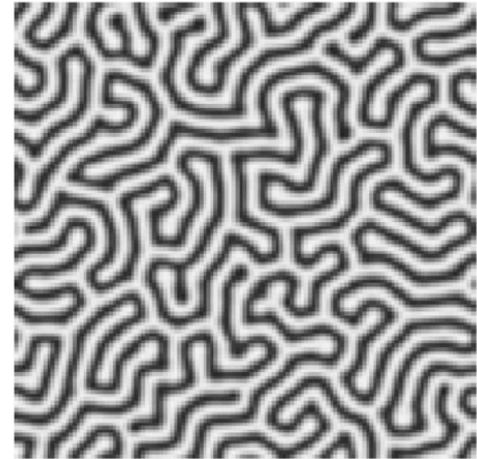
磁区構造形成モデル



(a)



(b)



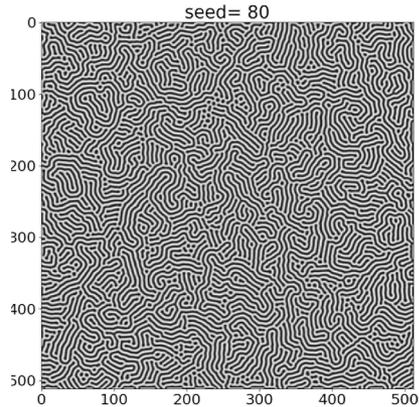
(c)

- 初期に $-1 < \phi(\mathbf{r}) < 1$ の一様乱数を振り、ゼロ磁場で生成したパターン。(比較のためゼロ磁場のままで生成した。)
- 初期に $\phi \simeq 1$ の状態から、速さ $v = 10^{-2}$ で磁場を下げた場合。 [$h(t) = h_{\text{ini}} - vt$; $h_{\text{ini}} = 1.4$]
- 同様に、速さ $v = 10^{-4}$ で磁場を下げた場合。

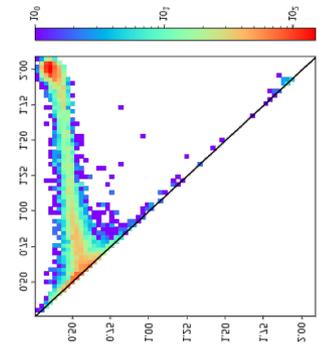
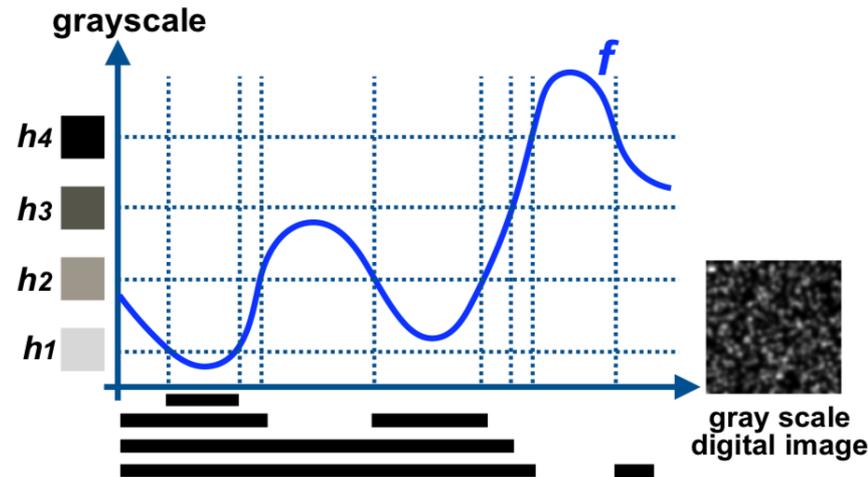
[工藤 和恵 先生 研究紹介HPより引用]

Persistent Homology分析

Gray scale persistence



ϕ : 密度分布



PD

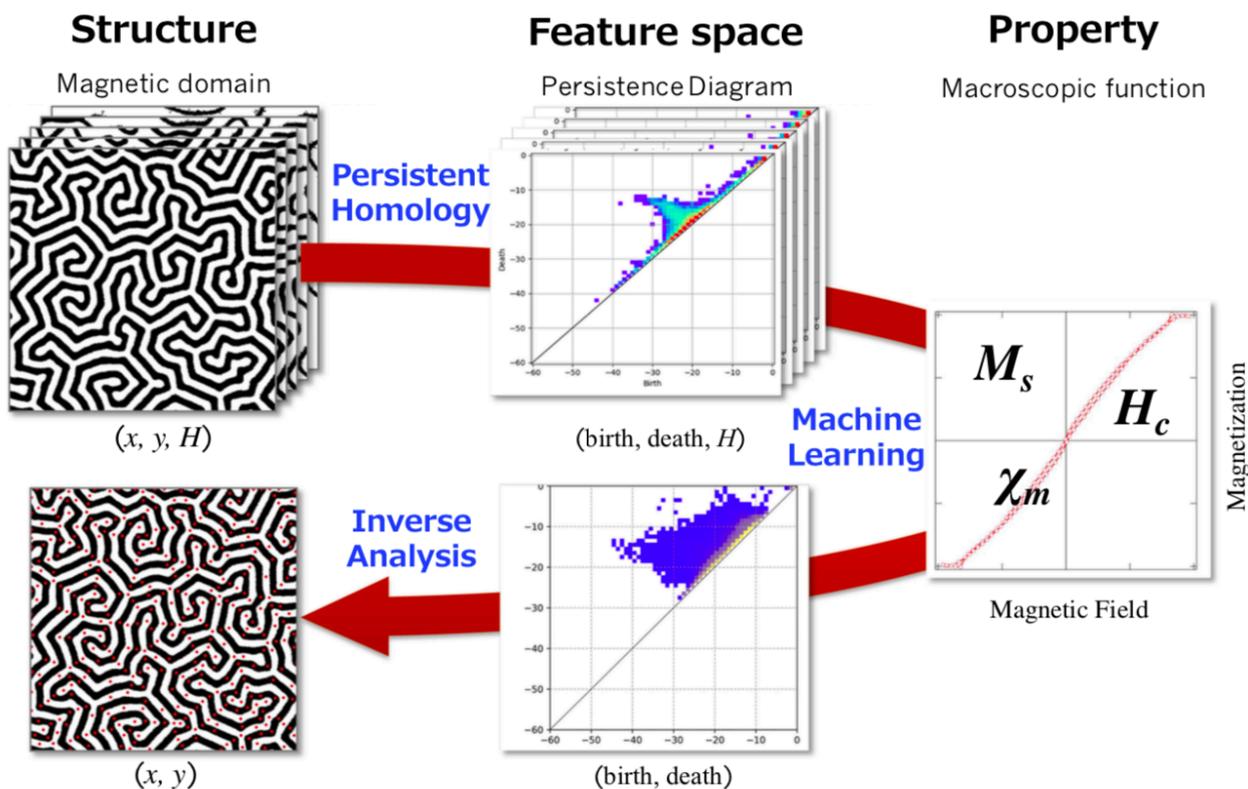
- **sub-level set** $X_h := \{x \in X \mid f(x) \leq h\}$
- **fattening** $X_{h_1} \subset X_{h_2} \subset \dots \subset X_{h_T}$
by $h_1 \leq h_2 \leq \dots \leq h_T$

[平岡先生スライドより(第70回 ENCOUNTERwithMATHEMATICS)]

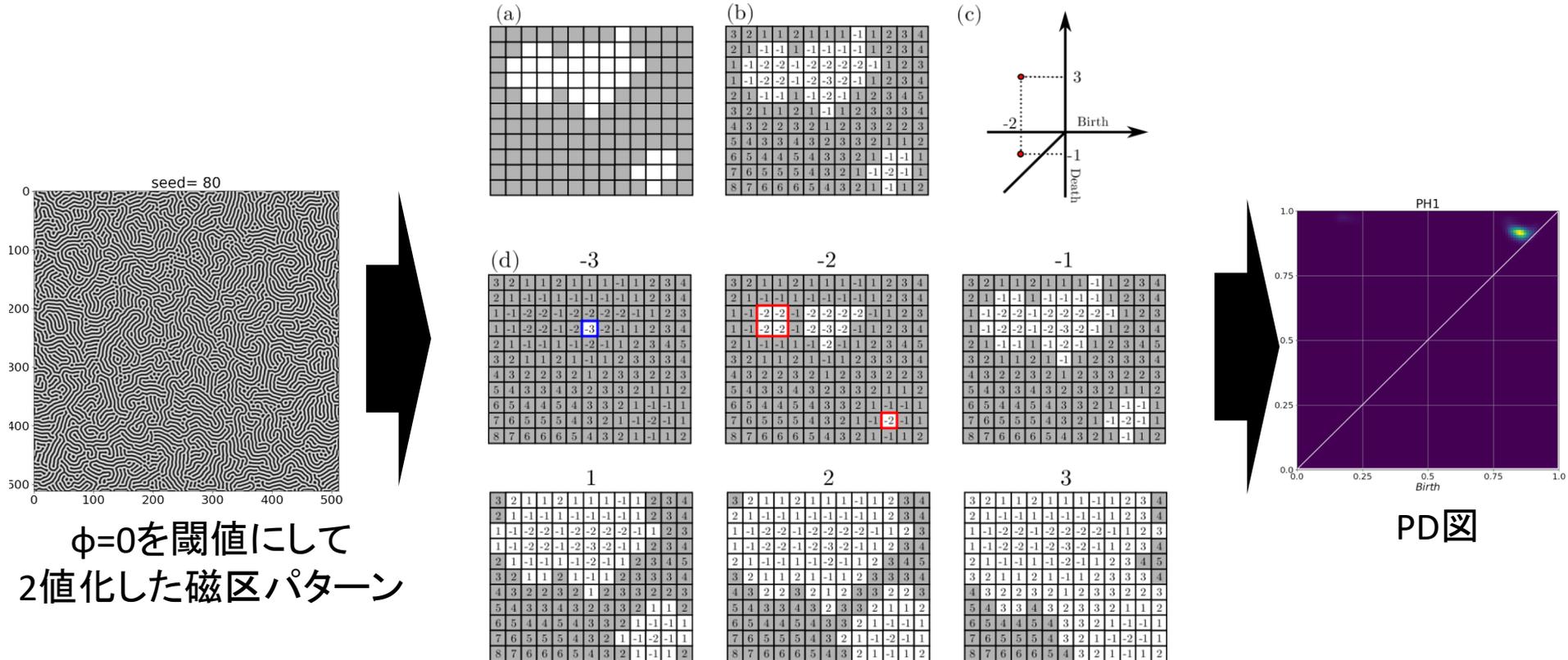
パーシステントホモロジーを用いた迷路状磁区構造におけるトポロジカル欠陥の可視化

山田拓洋^{1,2}・鈴木雄太¹・三俣千春²・小野寛太^{2,3}

上野哲朗⁴・大林一平^{5,6}・平岡裕章^{2,5,6,7}・小嗣真人^{1,2,*}



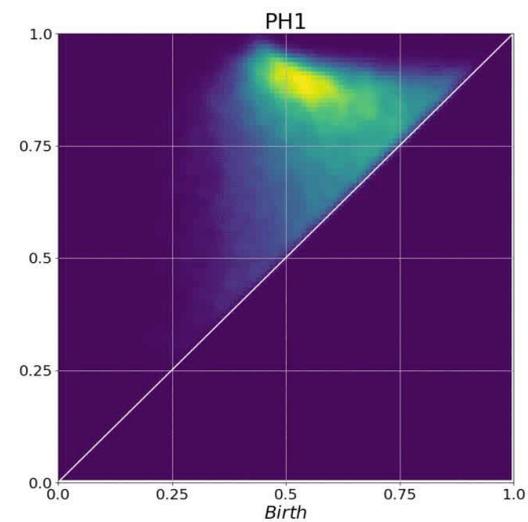
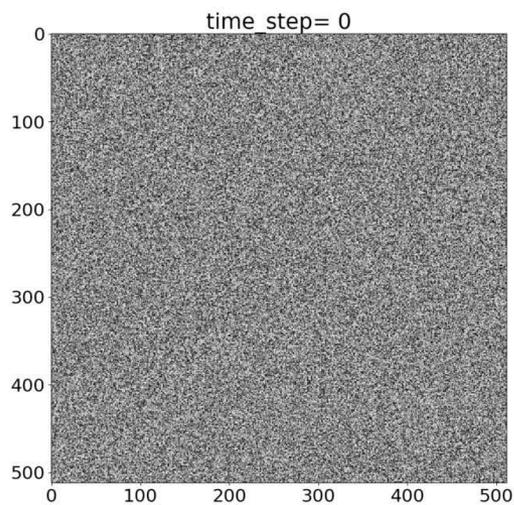
Spatial persistence



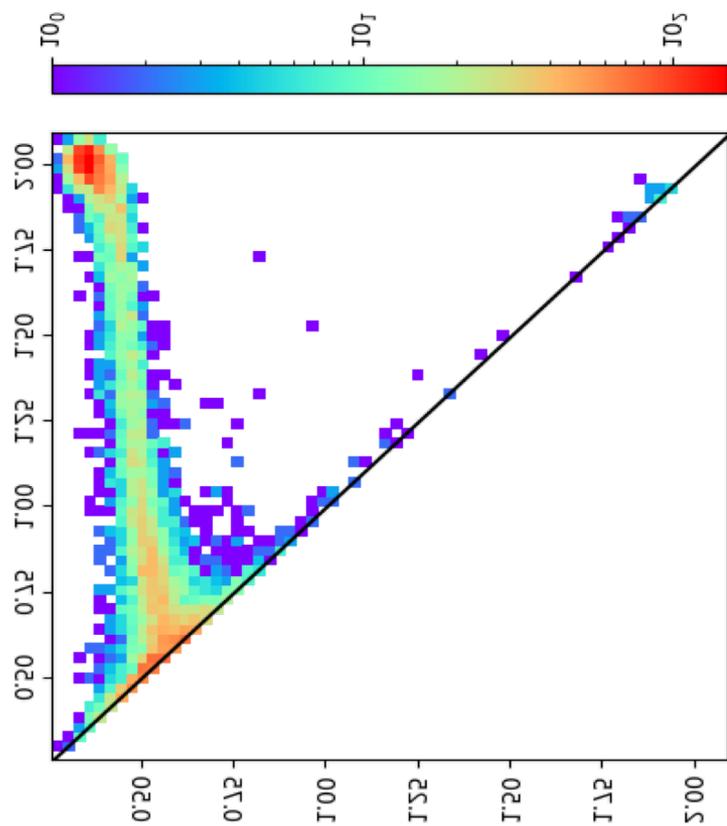
[I. Obayashi, Y. Hiraoka, and M. Kimura 18]

PDの時間発展

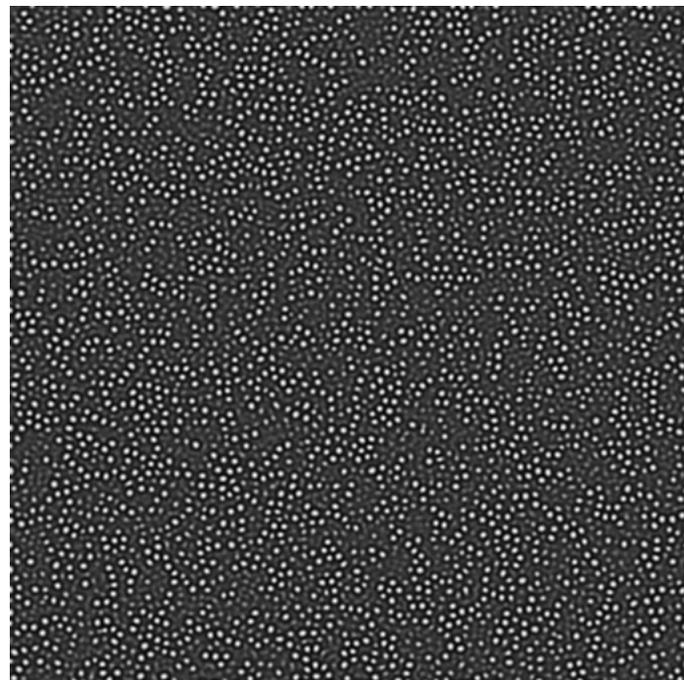
• $\alpha=1.5$



PD図の逆解析



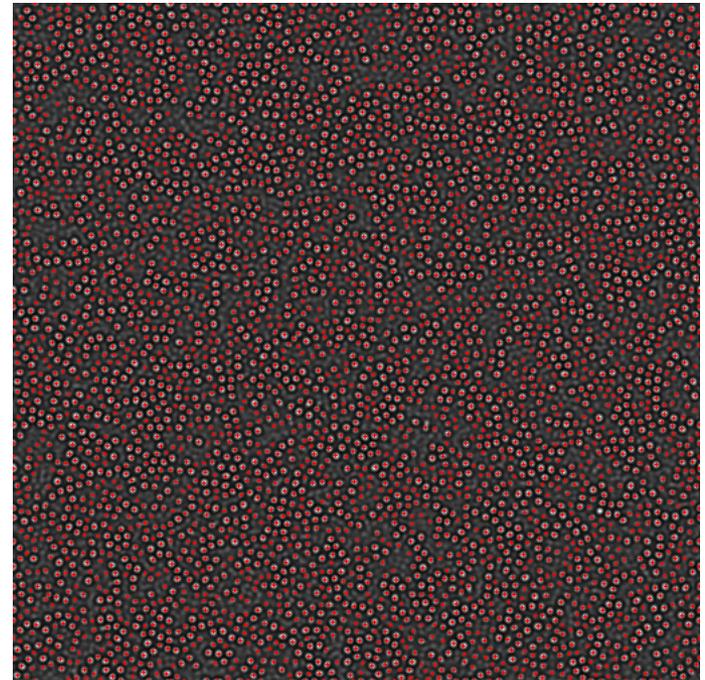
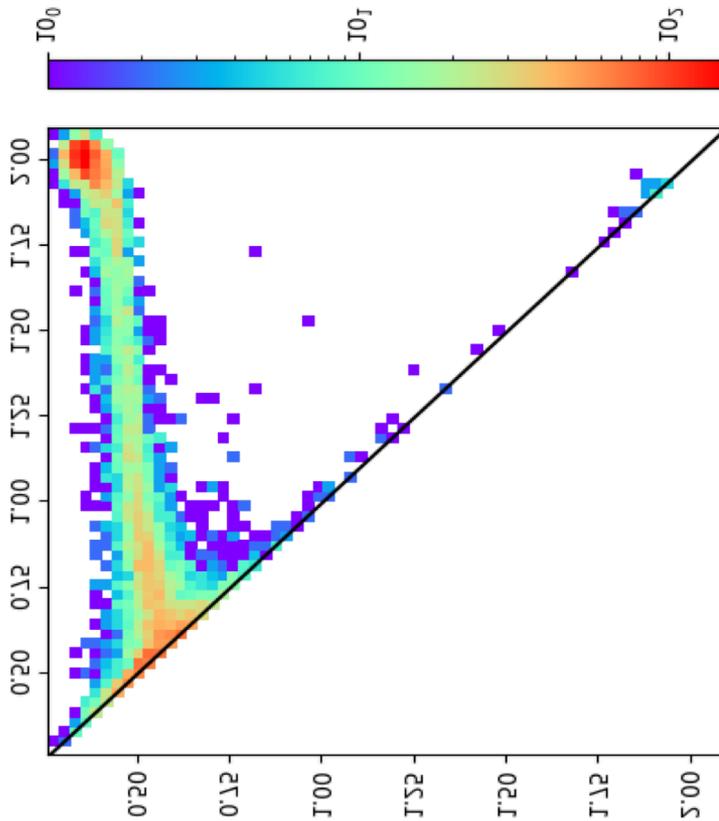
alpha=1.5, time step = 800



PD図の逆解析

$\alpha=1.5$, time step = 800

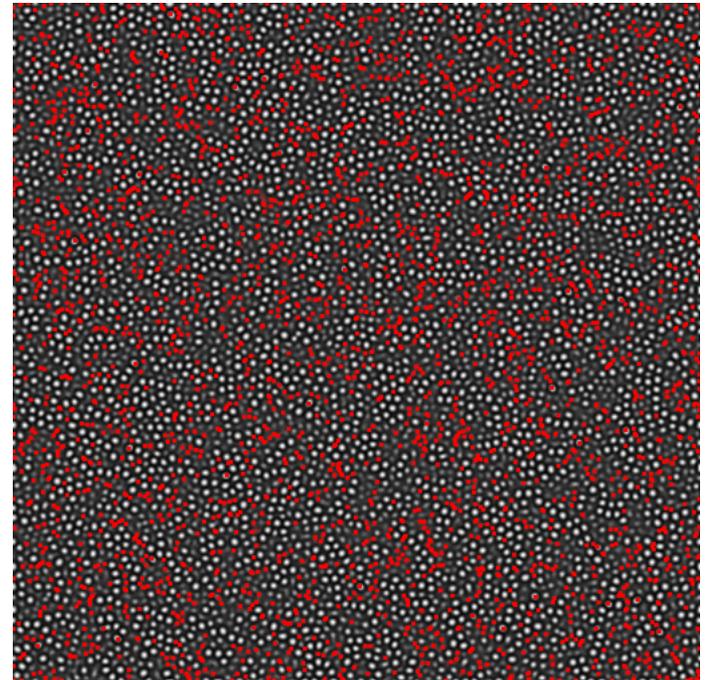
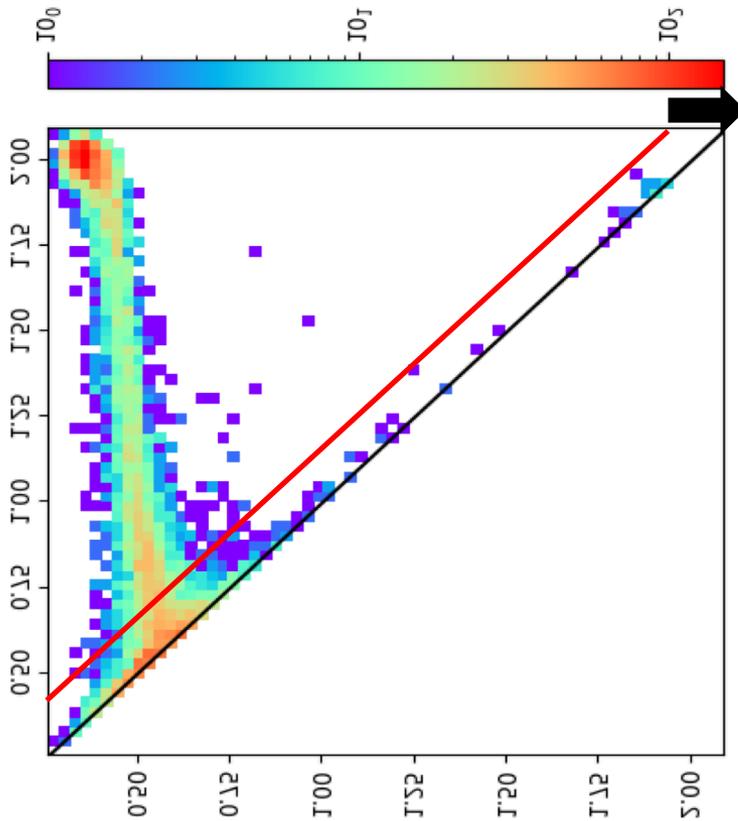
PD図に表示された全ての穴のdeath位置



[Homcloudを仕様: https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/hiraoka_lab/homcloud/index.en.html]

PD図の逆解析

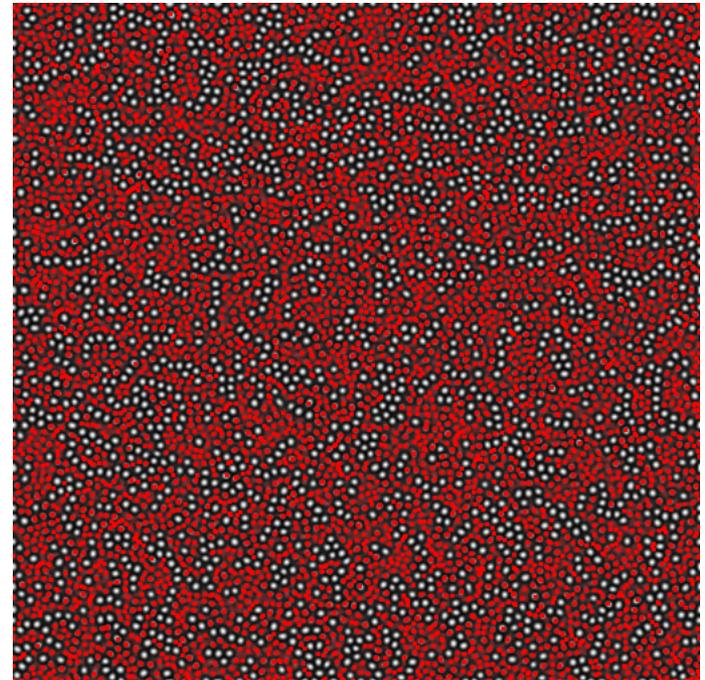
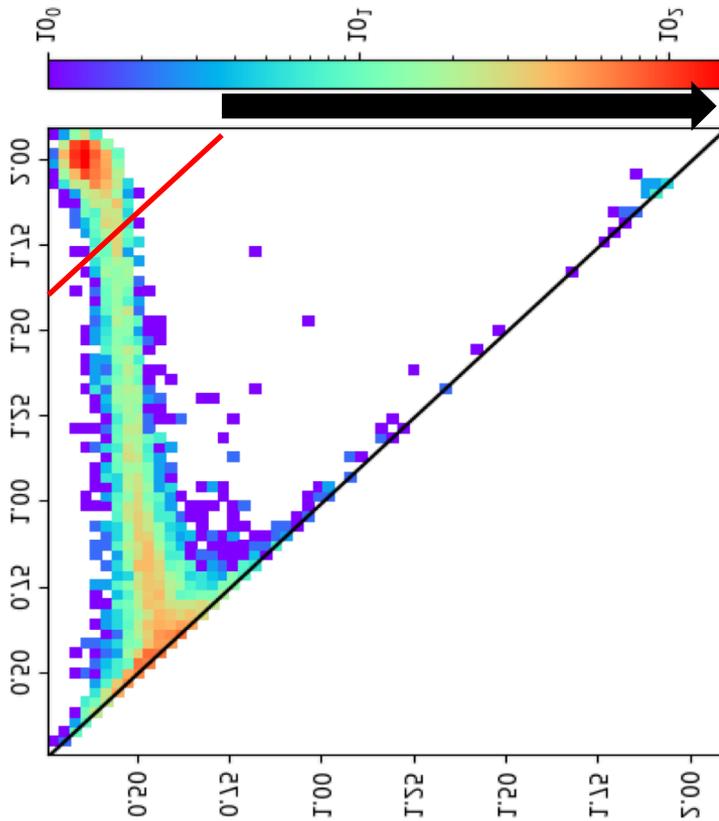
(birth - death) < 0.3の穴のdeath位置
とbirth時の穴の領域(薄赤の領域)



[Homcloudを仕様: https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/hiraoka_lab/homcloud/index.en.html]

PD図の逆解析

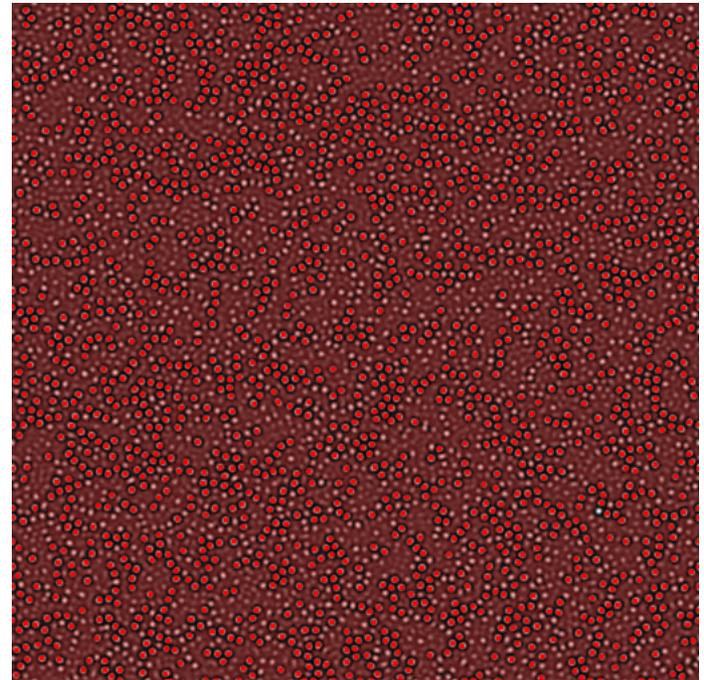
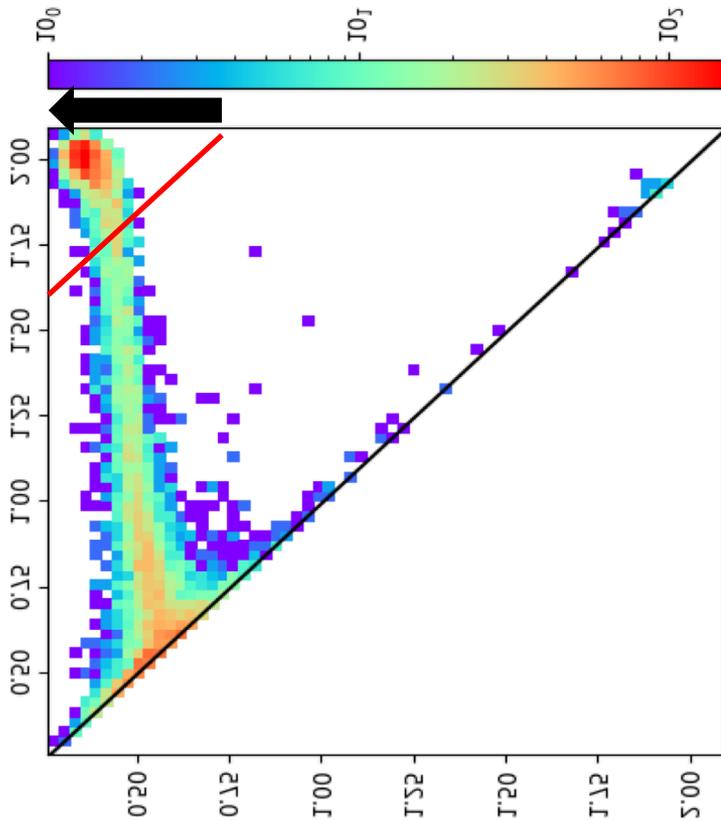
(birth - death) < 0.7の穴のdeath位置
とbirth時の穴の領域(薄赤の領域)



[Homcloudを仕様: https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/hiraoka_lab/homcloud/index.en.html]

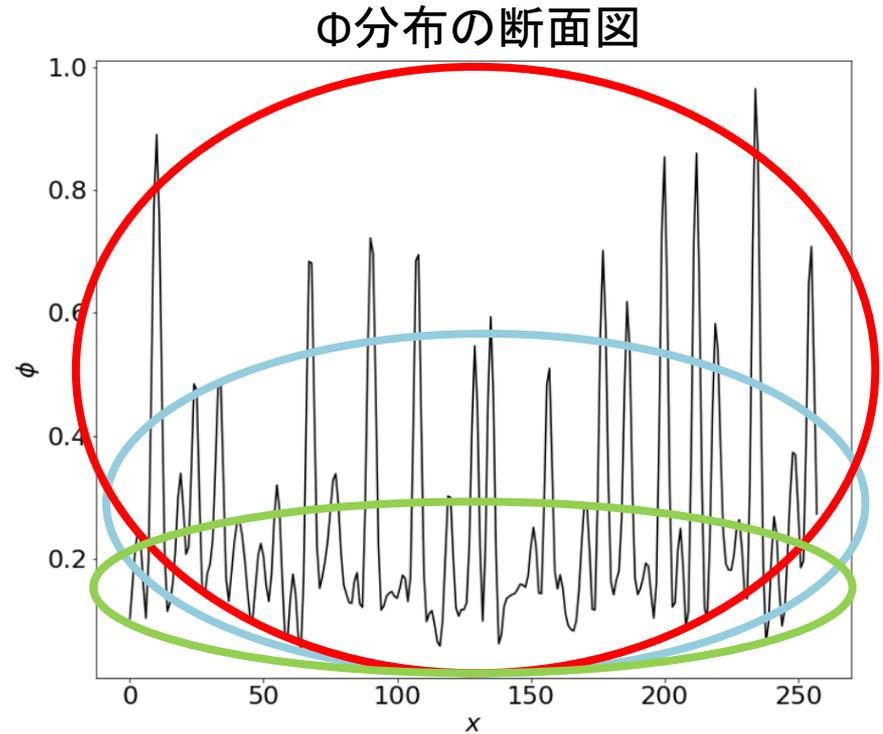
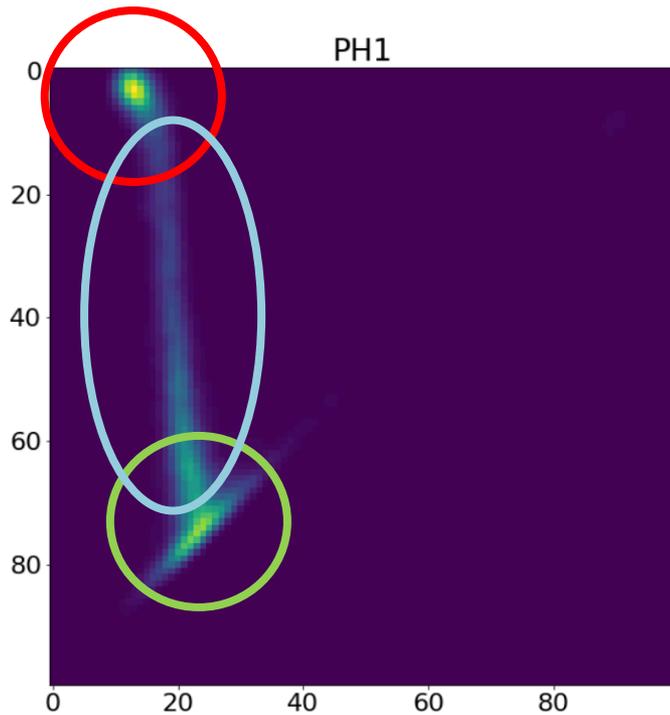
PD図の逆解析

(birth - death) > 0.7の穴のbirth位置
とbirth時の穴の領域(薄赤の領域)



[Homcloudを仕様: https://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/hiraoka_lab/homcloud/index.en.html]

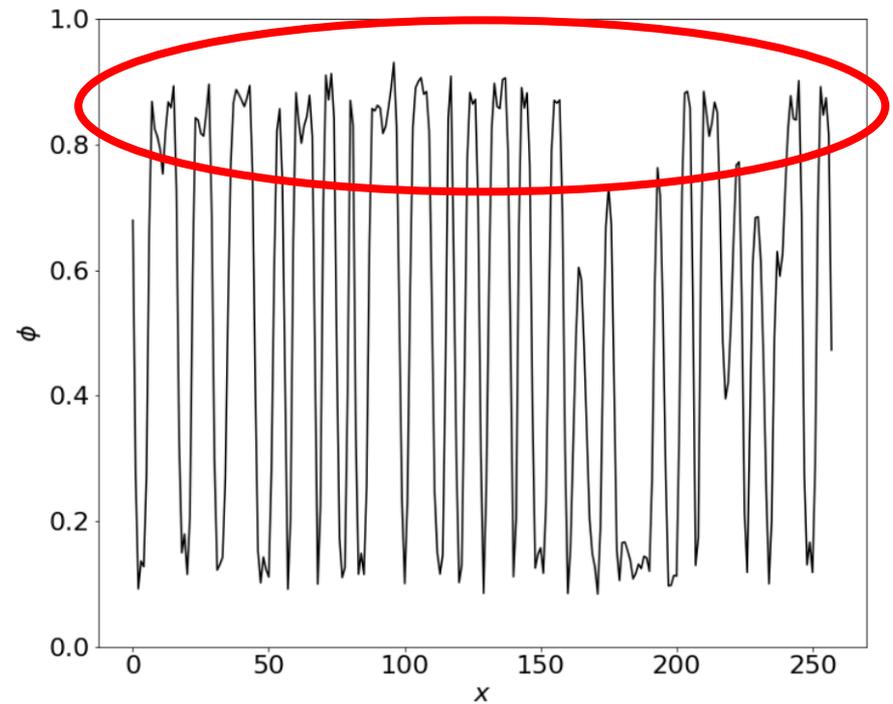
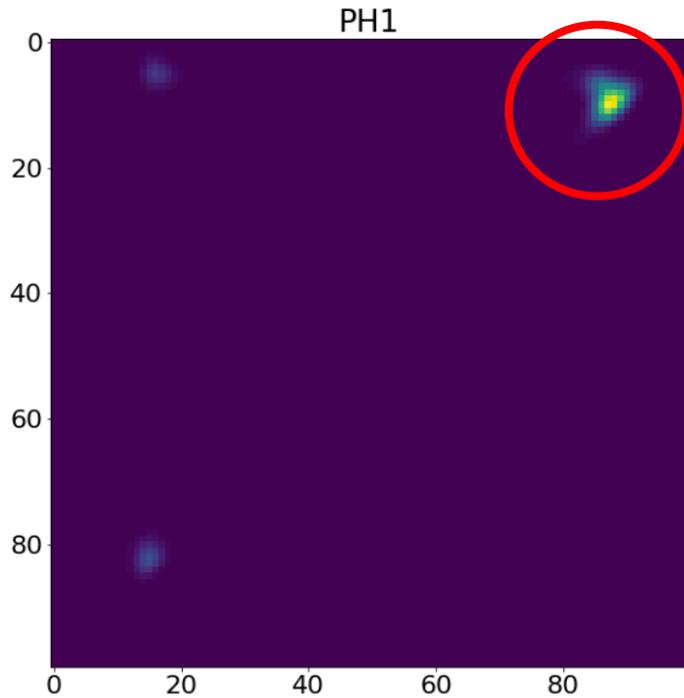
PD図：再構成結果からの考察



赤: 0.8付近にある強度の強いピークに対応
青: 中間の高さのピークに対応
緑: 0.1付近のピークに対応



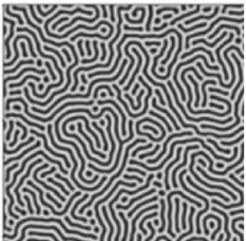
PD図：再構成結果からの考察



TDAによる特徴量抽出

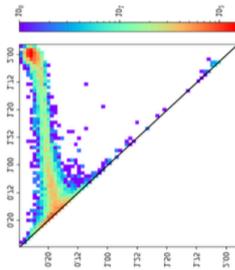
データ

1. 密度分布
2. 二値化データ
3. Point cloudデータ



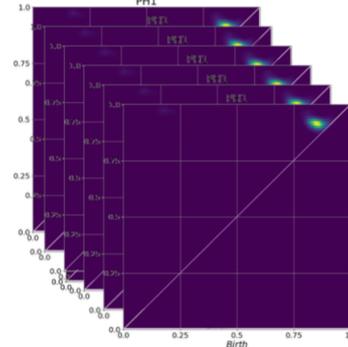
PD

1. Gray scale persistence
2. Spatial persistence
3. Alpha complex



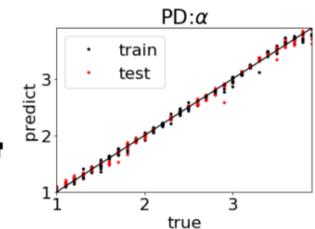
ベクトル化

カーネル密度推定

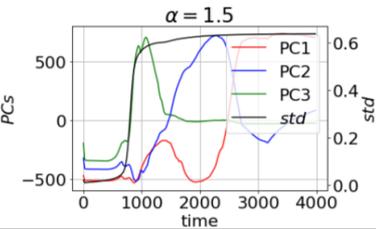


回帰/PCA

PLS
物性値と回帰



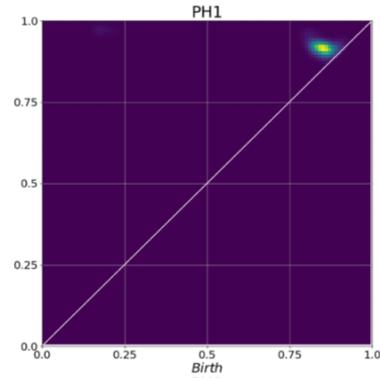
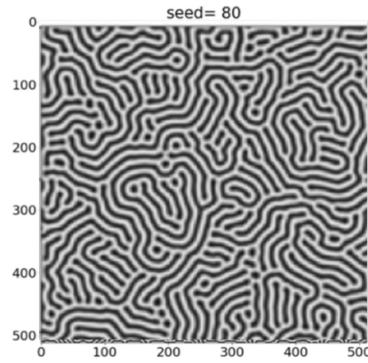
PCA
核生成検出



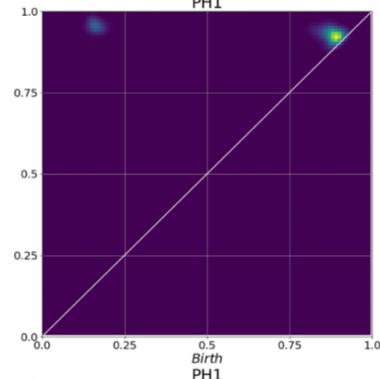
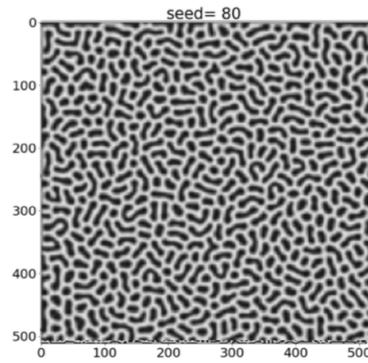
磁区パターンからの α の推定

α とPD

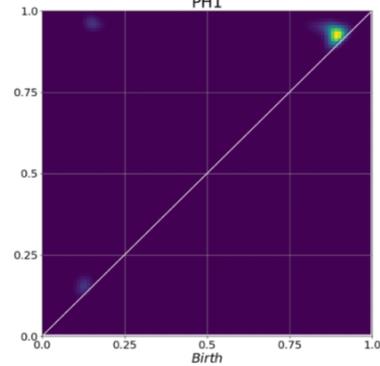
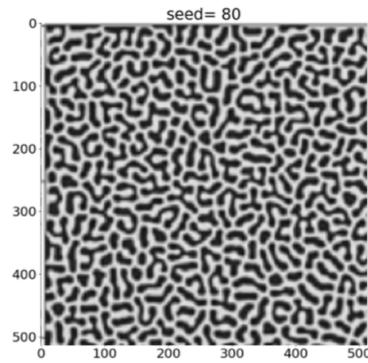
$\alpha=1.5$



$\alpha=2.5$



$\alpha=3.5$



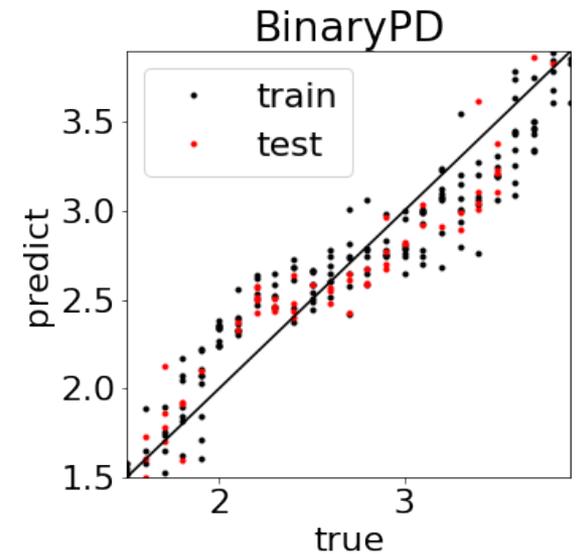
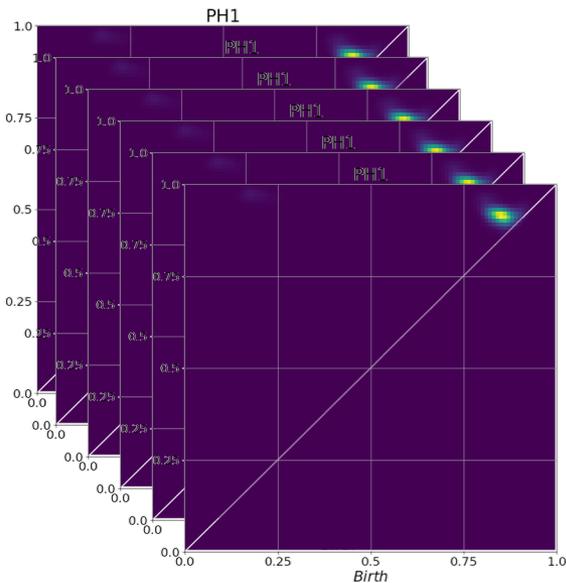
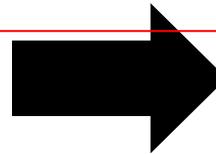
TDAによる特徴量抽出

1.カーネル密度推定を行い、PD図をベクトル化

2.時間発展に応じたPD図のセットに対して上記処理を適用

3.それを入力データとして、Lasso回帰

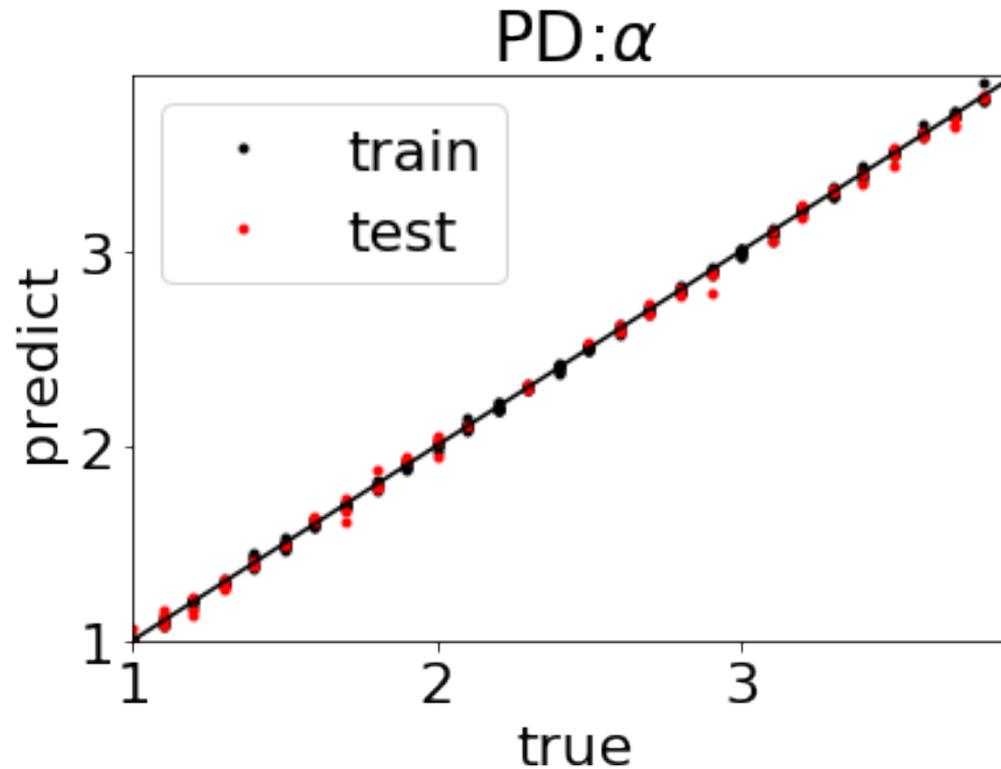
× 300



回帰モデルの予測値と、
データで与えられた α を比較

回帰結果1 (Lasso)

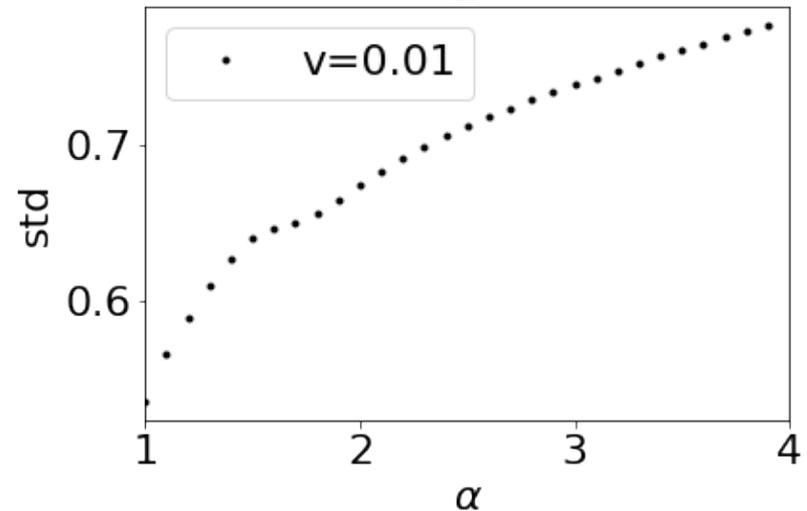
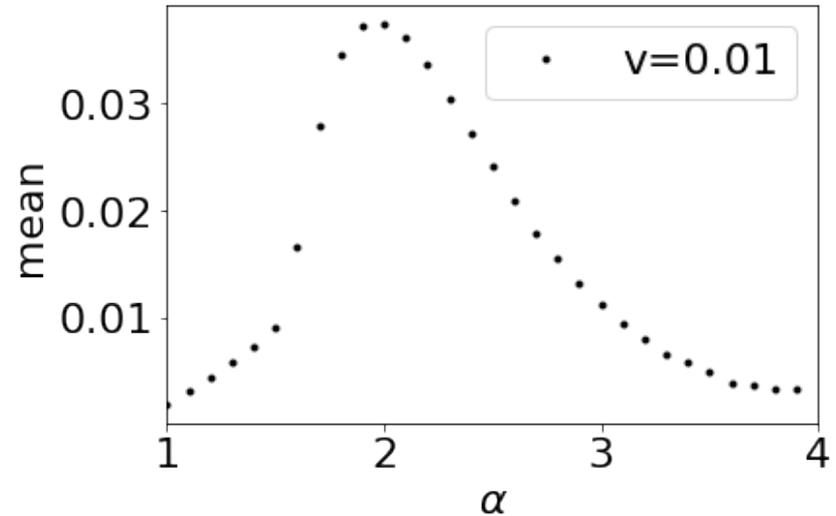
訓練サンプル数: 187
テストサンプル数: 63
正則化パラメータは,
5-fold CVで決定



統計量と α の関係

$$\text{mean} = \frac{1}{\text{サイト数}} \sum_r \Phi(\mathbf{r})$$

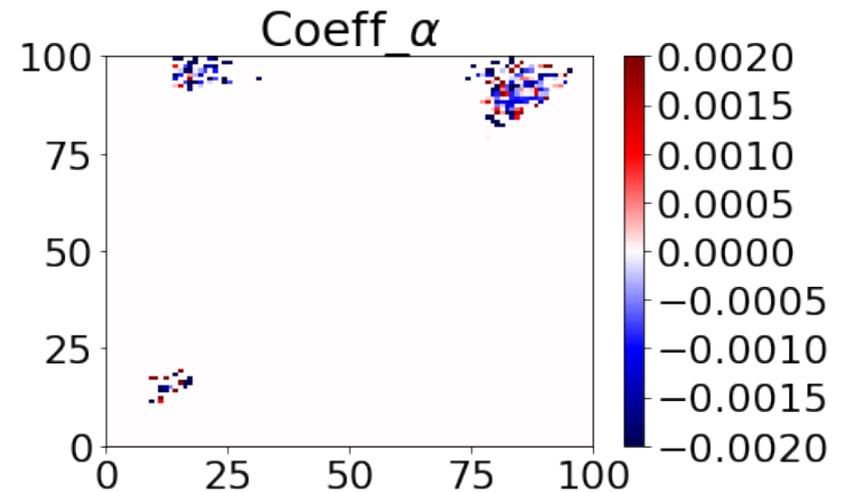
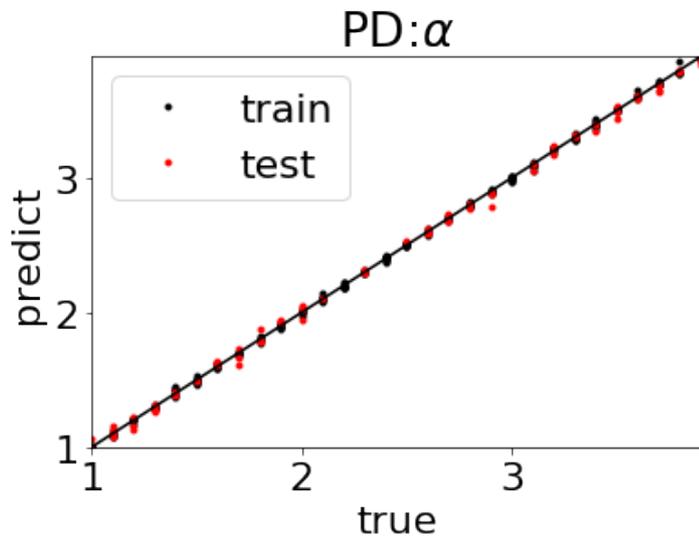
$$\text{std} = \text{std}(\Phi(\mathbf{r}))$$



➡標準偏差から α は一意に定まる

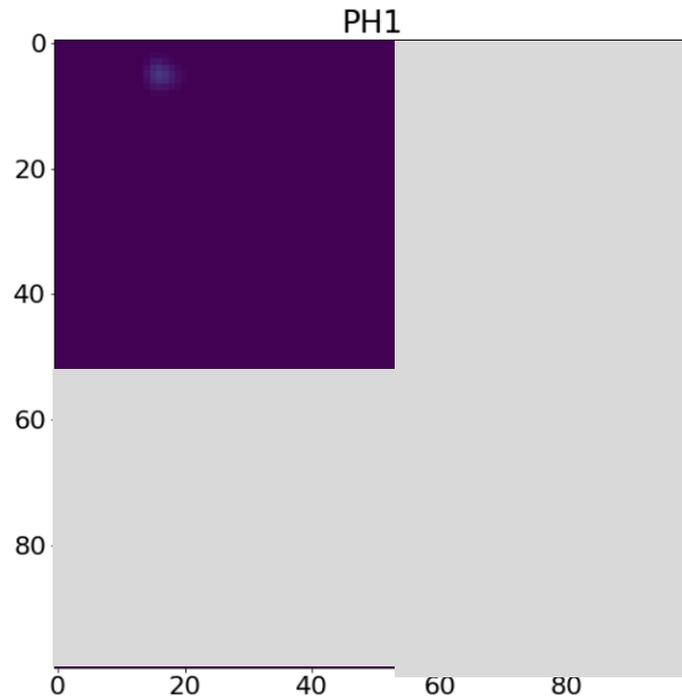
回帰結果1 (Lasso)

訓練サンプル数: 187
テストサンプル数: 63
正則化パラメータは,
5-fold CVで決定



回帰結果2 (Lasso)

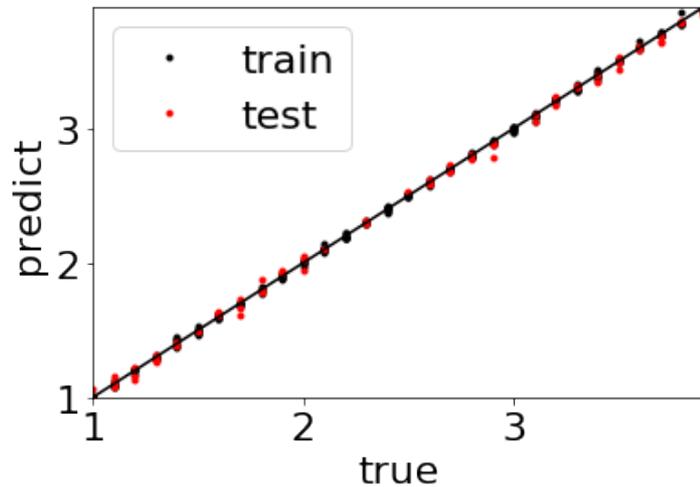
- 長寿命穴のみによる回帰



回帰結果2 (Lasso)

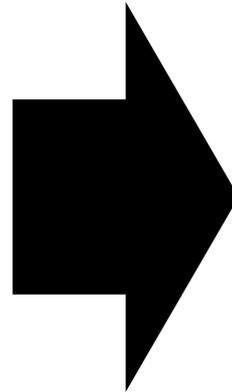
PD全体を仕様

PD: α



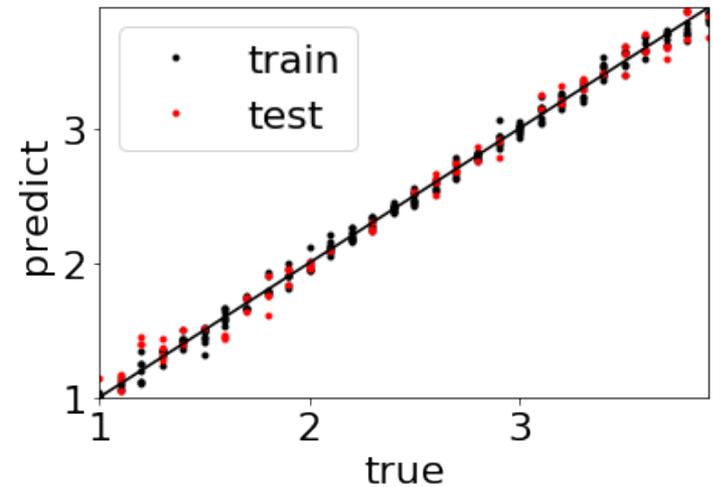
$$\text{MSE} = 4.45 \times 10^{-06}$$

回帰性能が
悪化



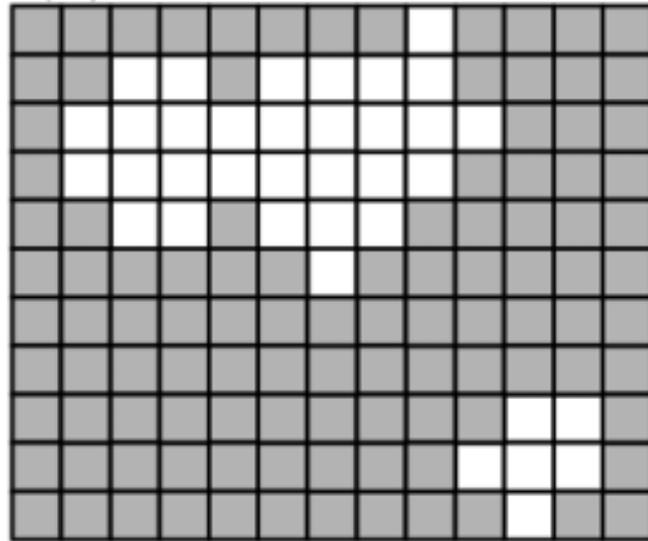
長寿命領域のみ

PD: α



$$\text{MSE} = 1.90 \times 10^{-05}$$

2値化して分析

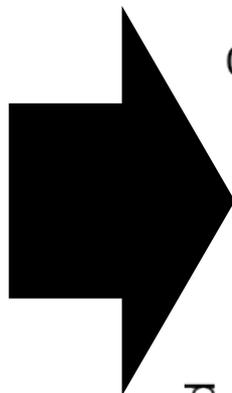
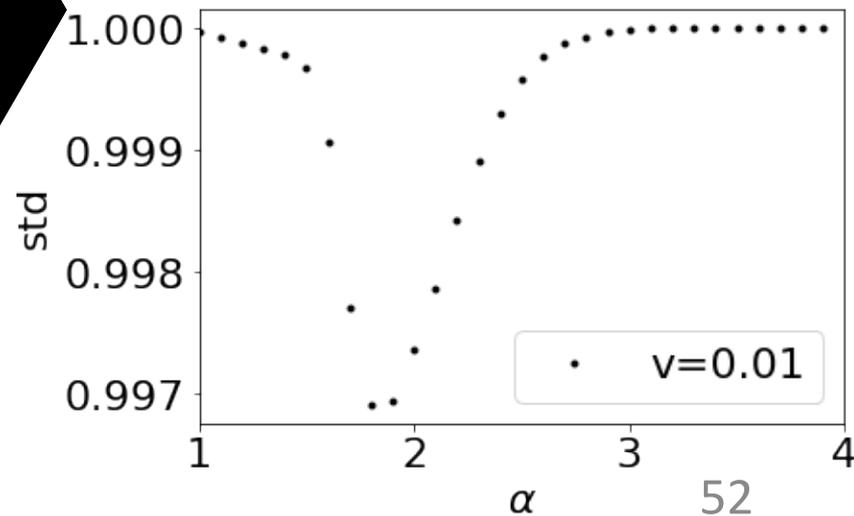
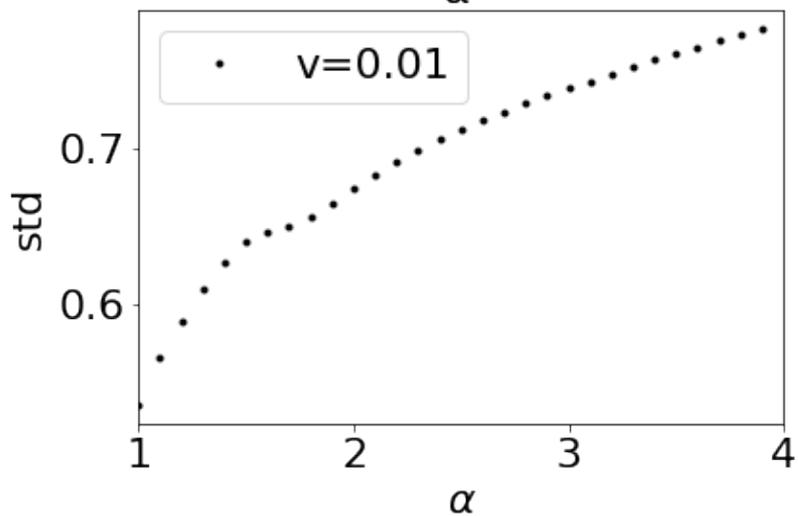
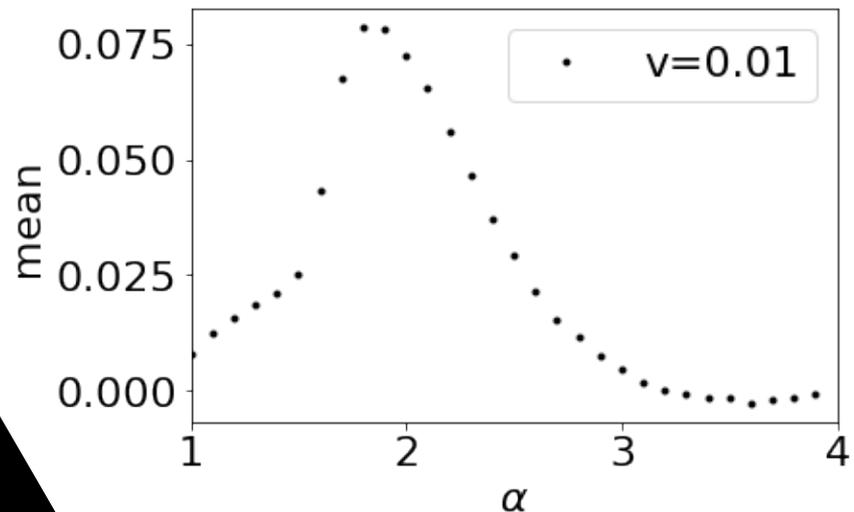
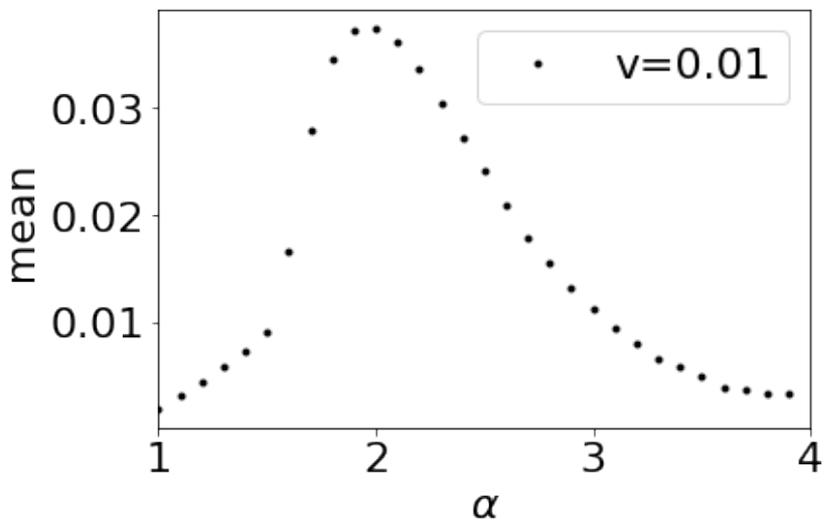


➡パターン情報のみに着目した分析になる

2値化した場合の統計量

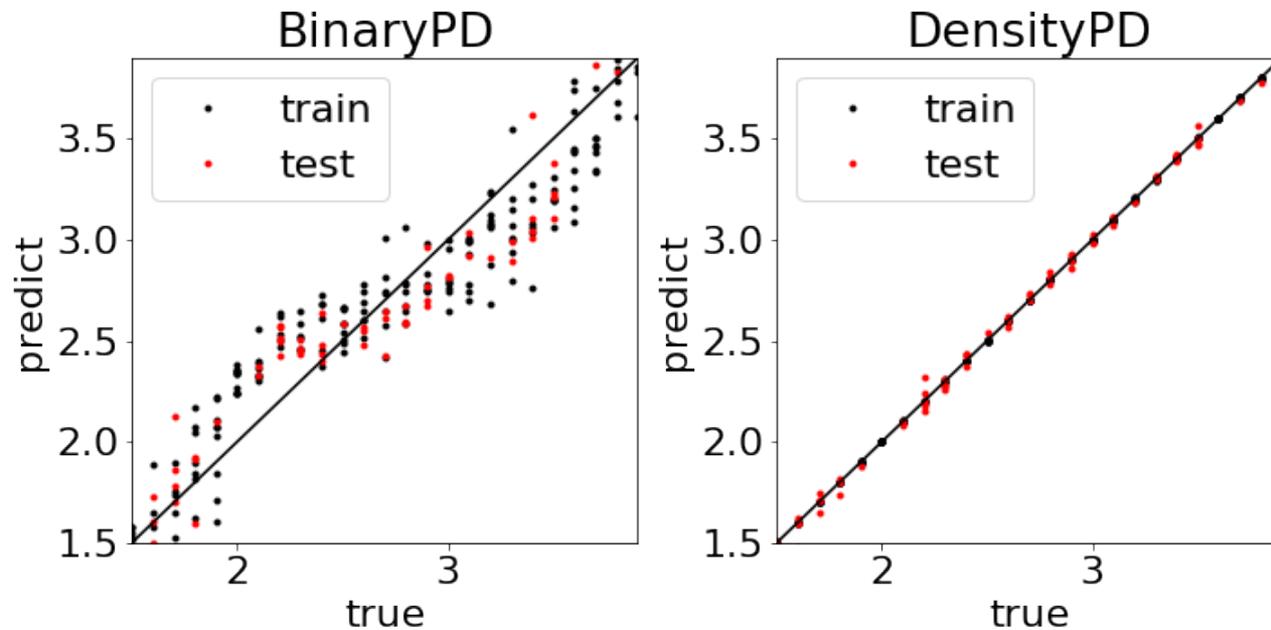
PD全体を仕様

長寿命領域のみ



2値化した場合のPDからの予測

Ridge回帰による比較結果



➡二値化することで消えている情報は有用であった可能性

磁区構造形成過程の分析

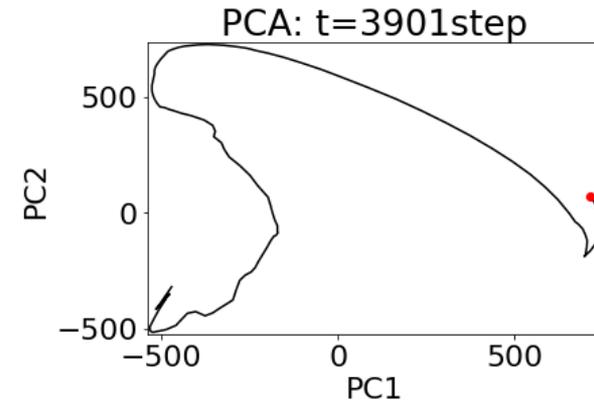
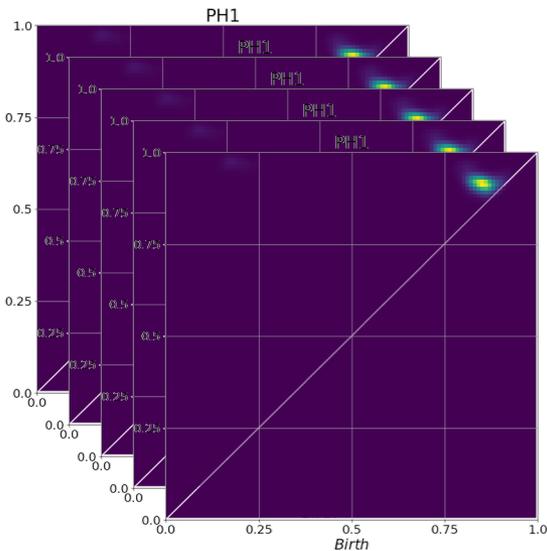
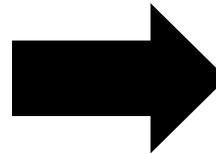
TDAによる特徴量抽出

1.カーネル密度推定を行い, PD図をベクトル化

2.時間発展に応じたPD図のセットに対して上記処理を適用

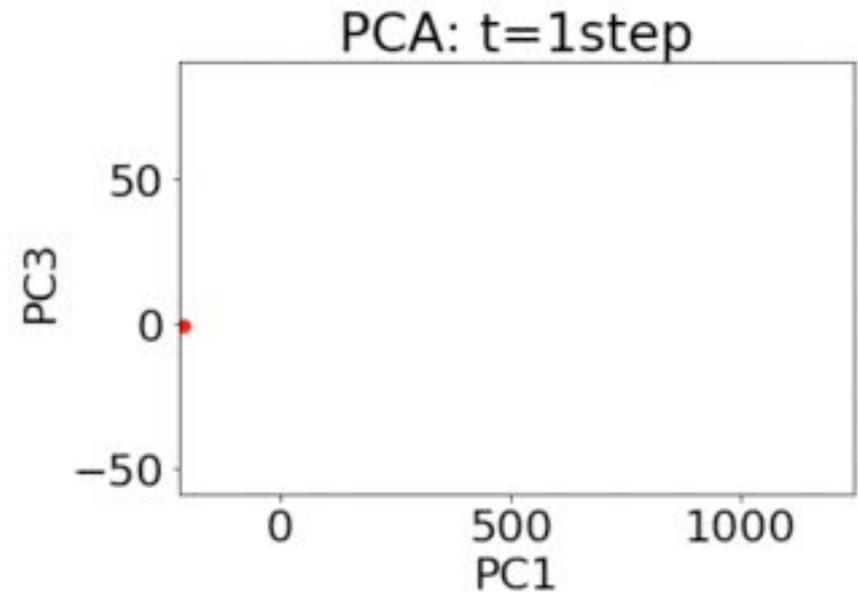
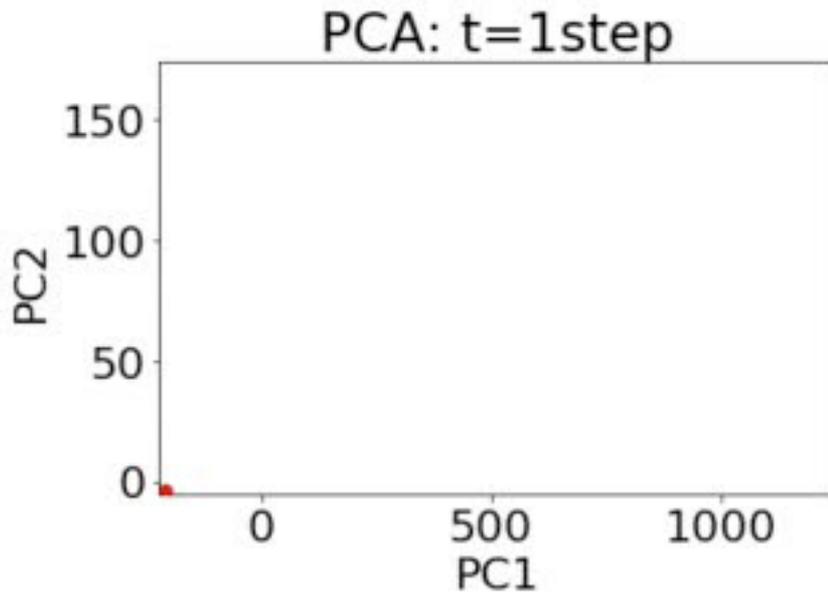
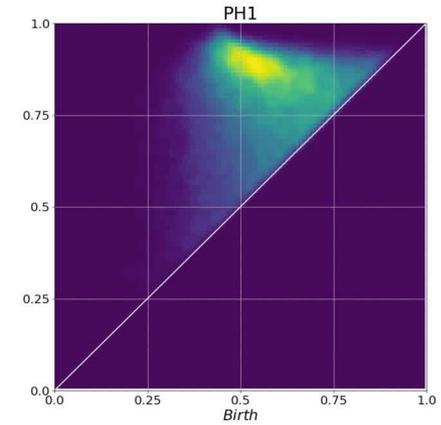
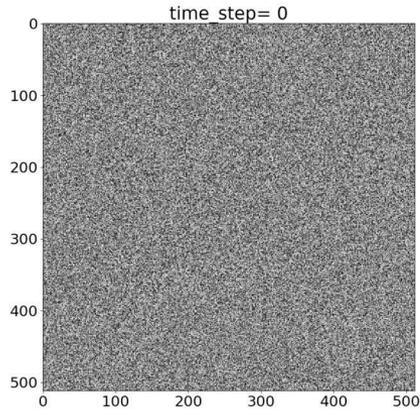
3.それをPCAで次元圧縮

× 200

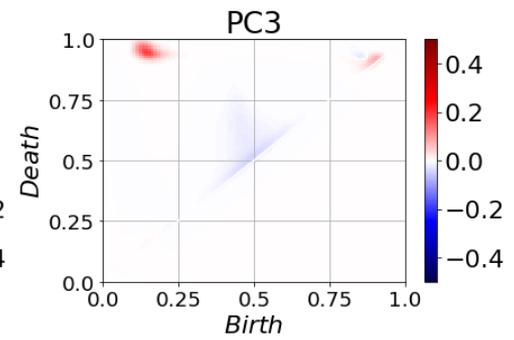
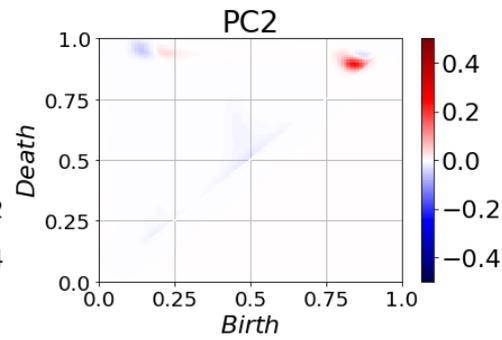
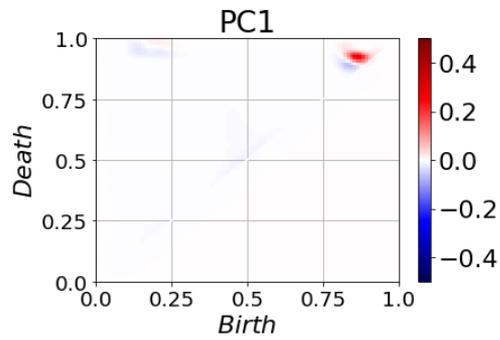
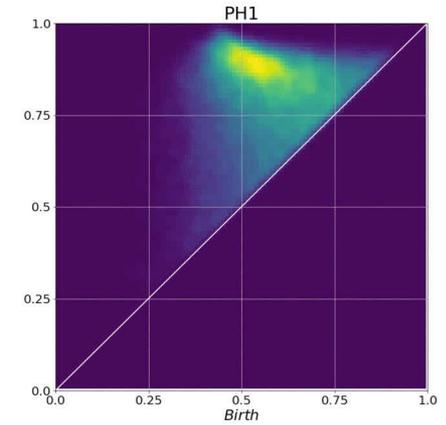
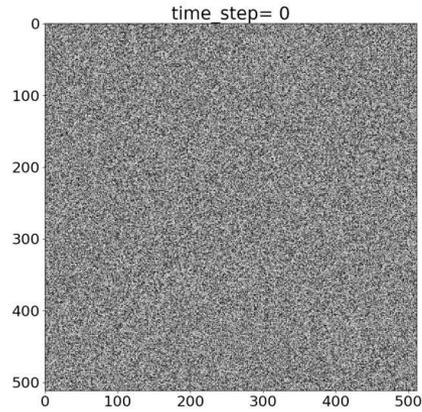


PCAで次元圧縮し,
時間発展を可視化

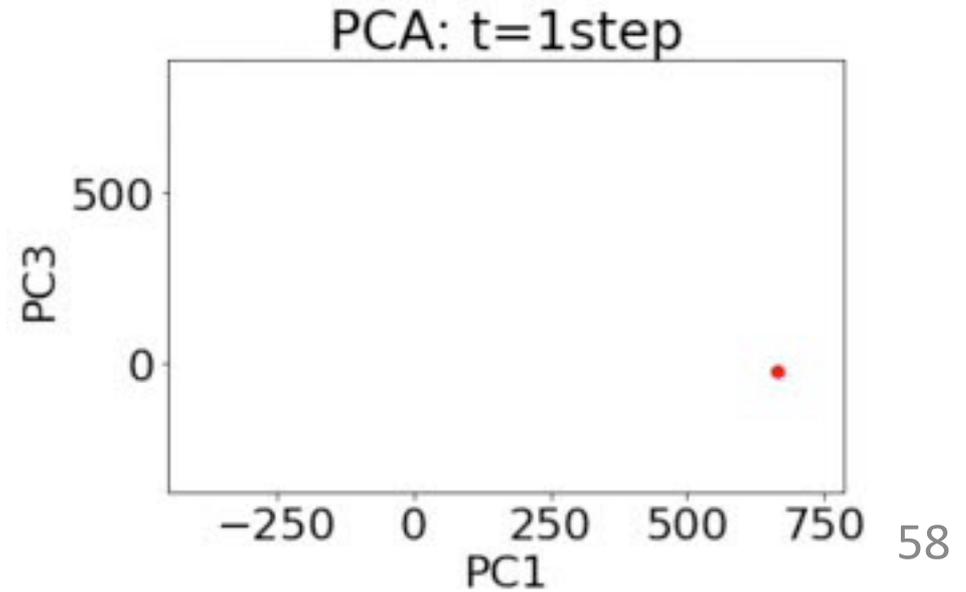
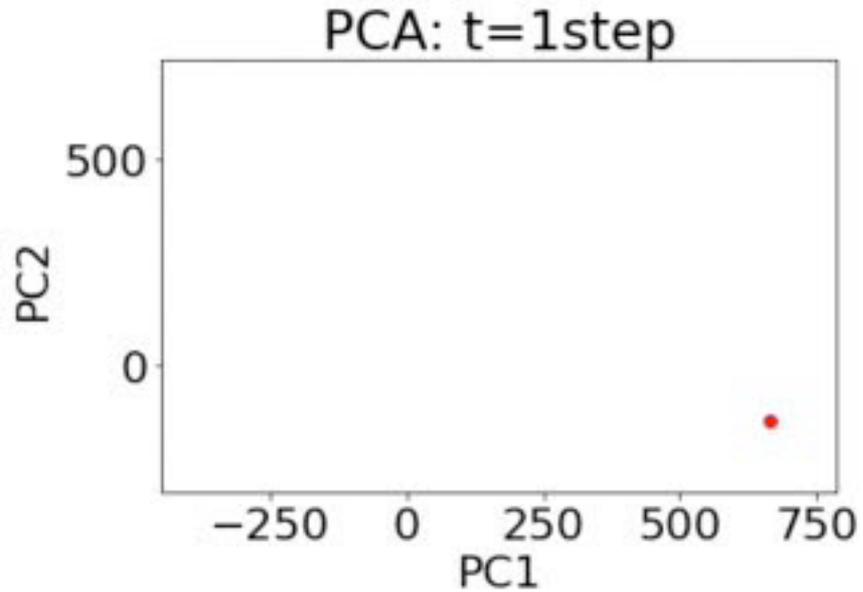
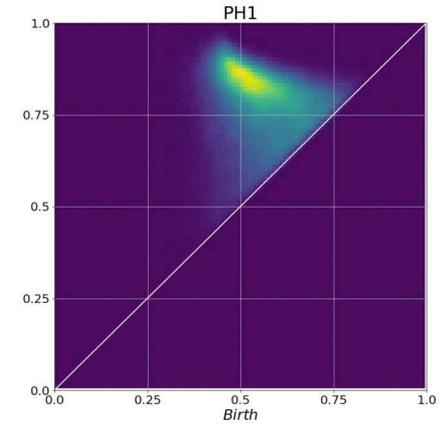
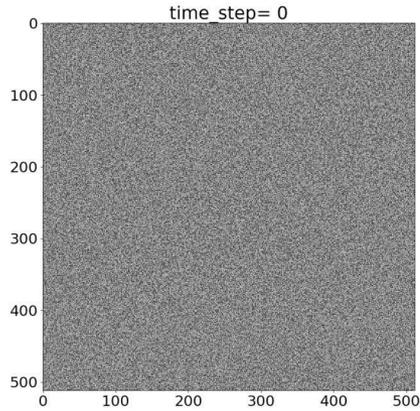
$\alpha=1.5$



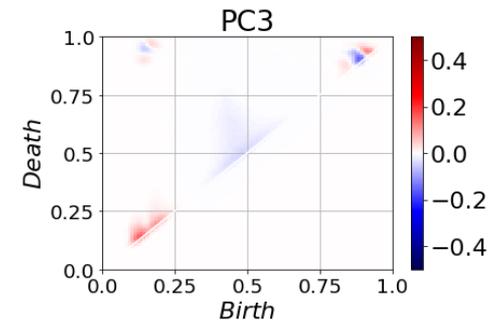
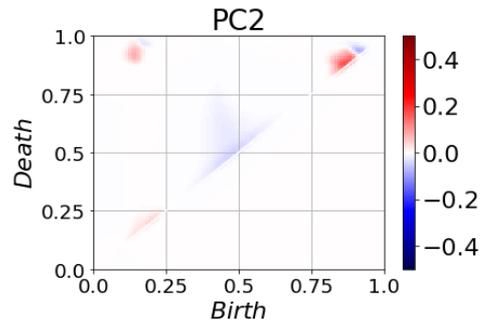
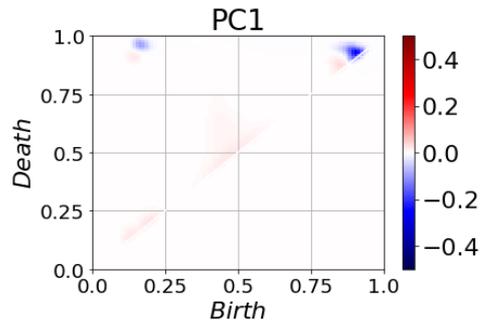
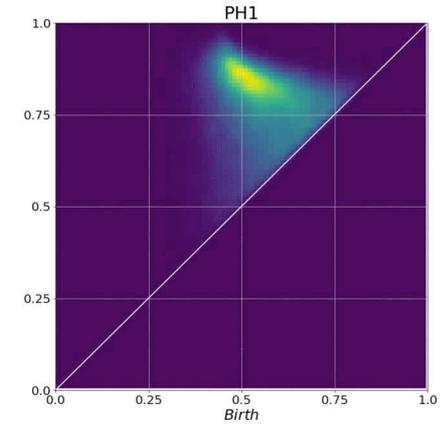
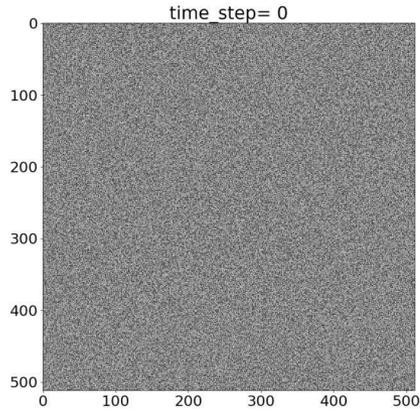
$\alpha=1.5$



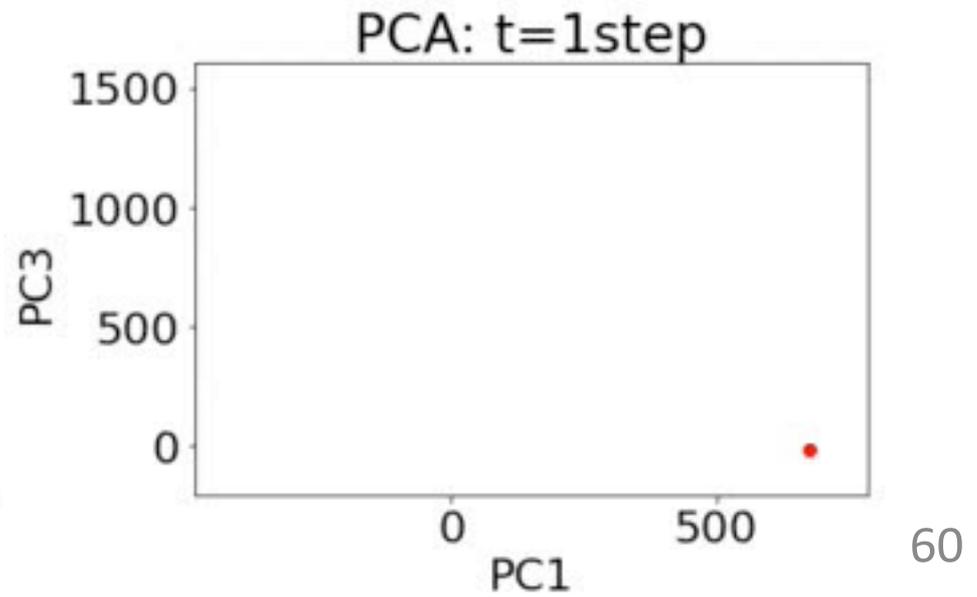
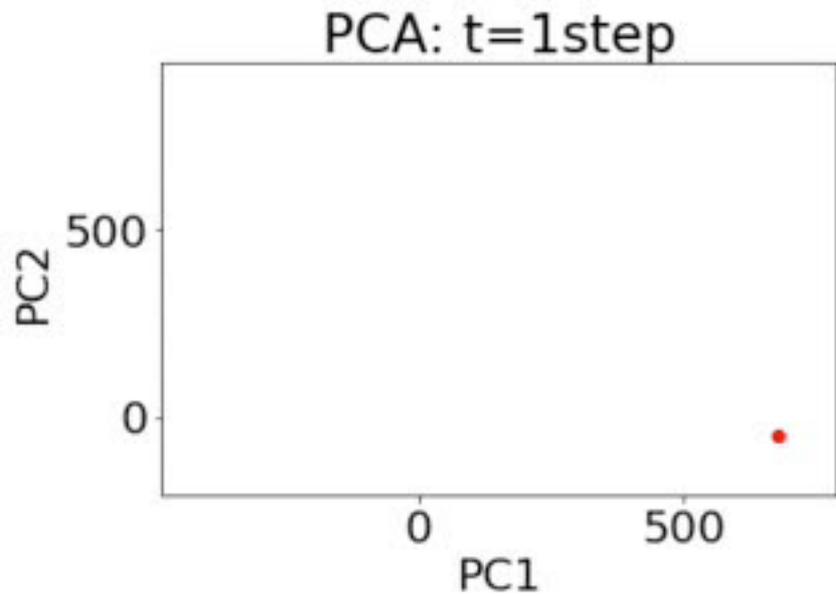
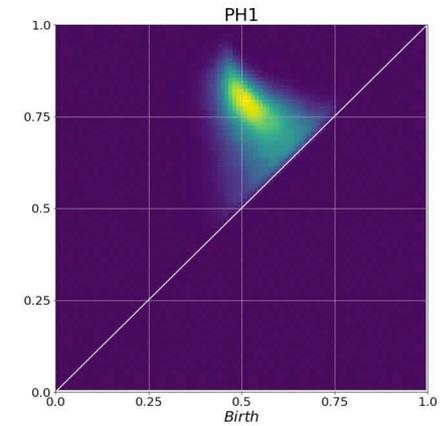
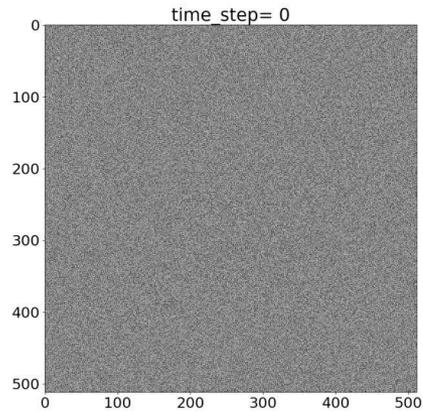
$\alpha=2.5$



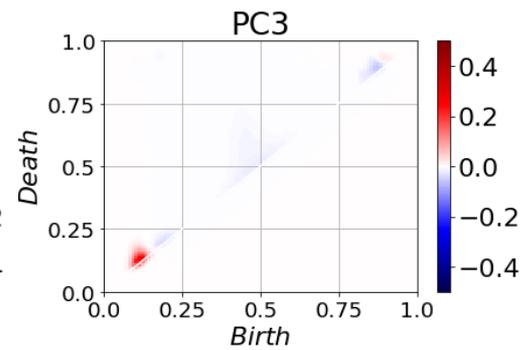
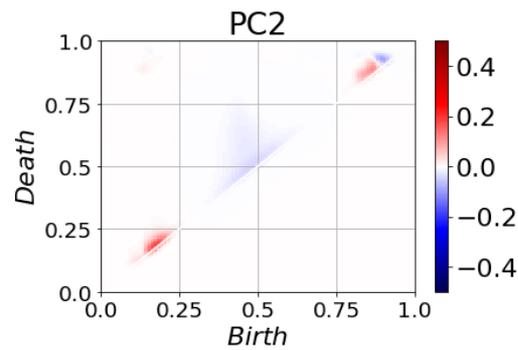
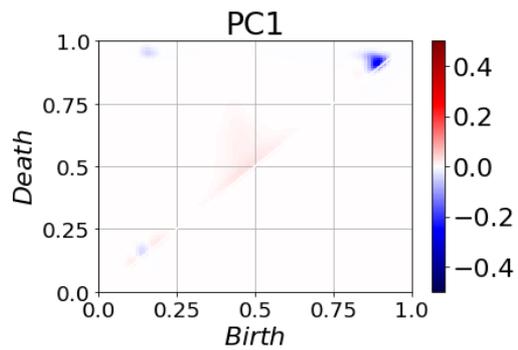
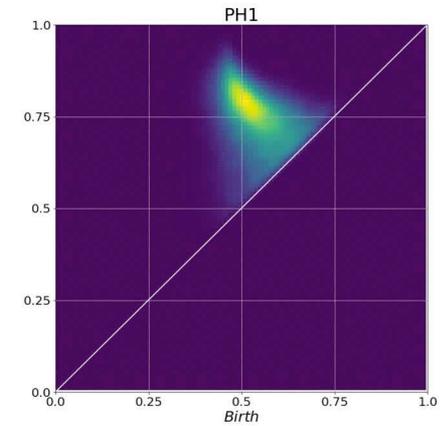
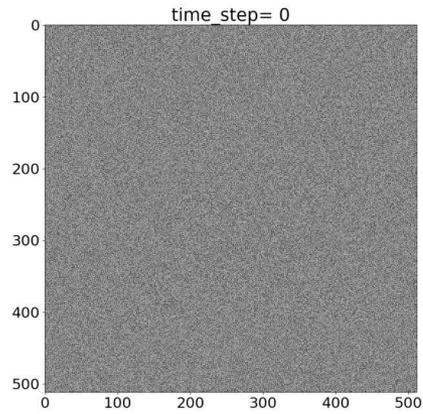
$\alpha=2.5$



$\alpha=3.5$

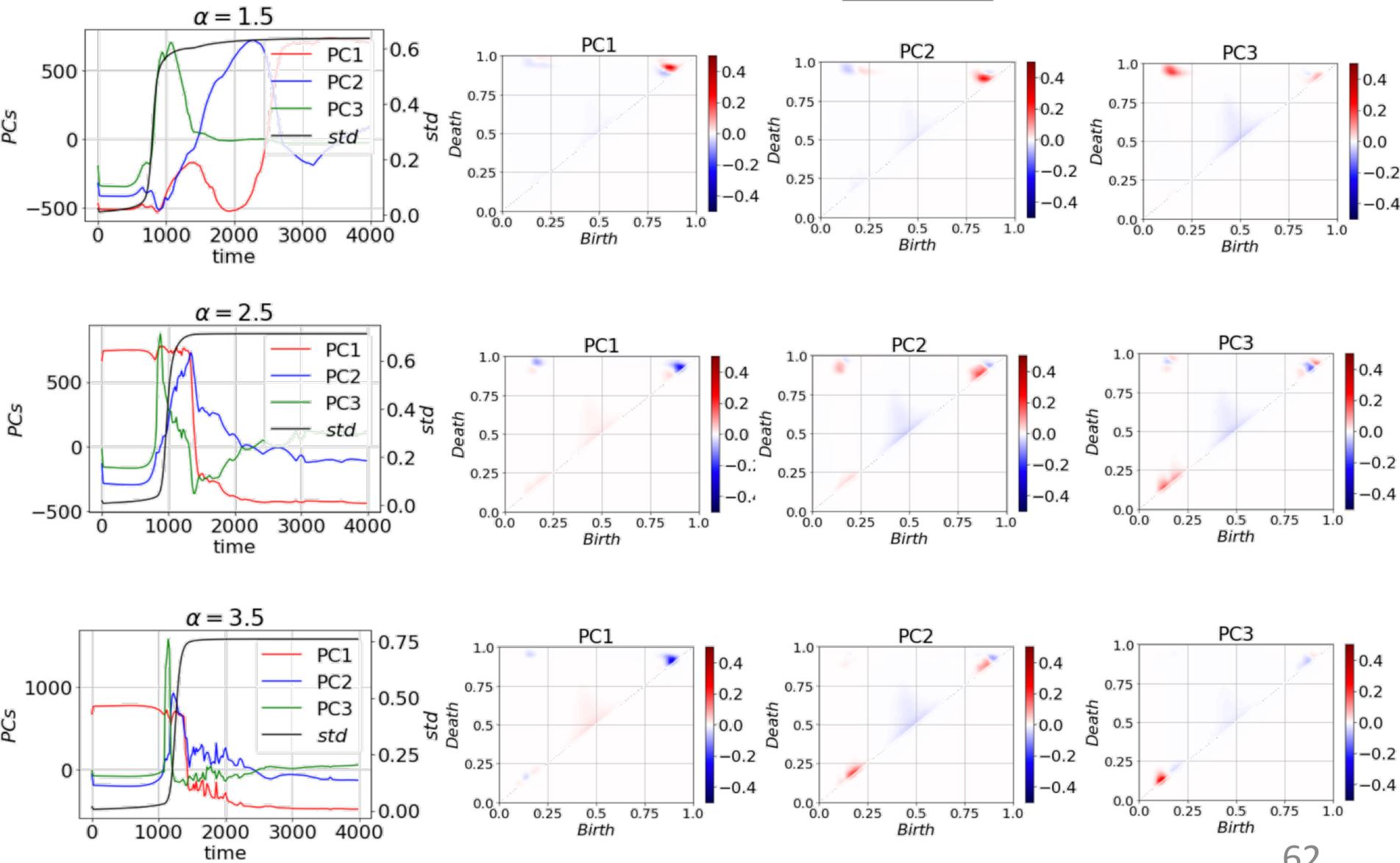


$\alpha=3.5$



● 主成分値の時間発展

主成分



考察

- 異方性 … $\phi = \pm 1$ をとる傾向。

$$H_{\text{ani}} = \alpha \lambda(\mathbf{r}) \int d\mathbf{r} \left(-\frac{\phi(\mathbf{r})^2}{2} + \frac{\phi(\mathbf{r})^4}{4} \right)$$

ここで、 $\lambda(\mathbf{r})$ はdisorderをあらわし、次のように与えられる：

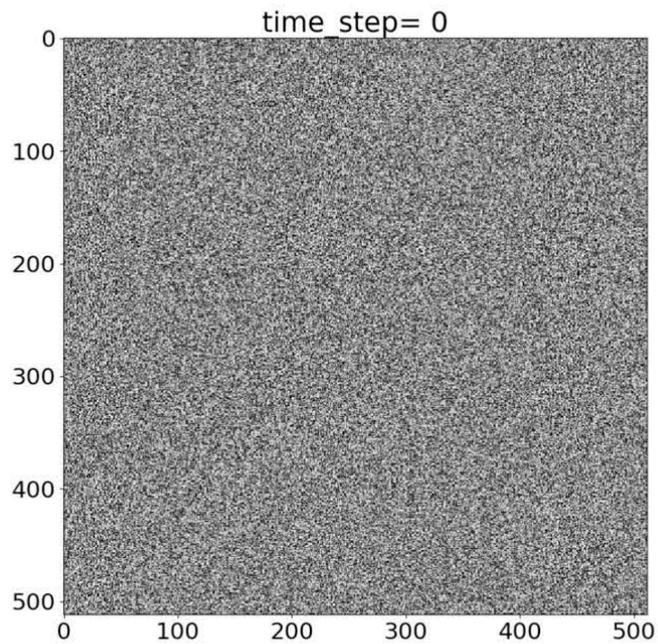
$$\lambda(\mathbf{r}) = 1 + \mu(\mathbf{r})/4$$

μ は、平均0で分散 μ_0^2 のガウス乱数とする。

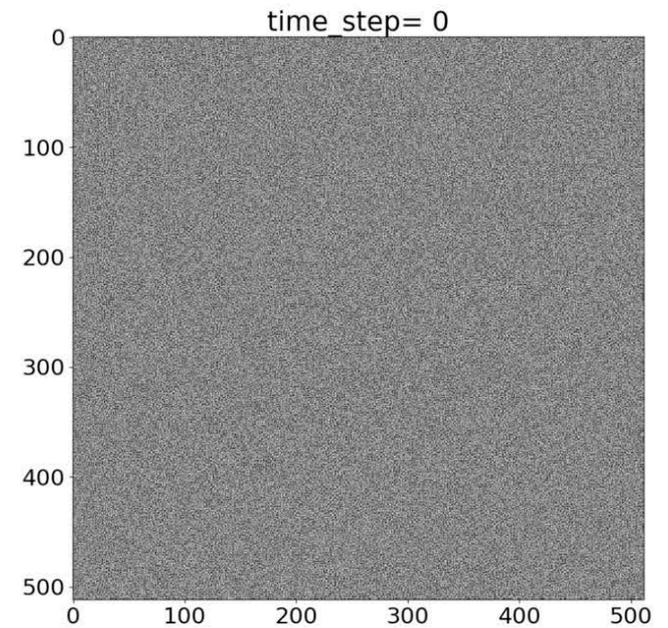
⇒ α が大きいと、1と-1の間の値は取りにくくなる

考察

$\alpha=1.5$



$\alpha=2.5$



➡核生成過程の違いがPDに反映されていた

まとめ

1. TDAを用いて抽出した磁区構造の特徴量と、物性特性を回帰することで、ドメイン内構造が重要であることが判明した.
2. TDAを用いて抽出した特徴量によって、磁区構造の核生成プロセスの違いを捉えることができていた.
3. PD上で、磁区形成過程のモデルを構築できないか？