

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина»

Физико-технологический институт

Кафедра теоретической физики и прикладной математики

На правах рукописи

**ЯКОВЛЕВ Илья Александрович**

**ФАЗОВАЯ ХАРАКТЕРИЗАЦИЯ КОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ С  
ТОПОЛОГИЧЕСКИ-ЗАЩИЩЕННЫМИ МАГНИТНЫМИ  
СТРУКТУРАМИ ПРИ ПОМОЩИ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ  
И ТЕОРИИ СТРУКТУРНОЙ СЛОЖНОСТИ**

1.3.8 – Физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:  
доктор физико-математических наук, доцент  
Мазуренко Владимир Владимирович

Екатеринбург – 2024

## Оглавление

Введение .....	4
Глава 1. Теоретическая часть .....	12
1.1    Магнитные модели .....	12
1.1.1    Модель Изинга .....	12
1.1.2    Модель Гейзенберга с анизотропным взаимодействием Дзялошинского-Мории .....	13
1.2    Методы численного моделирования магнитных систем.....	15
1.2.1    Метод Монте-Карло .....	16
1.2.2    Алгоритм Метрополиса.....	17
1.2.3    Спиновая динамика .....	18
1.3    Стандартные методы определения магнитных фазовых переходов .....	19
1.4    Алгоритмы машинного обучения для проведения фазовой классификации .....	22
1.4.1    Нейронная сеть прямого распространения .....	22
1.4.2    Метод опорных векторов .....	29
1.4.3    Классификация на основе ближайших соседей.....	32
Глава 2. Построение низкотемпературных фазовых диаграмм систем, в которых стабилизируются скирмионы. Поиск оптимального представления спиновых конфигураций.....	35
2.1    Предпосылки к исследованию.....	35
2.2    Фазовые диаграммы ферромагнитных систем с взаимодействием Дзялошинского-Мории .....	37
2.2.1    Двумерные системы .....	37
2.2.2    Смешанные состояния.....	40
2.2.3    Трехмерные магнитные системы.....	43
2.3    Разработка метода разделения магнитных фаз по профилям намагниченности .....	44
2.4    Выводы к главе .....	52

Глава 3. Классификации магнитных фаз при помощи методов машинного обучения .....	54
3.1 Предпосылки к исследованию .....	54
3.2 Двумерные магнитные системы .....	56
3.2.1 Обучение нейронной сети .....	56
3.2.2 Фазовая диаграмма .....	60
3.2.3 Анализ процесса классификации .....	63
3.2.4 Проверка на универсальность .....	66
3.3 Трехмерные магнитные системы.....	68
3.4 Сравнение с базовыми алгоритмами машинного обучения.....	71
3.4.1 Методы ближайших соседей.....	71
3.4.2 Низкоразмерная визуализация .....	75
3.4.3 Метод опорных векторов .....	76
3.5 Выводы к главе .....	77
Глава 4. Алгоритм оценки структурной сложности для анализа фазовых переходов.....	79
4.1 Предпосылки к исследованию .....	79
4.2 Описание метода .....	82
4.3 Тестирование методики на естественных паттернах .....	84
4.4 Анализ фазовых диаграмм магнитных систем .....	86
4.4.1 Модель Изинга .....	86
4.4.2 Модель Гейзенберга с анизотропным взаимодействием Дзялошинского-Мории .....	89
4.4.3 Анализ парциальных вкладов в сложность .....	93
4.5 Анализ динамических процессов .....	94
4.6 Сравнение с подходами, основанными на компрессии данных .....	96
4.7 Выводы к главе .....	98
Заключение.....	100
Список сокращений и условных обозначений .....	102
Список литературы .....	103

## Введение

### Актуальность темы исследования

Текущий уровень технологического прогресса неразрывно связан с достижениями в области исследования магнитных материалов, чьи свойства обусловлены наличием сильных корреляций [1, 2]. Здесь данные экспериментальных измерений играют важнейшую роль, поскольку не только позволяют получить информацию о свойствах конкретного соединения, но и в перспективе могут привести к развитию новых фундаментальных идей и подходов. В качестве примера можно привести обнаружение слабой спонтанной намагниченности в антиферромагнетике  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [3] в 1916 году. Анализ имеющихся данных показал, что наблюдаемый слабый ферромагнетизм чувствителен к симметрии кристалла. Позднее он был обнаружен и в других антиферромагнитных системах [4, 5]. На основе имеющихся данных Игорь Дзялошинский в 1958 году сформулировал концепцию антисимметричного обменного взаимодействия [6]. Впоследствии, Мория разработал теорию сверхобмена с учетом спин-орбитальной связи, объясняющую микроскопический механизм его действия [7].

Со временем стало понятно, что физические явления, обусловленные наличием в системе взаимодействия Дзялошинского-Мории не ограничиваются «слабым» ферромагнетизмом. Было теоретически предсказано, что оно должно приводить к формированию протяженных спиральных магнитных структур в материалах без инверсионной симметрии [8]. Позднее данные структуры были экспериментально обнаружены в металлических соединениях MnSi [9] и FeGe [10], а также твердых растворах Fe<sub>1-x</sub>Co<sub>x</sub>Si [11, 12]. Дальнейшее изучение материалов, в которых формируются спиновые спирали, сыграло важную роль в возникновении новой области исследований, посвященной топологически-защищенным магнитным объектам. В общем случае под данным термином понимается сохранение топологии состояния, а значит невозможность изменения его структуры при плавных непрерывных преобразованиях. Если же речь идет о дискретных магнитных

моделях, топологическая защищенность выражается в наличии конечного энергетического барьера между состояниями системы с различным спиновым упорядочением. Теоретически [13–15], а затем и экспериментально [16, 17], было показано, что взаимодействие Дзялошинского-Мории ответственно за формирование топологически-защищенных объектов – магнитных скирмионов в металлических ферромагнетиках. Возможность стабилизировать данные вихревые структуры и манипулировать ими с помощью магнитных и электрических полей при комнатной температуре делает их очень перспективными во многих технологических приложениях, от изготовления логических элементов и устройств хранения информации нового поколения [18], до квантовых вычислений [19].

Тем не менее скирмионы являются далеко не единственными магнитными топологически-защищенными структурами [20]. Некоторые из них, к примеру, бимероны, ассоциируемые с фрагментами спиновых спиралей, встречаются в переходных областях фазовой диаграммы материалов, в которых присутствует взаимодействие Дзялошинского-Мории [17]. В связи с этим большой интерес вызывает как исследование механизмов, ответственных за формирование подобных магнитных структур, так и разработка алгоритмов, позволяющих проводить их характеризацию. Это обеспечивает актуальность исследования, представленного в данной диссертационной работе.

### **Степень разработанности темы исследования**

В настоящее время подавляющее большинство исследований, посвященных изучению скирмионных структур и их технологическому применению, фокусируются на изучении чистых топологически-защищенных состояний. Однако в ряде работ было показано, что анализ полной фазовой диаграммы рассматриваемых систем, включая переходные области, тоже имеет практический интерес ввиду формирования смешанных состояний скирмион-ферромагнетик, комбинации скирмионов и спиновых спиралей, а также магнитных структур нового типа – бимеронов [21]. Возможные перспективы технологического применения данных объектов приводят к необходимости точного определения диапазона параметров модели, в котором они реализуются.

Стоит также отметить, что методы, используемые в настоящее время для идентификации топологических магнитных фаз вещества, основанные на расчете корреляционных функций различных порядков, не позволяют получить качественное и количественное описание переходных областей. Иными словами, решение о проведении точных границ чистых состояний является в большой мере субъективным. Для того чтобы справиться с этой проблемой можно использовать алгоритмы машинного обучения, отлично зарекомендовавшие себя в задачах классификации данных. Недавние работы [22, 23] показывают, что они вполне могут прочно закрепиться в обиходе ученых в качестве инструмента для точного определения фазовых состояний и оценки параметров микроскопических моделей. Еще одним преимуществом нейронных сетей, по отношению к человеку, является скорость обработки информации, позволяющая в кратчайшие сроки проводить анализ больших объемов данных.

Неоспоримый успех алгоритмов машинного обучения, улавливающих паттерны в имеющихся данных, позволяет поднять вопрос о возможности разделения состояний системы, реализующихся в разных фазах, на основе анализа некоторой характеристики этих паттернов. Одним из фундаментальных и интуитивно понятных свойств объектов является их сложность. Несмотря на множество формальных определений данной характеристики [24], большинство из них сильно зависят от контекста или не имеют явной количественной оценки. Это стимулирует разработку машинных алгоритмов, позволяющих однозначно сопоставить объекту некоторое число, совпадающее с интуитивным представлением о сложности его структуры.

### **Цель исследования**

Целью данной работы является исследование магнитных состояний двумерных и трехмерных магнетиков, которые описываются гамильтонианами с взаимодействиями Гейзенберга и Дзялошинского-Мории, а также разработка алгоритмов, позволяющих проводить фазовую характеристику данных систем как на качественном, так и на количественном уровнях.

**Задачи исследования:**

1. При помощи численного моделирования методом Монте-Карло построить фазовые диаграммы исследуемых систем и проанализировать поведение магнитных структур в их переходных областях.

2. Изучить возможность количественной характеристики фазовых диаграмм двумерных и трехмерных магнитных систем, описываемых гамильтонианом с взаимодействиями Гейзенберга и Дзялошинского-Мории при помощи алгоритмов машинного обучения. Особое внимание уделить анализу переходных областей, а также диапазонов параметров за пределами, доступными для стандартных методов.

3. Сформулировать понятие структурной сложности объектов и предложить алгоритм ее количественной оценки на основе анализа паттернов в системе на разных пространственных масштабах. Изучить возможность использования данной величины для исследования фазовых переходов в магнитных системах.

**Научная новизна**

1. В рамках моделирования методом Монте-Карло были построены детальные низкотемпературные фазовые диаграммы двумерных и трехмерных ферромагнитных систем, описываемых гамильтонианом с взаимодействиями Гейзенберга и Дзялошинского-Мории, на решетках большого размера.

2. Было найдено оптимальное представление магнитных конфигураций рассматриваемых систем, а также метод их низкоразмерной визуализации, позволяющий легко идентифицировать области, соответствующие различным фазам.

3. Впервые была показана возможность количественного описания фазового состава двумерных и трехмерных магнитных систем с топологически-защищенными скирмионными магнитными структурами при помощи алгоритмов машинного обучения в широком диапазоне температур, недоступном для традиционных методов, основанных на расчете корреляционных функций различных порядков.

4. Впервые был предложен алгоритм количественной оценки структурной сложности магнитных состояний и продемонстрированы перспективы его использования для анализа фазовых переходов различной природы.

## **Теоретическая и практическая значимость работы**

Системы, описываемые гамильтонианом с взаимодействиями Гейзенберга и Дзялошинского-Мории, вызывают большой интерес ввиду возможности стабилизации топологически-защищенных структур – скирмионов, бимеронов и др. Теоретическое исследование их поведения в области параметров модели, соответствующей переходным состояниям, с учетом различных особенностей кристаллической решетки позволяет дополнить существующую картину и является стимулом для экспериментальных работ в данном направлении. Продемонстрированная возможность количественной характеристики фазовых диаграмм таких систем на основе ограниченного набора данных при помощи алгоритмов машинного обучения уже послужила стимулом для дальнейших исследований [25–27]. Разработанный алгоритм оценки структурной сложности объектов на основе анализа паттернов, реализующихся на различных масштабах, может найти свое применение в широком диапазоне областей: от оценки качества изображений до анализа физических и биологических систем. Наиболее перспективным в данном отношении выглядит исследование фазовых переходов, имеющих как классическую, так и квантовую природу. В этом направлении уже был проделан ряд теоретических и экспериментальных работ [28–31].

## **Методология и методы исследования**

Численное моделирование исследуемых систем проводилось методом Монте-Карло с алгоритмом Метрополиса. Для этого был разработан программный комплекс с использованием технологии Nvidia CUDA [32], позволяющей проводить расчеты на графических процессорах. Нейронная сеть прямого распространения, используемая для характеристики фазовых диаграмм, была реализована самостоятельно. Настройка параметров проводилась при помощи стохастического метода градиентного спуска с моментом. Базовые алгоритмы машинного обучения, используемые в работе, были реализованы при помощи библиотеки scikit-learn [33]. Моделирование спиновой динамики выполнялось путем решения уравнения Ландау-Лившица-Гильберта для намагниченности средствами программного пакета UppASD [34].



### **Положения, выносимые на защиту:**

1. Магнитные конфигурации, лежащие в глубине чистых фаз двумерных и трехмерных систем, описываемых гамильтонианом с взаимодействиями Гейзенберга и Дзялошинского-Мории, можно с высокой точностью разделить путем визуализации отсортированных векторов, составленных из проекций магнитных моментов атомов. Данный подход универсален по отношению к типу кристаллической решетки, направлению внешнего магнитного поля и имеющимся проекциям спинов.

2. Для построения фазовых диаграмм рассматриваемых систем достаточно иметь информацию о проекциях спинов атомов на ось вдоль направления магнитного поля. Количественная фазовая характеристика как в двумерном, так и в трехмерном случае может быть проведена при помощи простейшей нейронной сети прямого распространения с одним скрытым слоем. Данный подход универсален по отношению к геометрии магнитной решетки. При этом для идентификации чистых фаз можно использовать базовые алгоритмы машинного обучения.

3. Разработанный алгоритм оценки структурной сложности объектов позволяет с высокой точностью определять фазовые переходы различного рода в магнитных системах, а также проводить анализ динамики спиновых структур под действием внешних факторов. При этом метод является универсальным по отношению к типу исследуемых данных.

### **Степень достоверности и апробация результатов**

Достоверность результатов обеспечивается широкой известностью используемых методов и программного обеспечения, их внутренней непротиворечивостью, а также согласием с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными.

Основные результаты работы были представлены:

– на научных семинарах кафедры теоретической физики и прикладной математики Уральского федерального университета (Россия, Екатеринбург) и департамента по изучению материалов университета Уппсалы (Швеция, Уппсала);

– на научных конференциях «Many body theory meets quantum information» (Россия, Москва, 2018), «Machine Learning for Quantum Technology» (Германия, Эрланген, 2019), «54-я Школа ПИЯФ по Физике Конденсированного Состояния (ФКС-2020)» (Россия, Санкт-Петербург, 2020) и VIII Международная молодежная научная конференция «Физика. Технологии. Инновации ФТИ-2021» (Россия, Екатеринбург, 2021).

### **Личный вклад автора**

Программная реализация метода Монте-Карло с алгоритмом Метрополиса для запуска на графических процессорах и его апробация, а также моделирование всех исследуемых систем, в том числе и с использованием сторонних программных пакетов, были выполнены автором лично. Также им были проведены расчеты наблюдаемых, спиновых структурных факторов и топологического заряда. Настройка параметров нейронной сети и сравнение результатов работы различных алгоритмов машинного обучения были выполнены совместно с научным руководителем и Сотниковым О. М. Концепция структурной сложности объектов была выдвинута Кацнельсоном М. И. и Багровым А. А. Программная реализация алгоритма расчета данной величины, поиск оптимального способа учета вкладов от разных масштабов, его апробация, анализ представленных моделей и сравнение с методом, основанным на компрессии данных были выполнены автором лично. Планирование исследований, анализ и обсуждение результатов, а также их подготовка к публикации велись при участии научного руководителя, Сотникова О. М. (вторая и третья главы), Багрова А. А. (четвертая глава) и Кацнельсона М. И. (четвертая глава).

### **Публикации**

Представленные в диссертационной работе результаты опубликованы в 5 статьях [35–39], индексируемых в зарубежных научных базах Web of Science и Scopus, и входящих в список ВАК, а также в 2 тезисах докладов научных конференций.

### **Объем и структура работы**

Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения, списка условных обозначений и списка литературы. Полный объем диссертации составляет 115 страниц, включая 52 рисунка и 1 таблицу. Список литературы содержит 145 наименований.

## Глава 1. Теоретическая часть

В данной главе будут рассмотрены базовые спиновые гамильтонианы, используемые для моделирования как тривиальных состояний, так и топологически-защищенных скирмионных структур, а также основные методы, при помощи которых проводится численное моделирование поведения данных систем. Помимо классических методик нахождения критических точек будут описаны принципы работы алгоритмов машинного обучения, применяющихся для определения фазовых переходов.

### 1.1 Магнитные модели

Для теоретического описания поведения реальных материалов зачастую используются модели, построенные с учетом различных приближений. В случае спиновых гамильтонианов магнитные атомы исходной системы заменяются на локальные спины  $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$ , расположенные в узлах кристаллической решетки и связанные между собой по средствам парных магнитных взаимодействий.

#### 1.1.1 Модель Изинга

Одной из простейших спиновых моделей для описания фазового перехода из парамагнитного состояния в упорядоченное ферромагнитное (или антиферромагнитное) является модель Изинга [40]. Ее гамильтониан может быть записан следующим образом:

$$H = -J \sum_{i < j} S_i^z \cdot S_j^z - \sum_i B S_i^z, \quad (1.1)$$

где  $J$  – константа изотропного обменного взаимодействия,  $B$  – внешнее магнитное поле вдоль оси  $z$ , а  $S_i^z = \{-1, 1\}$  – проекция спина  $i$ -го атома на эту ось. Суммиро-

вание по  $i < j$  в данном случае означает, что энергия взаимодействия каждой пары спинов при учитывается только один раз.

Простота данной модели, а также наличие точного аналитического решения для температуры Кюри в случае двумерной системы, атомы которой расположены в узлах квадратной решетки [41], делает ее идеальной для тестирования различных новых методик определения фазовых переходов [22, 42].

Помимо этого, представленный гамильтониан и его модификации применяются для решения широкого класса задач как в рамках физики магнитных явлений, так и за ее пределами. В качестве примеров можно привести теоретическое объяснение экспериментально полученной фазовой диаграммы монокристаллов  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$  [43], моделирование поведения спиновых стекол [44] и работы простейших нейронных сетей [45].

### 1.1.2 Модель Гейзенберга с анизотропным взаимодействием Дзялошинского-Мории

Для моделирования систем с топологически-защищенными скирмионными структурами используется более сложный спиновый гамильтониан следующего вида:

$$H = - \sum_{i < j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_{i < j} \mathbf{D}_{ij} \cdot [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j] - \sum_i B S_i^z, \quad (1.2)$$

где  $J_{ij}$  и  $\mathbf{D}_{ij}$  константа изотропного обменного взаимодействия Гейзенберга [46] и вектор Дзялошинского-Мории [6, 7], соответственно.  $\mathbf{S}_i$  – единичный вектор в направлении  $i$ -го спина. Изотропное обменное взаимодействие определяется свойствами конкретной системы, однако в случае моделирования материалов с магнитными скирмионами обычно принимается ферромагнитным и имеет положительный знак. Симметрия вектора Дзялошинского-Мории определяет тип реализуемых скирмионных структур: блоховские (магнитные моменты закручиваются по спирали) или неелевские (магнитные моменты радиально расходятся от центра скирмиона) [47].

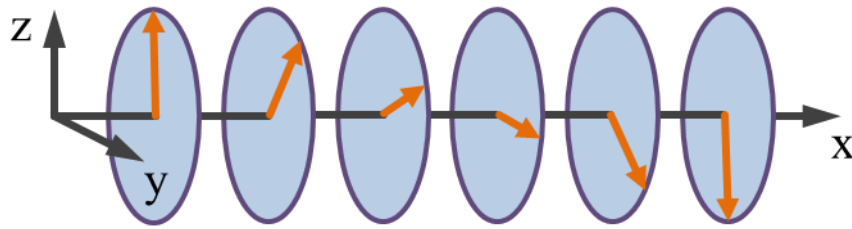


Рисунок 1.1 – Спиральное спиновое упорядочение. Оранжевые стрелки показывают направление намагниченности на каждом атоме цепочки

В то время как первое взаимодействие в гамильтониане (1.2) стремится направить спины соседних атомов параллельно друг другу, второе дает выигрыш по энергии при их взаимно перпендикулярной ориентации. В результате их комбинации и при соответствующей симметрии векторов Дзялошинского-Мории могут возникать спиновые спирали. В них магнитные моменты соседних атомов повернуты друг относительно друга на фиксированный угол, как это показано на рисунке 1.1. Комбинация спиновых спиралей вдоль различных направлений в решетке приводит к образованию вихревых структур, называемых скирмионами. Это происходит при увеличении модуля внешнего магнитного поля, направленного перпендикулярно плоскости образца. Примеры конфигураций, принадлежащих к спиральной и скирмионной фазам, реализуемым в рамках рассматриваемой модели, приведены на рисунке 1.2.

Для наглядности акцент в данной работе смещен в сторону исследования компактных топологических структур. С практической точки зрения это приводит к тому, что величина взаимодействия Дзялошинского-Мории зачастую сопоставима с константой изотропного обмена или и вовсе превышает ее. Возможность реализации такого режима была недавно предсказана в работе [48], где отношение  $J/|D|$  варьировалось при помощи высокочастотного лазерного поля. С другой стороны, существуют двумерные наносистемы с  $sp$  электронами [49], в которых прогнозируется сильное подавление изотропного взаимодействия между атомами образца.

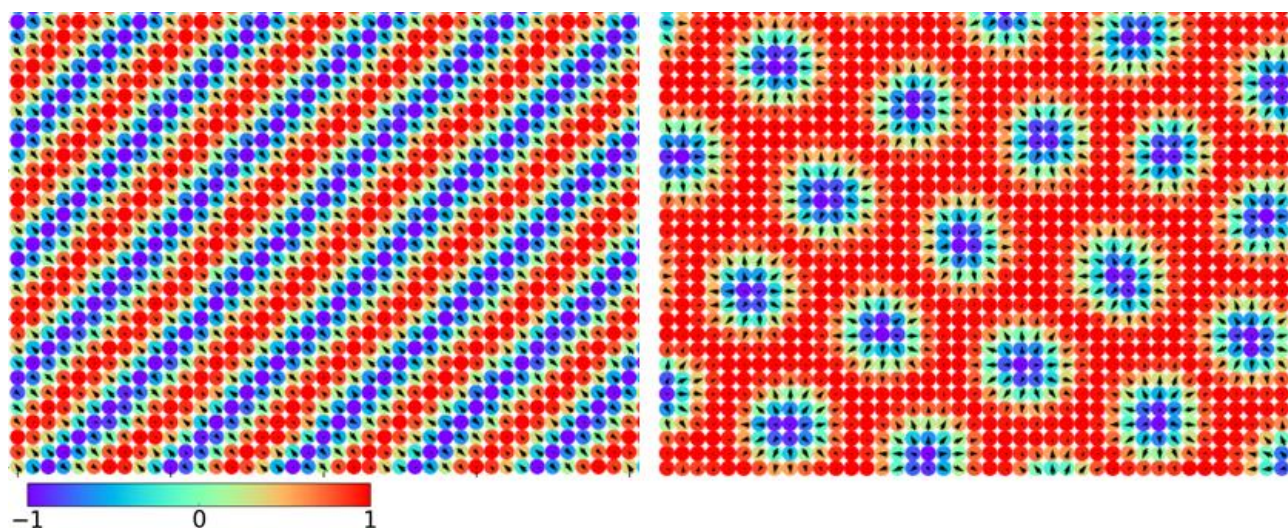


Рисунок 1.2 – Фрагменты системы с квадратной кристаллической решеткой линейного размера  $L = 512$ , демонстрирующие спиральную (левая часть) и скирмионную (правая часть) фазы, реализующиеся в рассматриваемой модели. Кружками обозначены отдельные атомы, черными стрелками – проекции их спинов на плоскость  $xу$ , цветом –  $S^z$  компоненты

## 1.2 Методы численного моделирования магнитных систем

Сбор экспериментальных данных о рассматриваемой системе зачастую сопряжен с большим количеством трудностей, связанных с получением образца, ограничениями величины внешних воздействий, при которых он является стабильным, а также доступностью требуемых для анализа установок. Более того, даже преодолев все необходимые этапы, остается риск того, что в исследуемой структуре не будут реализовываться интересные нас явления, а значит время и средства будут потрачены впустую. Естественным выходом из данной ситуации является компьютерное моделирование. К счастью, в настоящее время существует набор проверенных численных методов, позволяющих исследовать как статические системы с фиксированными параметрами, так и отслеживать их динамику.

### 1.2.1 Метод Монте-Карло

Методы Монте-Карло, получившие свое название от коммуны в княжестве Монако, известной своими казино [50], это численные методы решения задач при помощи моделирования случайных величин и статистической оценки их характеристик [51]. Они нашли применение в самых разнообразных областях, таких как вычисление интегралов и решение интегральных уравнений, решение дифференциальных уравнений в частных производных, систем алгебраических уравнений, моделирование различных фазовых переходов, решение задач перколяционной теории, описание моделей статистической физики и даже жизненных циклов простейших организмов. Хотя методы Монте-Карло и основаны на использовании случайных величин, решаемая задача не обязательно должна иметь вероятностный характер [51, 52].

Плюсы использования стохастических методов состоят в том, что многие математические и физические задачи либо не имеют известных аналитических алгоритмов решения, либо их реализация требует значительных вычислительных затрат. Применение подходов, основанных на использовании случайных величин, позволяет значительно ускорить и упростить решение таких задач. Еще одно преимущество данных методов заключается в том, что таким образом можно провести имитацию реального физического эксперимента.

Для реализации метода Монте-Карло в большинстве случаев используются вычислительные мощности современной компьютерной техники, а в последнее время активно развивается применение графических процессоров. Для физических задач в ходе моделирования эксперимента происходит накопление статистических данных. Наблюдаемые величины в таком случае строятся как среднее значение от большого числа вычислений.

К примеру, вероятность нахождения макроскопической термодинамической системы частиц в некотором состоянии задается распределением Гиббса:

$$P = \frac{1}{Z} e^{-\frac{H}{kT}}, \quad (1.3)$$



где  $k$  – коэффициент Больцмана,  $T$  – температура,  $H$  – гамильтониан системы,  $Z$  – нормировочная константа (статистическая сумма).

В данном случае для вычисления средних значений некоторой величины  $A$  в статистической физике использовалась бы формула следующего типа:

$$\langle A(x) \rangle = \frac{\sum_{i=1}^N A(x_i) \exp\left(-\frac{H(x_i)}{kT}\right)}{\sum_{i=1}^N \exp\left(-\frac{H(x_i)}{kT}\right)}, \quad (1.4)$$

где  $A(x_i)$  – значение величины, измеренное в точке  $x_i$  фазового пространства. В случае спиновых гамильтонианов  $x_i$  имеет смысл определенной магнитной конфигурации системы.

Расчеты по этой формуле достаточно громоздки и занимают значительное время, к тому же перебор всех существующих конфигураций большой системы является невозможным.

Однако, при большом числе опытов в состояниях, близких к равновесному [52], это выражение можно заменить на:

$$\langle A(x) \rangle = \frac{\sum_{i=1}^{N_{MC}} A(x_i)}{N_{MC}}, \quad (1.5)$$

где  $N_{MC}$  — число шагов метода Монте-Карло. При этом точки фазового пространства  $x_i$  выбираются случайным образом, с вероятностью, описываемой по формуле (1.3).

Таким образом, расчеты с использованием метода Монте-Карло сводятся к вычислению арифметического среднего значения по некоторой конечной выборке точек из фазового пространства, что значительно ускоряет процесс.

### 1.2.2 Алгоритм Метрополиса

Имея систему спинов, взаимодействие между которыми описывается некоторым гамильтонианом  $H$ , можно сформулировать алгоритм, позволяющий найти ее основное состояние при определенной температуре, а также рассчитать в нем требуемые наблюдаемые. Заметим, что спины могут поворачиваться случайным

образом в пределах некоего конуса вблизи начального положения, но так, что можно достичь состояния с любой энергией за конечное количество шагов (условие эргодичности). Для конечных температур следует ожидать, что энергия системы должна флуктуировать вокруг некоторого равновесного значения. Чтобы вычислять термодинамические величины необходимо выбирать состояния таким образом, чтобы система пришла к равновесию за какое-то разумное время. Для этих целей и служит алгоритм Метрополиса [52]. Его можно разбить на следующие шаги:

1. Сгенерировать начальную конфигурацию системы  $\alpha_k$ ;
2. Выбрать  $i$ -ый спин и повернуть его на случайный угол в пределах заданного конуса, получив тем самым пробное состояние системы  $\alpha_i$ ;
3. Вычислить энергию нового состояния  $E_i$ ;
4. Если  $E_k > E_i$ , принять новое состояние системы;
5. Если  $E_i > E_k$ , принять новое состояние с вероятностью:  

$$R = \exp(-\Delta E/kT);$$
  - Сгенерировать случайное число  $0 \leq r \leq 1$ ;
  - Положить состояние  $\alpha_{k+1} = \begin{cases} \alpha_k, & r \geq R, \\ \alpha_i, & r < R, \end{cases}$
6. Вычислить нужные величины в состоянии  $\alpha_{k+1}$ , взять его за начальное и повторять с пункта 2 нужное количество шагов.

### 1.2.3 Спиновая динамика

Хотя методы Монте-Карло и позволяют отслеживать изменение наблюдаемых при сдвиге параметров модели, эволюция системы из одного состояния в другое происходит случайным образом. Для того, чтобы более строго исследовать динамические процессы применяется метод спиновой динамики. Его суть заключается в численном решении дифференциального уравнения Ландау-Лившица-Гильберта для намагниченности [53, 54]. В терминах спинов отдельных атомов и

при моделировании поведения системы, находящейся при конечной ненулевой температуре, оно может быть записано в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{S}_i}{dt} = & -\frac{\gamma}{1+\alpha^2}\mathbf{S}_i \times \left[ -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{S}_i} + b_i(t) \right] - \\ & -\frac{\gamma}{|\mathbf{S}_i|}\frac{\alpha}{1+\alpha^2}\mathbf{S}_i \times \left( \mathbf{S}_i \times \left[ -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{S}_i} + b_i(t) \right] \right), \end{aligned} \quad (1.6)$$

где  $\gamma$  – гиромагнитное отношение,  $\alpha$  – параметр затухания,  $\mathbf{S}_i$  – единичный вектор, описывающий ориентацию спина  $i$ -ого магнитного атома, и  $b_i(t)$  – стохастическое магнитное поле, необходимое для моделирования температурных флуктуаций, величина которого определяется по нормальному распределению.

К минусам данного подхода можно отнести полную воспроизводимость получаемых результатов при старте с одного и того же состояния. Этот факт не позволяет причислить метод спиновой динамики к разряду *численных экспериментов*. Кроме того, точность существенно зависит от выбора метода интегрирования, а также от шага по времени. Устойчивые численные схемы для решения подобных уравнений основаны на использовании семейства методов Рунге-Кутты второго и четвертого порядков [55].

### 1.3 Стандартные методы определения магнитных фазовых переходов

В общем случае переход между различными фазовыми состояниями системы можно отследить по поведению некоторого параметра порядка. В критической точке данная величина имеет разрыв (переход первого рода) или плавно обращается в ноль (переход второго рода). Так, параметром порядка в модели Изинга выступает намагниченность системы. Тем не менее в модельных расчетах она не становится равной нулю в парамагнитной фазе и постоянно флуктуирует, поэтому для точного определения температуры Кюри чаще используют теплоемкость, имеющую максимум в точке фазового перехода.

С ростом сложности природы фазового состояния менее тривиальным становится и параметр порядка, с помощью которого его можно выделить. Так, со-

гласно теории Скирма [56], скирмионы должны обладать неким зарядом, завязанным на их топологических особенностях и обозначаемым как  $Q$ . Данная величина была в последствии названа скирмионным числом. Первая формула, подходящая для применения к магнитным скирмионам в непрерывных средах, была предложена еще в 1981 году [57]. В терминах намагниченности для двумерной системы она может быть записана как

$$Q = \frac{1}{4\pi} \int \mathbf{M} \cdot \left( \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial x} \times \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial y} \right) dx dy, \quad (1.7)$$

где  $\mathbf{M}$  – вектор намагниченности в конкретной точке пространства.

Несмотря на активные теоретические исследования скирмионов, наиболее эффективная интерпретация предложенного подхода для случая решеточных моделей была представлена только в 2016 году [58]. Это связано с тем, что скирмионные решетки обычно довольно плотные и насчитывают большое число данных вихревых структур, поэтому для их обнаружения не нужна высокая точность. Однако детальное исследование процессов, происходящих с единичным скирмионом, или структур малого диаметра требуют более тщательного контроля. Итоговая формула для расчета  $Q$  выглядит следующим образом:

$$Q = \frac{1}{4\pi} \sum_l A_l, \quad (1.8)$$

где  $A_l$  – площадь сферического сектора, построенного на вершинах спинов, расположенных в элементарном треугольнике  $l$ , как показано на рисунке 1.3. Ее расчет выполняется по следующей формуле:

$$A_l = 2 \arccos \left( \frac{1 + \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k + \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_i}{\sqrt{2(1 + \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)(1 + \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k)(1 + \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_i)}} \right). \quad (1.9)$$

Знак  $A_l$  выбирается как знак смешанного произведения векторов спинов атомов, на которых шло измерение. Суммирование идет по всем элементарным треугольникам.

$$\text{sign}(A_l) = \text{sign}(\mathbf{S}_i \cdot [\mathbf{S}_j \times \mathbf{S}_k]). \quad (1.10)$$

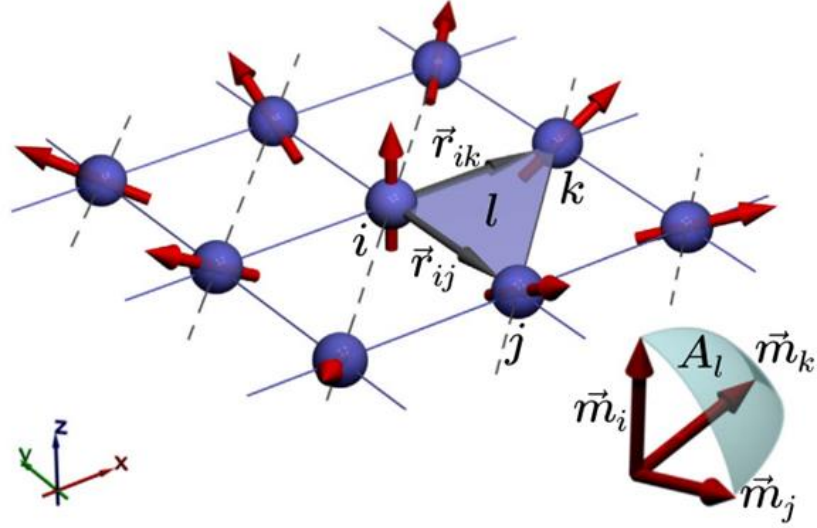


Рисунок 1.3 – Фрагмент двумерной квадратной решетки, разбитой на элементарные треугольники. В нижнем правом углу показан пример построения телесного угла на спинах атомов  $i$ ,  $j$ , и  $k$  из элементарного треугольника  $l$ , выделенного на рисунке синим и его величина  $A_l$ . Изображение взято из статьи [58]

Необходимо упомянуть, что из рассмотрения исключаются конфигурации, для которых выполняются следующие соотношения:

$$\mathbf{S}_i \cdot [\mathbf{S}_j \times \mathbf{S}_k] = 0, \quad (1.11)$$

$$1 + \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_k + \mathbf{S}_k \cdot \mathbf{S}_i \leq 0. \quad (1.12)$$

Итоговое значение  $Q$  соответствует количеству полных единичных сфер, образованных телесными углами, построенными на вершинах спинов соседних атомов решетки.

Еще одним методом, позволяющим идентифицировать спиновые структуры определенного типа, является нейтронное рассеяние. Именно с его помощью были получены первые экспериментальные подтверждения наличия скирмионной фазы в образцах MnSi [16] и Fe<sub>0.2</sub>Co<sub>0.8</sub>Si [60]. Данная методика позволяет обнаружить периодичность исследуемой системы и вектора трансляции решетки. Аналогом нейтронного рассеяния в теоретических исследованиях является расчет спиновых структурных факторов, вычисляемых по формулам:

$$\chi_{\parallel}(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i S_i^z e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i} \right|^2 \right\rangle, \quad (1.13)$$

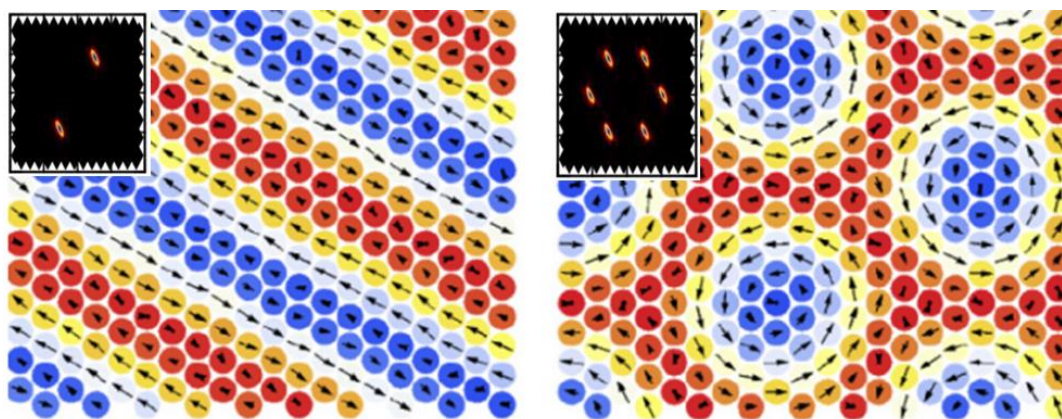


Рисунок 1.4 – Изображение спин спиральной (левая часть) и скирмионной (правая часть) фаз с соответствующими спиновыми структурными факторами (вставки).

Рисунок адаптирован из статьи [59]

$$\chi_{\perp}(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_i S_i^x e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i} \right|^2 + \left| \sum_i S_i^y e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i} \right|^2 \right\rangle, \quad (1.14)$$

где  $N$  – число атомов в системе,  $\mathbf{q}$  – вектор обратного пространства,  $S_i^{\alpha}$  ( $\alpha = (x, y, z)$ ) – проекция вектора  $i$ -го спина и  $\mathbf{r}_i$  – его радиус вектор. Скобками  $\langle \dots \rangle$  обозначено усреднение по различным спиновым конфигурациям, полученным в ходе Монте-Карло симуляций при фиксированных внешних параметрах.

Как видно из рисунка 1.4, у перпендикулярной составляющей структурного фактора чистой скирмионной фазы имеются пики на трех  $\mathbf{q}$ -векторах, в то время как спиновые спирали характеризуются пиком на одном  $\mathbf{q}$ -векторе.

## 1.4 Алгоритмы машинного обучения для проведения фазовой классификации

### 1.4.1 Нейронная сеть прямого распространения

#### Базовые понятия

Искусственная нейронная сеть представляет собой математическую модель, повторяющую принципы работы центральной нервной системы живых организмов. Ее элементами являются нейроны – некоторые простые вычислительные

единицы, связанные между собой синапсами. Ключевой особенностью архитектуры нейронных сетей является то, что они не программируются, а *обучаются* под конкретную задачу при помощи некоторых стандартных алгоритмов [61]. С технической точки зрения, процесс обучения заключается в поиске оптимальных значений весовых коэффициентов синапсов. Обучаясь, сеть способна находить сложные зависимости во входных данных, а также проводить обобщение.

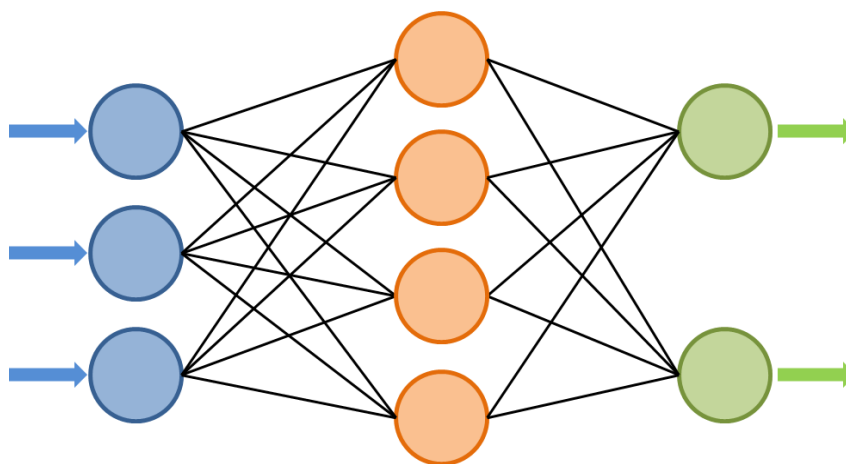


Рисунок 1.5 – Структура простейшей нейронной сети прямого распространения. Синим цветом изображены нейроны входного слоя, оранжевым – скрытого и зеленым – выходного

Стоит более подробно остановиться на основных понятиях. Так, под искусственным нейроном понимается отдельный вычислительный элемент, который получает на вход некую информацию, производит над ней операции и передает дальше. Нейроны в составе сети объединяются в слои: входной (input), на который подается начальная информация, выходной (output), с которого снимается интересующий нас результат, а также один или несколько скрытых (hidden). Последние играют роль черного ящика – в процессе обучения веса настраиваются неоднозначным образом, однако это может не сильно повлиять на итоговый результат работы. Структура простейшей нейронной сети приведена на рисунке 1.5.

Параметрами нейрона являются входные и выходные данные. Для элементов входного слоя эти понятия эквивалентны. В остальных случаях на вход

нейрона подается суммарная информация от всех нейронов с предыдущего слоя. Связь между двумя нейронами называется синапсом. Его единственным параметром является вес. Благодаря ему происходит изменение данных при передаче от одного нейрона к другому. Так как нейроны оперируют величинами в диапазонах  $[-1, 1]$  и  $[0, 1]$ , поступающая информация нормируется при помощи, так называемой, функции активации, после чего подается на выход. Таким образом, выходное значение конкретного нейрона вычисляется по следующей формуле:

$$output = \begin{cases} input, & \text{для нейрона входного слоя;} \\ f\left(\sum_{i=1}^N n_i W_i\right), & \text{в остальных случаях,} \end{cases} \quad (1.15)$$

где  $n_i$  – значение  $i$ -го нейрона предыдущего слоя,  $W_i$  – вес синапса между ним и текущим нейроном,  $N$  – число нейронов предыдущего слоя,  $f$  – функция активации. Более подробные выкладки приведены в следующем разделе.

Из формулы (1.15) видно, что входная информация — это сумма всех входных данных, умноженных на соответствующие им веса. Имея в наличии значения весовых коэффициентов и подав на вход какие-либо числа, мы можем посчитать выходной сигнал нейрона и подать его на вход нейрону следующего слоя. Данная операция выполняется последовательно для всех нейронов, вплоть до выходного слоя. Отсюда и пошло название *сеть прямого распространения*.

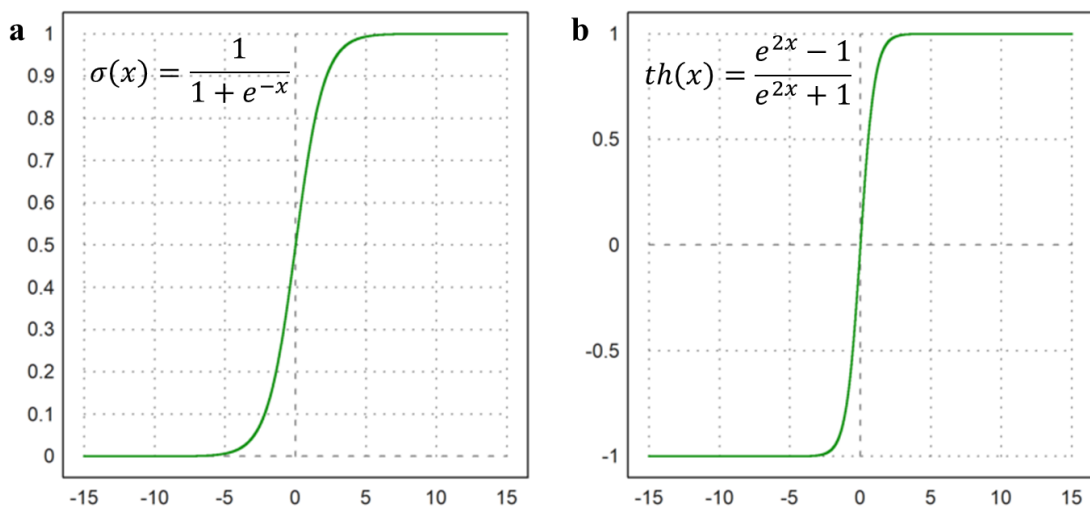


Рисунок 1.6 – Графики стандартных функций активации - сигмоиды (а) и гиперболического тангенса (b)



Как уже было сказано ранее, для нормализации данных используются функции активации. Их выбор в современной теории достаточно обширен [61], однако для большинства задач можно ограничиться базовым набором из линейной функции, сигмоиды (логистической функции) и гиперболического тангенса. Главное их отличие заключается в охватываемом диапазоне значений. Линейная функция используется в тестах, либо в том случае, когда необходимо передать информацию на следующий слой без изменения. Графики сигмоиды и гиперболического тангенса приведены на рисунке 1.6.

Обучение нейронной сети может проходить тремя принципиально разными способами: с учителем, когда подается тренировочный набор с правильными вариантами ответа, без учителя, когда сеть старается выделить в предоставленном наборе данных некоторые закономерности, а так же обучение с подкреплением, когда система осуществляет отклик на действия, так называемого агента, и сеть старается максимизировать получаемую *награду*, к примеру, минимизировать энергию системы или заработать большее число очков в игре. Наиболее распространенным является первый способ обучения, который и был применен в данной работе. Сам процесс настройки параметров сети в данном случае происходит итеративно, под итерацией понимается количество пройденных конфигураций тренировочного набора. Время, в течение которого нейросетью обрабатываются все входные данные, называется эпохой. Важно отметить, что каждая тестовая конфигурация встречается в эпохе в точности один раз.

Одной из основных проблем, связанных с работой нейронных сетей являются *переобучение* – явление, при котором сеть «заучивает» конфигурации и теряет возможность к обобщению данных. Это выражается в том, что ошибка тестового набора гораздо выше ошибки, полученной на обучающем. Для борьбы с этим явлением используется процедура перекрестной проверки (*cross-validation*), а также различные методы регуляризации, направленные на минимизацию модулей весовых коэффициентов. Однако последние выбираются специальным образом для каждой конкретной архитектуры нейросети и могут приводить к ухудшению качества ее работы. Что же касается перекрестной проверки, она заключается

в следующем: на каждой эпохе тренировочный набор разбивается на  $n$  равных частей, после чего  $n - 1$  часть используется при обучении, а на оставшейся проводится расчет ошибки. После этого происходит замена тестовой части циклическим образом на протяжении  $n$  итераций. Под эпохой в данном случае понимается цикл, в течение которого каждая конфигурация тренировочного набора будет однократно подана на вход нейронной сети.

### Алгоритм обратного распространения ошибки

Универсальным алгоритмом настройки весов является метод обратного распространения ошибки [62], основанный на градиентном спуске. Для наглядности и без ограничения общности рассмотрим его работу на примере нейронной сети прямого распространения с одним скрытым слоем, решающей задачу фазовой классификации для магнитной системы. В качестве входных параметров будем использовать  $Z$  компоненты спинов магнитных конфигураций на квадратной решетке размера  $L \times L$ . Структура сети приведена на рисунке 1.7.

Входные и выходные значения для нейронов скрытого слоя можно рассчитать по следующим формулам:

$$h_j^{inp} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N S_i^z W_{ij}^h, \quad (1.16)$$

$$h_j^{out} = \sigma(h_j^{inp}) = \frac{1}{1 + e^{-h_j^{inp}}}, \quad (1.17)$$

где  $S_i^z$  – значение  $i$ -го входного нейрона,  $W_{ij}^h$  – вес между  $i$ -ым входным и  $j$ -ым скрытым нейронами,  $N = L \times L$  – число входных нейронов. Нормировочный множитель в первой формуле необходим для того, чтобы сместить получаемое значение в область, в которой  $\text{sigmoid}(h_j^{inp}) \in [0, 1]$ . Это очень важный шаг, в особенности в самом начале процедуры обучения, когда веса инициализированы случайным образом в диапазоне  $[-1, 1]$ . Без нормировки мы бы получали  $h_j^{out}$  равные в точности 1 или 0 ввиду большого числа входных нейронов. Это привело бы к ситуации, когда единственными параметрами, влияющими на результат, бы-

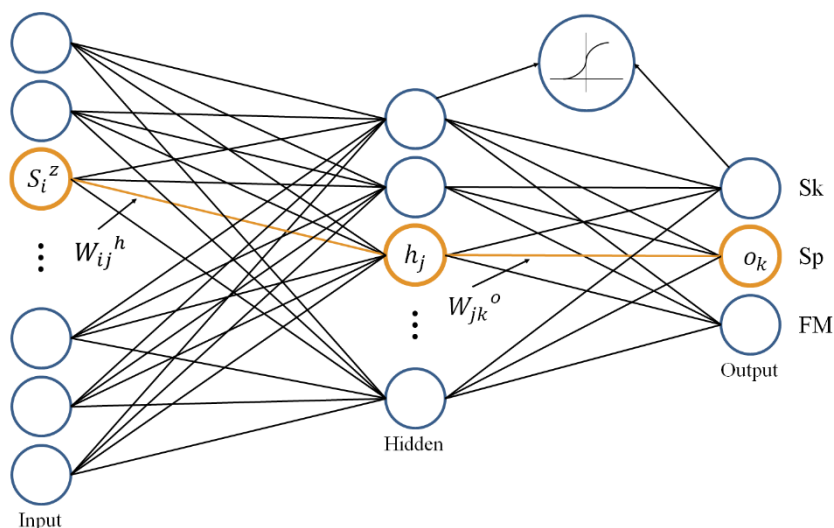


Рисунок 1.7 – Схематичное представление нейронной сети прямого распространения с одним скрытым слоем. Все обозначения описаны в тексте

ли бы веса между скрытым и выходным слоями, так как изменение весов на каждом шаге происходит на небольшую величину.

Значения нейронов выходного слоя для простоты вычислим с применением сигмоиды в качестве функции активации:

$$o_k = \sigma \left( \sum_{j=1}^{N_h} h_j^{out} W_{jk}^o \right), \quad (1.18)$$

где  $N_h$  – число нейронов скрытого слоя,  $W_{jk}^o$  – вес между  $j$ -ым скрытым и  $k$ -ым выходным нейронами.

В качестве функции ошибки выберем среднеквадратическое отклонение:

$$E(o^{ideal}, o) = \frac{\sum_{k=1}^{N_o} (o_k^{ideal} - o_k)^2}{2}, \quad (1.19)$$

где  $N_o$  – число нейронов выходного слоя,  $o^{ideal}$  – метка тренировочной конфигурации (правильный ответ) и  $o$  – вычисленные значения выходных нейронов. Двойка в качестве знаменателя выбрана для упрощения выкладок при дифференцировании.

После вычисления ошибки  $E$ , веса нейронной сети обновляются в направлении от выходного слоя к входному, что и дало название методу. Само обновление проходит методом градиентного спуска [63]:

$$W^{\gamma(l)} = W^{\gamma(l-1)} - \alpha \nabla_{W^{\gamma(l)}} E - \mu \nabla_{W^{\gamma(l-1)}} E, \quad (1.20)$$

где  $l$  – индекс эпохи обучения,  $\gamma = \{o, h\}$ ,  $\alpha$  – скорость обучения и  $\mu$  – момент. Последнее слагаемое добавляется для того, чтобы не «застрять» в локальном минимуме. Значения  $\alpha$  и  $\mu$  подбираются экспериментально путем проб и ошибок.

В общем виде градиент вычисляется по правилу дифференцирования сложной функции:

$$\nabla_W E = \frac{\partial E}{\partial W} = \frac{\partial E}{\partial f} \frac{\partial f}{\partial W}, \quad (1.21)$$

где  $f$  – совокупность функций, рассчитанных с момента появления данного весового коэффициента и до момента нахождения ошибки. Так, для весов при нейронах выходного слоя  $f = o_k$  (в данном случае имеется в виду не число, а функция).

Градиенты весовых коэффициентов для выходного слоя можно определить как:

$$\nabla_{W_{jk}^{o(l)}} E = \frac{\partial E}{\partial o_k} \frac{\partial o_k}{\partial W_{jk}^{o(l)}} = (o_k^{ideal} - o_k) o_k (1 - o_k) h_j^{out}. \quad (1.22)$$

При записи этой формулы было использовано то, что производная сигмоиды равняется  $\sigma' = \sigma(1 - \sigma)$ . Аналогичным образом можно получить градиенты весов между входным и скрытым слоями:

$$\nabla_{W_{ij}^{h(l)}} E = h_j^{out} (1 - h_j^{out}) \sum_{k=1}^{N_o} [W_{jk}^o (o_k^{ideal} - o_k) o_k (1 - o_k)] S_i^z. \quad (1.23)$$

Сумма в данном выражении появляется потому, что в каждом нейроне скрытого слоя учитываются ошибки на всех выходных нейронах. Для того, чтобы функции не выглядели громоздко удобно ввести  $\delta o_k$  и  $\delta h_j^{out}$ :

$$\delta o_k = (o_k^{ideal} - o_k) o_k (1 - o_k), \quad (1.24)$$

$$\delta h_j^{out} = h_j^{out} (1 - h_j^{out}) \sum_{k=1}^{N_o} W_{jk}^o \delta o_k. \quad (1.25)$$

Тогда формулы (1.22) и (1.23) можно переписать в следующем виде:

$$\nabla_{W_{jk}^{o(l)}} E = \delta o_k h_j^{out}, \quad (1.26)$$

$$\nabla_{W_{ij}^{h^{(l)}}} E = \delta h_j^{out} S_i^z. \quad (1.27)$$

Таким образом, сначала происходит вычисление  $\delta o_k$  для нейронов выходного слоя, а через них –  $\delta h_j^{out}$  нейронов скрытого, что делает методику распространения ошибки аналогичной прямому распространению исходных данных.

Стоит отметить, что веса обновляются после того, как были определены градиенты для всех элементов. Хотя наиболее распространенным является стохастический градиентный спуск, иногда полезно проводить перерасчет  $W$ , основываясь на усредненном градиенте по небольшой выборке конфигураций.

## 1.4.2 Метод опорных векторов

Метод опорных векторов (SVM) [64] является одним из базовых линейных алгоритмов, проводящих разделение объектов на две группы. Основной его идеей является построение гиперплоскости с наибольшим зазором между классами из обучающего набора.

### Случай линейной разделимости

Пусть исходный обучающий набор представляет из себя матрицу  $X$  составленную из  $n$  векторов  $\mathbf{x}_i$ , каждый из которых соответствует классу  $y_i = \{-1, 1\}$ . Цель заключается в нахождении такой гиперплоскости  $\mathbf{w}^T \mathbf{x} + b = 0$ , что выражение вида  $\text{sign}(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b)$  давало бы корректное предсказание класса. Нетрудно понять, что, если выборка является линейно разделимой, существует множество таких гиперплоскостей и возникает необходимость выбора оптимальной. Для этого потребуем, чтобы она максимально далеко отстояла от ближайших к ней точек обоих классов. Это соответствует предположению о том, что максимизация зазора должна приводить к наилучшей классификации новых данных.

Заметим, что знак классификации не зависит от нормировки  $w$  и  $b$ . Таким образом, можно подобрать параметры так, чтобы построить две параллельные гиперплоскости, проходящие через пограничные элементы классов (опорные вектора) и описываемые уравнением  $y_i(\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b) = 1$  (рисунок 1.8). Ширина полосы

между ними может быть вычислена как произведение вектора  $(\mathbf{x}_+ - \mathbf{x}_-)$  на единичный вектор нормали и равняется:

$$(\mathbf{x}_+ - \mathbf{x}_-) \cdot \frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{(\mathbf{x}_+ \cdot \mathbf{w}) - (\mathbf{x}_- \cdot \mathbf{w})}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{(1 - b) - (-1 - b)}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{2}{\|\mathbf{w}\|}. \quad (1.28)$$

Искомая гиперплоскость находится ровно посередине этой полосы, так как расстояние от нее до ближайших объектов различных классов должно быть одинаковым. Так как максимизация  $2/\|\mathbf{w}\|$  эквивалентна минимизации  $\|\mathbf{w}\|$ , задачу о построении оптимальной гиперплоскости можно свести к решению системы вида:

$$\begin{cases} \frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{w} \rightarrow \min, \\ y_i (\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b) \geq 1. \end{cases} \quad (1.29)$$

Эта задача эквивалентна двойственной задаче поиска седловой точки функции Лагранжа:

$$\begin{cases} L(\mathbf{w}, b, \lambda) = \frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{w} - \sum_{i=1}^n \lambda_i (y_i (\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b) - 1) \rightarrow \min, \\ \lambda_i \geq 0, \quad 1 \leq i \leq n. \end{cases} \quad (1.30)$$

где  $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_l)$  – вектор двойственных переменных,  $n$  – число векторов в обучающем наборе.

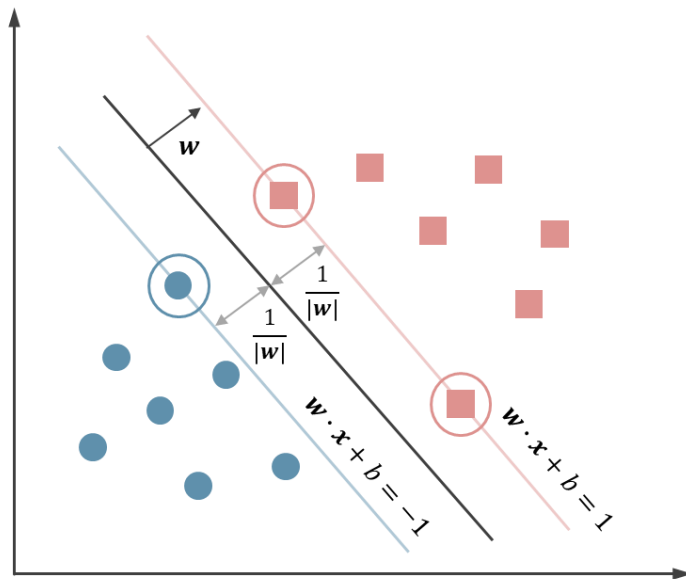


Рисунок 1.8 – Схематичное представление работы SVM в случае линейной разделимости данных. Опорные вектора выделены кружками

Искомый экстремум функции находится из условия равенства нулю частных производных:

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{w}} = \mathbf{w} - \sum_{i=1}^n \lambda_i y_i \mathbf{x}_i = 0, \\ \frac{\partial L}{\partial b} = \sum_{i=1}^n \lambda_i y_i = 0. \end{cases} \quad (1.31)$$

Подставляя  $\mathbf{w}$  и  $b$  обратно в уравнение для Лагранжиана, можно перейти к задаче квадратичного программирования, содержащей только двойственные переменные:

$$\begin{cases} -L(\lambda) = -\sum_{i=1}^n \lambda_i + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n \lambda_i \lambda_j y_i y_j (\mathbf{x}_i \mathbf{x}_j), \\ \lambda_i \geq 0, \quad 1 \leq i \leq n, \\ \sum_{i=1}^n \lambda_i y_i = 0. \end{cases} \quad (1.32)$$

Решив данную задачу относительно  $\lambda$ , можно найти  $\mathbf{w}$  по формуле:

$$\mathbf{w} = \sum_{i=1}^n \lambda_i y_i \mathbf{x}_i, \quad (1.33)$$

при этом ненулевые коэффициенты  $\lambda_i$  в данном случае будут только перед опорными векторами. Стоит отметить, что второе уравнение в системе (1.32) обеспечивает равновесие вкладов опорных векторов разных классов в итоговый ответ, так как в общем случае их количество различно. В свою очередь, для нахождения  $b$  достаточно взять произвольный опорный вектор  $\mathbf{x}_i$  и вычислить  $b = -\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + y_i$ . На практике же, для большей точности вычисляется медиана по всем опорным векторам:

$$b = \text{med}\{-\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + y_i : \lambda_i > 0, i = 1, \dots, n\}. \quad (1.34)$$

Найдя параметры, описывающие искомую гиперплоскость, задача об определении класса нового вектора  $\mathbf{x}$  сводится к вычислению следующего выражения:

$$a(\mathbf{x}) = \text{sign}\left(\sum_{i=1}^n \lambda_i y_i (\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}) + b\right). \quad (1.35)$$

При этом суммирование эффективно ведется только по опорным векторам, что сводит к минимуму затраты на вычисления.

### Случай линейной неразделимости

Так как в общем случае невозможно обеспечить линейную разделимость задачи, на практике применяется следующий трюк: исходное пространство заменяется «спрямляющим» пространством большей размерности, в котором вектора становятся линейно разделимыми. Таким образом эффективно ищется не гиперплоскость, а нелинейная гиперповерхность. Исходные вектора  $\mathbf{x}_i$  заменяются векторами  $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_i)$ , а их скалярное произведение  $\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$  – скалярным произведением  $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_i)^T \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_j)$ . Данную функцию принято называть «ядром» преобразования. Примечательно, что хотя на данный момент удалось добиться значительного прогресса в области изучения алгоритмов машинного обучения, все еще нет универсального алгоритма определения ядра, подходящего для решения той или иной задачи. Тем не менее, в большинстве случаев можно ограничиться полиномиальной  $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = (\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j + 1)^d$  или радиальной базисной  $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp(-\gamma \|\mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j\|)$  функциями.

Классификация нового вектора  $\mathbf{x}$  в данном случае проводится по следующей формуле:

$$a(\mathbf{x}) = \text{sign} \left( \sum_{i=1}^n \lambda_i y_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) + b \right). \quad (1.36)$$

Нетрудно провести аналогию между данной формулой и простейшей нейросетью прямого распространения с одним скрытым слоем, нейронами которого выступают опорные вектора [64].

### 1.4.3 Классификация на основе ближайших соседей

Несмотря на свою простоту и отсутствие настраиваемых параметров, широкое применение нашли методы, определяющие класс рассматриваемого вектора  $\mathbf{x}$  на основе анализа классов ближайших к нему векторов обучающего набора  $\mathbf{x}_i$ . Помимо простоты программной реализации данных алгоритмов, в качестве их несомненных достоинств можно выделить стабильность получаемых результатов,



а также возможность с высокой точностью находить нетривиальные фазовые границы. Тем не менее, такие методы не имеют обобщающей силы, так как оперируют только известным обучающим набором и не пытаются построить модель для описания зависимостей, встречающихся в данных.

### **Метод $k$ -ближайших соседей**

Как понятно из названия, в своей базовой реализации метод  $k$ -ближайших соседей ( $k$ -NN) [65] определяет класс вектора  $\mathbf{x}$  на основе  $k$  наиболее близко расположенных к нему векторов  $\mathbf{x}_i$ , где  $k$  – заранее заданное число. При этом метка класса присваивается простым голосованием по большинству. В случаях, когда данные распределены неравномерным образом, более предпочтительным является учет соседей в пределах некоего радиуса  $r$ . Кроме этого, в зависимости от реализации метода, равномерные весовые коэффициенты для каждой связи могут быть заменены на обратно пропорциональные от дистанции до ближайшего соседа. Это делается для обеспечения того, чтобы точки, лежащие ближе к новому образцу, вносили больший вклад.

Для повышения точности классификации так же рекомендуется осуществлять переход в новое пространство, тем самым заменяя Евклидову метрику на более подходящую данной конкретной задаче. Сделать это можно при помощи алгоритма Neighborhood components analysis [66], который ищет матрицу перехода таким образом, чтобы все вектора обучающего набора были корректно классифицированы с заданным  $k$ . В общем случае алгоритм не делает каких-либо предположений о распределении данных и может приводить к формированию фазовых границ любой сложности.

### **Метод ближайших центроид**

В случаях, когда классы хорошо разделены в пространстве параметров и их дисперсии имеют эквивалентные величины вдоль всех координатных осей, отлично себя проявляет метод ближайших центроид [67]. В рамках данного алгоритма конфигурации тренировочного набора в пределах каждой фазы (класса) заменяются одним усредненным представителем – центроидой, являющейся точкой

в исходном пространстве признаков. Ее координаты задаются при помощи следующего выражения:

$$C_l = \frac{1}{N_l} \sum_{i=1}^{N_l} \mathbf{x}_i, \quad (1.37)$$

где  $N_l$  – число элементов класса  $l$ .

Таким образом, задача классификации сводится к вычислению расстояний до всех центроид и определению минимального из них. Данный алгоритм не требует хранения в памяти большого объема данных о расстояниях между элементами обучающего набора и не имеет настраиваемых параметров, что дает ему преимущество в ряде задач, которые обсуждались ранее.

Для снижения влияния шумов и расширения области применимости алгоритма часто используются, так называемые, сжатые центроиды [67]: каждое свойство при построении делится на значение дисперсии внутри класса в данном направлении. Кроме того, если значение какого-либо свойства в наборе пересекает ноль, оно исключается из рассмотрения и не оказывает влияния на дальнейшую классификацию.

Подходы, приведенные в данной главе, будут применены для анализа состава фазовых диаграмм систем, описываемых гамильтонианом Гейзенберга с анизотропным взаимодействием Дзялошинского-Мории, и содержащих магнитные скирмионы.

## Глава 2. Построение низкотемпературных фазовых диаграмм систем, в которых стабилизируются скирмионы. Поиск оптимального представления спиновых конфигураций

### 2.1 Предпосылки к исследованию

В 1961 году Английский физик Тони Хилтон Роил Ским (1922–1987) предложил свою модель описания барионов как топологических солитонов. Позднее, в 1962 году, на основе своей модели он теоретически предсказал существование магнитной структуры, которая в честь него была названа скирмионом. Сам Ским под этим термином понимал образ протяженного бариона, рассматриваемого как топологический солитон, построенный из бозонов и обладающий фермионными свойствами [56]. Данная структура имела топологический заряд, интерпретированный Скимом как барионный. Их наличие было косвенно подтверждено при изучении квантового эффекта Холла в структурах GaAs/AlGaAs [68, 69], в конденсате Бозе-Эйнштейна [70], сверхпроводниках [71] и киральных жидких кристаллах [72].

В настоящее время под скирмионом чаще понимают магнитный скирмион – объект, представляющий собой определенное спиновое возбуждение в ферро-

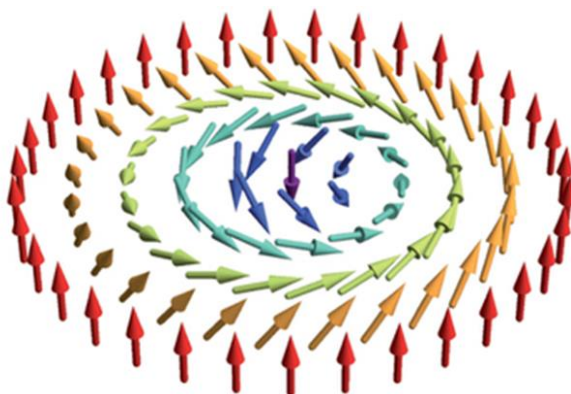


Рисунок 2.1 – Магнитная структура единичного скирмиона. Стрелками обозначены спины отдельных атомов. Изображение взято из статьи [73]

магнитной среде, а именно локализованную вихревую структуру, образованную магнитными моментами отдельных атомов [14, 15]. Типичный пример такой структуры приведен на рисунке 2.1. Интерес к ним существенно вырос после теоретического предсказания возможности спонтанного возникновения скирмионных текстур в качестве основного состояния киральных магнетиков [74], а также их экспериментального наблюдения в металлических ферромагнетиках с взаимодействием Дзялошинского-Мории, таких как MnSi [16], FeGe [75], MnGe [76] и  $\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}\text{Si}$  [17, 60, 77] в узком диапазоне внешних параметров, магнитных полей и температур. Кроме этого, были обнаружены компактные скирмионные структуры в монослое железа на плоскости иридия (111) [78], диаметр объектов в которых был порядка 1 нм, что значительно меньше 20–90 нм, наблюдаемых ранее.

Существенный интерес к изучению скирмионов обусловлен их компактностью и топологической устойчивостью, что открывает перспективы создания на их основе ячеек памяти и логических устройств нового поколения [18, 79, 80]. За «0» и «1» в данном случае можно принять наличие данной структуры или ее отсутствие в некоторой области пространства.

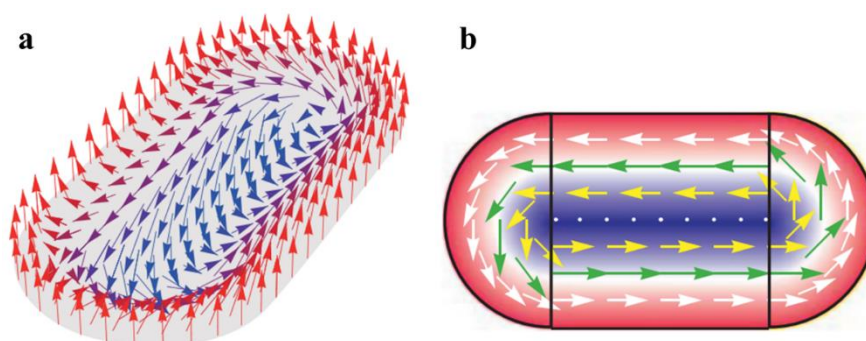


Рисунок 2.2 – Пример бимерона (a) – спиновая текстура, (b) – схематичное разложение на меронные и спиральный домены. Изображение взято из работы [21]

Тем не менее, скирмионы являются не единственными магнитными структурами, достойными внимания [20]. Еще одним интересным объектом для изучения можно считать бимероны. Они представляют собой комбинацию из двух полукруглых меронных доменов, несущих половинный топологический заряд, со-

единенных между собой прямоугольным спиральным доменом [21]. Типичный представитель бимерона изображен на рисунке 2.2. Они возникают в переходных областях фазовой диаграммы при разрушении спиновых спиралей магнитным полем и наблюдаются как в моделях [21, 81], так и в реальных материалах [77]. Данный факт, а также возможные перспективы технологического применения бимеронов, приводят к необходимости точного определения диапазона параметров модели, в котором они реализуются. Это, в свою очередь, сводится к задаче об определении фазовых границ в исследуемой системе. Стоит оговориться, что под бимероном в научной литературе также понимают скирмионоподобные структуры, в центре которых расположены пары вихрь-антивихрь, однако для их наблюдения требуются существенные модификации рассматриваемой системы [20].

В данной главе приведены детальные низкотемпературные фазовые диаграммы двумерных и трехмерных ферромагнитных систем, описываемых гамильтонианом с взаимодействиями Гейзенберга и Дзялошинского-Мории, построенные при помощи метода Монте-Карло на решетках большого размера. Были определены диапазоны параметров модели, соответствующие переходным областям, в том числе той, где реализуются бимеронные структуры. Кроме этого, найдено оптимальное представление магнитных конфигураций, позволяющее определять тип чистого состояния без дополнительного расчета спиновых корреляционных функций.

## **2.2 Фазовые диаграммы ферромагнитных систем с взаимодействием Дзялошинского-Мории**

### **2.2.1 Двумерные системы**

Первым шагом данного исследования стало построение фазовой диаграммы системы с квадратной кристаллической решеткой, описываемой спиновым гамильтонианом с взаимодействиями Гейзенберга и Дзялошинского-Мории. Кроме

этого, для стабилизации скирмионных состояний было введено внешнее магнитное поле, направленное вдоль оси  $z$ :

$$H = - \sum_{i < j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_{i < j} \mathbf{D}_{ij} \cdot [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j] - \sum_i B S_i^z. \quad (2.1)$$

Вектор Дзялошинского-Мории в расчетах имел симметрию  $C4v$  и был расположен в плоскости образца, перпендикулярно радиус векторам между соседними спинами  $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i$ . В данном случае мы ограничились пределом, когда обменное взаимодействие сильно экранируется на расстояниях порядка межатомного. Таким образом, рассматривается вклад в энергию системы только от взаимодействия между ближайшими соседями. Как было показано в работе [77], данное приближение является достаточным для воспроизведения экспериментальных результатов в тонких пленках  $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$ .

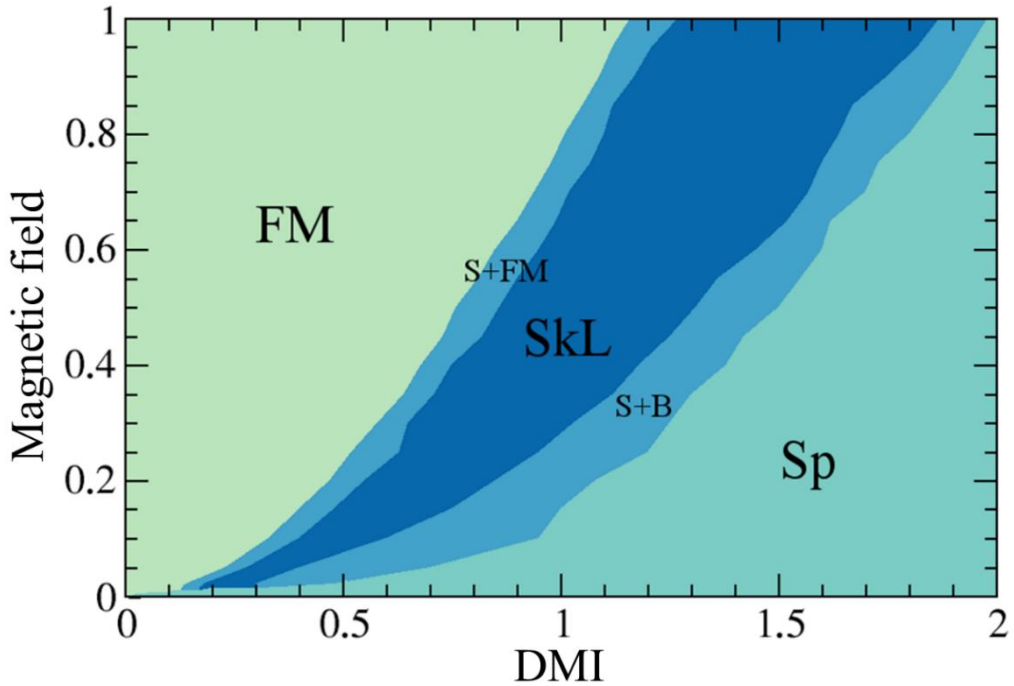


Рисунок 2.3 – Фазовая диаграмма ферромагнитной системы с взаимодействием Дзялошинского-Мории, полученная на решетке  $256 \times 256$  и периодическими граничными условиями при температуре  $T = 0.02$ . Аббревиатурами SkL, S+FM, S+B, FM и Sp обозначены скирмионная решетка, скирмионный газ, смешанная фаза, состоящая из скирмионов и бимеронов, ферромагнитное состояние и спиновые спирали, соответственно. Все параметры приведены в единицах  $J$

Для построения фазовой диаграммы, представленной на рисунке 2.3, была использована сетка  $100 \times 200$  (20000 точек) в плоскости параметров  $B|D|$ . В каждой точке проводилось по 15 запусков метода Монте-Карло. Таким образом, полное число симуляций составило 300000. В течение одного прогона система постепенно охлаждалась с отметки в  $T = 1.0J$ . Полное число шагов по температуре было выбрано равным 50. В каждой точке проводилось  $1.5 \times 10^5$  шагов метода Монте-Карло на спин. Симуляционные параметры в аналогичном диапазоне использовались в работе [82]. Для определения различных фаз, реализующихся в системе, для всех конфигураций были рассчитаны топологический заряд и структурные факторы, а также произведена визуализация магнитных моментов атомов при конечной температуре. Использование графических ускорителей позволило за разумное время рассматривать решетки большого размера, вплоть до  $L = 1024$ , что также отразилось на точности определения границ.

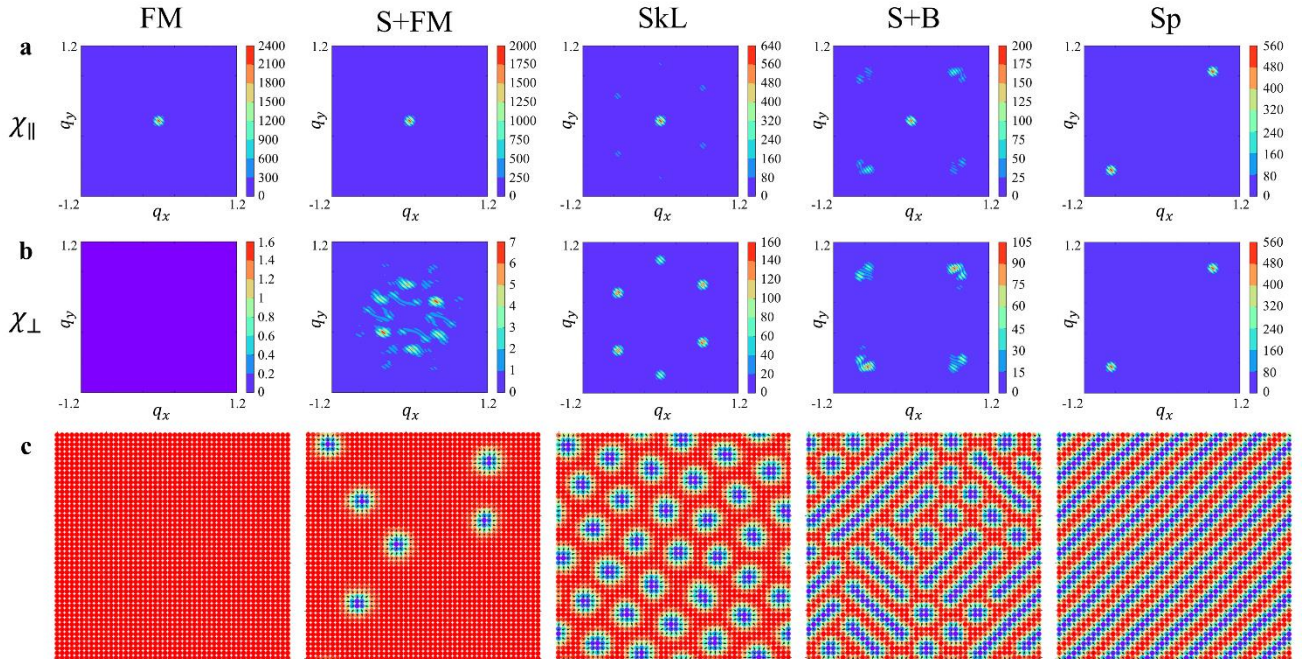


Рисунок 2.4 – Параллельные (а) и перпендикулярные (б) структурные факторы различных фаз, наблюдаемых в исследуемой системе, а также примеры магнитных конфигураций (с), которым они соответствуют. Результаты были получены при  $B = 0.5J$  и  $|D| = 0.7J$  (FM),  $0.77J$  (S+FM),  $J$  (SkL),  $1.4J$  (S+B),  $1.5J$  (Sp)

Чтобы протестировать стабильность фазовой классификации мы варьировали число шагов метода Монте-Карло на спин с  $10^4$  до  $50 \times 10^4$ . Для проверки чувствительности получаемых результатов к параметрам процедуры охлаждения системы мы меняли стартовую температуру в диапазоне от  $0.5J$  до  $5J$  и число шагов по температуре от 20 до 150. Все эти дополнительные манипуляции не привели к изменениям фазовой диаграммы, что говорит о стабильности полученных результатов.

На рисунке 2.4 приведены типичные примеры параллельных (1.13) и перпендикулярных (1.14) спиновых структурных факторов, соответствующих различным фазам. Нетрудно заметить, что каждая из них однозначно определяется путем анализа картины интенсивностей соответствующих корреляционных функций. Например, у перпендикулярной составляющей структурного фактора смешанной скирмион-бимеронной и чистой скирмионной фаз имеются пики на двух и трех  $\mathbf{q}$ -векторах, соответственно. Так же, все скирмионные фазы характеризуются ненулевым топологическим зарядом.

Стоит также отметить, что при нулевом магнитном поле наблюдается образование спиновых спиралей для сколь угодно малого по величине взаимодействия Дзялошинского-Мории,  $|\mathbf{D}|/J > 0.01$ , что согласуется с аналитическим решением [14, 15], а также предыдущими численным и экспериментальными данными [77].

### 2.2.2 Смешанные состояния

Из фазовой диаграммы видно, что скирмионная фаза состоит из непериодических скирмионов (S+FM), периодической скирмионной решетки (SkL) и смешанного состояния, характеризующегося одновременным наличием скирмионов и бимеронов (S+B). Типичный пример магнитной конфигурации, соответствующей S+B состоянию представлен в левой части рисунка 2.5. Бимероны различных размеров располагаются вдоль диагоналей квадратной решетки с периодическими граничными условиями. Анализируя распределение плотности топологического заряда, изображенное в правой части рисунка 2.5 можно убедиться, что каждый



бимерон состоит из двух меронов, соединенных прямоугольным спиральным доменом.

Аналогичная смешанная фаза уже встречалась в модельных расчетах в работе [21] при исследовании двумерной нелинейной сигма модели, а также наблюдалась экспериментально при низких температурах в зонных ферромагнетиках с взаимодействием Дзялошинского-Мории [77]. Однако в последнем случае она была определена как комбинация скирмионов и фрагментов спиновых спиралей. В то же время, из аналитических расчетов [14, 15] известно, что смешанный режим не встречается в качестве основного состояния системы при нулевой температуре, которое может быть представлено только спиновыми спиральями, скирмионной решеткой или ферромагнитным упорядочением. Такая разница между аналитическими и численными решениями возникает ввиду температурных эффектов. В самом деле, как было показано в статье [21], меронная фаза появляется при конечной температуре, поскольку ее энтропия намного больше энтропии спиральной или скирмионной фаз.

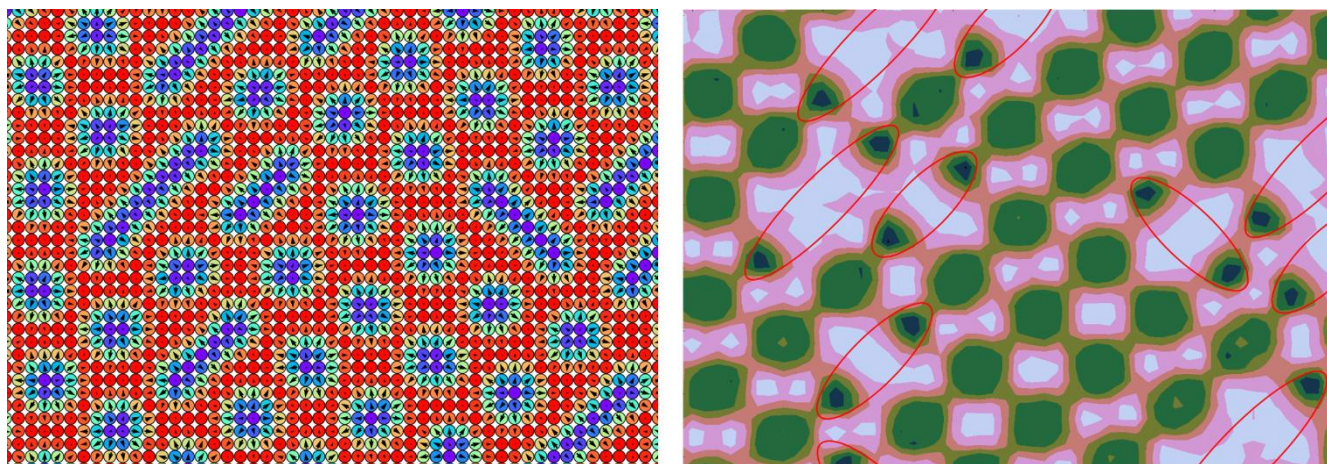


Рисунок 2.5 – (Левая часть) Фрагмент квадратной решетки линейного размера  $L = 512$ , демонстрирующий решение методом Монте-Карло гамильтониана (4), полученное при параметрах  $B = 0.6J$ ,  $|\mathbf{D}| = 1.5J$ ,  $T = 0.02J$ , и принадлежащее S+B фазе.

(Правая часть) Соответствующая пространственная плотность топологического заряда. Бимероны выделены красными овалами

Толщина наблюдаемых бимеронов соответствует диаметру скирмиона. Последний регулируется соотношением  $J/|D|$ . Наглядно это можно проследить на рисунке 2.6. Как видно, данные структуры присутствуют даже в том случае, когда изотропным взаимодействием Гейзенберга в системе можно пренебречь. Средняя длина бимеронов возрастает с увеличением модуля вектора Дзялошинского-Мории при фиксированном значении магнитного поля. С другой стороны, ее можно изменить, варьируя  $B$  при фиксированных параметрах обмена. Однако в системе без дефектов и с периодическими граничными условиями невозможно предсказать точную длину и расположение бимеронов.

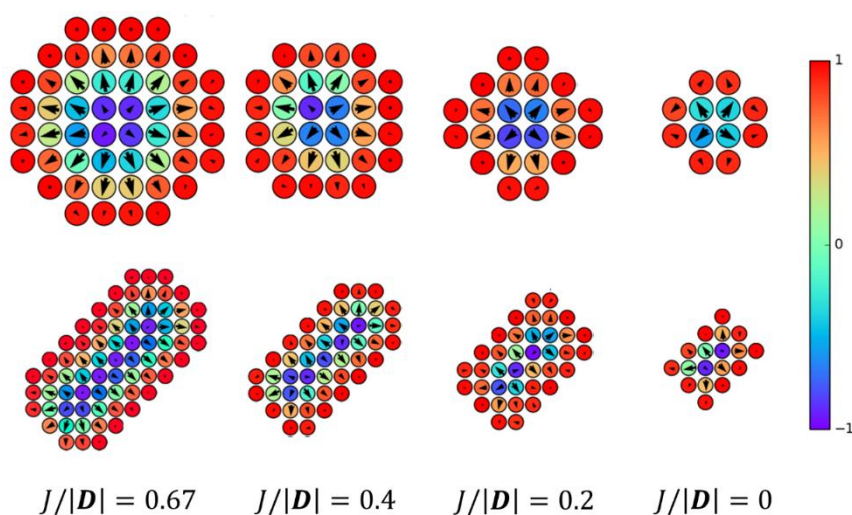


Рисунок 2.6 – Фрагменты квадратной решетки, демонстрирующие отдельные скирмионы (верхняя часть) и бимероны (нижняя часть), стабилизированные при определенных значениях отношения  $J/|D|$

Определение точных границ S+B фазы вызывает существенный практический интерес. Так, в работе [35] нами было теоретически предсказано, что внедрение в систему, находящуюся в данном диапазоне параметров, периодической решетки вакансий приводит к стабилизации магнитных структур определенного типа. При этом выбор между скирмионом и бимероном осуществляется настройкой формы и размера элементарной ячейки этой решетки. Кроме этого, конечный кластер, имеющий форму ромба, может выступать в качестве прототипа ячейки

памяти с тремя состояниями: пара бимеронов, единственный скирмион и ферромагнетик. Примечательно, что первые два из них проявляют стабильность даже при отключении магнитного поля.

### 2.2.3 Трехмерные магнитные системы

Для исследования поведения трехмерных топологических магнитных структур гамильтониан (2.1) был определен на кубической решетке размера  $48 \times 48 \times 48$ . Симуляции проводились при  $J = 1$ , что соответствует ферромагнитному состоянию. Вектор Дзялошинского-Мории в данном случае был направлен вдоль связей между соседними атомами. Аналогичный спиновый гамильтониан был использован в работе [17] для воспроизведения экспериментальной фазовой диаграммы соединения  $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$ . Как и ранее, взаимодействие учитывалось только между ближайшими соседями. Параметры симуляций аналогичны использованным в предыдущем разделе.

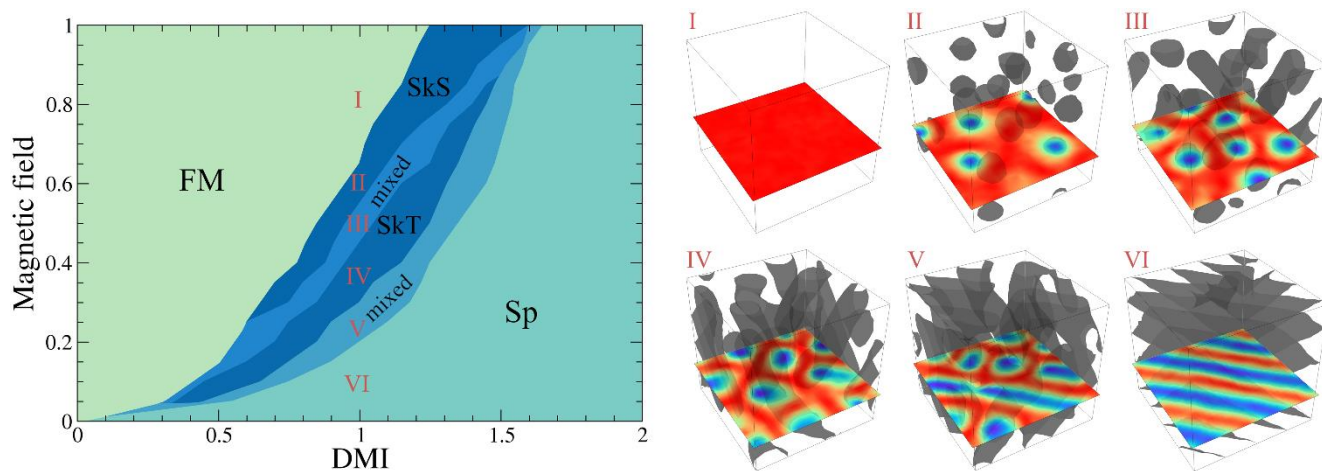


Рисунок 2.7 – (Правая часть) Фазовая диаграмма трехмерной магнитной системы, описываемой гамильтонианом (2.1), полученная при температуре  $T = 0.02$ . Аббревиатурами FM, SkS, SkT и Sp обозначены фазы ферромагнетика, скирмионных сфер, скирмионных трубок и спиновых спиралей, соответственно. (Левая часть) Примеры магнитных конфигураций, стабилизированных на решетке  $25 \times 25 \times 25$ . Серым показаны поверхности  $S^z = 0$ . Все параметры приведены в единицах константы изотропного обменного взаимодействия

На рисунке 2.7 приведена фазовая диаграмма данной системы, полученная при помощи моделирования методом Монте-Карло с алгоритмом Метрополиса. Примечательно, что в данном случае присутствуют два принципиально различных скирмионных состояния: сферы и трубки. Этот результат отлично согласуется с предыдущими теоретическими исследованиями, посвященными изучению топологических структур в трехмерных магнетиках [83–86]. Переход от скирмионных трубок к скирмионным сферам в рамках конкретного соединения осуществляется при увеличении внешнего магнитного поля. В модельных расчетах переключение между этими фазами может также осуществляться при изменении модуля вектора Дзялошинского-Мории.

Еще одной особенностью данной диаграммы является наличие двух обширных переходных областей. Первая из них характеризуется одновременным наличием скирмионных сфер и разупорядоченных трубок, а также их фрагментов. При параметрах, соответствующих второй переходной области, система заполнена скирмионными трубками различного сечения. Поверхностные состояния при этом соответствуют бимеронам.

### **2.3 Разработка метода разделения магнитных фаз по профилям намагниченности**

В отличие от двумерных систем, большое разнообразие реализующихся структур, а также дополнительные шумы, вызванные существенным увеличением числа атомов (в данном случае их 110 592), затрудняют применение расчета спиновых структурных факторов в качестве метода для определения фазового состояния даже при низкой температуре (см. рисунок 2.8). Это приводит к необходимости поиска оптимального представления магнитных конфигураций, позволяющего определять тип чистого состояния.

В отличие от предыдущих работ, в которых применялись различные алгоритмы неконтролируемого обучения [22, 23, 87–91], нами было принято решение не использовать все компоненты спинов атомов. Нетрудно заметить, что все

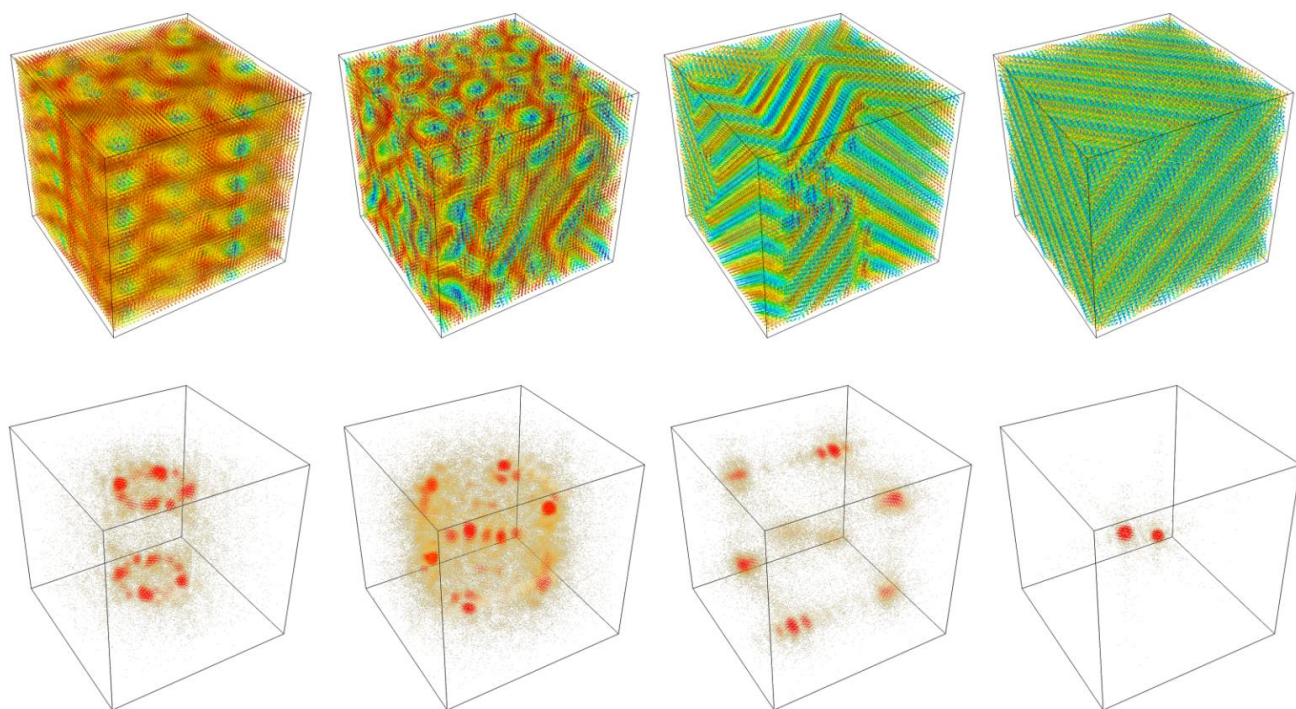


Рисунок 2.8 – Скирмионные и спиральные магнитные конфигурации трехмерной системы с кубической решеткой (верхняя панель), а также соответствующие им структурные факторы (нижняя панель). Конфигурации получены при температуре  $T = 0.02$  и следующих параметрах гамильтониана (слева направо):  $|\mathbf{D}| = 0.93$ ,  $B = 0.56$ ;  $|\mathbf{D}| = 1.15$ ,  $B = 0.55$ ;  $|\mathbf{D}| = 1.35$ ,  $B = 0.2$ ;  $|\mathbf{D}| = 1$ ,  $B = 0.01$ . Все значения приведены в единицах  $J$

фазы, представленные в рассматриваемой модели, характеризуются определенным паттерном намагниченности. Следовательно, для их анализа достаточно иметь информацию лишь о векторе, содержащем  $S^z$  отдельных атомов [92]. Было установлено, что простая сортировка данного вектора по возрастанию и последующая отрисовка получившегося профиля намагниченности позволяет с высокой точностью разделять конфигурации, принадлежащие различным чистым состояниям. Схематично предложенный подход показан на рисунке 2.9. Как хорошо видно, профили намагниченности каждой фазы имеют свое специфическое поведение, что упрощает процесс их идентификации. Так, для ферромагнетика мы имеем пологие кривые вблизи максимума, в то время как спиновые спирали характеризуются практически равномерным распределением  $S^z$  в диапазоне  $[-1, 1]$ .

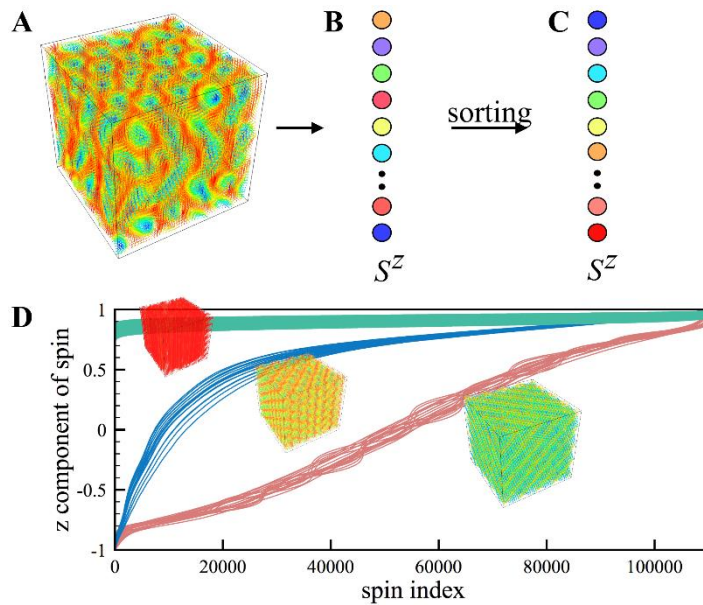


Рисунок 2.9 – Основная идея подхода. Магнитная структура (A) заменяется одномерным вектором (B), содержащим  $S^z$  компоненты спинов, который впоследствии сортируется по возрастанию (C). (D) Визуализация профилей намагниченности конфигураций, принадлежащих чистым спиральной (красные линии), скирмионной (синие линии) и ферромагнитной (зеленые линии) фазам

Кроме того, в случае идеальных конфигураций, полученных при низкой температуре, для последних формируются плато, так как спины всех атомов поворачиваются на фиксированный угол и, следовательно, имеют ограниченный набор значений для  $z$  проекции.

Данный подход существенно проще предыдущих, так как не требует вычисления различных корреляционных функций или итеративной минимизации, применяемой в стандартных алгоритмах машинного обучения. Он позволяет проводить двумерную визуализацию имеющегося набора данных без предварительного снижения размерности, как это делается, к примеру, при использовании комбинации PCA [93, 94] и t-SNE [95].

Неоспоримым плюсом предложенного подхода является возможность разделения данных, имеющих различную структуру, но обладающих одинаковой полной намагниченностью. На рисунке 2.10 приведены профили для спин-спиральных и парамагнитных конфигураций. Как нетрудно заметить, неупорядо-

ченное состояние характеризуется линейной зависимостью. В это же время профиль для спиновых спиралей имеет четко выраженные осцилляции. Нарушение его симметрии относительно нуля можно объяснить тем, что вектор намагниченности содержит только  $S^z$  компоненты, тогда как спирали могут формироваться одновременно вдоль различных диагоналей кубической сверхячейки, как это показано на рисунке 2.8.

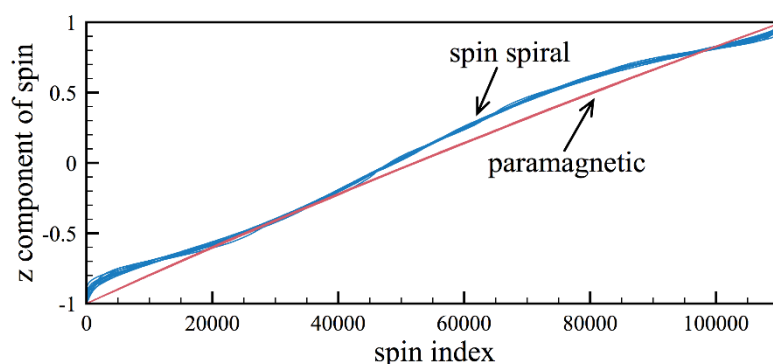


Рисунок 2.10 – Сравнение профилей намагниченности чистых парамагнитных и спин-спиральных конфигураций, полученных при помощи моделирования методом Монте-Карло трехмерной системы, описываемой гамильтонианом (2.1)

Важно отметить, что в предложенном способе представления отсутствует информация о размере присутствующих магнитных структур, что позволяет ему выделять конфигурации, имеющие разный масштаб, но одинаковую природу. Для подтверждения этого нами были рассмотрены два скирмионных состояния, стабилизированных при разных величинах взаимодействия Дзялошинского-Мории. Следовательно, они отличались между собой не только по размеру структур, но и по числу скирмионов. Тем не менее, как видно из рисунка 2.11, профили намагниченности данных конфигураций практически совпадают, что говорит об их принадлежности одной фазе.

Как уже упоминалось ранее, в рассматриваемой системе присутствуют два различных скирмионных состояния, пример которых приведен на рисунке 2.12. Графики зависимости скирмионного числа от индекса слоя по оси  $z$  в обоих случаях имеют аналогичное поведение, что говорит о невозможности использования

данной величины для идентификации конкретной фазы. В свою очередь, профили намагниченности данных состояний существенно отличаются. Кроме того, в случае скирмионных сфер наблюдаются плато в области отрицательных  $S^z$ , так как структура ядра каждой сферы примерно одинакова. Стоит отметить, что профили для переходной области лежат в промежуточном диапазоне, а значит выделение четких границ между чистыми состояниями требует использования дополнительных алгоритмов.

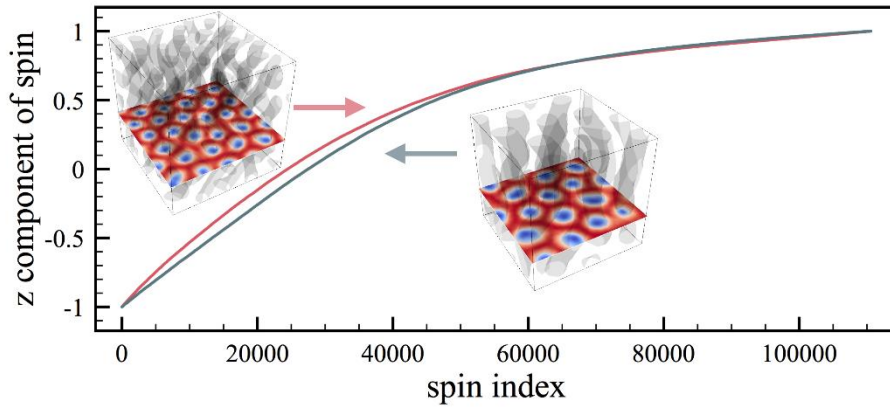


Рисунок 2.11 – Профили намагниченности двух конфигураций, соответствующих скирмионным трубкам, стабилизированным при параметрах  $|\mathbf{D}| = 1J$ ,  $B = 0.4J$ ,  $T = 0.02J$  (левая структура, красный профиль) и  $|\mathbf{D}| = 0.6J$ ,  $B = 0.14J$ ,  $T = 0.02J$  (правая структура, серый профиль)

Во всех случаях, рассмотренных ранее, внешнее магнитное поле было направлено вдоль оси  $z$ . Однако в реальных экспериментах существует возможность изменять его ориентацию. Данный факт приводит к возникновению вопроса о возможности использования  $S^z$  компонент для разделения топологических магнитных фаз в наборе данных, полученном при произвольной ориентации  $\mathbf{B}$ . Для ответа на него нами были проведены дополнительные симуляции с магнитным полем, направленным вдоль оси (111) куба, что является распространенным выбором в эксперименте. Стоит отметить, что для стабилизации скирмионных трубок в данном случае пришлось добавить в гамильтониан (2.1) член  $-\sum_i K(S_i^z)^2$ , отвечающий за локальную анизотропию. Кроме того, в получившейся модели ис-



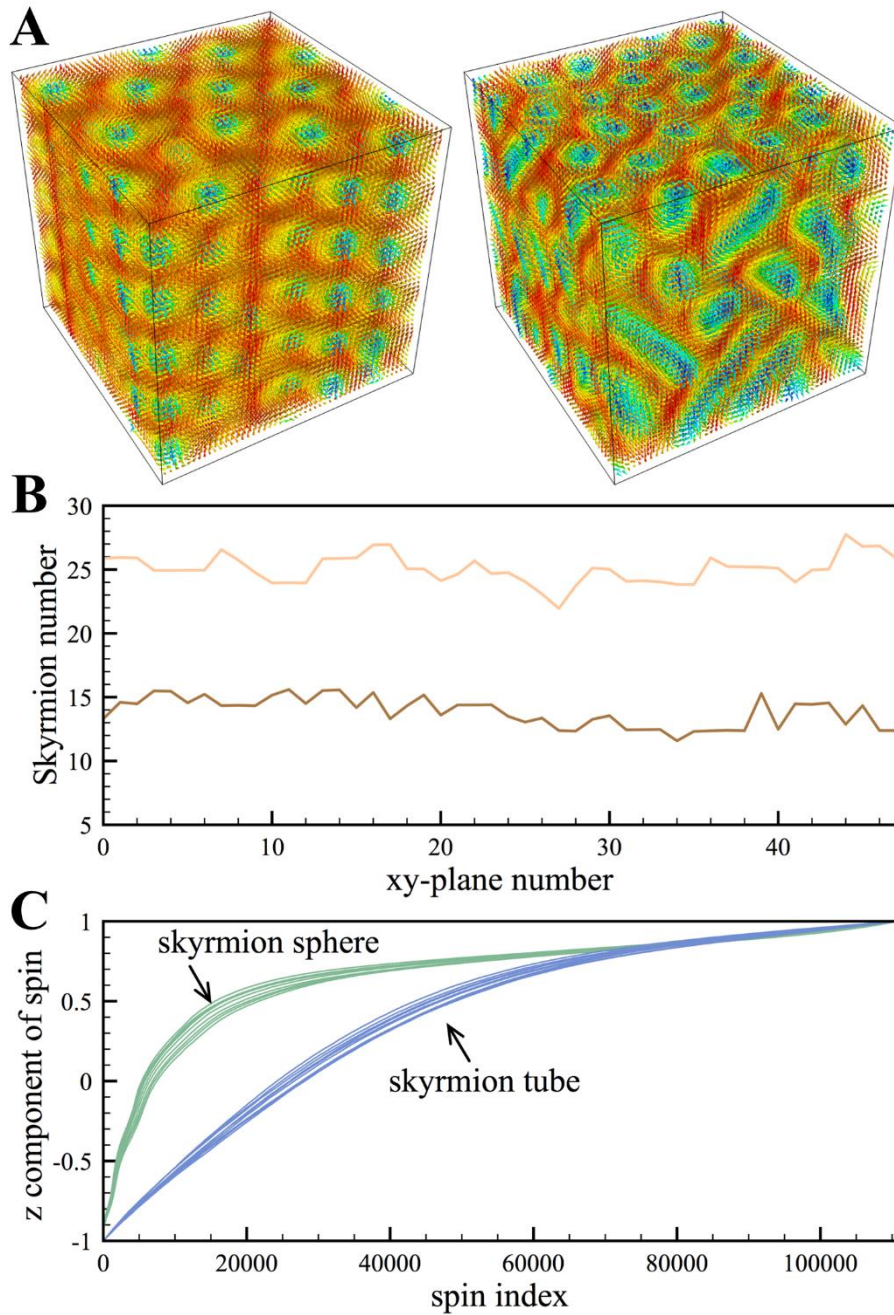


Рисунок 2.12 – (А) Примеры магнитных конфигураций, принадлежащих фазам скирмионных сфер и скирмионных трубок, стабилизированные при параметрах  $|D| = 1J$ ,  $B = 0.6J$ ,  $T = 0.02J$  (сферы) и  $|D| = 1J$ ,  $B = 0.4J$ ,  $T = 0.02J$  (трубки). (В) Графики топологического заряда, рассчитанные для каждой плоскости  $xy$ . Коричневая кривая соответствует сферам, оранжевая – трубкам. (С) Сравнение профилей намагниченности типичных представителей этих фаз

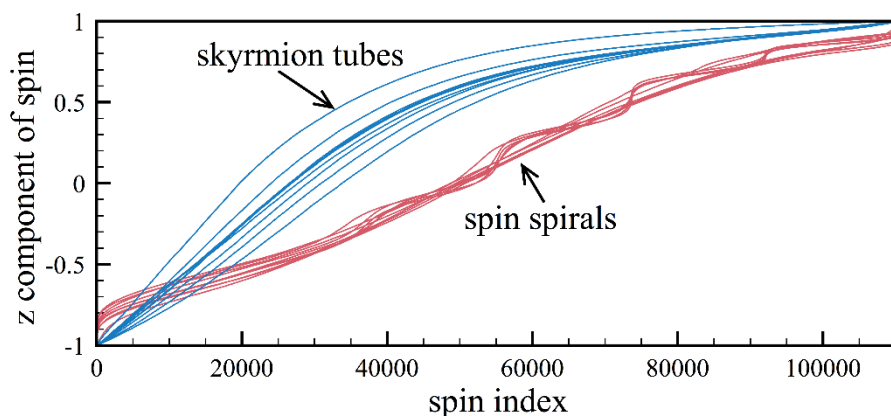


Рисунок 2.13 – Профили намагниченности Монте-Карло конфигураций, принадлежащих фазам спиновых спиралей (красные кривые) и скирмионных трубок (синие кривые), стабилизированных для случая ориентации магнитного поля вдоль оси (111) кубической решетки

чезло состояние скирмионных сфер. Тем не менее, поведение профилей намагниченности для конфигураций, принадлежащих оставшимся фазам, аналогично случаю с  $\mathbf{B} \parallel \mathbf{z}$  (см. рисунок 2.13). Данный результат позволяет говорить о возможности применения предложенного подхода для анализа экспериментальных данных, полученных при различных ориентациях магнитного поля.

Как известно, экспериментально возможно измерить либо  $z$  [96], либо  $x$  [97] компоненты магнитного момента атомов. Возникает закономерный вопрос о возможности использования предложенного подхода, когда в нашем распоряжении есть только проекции спинов на плоскость. Чтобы ответить на него, нами были построены профили намагниченности, составленные из  $z$ ,  $x$  и  $xz$  компонент спина одного и того же набора конфигураций. Как видно из рисунка 2.14, профили для случая плоскостных компонент намагниченности становятся ближе друг к другу, но все еще имеют уникальное поведение, позволяющие идентифицировать различные фазы. Разница между состояниями становится еще более очевидной если в нашем распоряжении находятся все компоненты спина. Для рассмотрения более сложной ситуации были использованы ферромагнитные конфигурации вблизи фазового перехода.

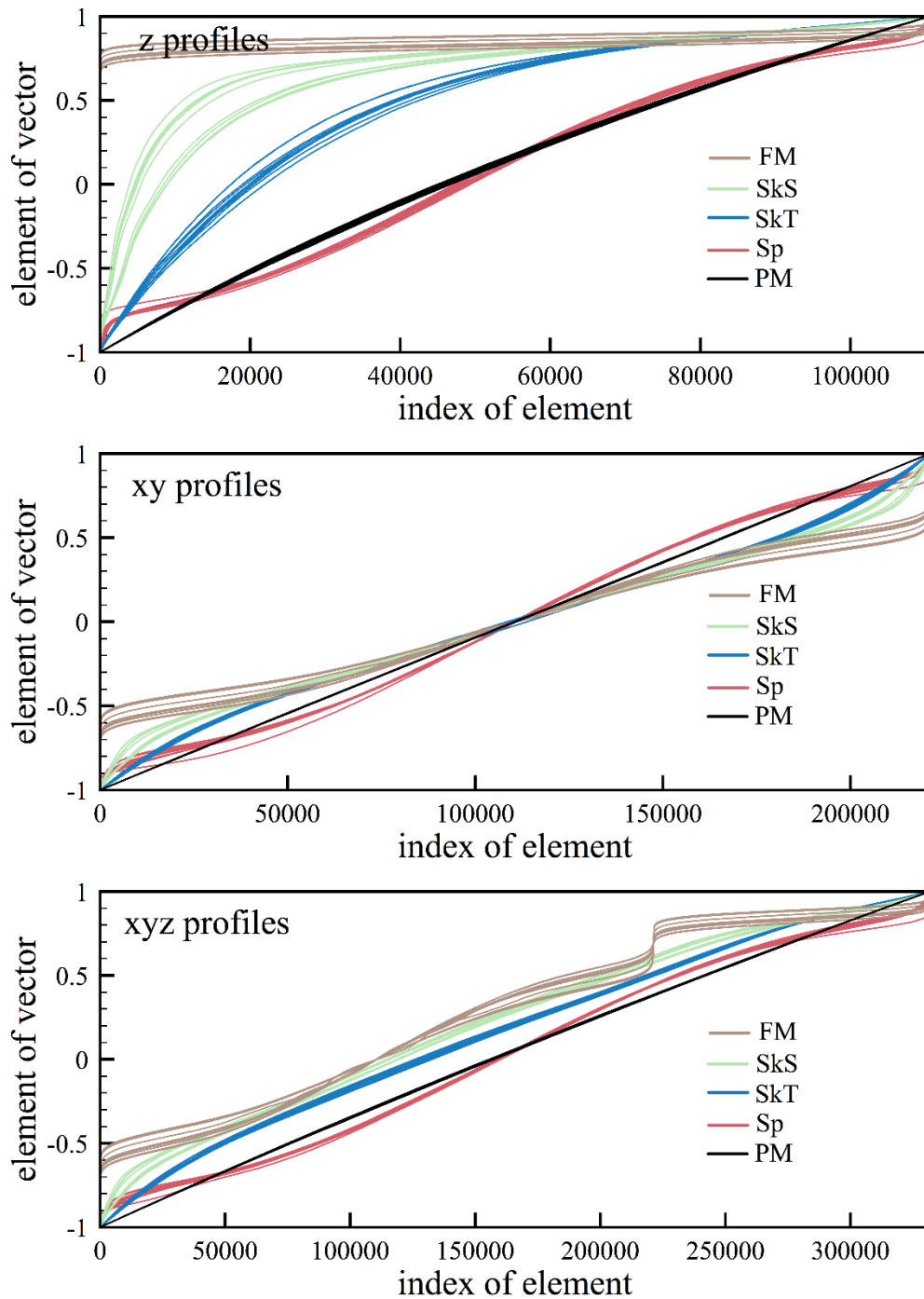


Рисунок 2.14 – Профили намагниченности конфигураций, принадлежащих чистым фазам, полученные при учете различных спиновых проекций. Используются те же аббревиатуры, что и для фазовой диаграммы (см. рисунок 2.7). PM соответствует парамагнитному состоянию

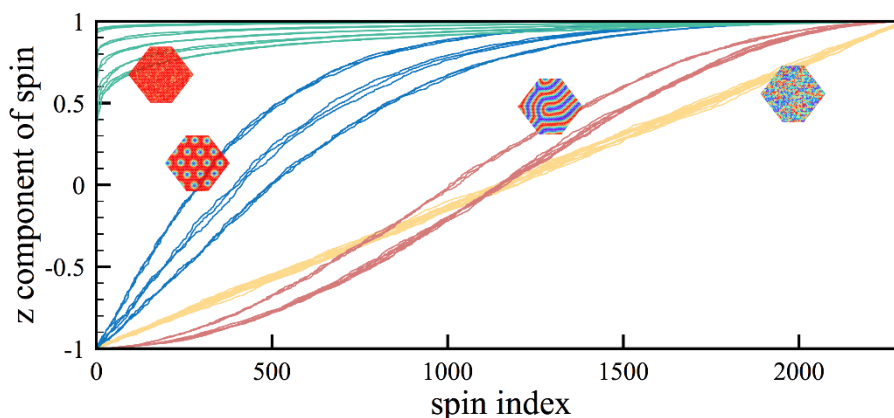


Рисунок 2.15 – Профили намагниченности конфигураций, принадлежащих парамагнитной (желтые кривые), спин-спиральной (красные кривые), скирмионной (синие кривые) и ферромагнитной (зеленые кривые) чистым фазам, стабилизированным для двумерной системы с треугольной геометрией расположения магнитных центров

Для проверки универсальности предложенного подхода по отношению к размерности рассматриваемой системы и типу кристаллической структуры нами были построены профили намагниченности конфигураций, стабилизированных на двумерной треугольной решетке. Как видно из рисунка 2.15, каждая чистая фаза в данном случае характеризуется своим уникальным поведением. Это облегчает процесс разделения состояний. Кроме этого, характер поведения профилей намагниченности аналогичен случаю трехмерной системы с кубической решеткой, что позволяет сделать вывод об универсальности предложенного представления.

## 2.4 Выводы к главе

В данной главе при помощи метода Монте-Карло были построены и проанализированы детальные фазовые диаграммы двумерной и трехмерной ферромагнитных систем, описываемых гамильтонианом с взаимодействиями Гейзенберга и Дзялошинского-Мории. В обоих случаях определены диапазоны параметров, при которых реализуются смешанные состояния спиновых спиралей и скир-

мионов, что должно облегчить дальнейшие исследования в данной области. Было установлено, что конфигурации, принадлежащие чистым фазам, могут быть легко идентифицированы путем визуализации их отсортированных профилей намагниченности. Данный подход является универсальным по отношению к размерности системы и геометрии расположения магнитных центров. Кроме этого, возможность однозначного разделения фазовых состояний не зависит от ориентации внешнего магнитного поля и имеющихся в наличии проекций спина.

Результаты данной главы были опубликованы в работах [35] и [36]. Позднее нами было показано, что предварительная сортировка профилей намагниченности значительно облегчает анализ динамических процессов [98].

## Глава 3. Классификации магнитных фаз при помощи методов машинного обучения

### 3.1 Предпосылки к исследованию

Значительный прогресс в развитии алгоритмов машинного обучения позволил существенно расширить диапазон методов, доступных в рамках теории конденсированного состояния для изучения свойств реальных материалов. К примеру, нейросетевое представление волновой функции гамильтониана квантовой спиновой системы [99, 100] позволило существенно продвинуться в области исследования сложных систем с большим числом частиц [101–104]. С внедрением данного подхода появилась возможность моделирования фрустрированных систем, описание свойств которых при помощи существующих численных методов сильно ограничено. Комбинация же нейронной сети и квантового метода Монте-Карло помогла обойти, так называемую, проблему знака – появление в расчетах отрицательного значения вероятности [105].

Так же, существенных успехов удалось достичь и в области идентификации магнитных фаз для широкого набора спиновых гамильтонианов, как квантовых, так и классических [100–102, 106, 107]. Одним из ярких примеров служит определение фазового перехода ферромагнетик – парамагнетик в модели Изинга [22]. Для нахождения температуры Кюри с высокой степенью точности в данном случае достаточно простейшей нейросети с одним скрытым слоем. Важно отметить, что сложные топологические фазы, возникающие, к примеру, в XY модели [108] также поддаются разделению, однако требуют более продвинутой архитектуры – сверточной нейронной сети [23, 87], что делает данный подход аналогичным задаче о распознавании изображений [109].

Несмотря на постоянное развитие и повышение технической сложности методов машинного обучения, для анализа реальных физических систем зачастую достаточно набора базовых алгоритмов. В частности, это справедливо, когда речь

заходит о решении задачи фазовой классификации. Магнитная система, описываемая гамильтонианом Гейзенберга с взаимодействием Дзялошинского-Мории, рассмотренная в предыдущей главе, отлично подходит для изучения возможности применения простейших алгоритмов машинного обучения для исследования сложных неколлинеарных магнитных фаз, имеющих технологическое значение. Как теоретические, так и экспериментальные [17] фазовые диаграммы материалов, в которых наблюдаются скирмионы, имеют значительные переходные области, что приводит к проблеме точного определения границ.

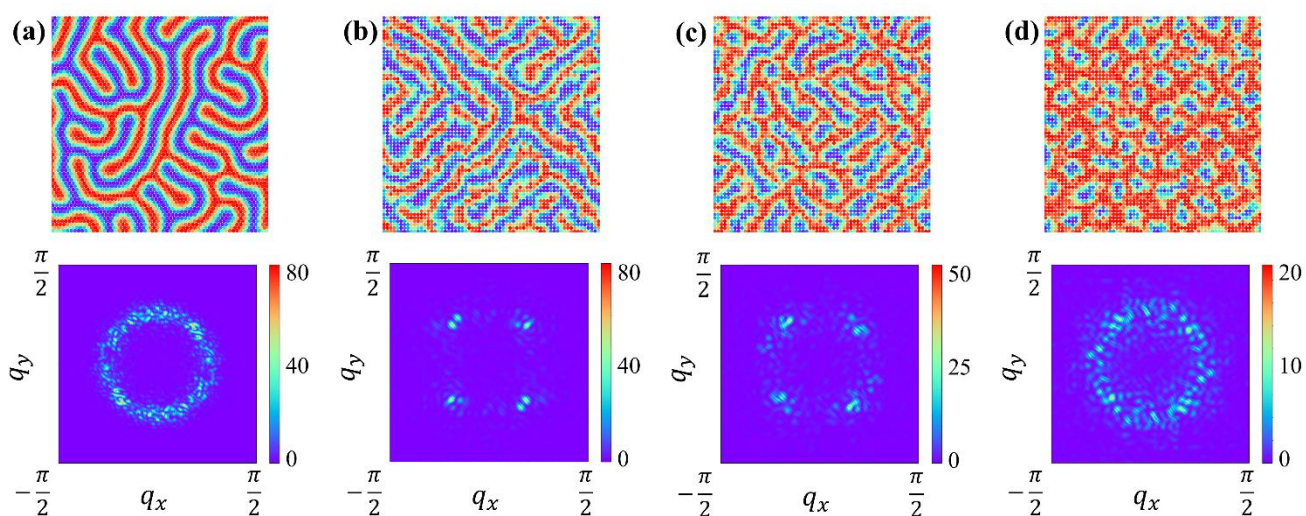


Рисунок 3.1 – (a) Магнитные лабиринты на треугольной решетке при низкой температуре ( $T = 0.02J$ ), (b) спиновые спирали, (c) смешанная скирмион-бимеронная конфигурация и (d) чистый скирмионный кристалл на квадратной решетке, полученные при более высокой температуре ( $T = 0.4J$ ). В нижней части рисунка приведены соответствующие перпендикулярные спиновые структурные факторы

Стоит отметить, что традиционные алгоритмы фазовой классификации, основанные на анализе спиновых корреляционных функций различных порядков, работают только в условиях низких температур, а также ограничиваются выделением фаз, имеющих явно прослеживающееся упорядочение. Как видно из рисунка 3.1, расчет спиновых структурных факторов не позволяет идентифицировать не только конфигурации, полученные при  $T = 0.4J$ , но и спиновые спирали лаби-

ринтного типа, являющиеся основным состоянием для системы с треугольной кристаллической решеткой. Так же, все представленные магнитные структуры имеют ненулевой топологический заряд. Тем не менее, глядя на приведенные изображения, все еще можно однозначно с высокой точностью отнести их к той или иной фазе. Данный факт дает надежду на успешное применение алгоритмов машинного обучения, в основе которых лежит поиск паттернов в данных.

Как было показано в предыдущей главе, в случае трехмерных магнитных систем ситуация еще более осложняется ввиду увеличения разнообразия реализуемых структур и необходимости использования в реалистичных симуляциях сеток от  $100 \times 100 \times 3$  (30 000 спинов) [17] до  $256 \times 256 \times 280$  (18 350 080 спинов) [110]. Все это затрудняет идентификацию различных фаз даже при низкой температуре. В свою очередь, предложенный алгоритм, основанный на визуализации отсортированных профилей намагниченности, не позволяет определить критические точки перехода, что приводит к необходимости поиска более продвинутых методов.

В данной главе приведен алгоритм для проведения фазовой классификации двумерных и трехмерных топологических магнитных структур, реализуемых в модели, описанной ранее. В его основу легла простейшая полносвязная нейронная сеть прямого распространения с одним скрытым слоем, аналогичная используемой в работе [22]. Был проведен детальный анализ структуры обученной сети, а также сравнение с другими базовыми алгоритмами машинного обучения. Все представленные результаты получены на решетках размера  $48 \times 48$  и  $48 \times 48 \times 48$  для двумерного и трехмерного случаев, соответственно.

## **3.2 Двумерные магнитные системы**

### **3.2.1 Обучение нейронной сети**

Схематическая структура нейронной сети, используемой в данной работе, приведена на рисунке 3.2(с). В качестве активационной функции нейронов скрытого и выходного слоев была выбрана сигмоида, что позволило избежать зависи-



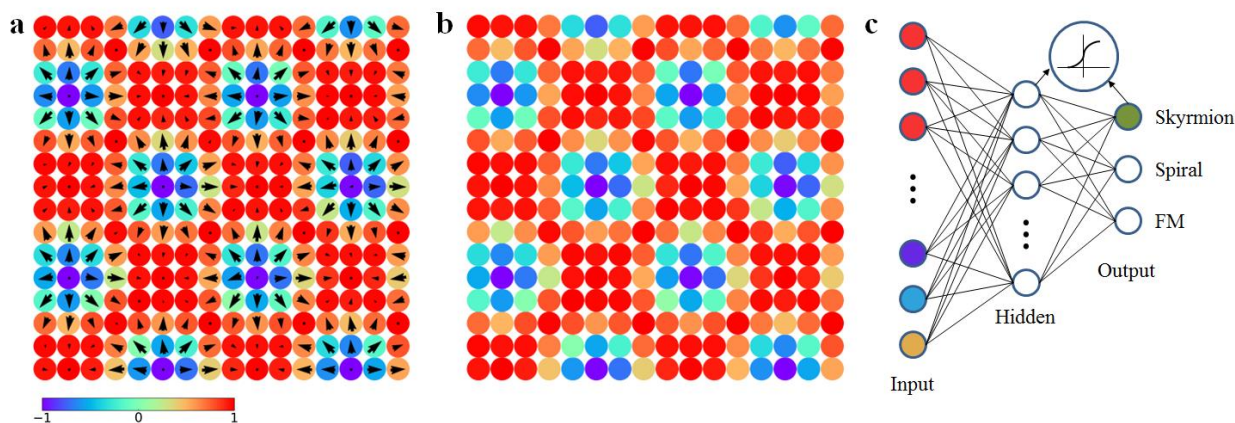


Рисунок 3.2 – Схематичное представление работы нейронной сети. (а) Скирмионная магнитная конфигурация, полученная при помощи моделирования методом Монте-Карло гамильтониана (2.1). Атомы изображены кружками, черными стрелками показаны  $x$ у компоненты спинов, цветом –  $z$  компонента. (b) Матрица, составленная из  $z$  проекций исходной магнитной структуры, подлежащей классификации. (c) Нейронная сеть прямого распространения с одним скрытым слоем. На вход подаются  $z$  компоненты спинов искомой конфигурации. В качестве активационной функции нейронов скрытого и выходного слоев выступает сигмоида

мости между значениями отдельных элементов внутри слоя. Три выходных нейрона соответствуют трем чистым фазам, реализующимся в системе: ферромагнитной, спиральной и скирмионной. В качестве тренировочного набора были сгенерированы по 1000 конфигураций, принадлежащих центральным областям данных фаз. Важно отметить, что они не покрывали всю фазовую диаграмму. Для их получения было зафиксировано значение константы изотропного обмена Гейзенберга  $J = 1$ , в то время как параметры  $B$  и  $|D|$  выбирались при помощи генератора случайных чисел с равномерным распределением в заданных пределах вблизи некоторых точек в центрах чистых фаз. Схематично данные области приведены на рисунке 3.3. Таким же образом определялось и значение температуры в диапазоне  $T \in [0.02, 0.1]$  в единицах  $J$ . Кроме того, были сгенерированы добавочные 1000 конфигураций, принадлежащих парамагнитной фазе при  $T \sim 10J$ . Они использовались в обучающем наборе для того, чтобы сеть научилась определять со-

стояния, не относящиеся ни к одному из искомым. В качестве меток к таким конфигурациям выступали нулевые значения для всех выходных нейронов.

Основная трудность использования алгоритмов машинного обучения для классификации фаз в данной системе заключалась в выборе параметров, которые должны подаваться на вход метода. Как было показано в работе [22], в случае модели Изинга со спином каждого атома, равным  $S^z = \pm 1$ , любая частная магнитная конфигурация может быть описана вектором, составленным из этих чисел. Таким образом, каждому нейрону входного слоя соответствует значение спина конкретного атома. В более сложной XY модели в качестве этих параметров можно использовать значения углов поворота спинов в плоскости, как это было сделано в статье [23].

В случае неколлинеарных магнитных конфигураций, исследуемых в данной работе, ситуация принимает более сложный характер, поскольку ориентация каждого спина в пространстве не может быть описана одним значением. Тем не ме-

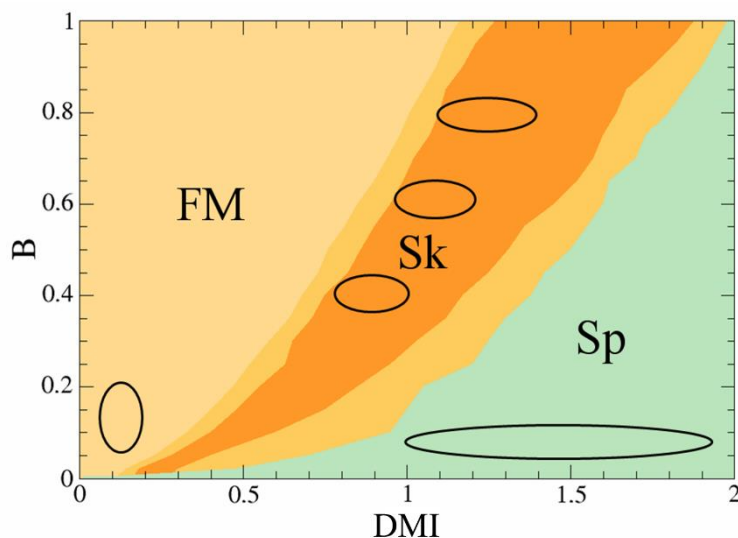


Рисунок 3.3 – Фазовая диаграмма ферромагнитной системы с взаимодействием Дзялошинского-Мории, полученная при температуре  $T = 0.02$ . Аббревиатурами Sk, FM и Sp обозначены скирмионная решетка, ферромагнитное состояние и спиновые спирали, соответственно. Черными овалами обведены области, используемые для генерации конфигураций обучающего набора. Все параметры приведены в единицах константы изотропного обменного взаимодействия

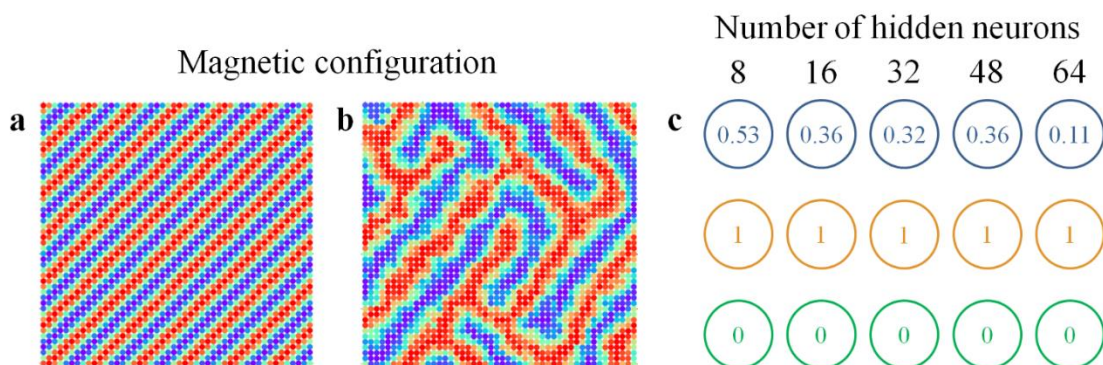


Рисунок 3.4 – Примеры спин-спиральных конфигураций, используемых при обучении (a) ( $|\mathbf{D}| = 1.4J$ ,  $B = 0.02J$ ,  $T = 0.05J$ ) и тестировании (b) ( $|\mathbf{D}| = 0.72J$ ,  $B = 0.03J$ ,  $T = 0.22J$ ). (c) Значения выходных нейронов для конфигурации (b) в зависимости от числа скрытых нейронов. Числа в синих, оранжевых и зеленых кружках сигнализируют о наличии скирмионной, спиральной и ферромагнитной фаз, соответственно

нее, в предыдущей главе было показано, что для анализа скирмионных структур достаточно иметь проекции магнитных моментов атомов на ось направления  $\mathbf{B}$ . Таким образом, на вход нейронной сети в данной работе подавались вектора, составленные из  $z$  компонент спинов магнитных конфигураций.

В качестве функции ошибки сети было выбрано среднеквадратичное отклонение. Веса оптимизировались при помощи алгоритма обратного распространения ошибки [62]. Технические детали процедуры обучения приведены в главе 1. Для решения поставленной задачи о классификации фаз нами были исследованы несколько моделей с числом нейронов скрытого слоя от 8 до 128. Основываясь на тестовых данных, было установлено, что сеть с 64 нейронами имеет наилучшую точность. В качестве примера, на рисунке 3.4 приведены результаты работы сети при распознавании высокотемпературных спиралей, которые не были представлены в тренировочном наборе. Кроме того, мы пришли к выводу о том, что дальнейшее увеличение числа нейронов скрытого слоя приводит к снижению качества распознавания. Таким образом, полное число настраиваемых параметров используемой сети равнялось  $64L^2 + 192$ , что несравнимо меньше, чем у моделей, используемых в прошлых работах [23].

### 3.2.2 Фазовая диаграмма

С помощью обученной нейронной сети была построена фазовая диаграмма системы с квадратной решеткой, описываемой гамильтонианом (2.1). Для этого мы разбили плоскость параметров магнитного поля и температуры на сетку из 625 ячеек. В каждой точке значения выходных нейронов усреднялись по 10 независимым прогонам метода Монте-Карло. Таким образом, полное число магнитных конфигураций, используемых при построении, равнялось 6250.

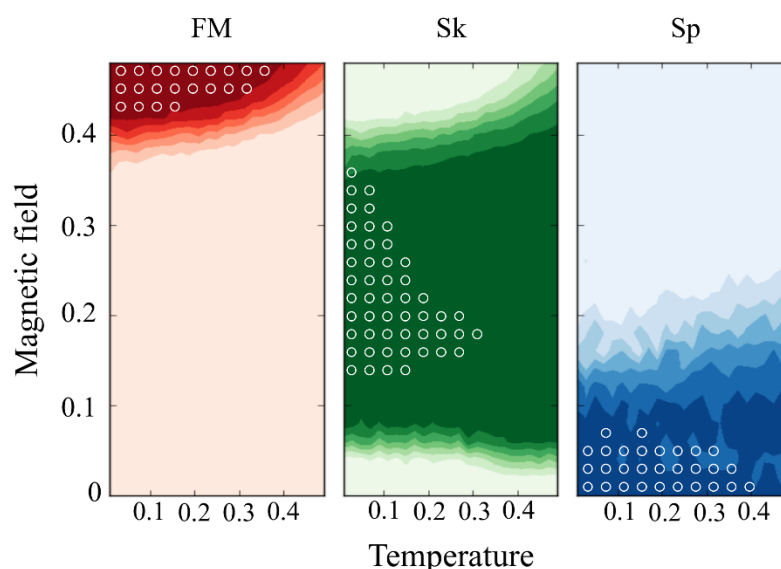


Рисунок 3.5 – Фазовая диаграмма, полученная при помощи нейронной сети с 64 элементами скрытого слоя, для  $|\mathbf{D}| = 0.72$ . Каждая вкладка соответствует определенному выходному нейрону, а их значения показаны интенсивностью цвета (темная область – 1, светлая – 0). Белыми кружками обозначены области, фазы в которых можно определить путем анализа спиновых структурных факторов. Все параметры приведены в единицах  $J$

Из рисунка 3.5 видно, что сеть безошибочно распознает все интересующие нас фазы при низких температурах. Данный вывод можно сделать из сравнения с областями, определенными при помощи вычисления спиновых структурных факторов, которые обозначены белыми кружками. Следует отметить, что для магнит-

ных конфигураций, смоделированных при параметрах, соответствующих темно-зеленой области, были получены достаточно большие значения топологического заряда  $Q > 15$ . Еще одним важным результатом является то, что можно выполнить количественный анализ состава переходных областей между различными фазами. Действительно, для каждой точки фазовой диаграммы определены значения выходных нейронов, отвечающих вкладам от чистых фаз. Это дает возможность решения сложной проблемы определения фазовых границ и количественного описания переходных областей [111]. К примеру, в данной системе отчетливо видно перекрытие между скирмионной и спиральной фазами, что соответствует области, в которой встречаются бимеронные структуры.

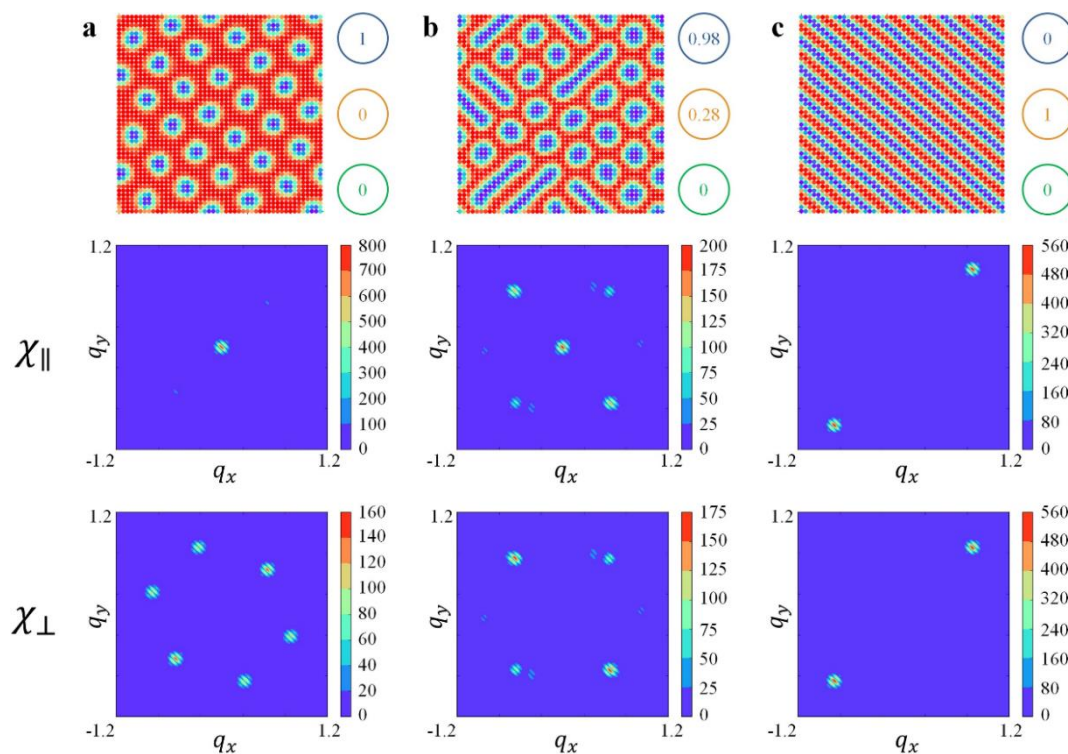


Рисунок 3.6 – Примеры чистой скирмионной (а), смешанной скирмион-бимеронной (b) и чистой спиральной (с) магнитных конфигураций, полученных при температуре  $T = 0.02J$ , а также соответствующие им спиновые структурные факторы. Числа в синих, оранжевых и зеленых кружках соответствуют значениям выходных нейронов, ответственных за скирмионную, спиральную и ферромагнитную фазы. Скирмионные числа данных конфигураций равны 32, 28 и 0 слева направо

Более подробно особенности работы нейронной сети при решении задачи классификации будет полезно рассмотреть на нескольких показательных примерах. На рисунке 3.6 приведены конфигурации, полученные при низкой температуре и принадлежащие наиболее интересным фазам. Как нетрудно заметить, все они корректно распознаны при помощи обученной нейронной сети. Для смешанного состояния в данном случае активируются сразу два выходных нейрона, а соотношение их значений примерно описывает долю скирмионов и бимеронов. Тем не менее, первая и вторая конфигурации не могут быть разделены на основе

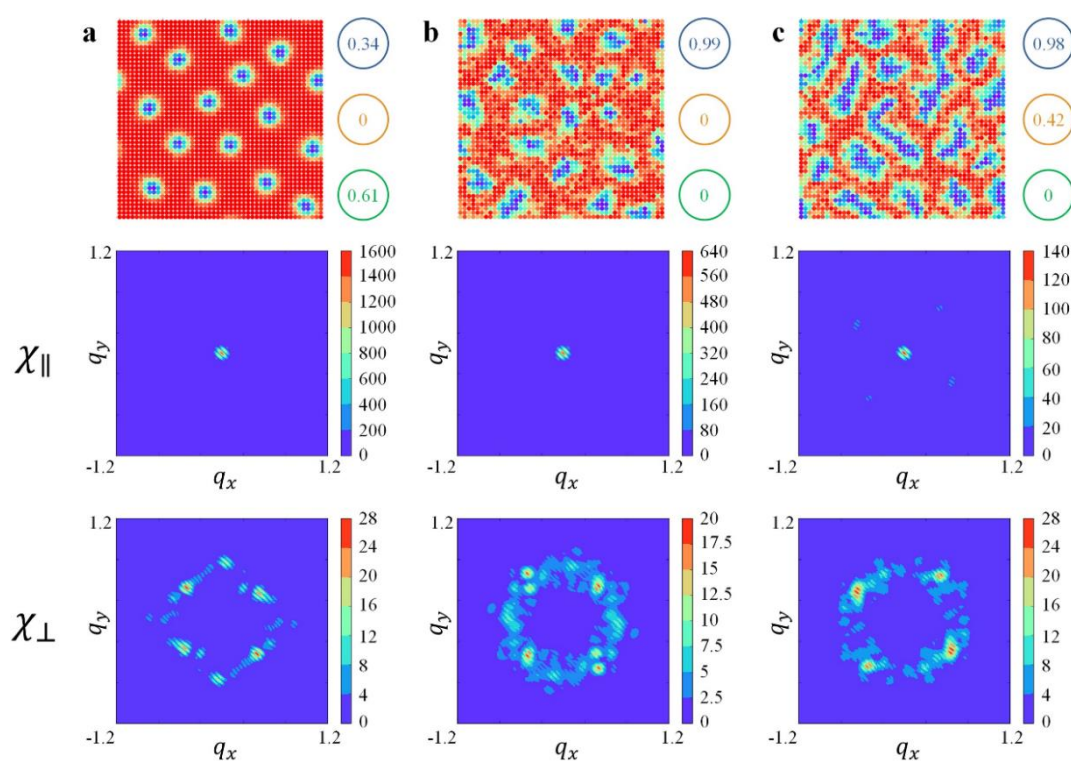


Рисунок 3.7 – Примеры неперодической скирмионной (а) магнитной конфигурации, полученной при низкой температуре ( $T = 0.02J$ ), чистой скирмионной (b) и смешанной скирмион-бимеронной (c) магнитных конфигураций, полученных при высокой температуре ( $T = 0.4J$ ), а также соответствующие им спиновые структурные факторы. Числа в синих, оранжевых и зеленых кружках соответствуют значениям выходных нейронов, ответственных за скирмионную, спиральную и ферромагнитную фазы. Скирмионные числа данных конфигураций равны 15, 19 и 15

слева направо

топологического заряда, так они обе имеют довольно большое значение  $Q$ . Опираясь только на данную величину и картину пиков структурного фактора, смешанную фазу можно было бы ошибочно ассоциировать с  $2-q$  скирмионной, встречающейся в некоторых системах [112]. Использование нейросетевого подхода помогает справиться с этой проблемой.

На рисунке 3.7 представлены примеры магнитных конфигураций, принадлежащих непериодической скирмионной фазе при низкой температуре и высокотемпературным чистой скирмионной и смешанной скирмион-бимеронной фазам. Нетрудно заметить, что все они характеризуются размытыми спиновыми структурными факторами. Более того, топологический заряд данных конфигураций примерно одинаков. Это делает невозможным фазовое разделение при помощи стандартных методов. В то же время, разработанная нейронная сеть прекрасно справляется с поставленной задачей. Следует так же отметить, что ее использование не сопряжено с большими временными и вычислительными затратами, в отличие от расчета  $Q$  и  $\chi(\mathbf{q})$ .

### 3.2.3 Анализ процесса классификации

Результаты предыдущих исследований, основанных на применении нейронных сетей [22, 23, 87, 99], приводят к необходимости ответа на новый фундаментальный вопрос: на основе чего сеть может распознать различные фазы вещества. В работе [22] было показано, что успешная идентификация состояний в модели Изинга связана с разницей в полной намагниченности спиновых конфигураций, принадлежащих различным фазам. В случае системы, рассмотренной в данной работе, такое обоснование также является реалистичным. Намагниченность в расчете на спин, определяемая как  $m(\mathbf{x}) = \frac{1}{N} \sum_i^N S_i^z$  (где  $\mathbf{x}$  – входная конфигурация), в тренировочном наборе лежит в диапазонах [0.91, 0.99], [0.38, 0.53] и [0, 0.03] для ферромагнитной, скирмионной и спин-спиральной фаз, соответственно. В то же время тестовый набор включает в себя конфигурации, характеризуемые  $m(\mathbf{x}) \in [0.84, 0.99]$ , [0.33, 0.69] и [0, 0.07] для случая чистых фаз. Хотя данные диапазоны

и шире, чем те, что были использованы при обучении, они все также не перекрываются. Нами было установлено, что компоненты вектора  $Wx$  (где  $W$  – матрица весов между входным и скрытым слоями сети) линейно зависят от намагниченности (см. рисунок 3.8), что согласуется с результатами, приведенными в работе [22]. Тем не менее, для рассматриваемой системы увеличение числа нейронов скрытого слоя приводит к появлению новых зависимостей. Это может означать, что намагниченность является не единственным параметром, который сеть использует при проведении фазовой классификации.

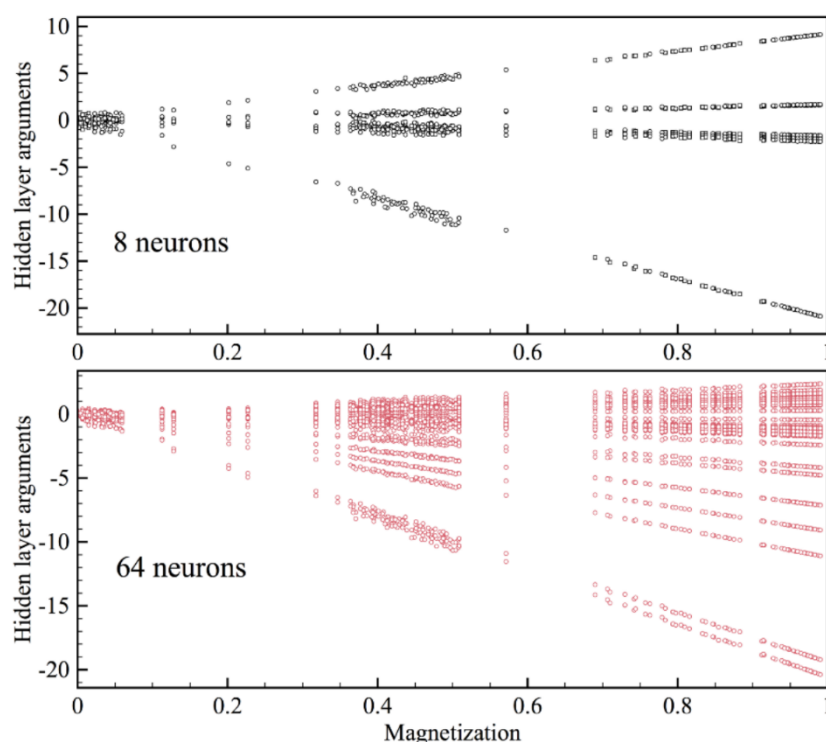


Рисунок 3.8 – Зависимость аргументов нейронов скрытого слоя от  $z$  компоненты намагниченности спиновой конфигурации

Поскольку основное внимание в данной работе направлено на распознавание скирмионной фазы, нами была также исследована зависимость аргументов нейронов скрытого слоя от топологического заряда. Для данной цели было проведено моделирование гамильтониана с нулевым вкладом от изотропного обмена при различной величине магнитного поля. Это дало нам возможность получить 2000 магнитных конфигураций, характеризующихся существенно различными



значениями  $Q$  (от 0 до 170) без изменения размера системы. Полученные результаты приведены на рисунке 3.9. Все нейроны могут быть разделены на две категории: часть аргументов имеет постоянное значение, в то время как остальные проявляют линейную зависимость от топологического заряда. Тем не менее, не правильным будет делать вывод о том, что нейросеть использует величину  $Q$ , так как чем больше скирмионов в системе, тем меньше ее намагниченность  $m(x)$ . Как нетрудно заметить, графики на рисунке 3.9 эффективно повторяют поведение зависимостей, получаемых при инвертировании центральной области рисунка 3.8.

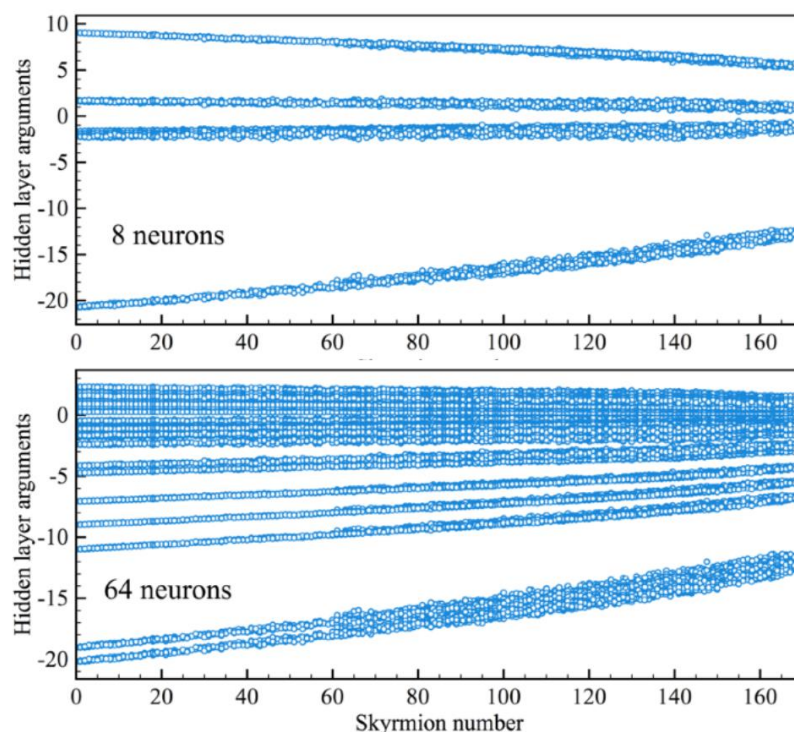


Рисунок 3.9 – Зависимость аргументов нейронов скрытого слоя от скирмионного числа. Результаты были получены для случая  $J = 0$

Для понимания внутренней структуры работы сети можно также проводить визуализацию нейронов скрытого слоя и соответствующих матриц весовых коэффициентов. Данный анализ был проделан нами на примере конфигурации, содержащей большие скирмионы. Важно отметить, что размер объектов, представленных в обучающем наборе, не превышал  $10a$ , где  $a$  – постоянная решетки. Тем не менее, было установлено, что нейросеть способна корректно классифицировать

магнитные структуры намного большего диаметра. К примеру, скирмион в левой части рисунка 3.10 имеет размеры порядка  $35a$  и со 100% точностью определяется даже сетью с 8 нейронами скрытого слоя.

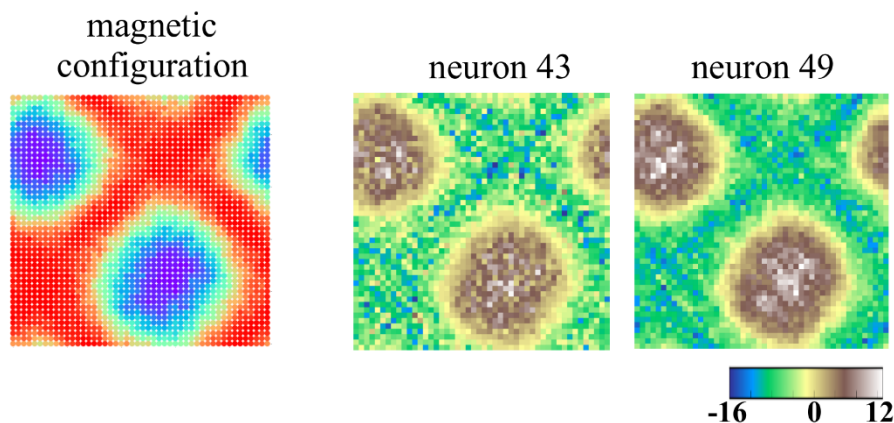


Рисунок 3.10 – (Левая часть)  $z$ -проекция спинов скирмионной магнитной конфигурации, стабилизированной при параметрах  $|\mathbf{D}| = 0.2J$ ,  $B = 0.02J$ ,  $T = 0.02J$ . (Правая часть) Двумерная визуализация векторов  $Wx$  для двух нейронов скрытого слоя

В правой части рисунка 3.10 приведены компоненты векторов  $Wx$  для двух нейронов скрытого слоя, дающих максимальный вклад в итоговый ответ сети. Для удобства восприятия они представлены в двумерной форме. Стоит отметить, что максимальные и минимальные интенсивности, соответствующие ядру и периферии скирмионов, для данных нейронов различны. Тем не менее, можно легко распознать очертания данных объектов. Нами было установлено, что визуализация весов нейронной сети  $W$  без привязки к конкретной спиновой конфигурации не дает никакой полезной информации о принципах ее работы.

### 3.2.4 Проверка на универсальность

Следующим шагом нашего исследования стала проверка того, сможет ли нейронная сеть, обученная на конфигурациях системы с квадратной кристаллической решеткой, проводить фазовую классификацию спинового гамильтониана,

определенного для случая треугольной геометрии расположения магнитных центров. Для этого был сгенерирован соответствующий тестовый набор, включающий в себя как чистые скирмионную, спиральную и ферромагнитную фазы, так и их комбинации. Примеры таких спиновых конфигураций, а также результаты их распознавания, приведены на рисунке 3.11. Так как на вход сети подавался одномерный вектор  $S_i^z$ , для увеличения точности работы нами вырезалась квадратная область решетки, полученная при размножении исходной ромбической ячейки размера  $48 \times 48$ . Это было сделано для минимизации изменения геометрии объектов при их отображении на исходную решетку.

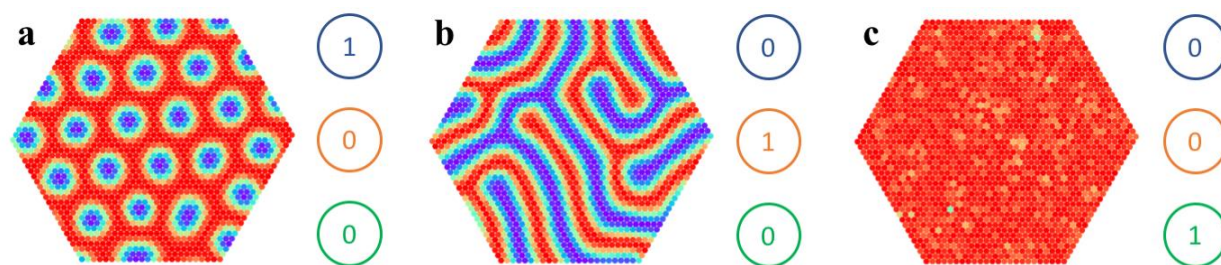


Рисунок 3.11 – Примеры скирмионной (а), спин-спиральной (b) и ферромагнитной конфигураций (с), стабилизированных в системе с треугольной решеткой. Числа в кружках соответствуют значениям выходных нейронов, которые соответствуют чистым фазам: ферромагнетика, спиновой спирали и скирмиона

Было установлено, что обученная нейронная сеть корректно распознает скирмионные и ферромагнитные конфигурации с высокой точностью. В случае спиновых спиралей, ведущих себя гораздо более сложным образом, чем используемые в тренировочном наборе (см. рисунок 3.4 (а)), точность классификации составляет лишь 40%. Однако при ориентации спиралей вдоль диагоналей системы все конфигурации распознаются корректно, что позволяет сделать вывод о том, что данную проблему можно решить расширением обучающего набора.

### 3.3 Трехмерные магнитные системы

В предыдущей главе нами были проанализированы особенности поведения трехмерных топологических магнитных структур на кубической решетке размера  $48 \times 48 \times 48$ . Так как общее число спинов в рассматриваемой системе равняется 110 592, простейшая нейронная сеть, описанная в предыдущем разделе, не может достичь требуемой точности классификации, оперируя исходной информацией о спиновых конфигурациях. Следовательно, появляется необходимость некоей предварительной обработки данных с целью определения их внутренней структуры, что является распространенным подходом при анализе образцов неизвестной природы. Этот этап может включать себя различные алгоритмы снижения размерности, а также использование методов машинного обучения, осуществляющих кластеризацию [93, 95]. В качестве такой предварительной обработки нами было принято решение использовать процедуру сортировки профилей намагниченности, возможности которой были продемонстрированы в предыдущей главе.

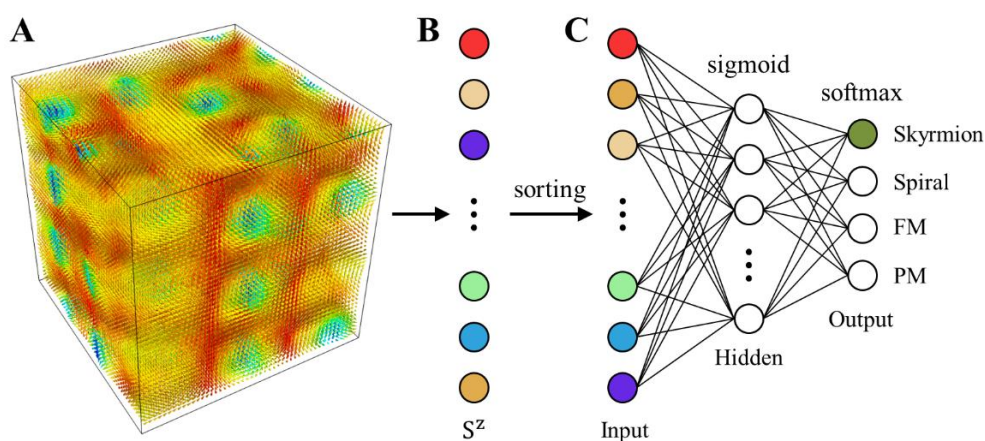


Рисунок 3.12 – Схематичное представление работы нейронной сети. (A) Трехмерная скирмионная магнитная конфигурация, полученная при помощи моделирования методом Монте-Карло гамильтониана (3.1). Стрелками представлены спины атомов. (B) Исходный вектор, содержащий  $S^z$  компоненты спинов. (C) Нейронная сеть прямого распространения с одним скрытым слоем. На вход подается отсортированный профиль намагниченности

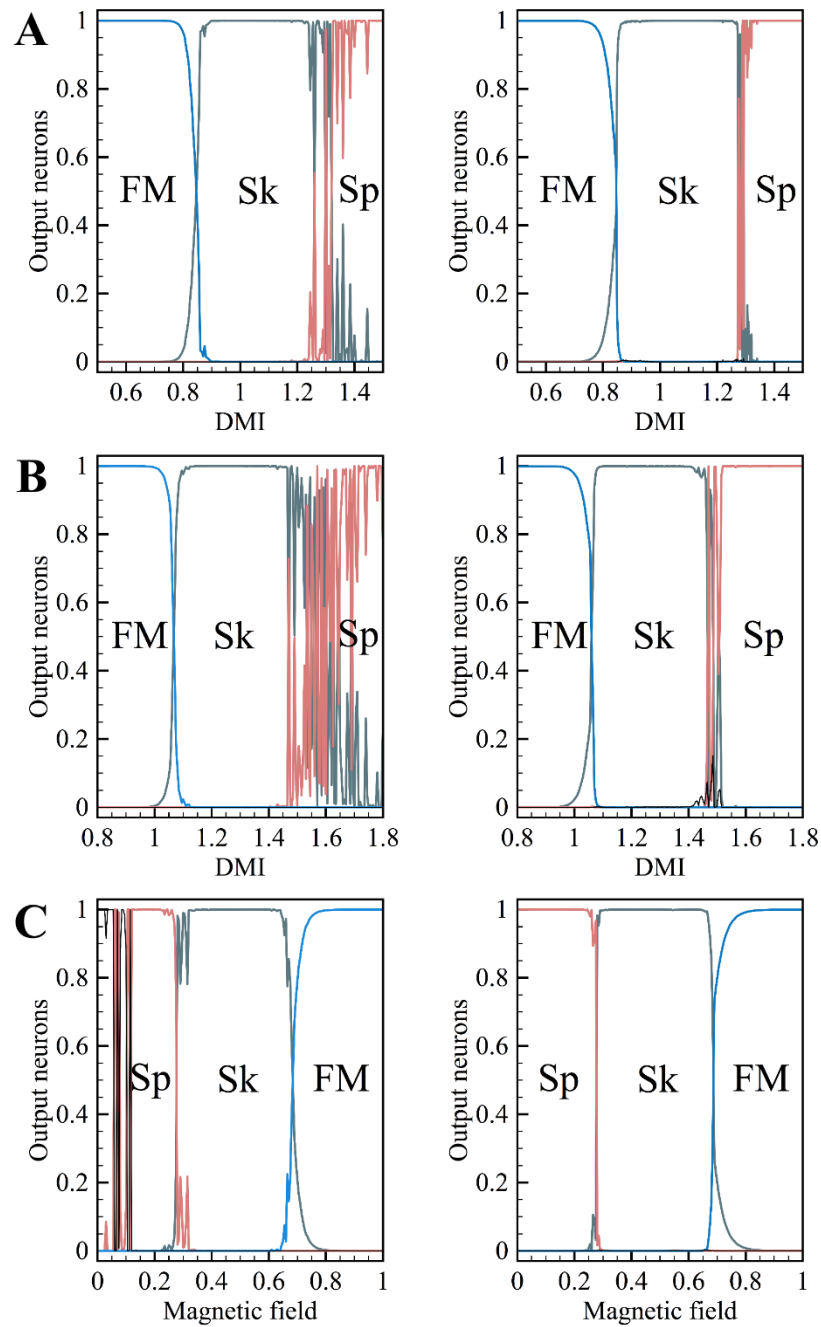


Рисунок 3.13 – Влияние предварительной сортировки векторов  $S^z$  компонент спинов магнитных конфигураций на результаты работы нейронной сети. Аббревиатурами Sk, FM и Sp обозначены скирмионное, ферромагнитное и спиральное состояния, соответственно. Левая и правая части соответствуют случаям обучения на исходных и отсортированных векторах намагниченности. Синими, серыми, красными и черными линиями обозначены значения выходных нейронов, для ферромагнитной, скирмионной, спиральной и парамагнитной фаз, соответственно. Тестирование проводилось при параметрах (a)  $B = 0.5J$ ,  $T = 0.02J$ , (b)  $B = 0.75J$ ,  $T = 0.1J$  и (c)  $|D| = 1J$ ,  $T = 0.02J$

Так как предложенный подход, основанный на визуализации отсортированных профилей намагниченности, нацелен на идентификацию чистых состояний, точное определение фазовых границ и переходных областей требует дополнительного использования алгоритмов машинного обучения. В данном разделе представлено сравнение результатов работы нейронной сети с одним скрытым слоем, имеющим 64 нейрона, для случаев подачи на вход исходных векторов  $S^z$  компонент спинов магнитных конфигураций, а также их отсортированных версий.

Структура сети и схематичный процесс подготовки данных приведены на рисунке 3.12. В отличие от двумерного случая, для активации нейронов выходного слоя использовалась *softmax* функция:

$$\text{softmax}(o_i) = \frac{\exp(o_i)}{\sum_{j=1}^{N_o} \exp(o_j)}, \quad (3.1)$$

где  $o_i$  – значение  $i$ -го выходного нейрона,  $N_o$  – их общее число. Это позволяет провести более качественное сравнение сетей, обученных на данных различной структуры, так как фазовые переходы становятся более выраженными. Причина кроется в том, что суммарное значение нейронов выходного слоя всегда равно единице. Для обучения сети было использовано 4600 конфигураций, принадлежащих чистым ферромагнитной, скирмионной, спин-спиральной и парамагнитной фазам. Важно отметить, что к скирмионному состоянию в данном случае были отнесены сферы, трубки, а также их комбинации.

Результаты классификации, проведенной по нескольким срезам фазовой диаграммы, представлены на рисунке 3.13. Как было показано ранее для двумерной системы, нейронная сеть, натренированная на исходных данных, полагается на полную намагниченность конфигурации. Из левой панели видно, что в данном случае наблюдаются значительные флуктуации в критических областях. Их амплитуда существенно усиливается при увеличении температуры. Кроме этого, в низких магнитных полях сеть ошибочно относит спиновые спирали к парамагнитной фазе. Предварительная сортировка профилей намагниченности позволяет справиться с этими проблемами (см. правую панель рисунка 3.13). Оставшиеся флуктуации в данном случае возникают в области параметров, соответствующей

смешанной фазе, отсутствующей в обучающем наборе. Полученные графики дают возможность с высокой точностью оценить ее границы. Параметры, при которых осуществляются переходы, находятся в хорошем согласии с теоретической фазовой диаграммой.

### 3.4 Сравнение с базовыми алгоритмами машинного обучения

В предыдущих разделах было показано, что простейшая нейронная сеть с одним скрытым слоем способна определять критические точки, а также переходные области на фазовой диаграмме исследуемой системы. Тем не менее, ввиду случайности начальных условий и большого числа настраиваемых параметров алгоритма, для ее обучения может потребоваться значительное время, а также соответствующие навыки. Однако конфигурации, принадлежащие чистым фазам, распадаются на категории при вычислении полной намагниченности или визуализации ее профиля. Следовательно, для проведения автоматической классификации в данном случае могут быть использованы существенно более простые алгоритмы.

В данном разделе приведено сравнение работы нейронной сети прямого распространения и некоторых базовых методов, используемых в задачах классификации данных. Для простоты большая часть результатов приведена для случая двумерной системы. Все использованные методы, за исключением нейронных сетей, были имплементированы средствами библиотеки `scikit-learn` [33].

#### 3.4.1 Методы ближайших соседей

В качестве простейших алгоритмов, не имеющих настраиваемых параметров и не требующих как таковой процедуры обучения, нами были рассмотрены методы ближайших центроид и  $k$ -NN. Тренировочный набор при этом остался неизменным и включал в себя 4000 конфигураций для системы с квадратной кристаллической решеткой. В качестве тестовых данных выступали 100 конфигураций со скирмионами большого размера, 300 высокотемпературных ( $T \in [0.18J$ ,

0.26J]) спиновых спиралей, а также по 880 конфигураций, принадлежащих ферромагнитной, скирмионной, спин-спиральной и парамагнитной фазам, стабилизированным на треугольной решетке.

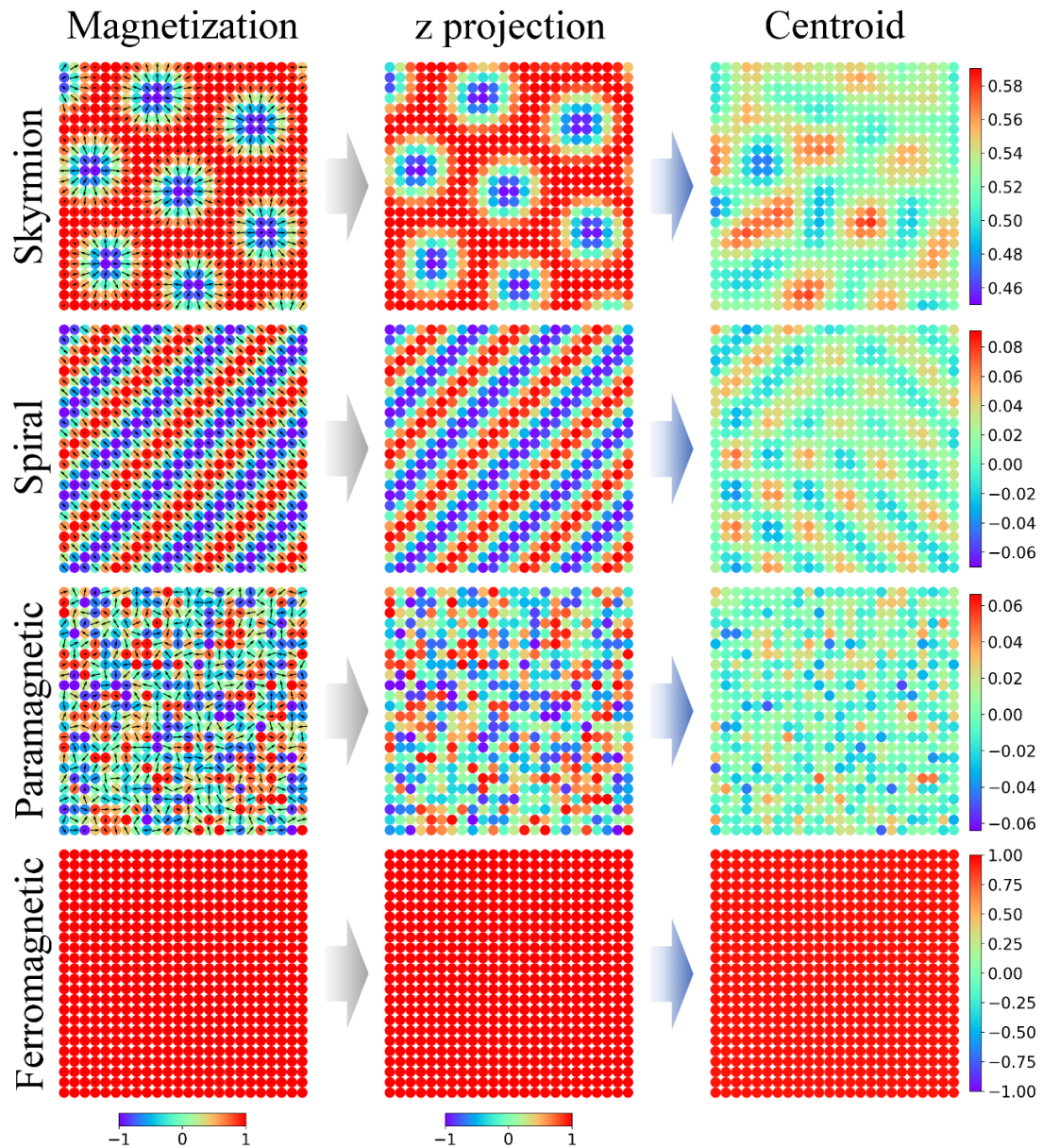


Рисунок 3.14 – Сравнение центроид различных чистых фаз. В левом столбце приведены примеры скирмионной, спиральной, парамагнитной и ферромагнитной конфигураций. Стрелками обозначены проекции спинов на плоскость  $xu$ . В центральном столбце для каждой конфигурации представлены только  $S^z$  компоненты. Правый столбец соответствует двумерной визуализации центроид, вычисленных на основе анализа 1000 представителей для каждой из представленных чистых фаз



На рисунке 3.14 схематично представлен алгоритм расчета центроид, а также их двумерная визуализация для каждой фазы из тренировочного набора. Как и ожидалось, интенсивности элементов соответствуют среднему значению спина конкретного атома по всем конфигурациям. Тем не менее, каждая центроида имеет отчетливый паттерн, различающийся от фазы к фазе. Это позволяет с высокой точностью разделять, к примеру, спиновые спирали и парамагнетик, несмотря на близость к нулю средней намагниченности в обоих случаях.

Таблица 3.1 – Сравнение точности классификации нейронной сети и методов ближайших соседей. Символами  $\square$  и  $\triangle$  обозначен тип кристаллической решетки (квадратная или треугольная)

Тестовый набор	Нейронная сеть (%)	Ближайшие центроиды (%)	$k$ -NN (%)
Большие скирмионы ( $\square$ )	94	100	0
Высокотемпературные спирали ( $\square$ )	75	78	9
Ферромагнетик ( $\triangle$ )	100	100	100
Спиновые спирали ( $\triangle$ )	40	54	25
Скирмионы ( $\triangle$ )	91	100	48
Парамагнетик ( $\triangle$ )	37	90	100

Сравнение результатов работы методов ближайших соседей с нейронной сетью, обученной ранее, приведены в таблице 3.1. Нами было установлено, что  $k = 3$  в данном случае позволяет получить наилучшую точность. Как нетрудно заметить, в подавляющем большинстве случаев лидирует классификатор на основе центроид. Метод  $k$ -NN со 100% точностью способен детектировать парамагнитную фазу, но при этом имеет практически нулевую предсказательную силу при анализе состояний, структура которых значительно отличается от тренировочной выборки. Несмотря на высокую точность в определенных ситуациях, данные алгоритмы присваивают каждой конкретной конфигурации метку в точности одного класса, представленного в обучающем наборе. Это означает, что детекти-

рование смешанных областей не представляется возможным. В случае нейросети неверно распознанными считались конфигурации, для которых хотя бы один дополнительный выходной нейрон имел значение, превышающее 0.15.

Низкая точность на конфигурациях, соответствующих спиновым спиральям, стабилизированным в системе с треугольной решеткой, объясняется существенным отличием их топологии. На рисунке 3.15 приведено сравнение их центроиды с центроидами обучающего набора. Как видно, в данном случае довольно сложно проследить некую структуру, в отличие от системы с квадратной решеткой. Кроме того, расстояние между центроидой для спиралей из тестового набора и центроидами спиралей и парамагнетика из тренировочного примерно совпадает и равно 1.7 и 1.8. Это объясняет тот факт, что большая их часть была распознана как парамагнитное состояние.

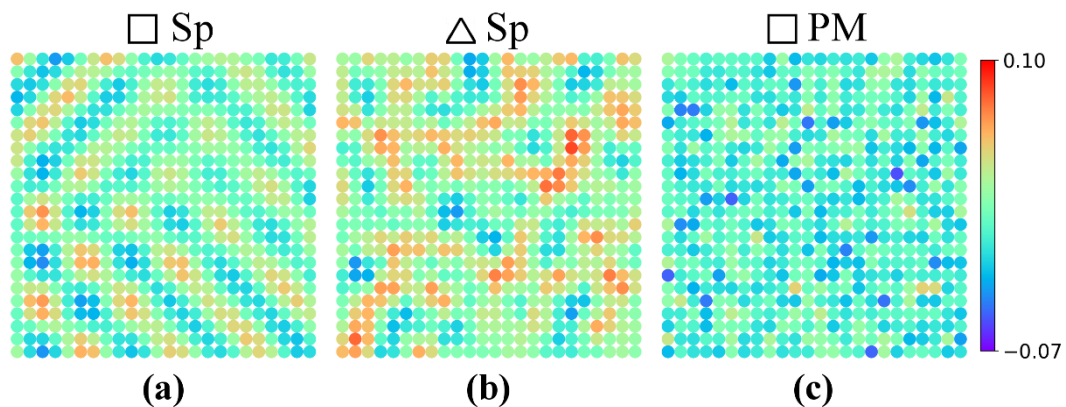


Рисунок 3.15 – Сравнение центроид, полученных для (b) тестовых спиральных конфигураций, стабилизированных на треугольной решетке и (a, c) тренировочных наборов, стабилизированный на квадратной решетке

Стоит отметить, что предварительная сортировка входного вектора намагниченности негативно отражается на результатах работы простейших методов, не имеющих настраиваемых параметров. Причина этого кроется в том, что в их основе лежит вычисление евклидова расстояния между конфигурациями. Оно, в свою очередь, чувствительно к упорядочению спинов.

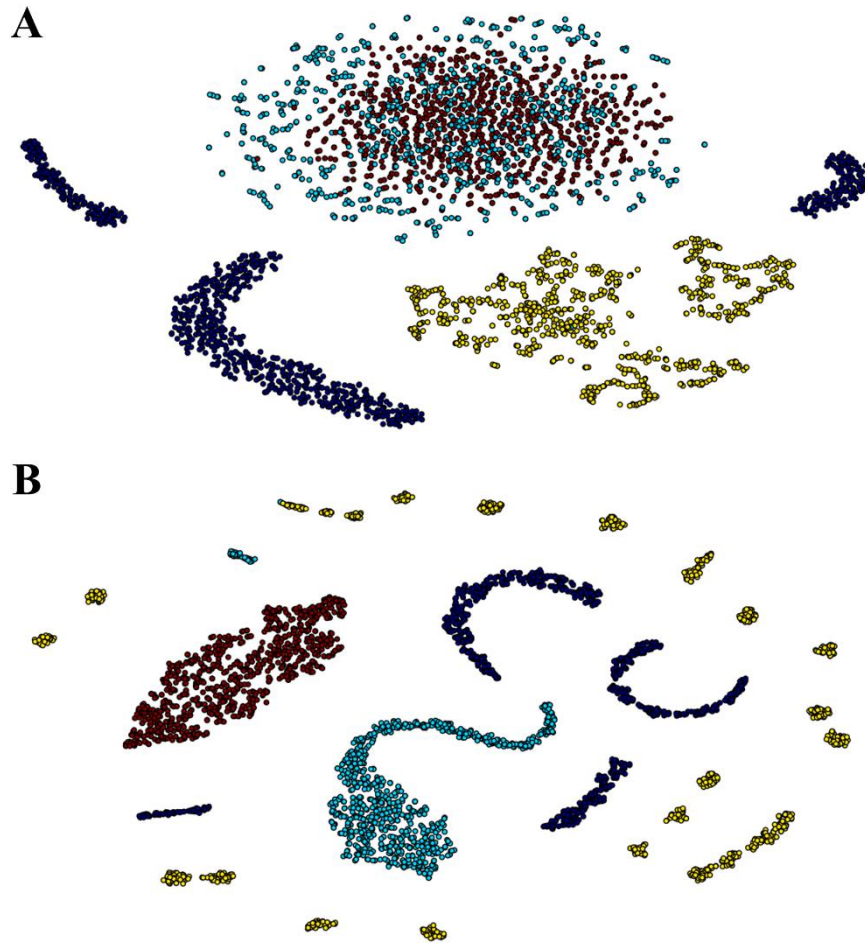


Рисунок 3.16 – Двумерная визуализация конфигураций из тестового набора, стабилизированного на треугольной решетке, при помощи алгоритма t-SNE для случаев исходного (А) и отсортированного (В) векторов намагниченности. Цветом представлены различные фазы

### 3.4.2 Низкоразмерная визуализация

Предыдущие работы, посвященные классификации магнитных фаз в двумерных системах [22, 23, 84, 89, 90, 106], показали, что алгоритмы снижения размерности, такие как PCA [93] и t-SNE [95], могут помочь в определении критических параметров фазовых переходов. В качестве объектов исследования были рассмотрены как простейшие модели Изинга и XY, так и их усложненные вариации.

Для того чтобы показать сложность задачи фазовой классификации модели Гейзенберга с взаимодействием Дзялошинского-Мории, исследуемой в рамках данной диссертационной работы, нами была проведена низкоразмерная визуализация конфигураций из тестового набора в случае треугольной кристаллической решетки. Для этого мы применили метод t-SNE, используя в качестве входных данных для каждого файла 50 главных компонент, предварительно отобранных при помощи алгоритма PCA. Как было показано ранее [95], данная комбинация позволяет существенно улучшить итоговый результат. На рисунке 3.16 приведено сравнение низкоразмерной визуализации при использовании в качестве входных данных исходных векторов намагниченности, а также их отсортированных версий. В первом случае наблюдается обширное перекрытие облаков, соответствующих парамагнитной и спин-спиральной фазам. С данной проблемой удастся справиться при помощи предварительной сортировки данных, однако в обоих случаях число кластеров, в которые группируются конфигурации, превышает число рассматриваемых фаз. Данный факт затрудняет использование метода t-SNE для генерации меток в наборе неизвестных данных.

### 3.4.3 Метод опорных векторов

В качестве одного из алгоритмов, на работу которых не оказывает влияние предварительная сортировка входных конфигураций, нами был рассмотрен метод SVM с радиальной базисной функцией в качестве ядра преобразования. Так как его эффективность слабо снижается с увеличением размерности данных, в качестве объекта анализа мы использовали трехмерную систему. Обучив алгоритм на тренировочном наборе, конфигурации в котором принадлежали чистым фазам, мы провели классификацию нескольких срезов фазовой диаграммы. Стоит отметить, что полученный результат, приведенный на рисунке 3.17, хорошо согласуется с работой нейронной сети (см. рисунок 3.13). Тем не менее, SVM, как и алгоритмы ближайших соседей, ставит каждой конфигурации в соответствие только

одну метку, что делает его использование в переходных областях нецелесообразным.

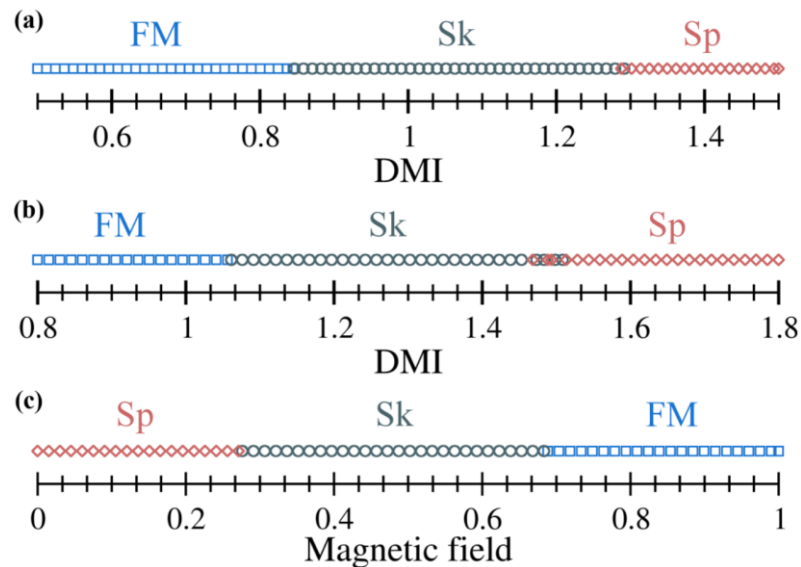


Рисунок 3.17 – Результаты фазовой классификации методом опорных векторов трехмерной системы, описываемой гамильтонианом (2.1), на основе профилей намагниченности. Все обозначения, а также параметры срезов аналогичны рисунку 3.13. Кругками, квадратами и ромбами представлены магнитные конфигурации, отнесенные к скирмионным, ферромагнитным и спин-спиральным фазам, соответственно

### 3.5 Выводы к главе

В данной главе было показано, что нейронная сеть с одним скрытым слоем, обученная на умеренном количестве конфигураций, принадлежащих чистым состояниям, может быть использована для количественного построения фазовых диаграмм двумерных и трехмерных систем, описываемых гамильтонианом с взаимодействиями Гейзенберга и Дзялошинского-Мории. Помимо детектирования критических точек, она также способна с высокой точностью определять переходные области и их состав как при низкой, так и при более высокой температуре. При этом предварительная сортировка профилей намагниченности, предложенная в предыдущей главе, значительно улучшает точность получаемых результатов и

позволяет избежать необходимости использования более сложных архитектур. Кроме этого, было установлено, что конфигурации, принадлежащие чистым фазам, при помощи базовых алгоритмов машинного обучения.

Результаты данной главы были опубликованы в работах [36] и [37] и уже послужили стимулом для дальнейших исследований в этой области [25–27].

## Глава 4. Алгоритм оценки структурной сложности для анализа фазовых переходов

### 4.1 Предпосылки к исследованию

Построение фазовых диаграмм различных систем является важной, но вместе с тем довольно сложной задачей. Даже когда параметр порядка известен, определение фазовой границы в пространстве параметров модели при помощи общепринятых методов может требовать серьезных вычислительных затрат. Так, к примеру, расчет спиновых структурных факторов трехмерной магнитной конфигурации занимает от нескольких часов до нескольких дней, в зависимости от размера системы. Ситуация еще более усложняется, если параметр порядка неизвестен или переход носит нетривиальный характер (например, в случае топологических фазовых переходов). Тем не менее, алгоритмам машинного обучения удалось добиться значительных успехов в задачах автоматического поиска фазовых границ [22, 23, 87–92, 99, 106]. Так как эти методы непосредственно работают с паттернами в имеющихся данных, это приводит к возникновению естественного вопроса: можно ли различать состояния системы, принадлежащие к разным фазам, путем анализа некоторого свойства этих паттернов. Из рисунка 4.1 видно, что

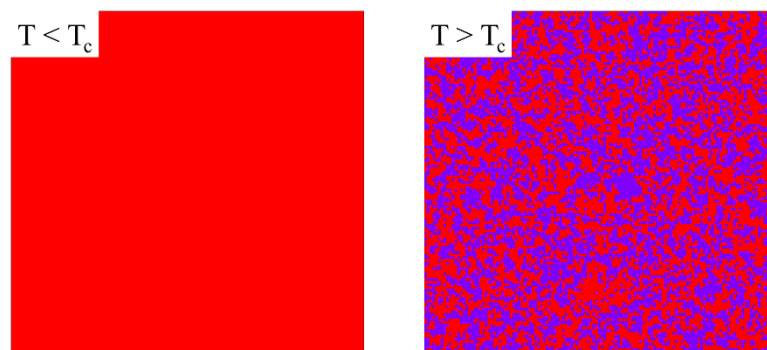


Рисунок 4.1 – Спиновые конфигурации, принадлежащие ферромагнитной ( $T < T_c$ ) и парамагнитной ( $T > T_c$ ) фазам, полученные в рамках модели Изинга. Цветом показаны  $S^z$  компоненты спинов

при ферромагнитном упорядочении изинговских спинов система находится в наиболее простом состоянии, в то время как при температуре выше критической в ней реализуются нетривиальные паттерны. Существенный интерес представляет разработка алгоритма учета структуры таких паттернов, который бы позволил однозначно сопоставить двум этим магнитным конфигурациям в соответствие некоторую числовую величину. Кроме того, так как при плавном изменении параметров системы (в данном случае температуры) магнитное упорядочение начинает перестраиваться, анализ поведения данной величины должен позволить определить точку фазового перехода. В качестве такой характеристики нами была предложена структурная сложность  $C$  – величина, которая оценивает разнообразие паттернов системы относительно пространственных масштабов.

Сложность является одним из наиболее фундаментальных свойств окружающего нас мира и ключевым объектом для многих естественных и социальных наук. В некоторых из них, к примеру в биологии, ее происхождение является одним из центральных вопросов [113–119]. Несмотря на многочисленные попытки дать формальное определение сложности [24, 116, 120–125], все еще не удалось достичь полного понимания ее природы. Одно из первых и наиболее знаменитых определений было дано в рамках теории информации Колмогоровым [126], связавшим сложность с минимальной длиной инструкции, необходимой для описания рассматриваемого объекта. Тем не менее, данная величина скорее характеризует степень случайности наблюдаемых паттернов, чем нетривиальность их структуры. Важно отметить, что для ее вычисления отсутствует некий универсальный алгоритм [116]. Другой подход был сформулирован Баком и соавторами [125, 127–129], которые ввели понятие самоорганизованной критичности как универсальную основу для описания сложности.

Хотя существует множество определений структурной (или эффективной) сложности [121, 130, 131], у большинства из них имеется общий недостаток: в каждом конкретном случае требуется субъективно решать, что является существенными структурными особенностями, а что простым шумом, которым следу-



ет пренебречь. Следовательно, не прекращаются попытки предложить более «независимый от наблюдателя» способ вычисления данной величины, который, с незначительными изменениями, можно будет применять в различных контекстах. Таким образом, можно сформулировать ряд требований, выдвигаемых к алгоритму вычисления структурной сложности:

- Должна накапливаться информация о различных масштабах, представленных в задаче.
- Строгая аналитическая формулировка, такая что для каждого класса объектов (паттернов, текстов, мелодий и др.) протокол вычисления сложности мог бы быть выполнен без необходимости делать субъективный выбор и принимать решения.
- В пределах одного класса объектов получаемые значения должны быть стабильны по отношению к незначительным изменениям структуры.
- Определяемая величина должна быть мала как для тривиально упорядоченных, так и для полностью неупорядоченных структур.

Многообещающий взгляд на эту проблему был сформулирован в работах [132] и [133], где для широкого разнообразия структур была дана четко определенная и вычислимая мера, основанная на отсутствии самоподобия (работа [134] также имеет аналогичный по духу подход). Было высказано предположение, что структура тем сложнее, чем больше она отличается от самой себя при рассмотрении в разных пространственных и временных масштабах.

В данной главе приведен алгоритм расчета структурной (эффективной) сложности рассматриваемых объектов, способный работать с различным представлением данных. С его помощью были проанализированы фазовые диаграммы двумерной и трехмерной моделей Изинга, а также двумерной модели Гейзенберга с взаимодействием Дзялошинского-Мории. Помимо этого, были рассмотрены особенности его работы с различным представлением данных на примере динамической магнитной системы. В заключительной части приведено сравнение точ-

ности предложенного алгоритма с другим известным методом, используемым для анализа фазовых переходов, в основе которого лежит компрессия.

## 4.2 Описание метода

Предлагаемый алгоритм количественной оценки структурной сложности системы основан на отслеживании неоднородности поведения паттернов, возникающих в ней на различных этапах перенормировки. Для демонстрации его работы можно рассмотреть магнитную конфигурацию размера  $L \times L$  спинов (см. рисунок 4.2). Позиция каждого атома задается пространственными индексами  $i$  и  $j$ , а его состояние, в общем случае, определяется вектором  $\mathbf{S}_{ij}$ . При этом значение данного вектора зависит от задачи. Так, в случае RGB изображения, он имеет три компоненты, соответствующие каждому цвету и масштабированные в диапазон  $[-1, 1]$ . Для магнитной системы, моменты в которой могут иметь любые ориентации в пространстве,  $\mathbf{S}_{ij}$  будет равен единичному вектору в направлении спина атома. В простейшем случае, когда мы имеем дело с изображением в черно-белом представлении или магнитной системой, проекции моментов в которой принимают ненулевые значения только для выделенной оси, состояние элемента матрицы будет описываться всего одним числом.

После перевода системы в подходящее численное представление происходит перенормировка исходного паттерна согласно определённому правилу. К примеру, может быть осуществлена свертка изображения с гауссовым фильтром или использована более специфическая схема, аналогичная определенной в работе [135] для полимеров. Очевидно, получаемое значение структурной сложности будет зависеть от конкретной реализации. Однако мы обнаружили, что простейшая дискретная схема уменьшения размера системы, основанная на усреднении, приводит к значимым и устойчивым результатам, поэтому все представленные в дальнейшем данные были получены с ее помощью. Аналогичный подход был применен в работах [136] и [137] для анализа масштабно-инвариантных свойств природных ландшафтов.

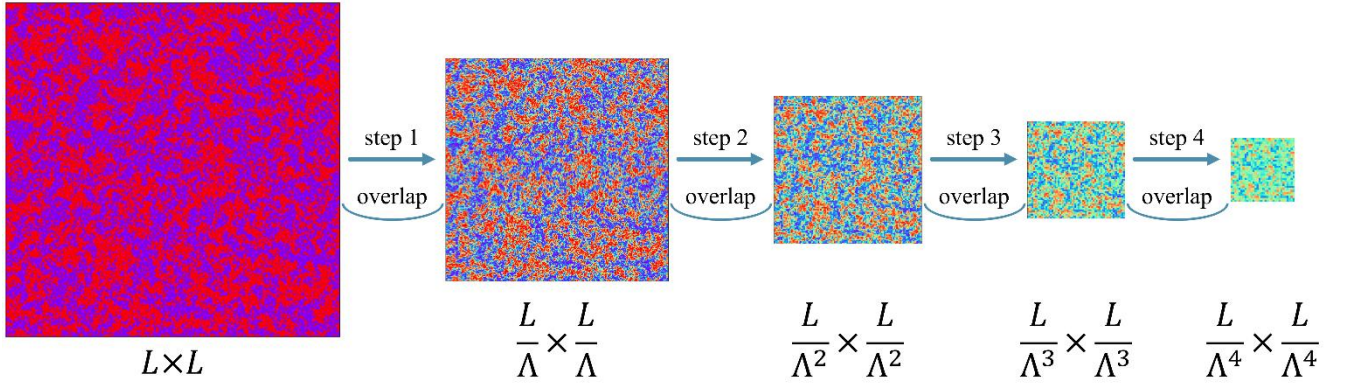


Рисунок 4.2 – Схематичное представление работы предложенного алгоритма. На рисунке приведены четыре шага перенормировки магнитной конфигурации размера  $L \times L$ , взятой из переходной области фазовой диаграммы в модели Изинга. При этом количество элементов матрицы на каждом шаге уменьшалось по осям в  $\Lambda$  раз. После чего происходит расчет перекрытий между паттернами на последовательных шагах процедуры перенормировки

На каждом шаге перенормировки решетка разбивается на блоки размера  $\Lambda \times \Lambda$ , после чего каждый блок заменяется одиночным элементом, значение которого вычисляется по формуле  $\mathbf{S}_{ij}(k) = 1/\Lambda^2 \sum_l \sum_m \mathbf{S}_{\Lambda i+m, \Lambda j+l}(k-1)$ , где индексы  $l$  и  $m$  нумеруют объекты в пределах блока, а  $k$  соответствует номеру итерации. Данная процедура выполняется несколько раз, что приводит к образованию набора матриц различной размерности. После чего появляется возможность вычисления перекрытий между паттернами на соседних шагах процедуры перенормировки. Для этого матрицы в каждой паре масштабируются до большей размерности, что позволяет сохранить число элементов. Схематически данный алгоритм приведен на рисунке 4.2. Для расчета перекрытий используется следующая формула:

$$O_{k,k-1} = \frac{1}{L_{k-1}^2} \sum_{i=1}^{L_k} \sum_{j=1}^{L_k} \mathbf{S}_{ij}(k) \cdot \sum_{m=1}^{\Lambda} \sum_{l=1}^{\Lambda} \mathbf{S}_{\Lambda i+m, \Lambda j+l}(k-1), \quad (4.1)$$

где  $k=0$  соответствует исходному изображению,  $L_k$  – размер матрицы на шаге  $k$ . Стоит отметить, что данный способ расчета не учитывает нормировку, а значит  $O_{k,k} \neq 1$ .

Определив структурную сложность  $C$  как интегральную величину по вкладам от различных пространственных масштабов, мы получили:

$$C = \sum_{k=0}^{N-1} C_k = \sum_{k=0}^{N-1} \left| O_{k+1,k} - \frac{1}{2}(O_{k,k} + O_{k+1,k+1}) \right|, \quad (4.2)$$

где  $N$  – полное число шагов перенормировки.

Так как в этой работе применяется подход, основанный на усреднении, в данном конкретном случае видно, что, используя выражение (4.1) и определение значения элемента на следующем шаге перенормировки, можно получить  $O_{k,k-1} = O_{k,k}$ . Тогда общая формула (4.2) заменяется более простой версией:

$$C = \sum_{k=0}^{N-1} C_k = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{N-1} |O_{k+1,k+1} - O_{k,k}|. \quad (4.3)$$

Ввиду того, что в данной записи отсутствует перекрытие между паттернами на различных шагах перенормировки  $O_{k+1,k}$ , пропадает необходимость учета изменения размера системы. Это, в свою очередь, приводит к значительному ускорению вычислений и повышению стабильности алгоритма. Однако стоит помнить, что в общем случае произвольной операции перенормировки данная формула не применима.

### 4.3 Тестирование методики на естественных паттернах

Для того чтобы оценить, отражает ли получаемая величина интуитивное представление о сложности объекта, нами было проведено предварительное тестирование на фотографиях, содержащих природные ландшафты и стены. Первая категория соответствует случаю анализа изображений произвольного характера, а вторая является примером более однородных текстур. Все использованные фотографии имели разрешение  $4096 \times 4096$ , что позволило получить до 10 шагов перенормировки с ненулевыми вкладами от перекрытий.

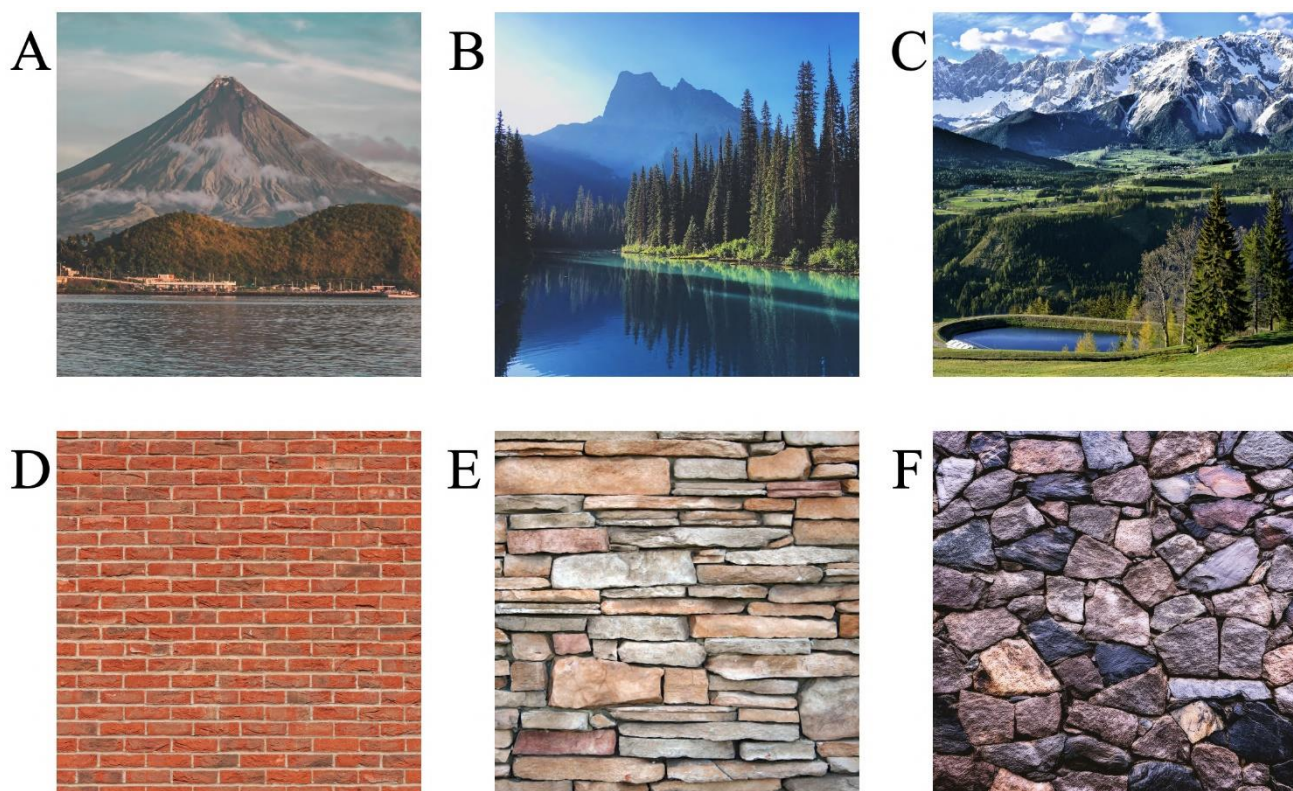


Рисунок 4.3 – Примеры естественных (А-С) и рукотворных (D-F) объектов, используемых для тестирования методики расчета структурной сложности. Изображения в разрешении  $4096 \times 4096$  пикселей были взяты с сайта <https://www.pexels.com>. Соответствующие значения структурной сложности равны (А)  $C = 0.078$ , (В)  $C = 0.136$ , (С)  $C = 0.273$ , (D)  $C = 0.108$ , (E)  $C = 0.277$  и (F)  $C = 0.498$ . Расчеты проводились при  $N = 10$ ,  $\Lambda = 2$

В случае природных ландшафтов все фотографии содержали леса, горы и водоемы. Как видно из рисунка 4.3, по мере увеличения числа деталей и сложности представленных геометрических форм росло и получаемое значение  $C$ . В свою очередь, очевидно, что постройка стены с использованием камней различной формы и размера является более трудоемкой задачей, чем ее возведение из стандартных кирпичей. Данное интуитивное представление также согласуется с результатами расчета структурной сложности.

## 4.4 Анализ фазовых диаграмм магнитных систем

### 4.4.1 Модель Изинга

Для проверки того, может ли вычисление структурной сложности использоваться для детектирования фазовых переходов в магнитных системах, нами была рассмотрена модель Изинга с ферромагнитным взаимодействием, определенная на квадратной (2D) и кубической (3D) решетках:

$$H = -J \sum_{i < j} S_i^z \cdot S_j^z, \quad J > 0. \quad (4.4)$$

Для простоты взаимодействие учитывалось только между ближайшими соседями. В данной модели представлен переход ферромагнетик-парамагнетик, критическая температура которого известна с высокой точностью, что делает ее идеальной для тестирования различных методик [22, 42].

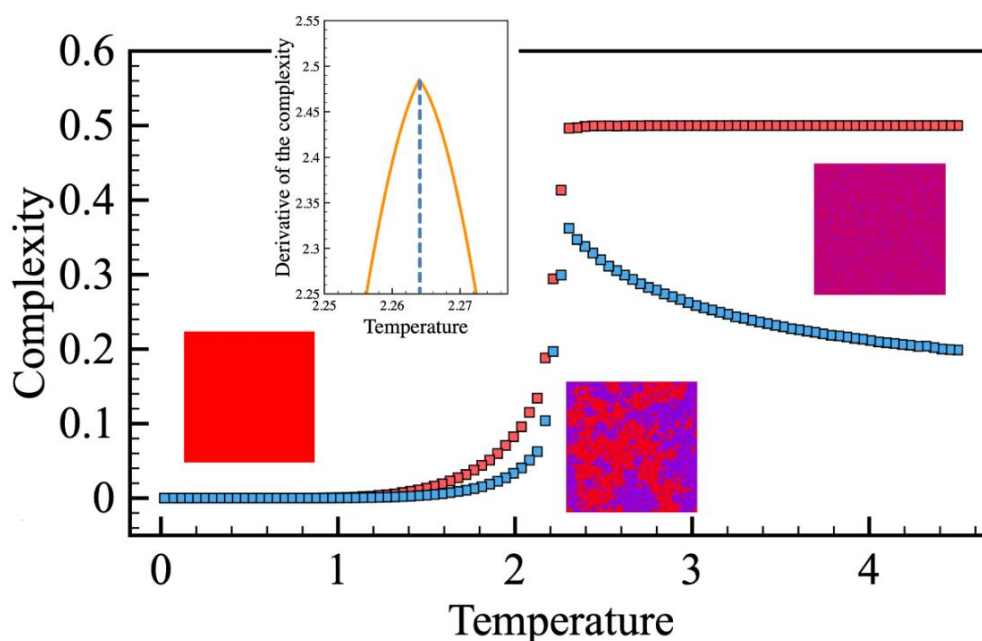


Рисунок 4.4 – Температурная зависимость сложности в двумерной модели Изинга. Красными и синими квадратами обозначены случаи  $k \geq 0$  и  $k \geq 1$ , соответственно. На вставке изображено поведение первой производной  $dC/dT$ , максимум которой позволяет определить критическую температуру. Расчеты проводились при  $N = 8, \Lambda = 2$

лись при  $N = 8, \Lambda = 2$

В двумерном случае Монте-Карло симуляции проводились для решеток размера  $1024 \times 1024$  в диапазоне температур  $0 < T/J < 4.5$  с шагом  $\Delta T = 0.045J$ . Это позволило проанализировать все ненулевые вклады в сложность от разных масштабов. Результаты для трехмерной системы были получены для решеток размера  $256 \times 256 \times 256$  в диапазоне температур  $2.5 < T/J < 6.5$  с аналогичным шагом. При этом использовался минимально возможный размер фильтра перенормировки  $2 \times 2 \times 2$ .

Зависимость структурной сложности от температуры для рассмотренных систем приведена на рисунках 4.4 и 4.5. В качестве первого существенного достоинства  $C$  можно выделить высокую стабильность результатов. Так, для каждой температуры были сгенерированы пять независимых Монте-Карло реализаций системы, погрешность значений структурной сложности по которым составила в среднем около 0.01% (за исключением критической области). Это позволило не добавлять на графики планки погрешности, так как соответствующие диапазоны отклонения меньше размера символов.

Кроме этого, можно заметить, что производная структурной сложности по температуре  $dC/dT$  имеет четкий максимум в точке перехода  $T = T_c$ . Для двумерной системы такой подход дает  $T_c/J \approx 2.26$ , что отлично согласуется с известным аналитическим значением  $T_c/J = 2/\ln(1 + \sqrt{2}) \approx 2.269$  [41]. В случае кубической решетки мы получили  $T_c \approx 4.5J$ , что близко к результатам вычисления, на основе высокотемпературного разложения  $T_c \approx 4.5103J$  [138] и анализа поведения теплоемкости в Монте-Карло симуляциях  $T_c \approx 4.5J$  [139]. Приведенные значения  $T_c$  были получены на основе дополнительных Монте-Карло симуляций вблизи температуры Кюри с шагом  $\Delta T = 0.001J$ . Следует отметить, что при постепенном охлаждении системы большого размера могут формироваться доменные структуры, что также можно отследить путем анализа зависимости структурной сложности (см. рисунок 4.5).

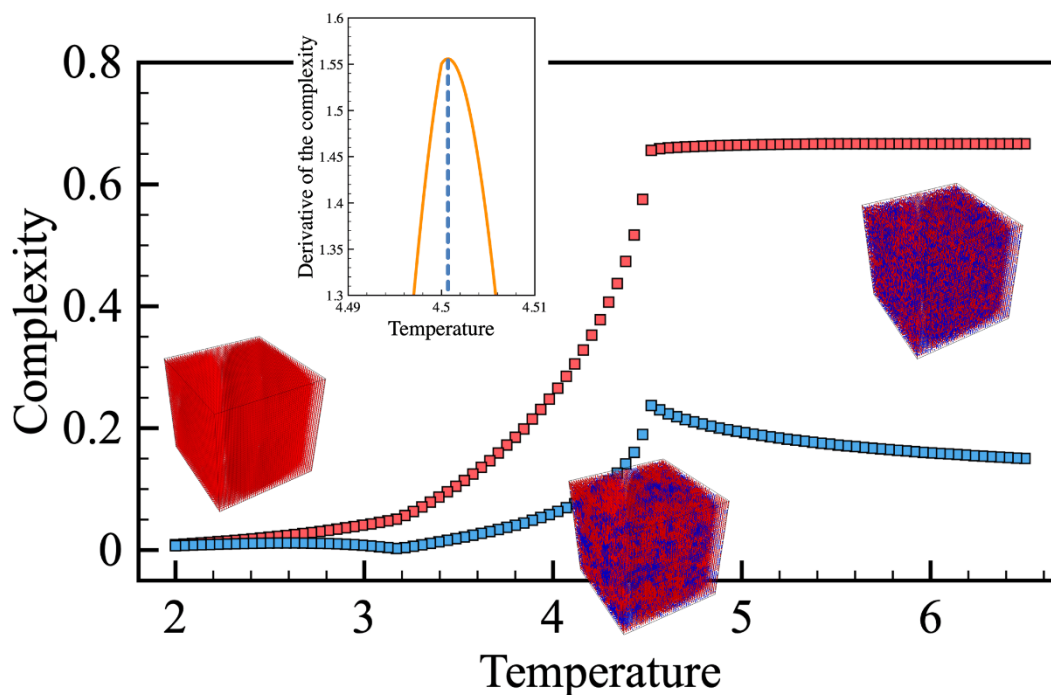


Рисунок 4.5 – Температурная зависимость сложности в трехмерной модели Изинга. Красными и синими квадратами обозначены случаи  $k \geq 0$  и  $k \geq 1$ , соответственно. Особенность при  $T \approx 3.2J$  отражает образование доменов в ферромагнитной фазе, возникающих при моделировании решеток большого размера методом Монте-Карло. На вставке изображено поведение первой производной  $dC/dT$ , максимум которой позволяет определить критическую температуру. Расчеты проводились при  $N = 6$ ,  $\Lambda = 2$

Одной из особенностей поведения  $C(T)$  является ее выход на насыщение в парамагнитной фазе. Данный факт выбивается из исходной формулировки структурной сложности, так как магнитные паттерны при  $T > T_c$  визуально выглядят более случайными и менее структурированными, чем в критической области. Тем не менее, необходимо учитывать два ключевых момента. Во-первых, если пренебречь вкладом самого микроскопического масштаба, едва различимого визуально ( $C_0$ ), итоговая величина начнет убывать с ростом температуры. Этот факт говорит в пользу предлагаемого определения, так как естественно ожидать зависимости структурной сложности от разрешающей способности наблюдателя (будь то человек, датчик, нейронная сеть и т. д.). Во-вторых, как будет рассмотрено далее,



еще одним уникальным свойством структуры, помимо итоговой величины  $C$ , является распределение сложности по различным масштабам. В случае парамагнетика основной вклад приходит от  $k = 0$ , в то время как для менее тривиальных структур наблюдаются существенные вклады при разных  $k$ .

#### 4.4.2 Модель Гейзенберга с анизотропным взаимодействием Дзялошинского-Мории

В качестве примера системы с более сложным характером фазовых переходов была выбрана модель Гейзенберга с взаимодействием Дзялошинского-Мории, исследование которой проводилось в предыдущих главах. Спиновый гамильтониан был определен на квадратной кристаллической решетке размера  $1024 \times 1024$  для случая связей только между ближайшими соседями.

$$H = - \sum_{i < j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_{i < j} \mathbf{D}_{ij} \cdot [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j] - \sum_i B S_i^z. \quad (4.5)$$

Был рассмотрен срез фазовой диаграммы, полученный при параметрах модели,  $J = |\mathbf{D}| = 1$  и температуре  $T = 0.02$ . В качестве переменного параметра выступало внешнее магнитное поле, определенное в диапазоне  $0 < B < 1$  с шагом  $\Delta B = 0.01$ . Полученная зависимость  $C(B)$  приведена на рисунке 4.6. Как и ранее, погрешность структурной сложности конфигураций, полученных при одинаковых параметрах, лежит в пределах 0.01%, что хорошо видно для случая спиновых спиралей лабиринтного типа (см. рисунок 4.7). В свою очередь, экстремумы функции  $dC/dB$  соответствуют переходным областям: скирмион-бимеронной фазе и скирмионному газу.

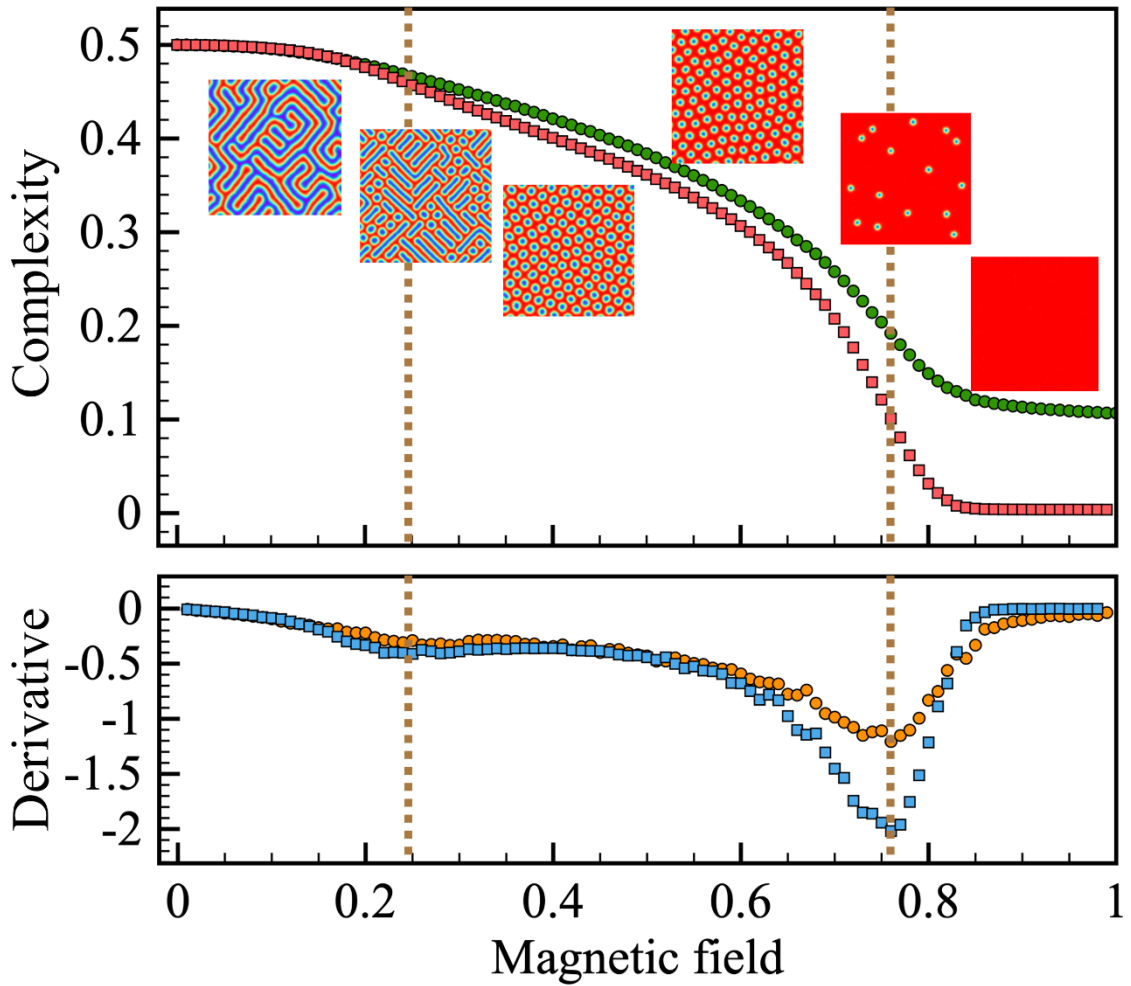


Рисунок 4.6 – (Верхняя панель) Зависимость структурной сложности от магнитного поля в системе с квадратной кристаллической решеткой, описываемой гамильтонианом (4.5), при параметрах  $J = |D| = 1$ . (Нижняя панель) Первая производная  $dC/dB$ , используемая для детектирования фазовых переходов. Кругами и квадратами обозначены результаты, полученные при  $T = 0.02$  и  $T = 0.4$ , соответственно. Расчеты проводились при  $N = 8$ ,  $\Lambda = 2$ ,  $k \geq 0$

Еще одним достоинством структурной сложности можно выделить слабую чувствительность поведения кривой  $C(B)$  к температуре, при которой проводились расчеты. Так, при  $T = 0.4$  происходит лишь увеличение данной величины для ферромагнитных конфигураций, что обусловлено приближением к фазовому переходу ферромагнетик-парамагнетик. Данный факт свидетельствует о применимости подхода в области параметров, когда стандартные алгоритмы, такие как расчет спиновых структурных факторов, уже не дают точных результатов. Кроме

того, в отличие от алгоритмов машинного обучения, чья эффективность была показана в предыдущей главе, расчет структурной сложности не требует наличия большого числа тренировочных конфигураций, а также не имеет настраиваемых параметров.

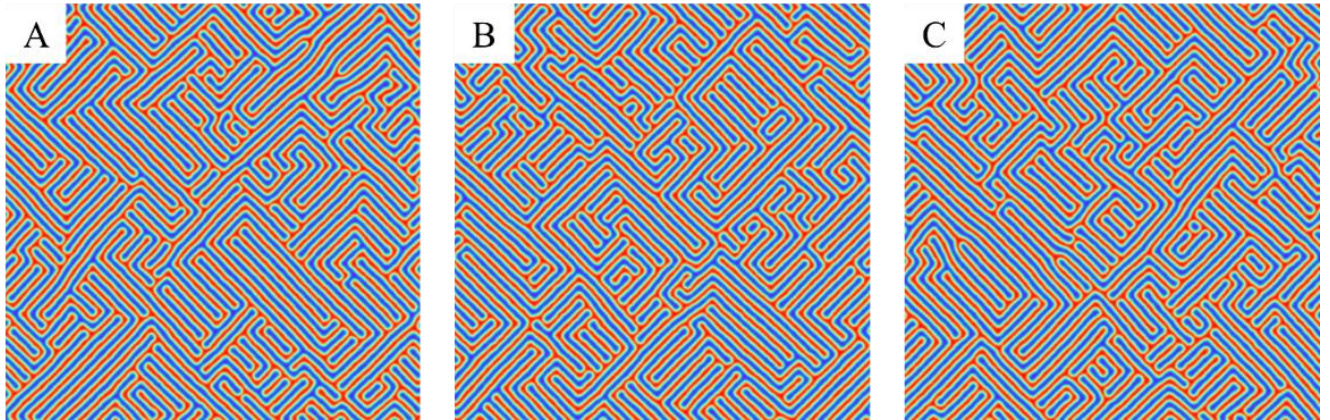


Рисунок 4.7 – Пример конфигураций, принадлежащих фазе спиновых спиралей, стабилизированных при параметрах  $J = |D| = 1$ ,  $B = 0.05$  и  $T = 0.02$ . Хотя каждая отдельная структура уникальна, получаемые значения структурной сложности практически совпадают и равны (A)  $C = 0.499211$ , (B)  $C = 0.499183$  и (C)  $C = 0.499181$ . Расчеты проводились при  $N = 8$ ,  $\Lambda = 2$ ,  $k \geq 0$

Примечательно, что зависимости  $C(B)$  имеют аналогичный вид и в случае конфигураций, стабилизированных в системе с треугольной кристаллической решеткой (см. рисунок 4.8). Это говорит о том, что алгоритм улавливает именно паттерны, а не их ориентацию в пространстве. Кроме этого, было установлено, что для определения фазовых переходов достаточно данных только о проекциях спина на ось  $z$ . При этом учет неполной информации выражается в изменении модуля структурной сложности и обнулении значений для ферромагнитного состояния при более высокой температуре. Последнее связано с тем, что отличия между спинами в данном случае наблюдаются только на уровне их  $x$  и  $y$  проекций.

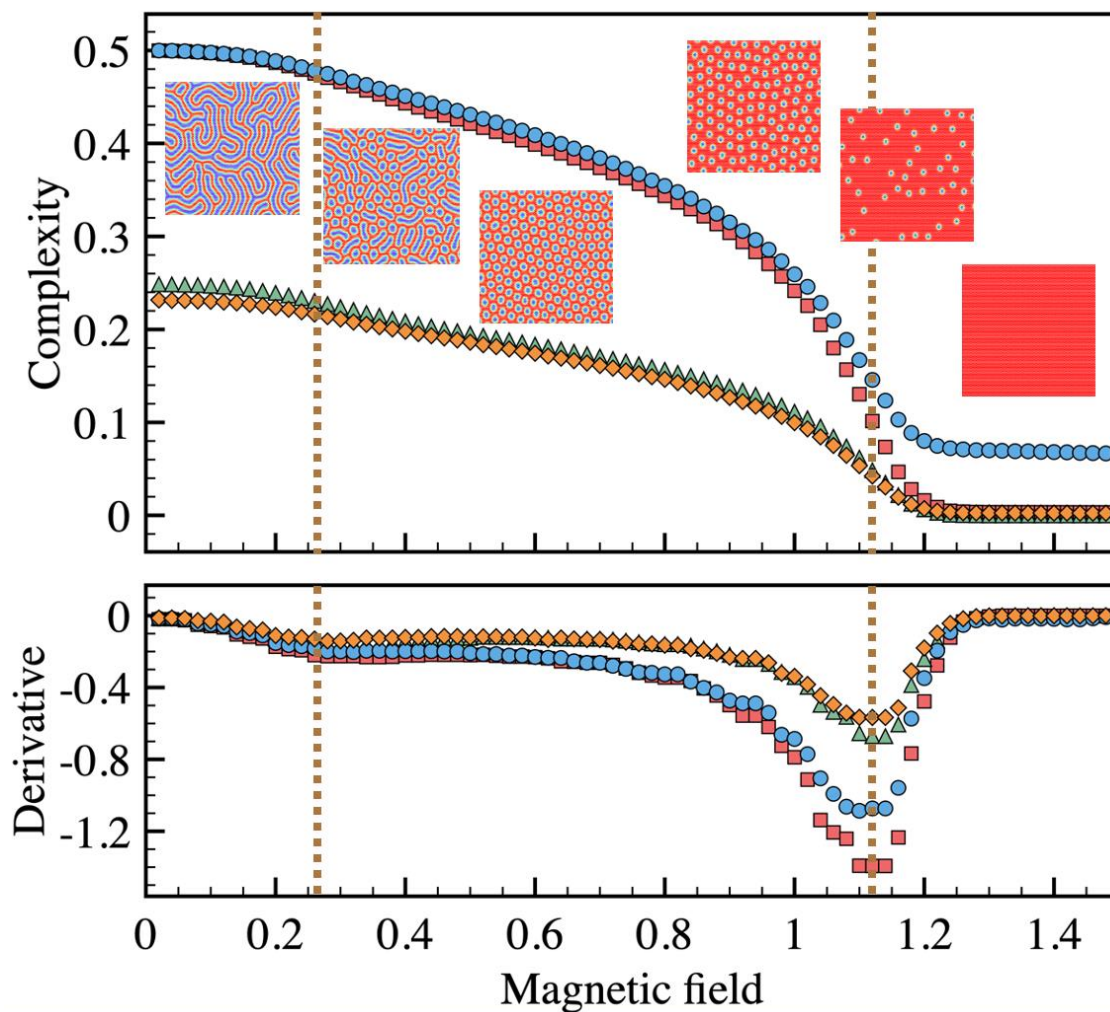


Рисунок 4.8 – (Верхняя панель) Зависимость структурной сложности от магнитного поля в системе с треугольной кристаллической решеткой, описываемой гамильтонианом (4.5), при параметрах  $J = |\mathbf{D}| = 1$ . (Нижняя панель) Первая производная  $dC/dB$ , используемая для детектирования фазовых переходов. Кругами и квадратами обозначены результаты, полученные при  $T = 0.02$  и  $T = 0.4$  с использованием всех проекций спинов, в то время как треугольники и ромбы соответствуют значениям  $C$ , определенным на основе  $S^z$ . Расчеты проводились при  $N =$

$$8, \Lambda = 2, k \geq 0$$

### 4.4.3 Анализ парциальных вкладов в сложность

Как уже упоминалось ранее, итоговое значение структурной сложности  $C$  не является единственной доступной информацией о системе. Важно также проводить анализ вкладов с различных пространственных масштабов в эту величину. На рисунке 4.9 приведены графики распределений  $C_k(k)$  для четырех магнитных конфигураций, принадлежащих спин-спиральной, скирмионной и парамагнитной фазам, а также точке перехода ферромагнетик-парамагнетик. Две последние были получены в рамках модели Изинга. Можно заметить, что спирали и скирмионы характеризуются наличием существенных вкладов от нескольких масштабов, близких к размерам представленных в системе магнитных конфигураций. В это же время структурная сложность парамагнетика обусловлена резкими изменениями при размытии исходного паттерна. В наиболее интересном случае, соответствующем фазовому переходу,  $C_k$  распределены более равномерно по всем представленным масштабам.

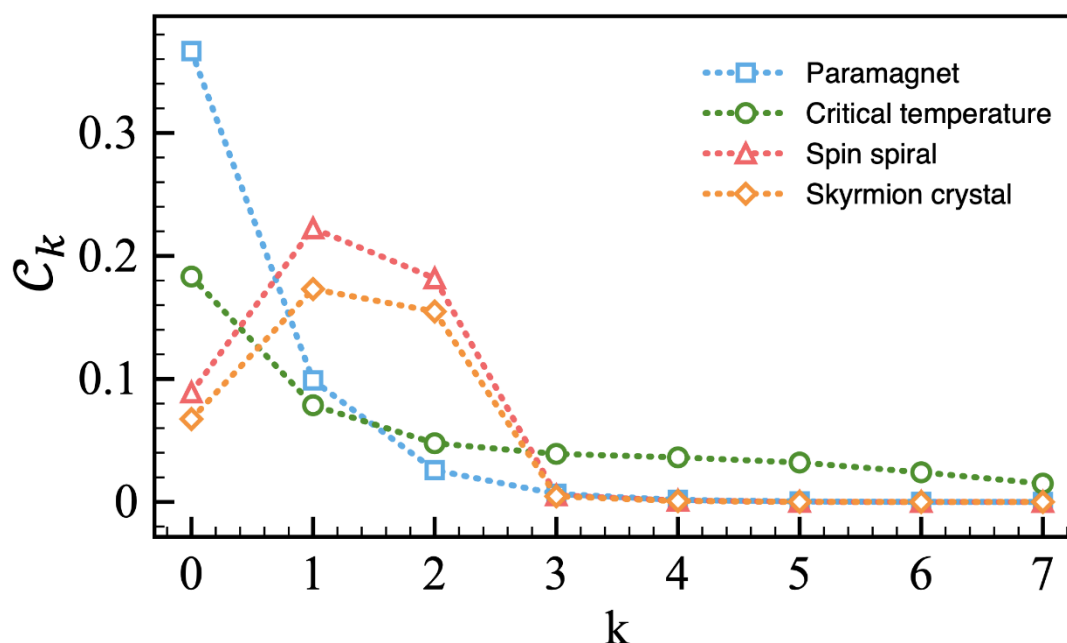


Рисунок 4.9 – Распределения вкладов в структурную сложность от разных масштабов для четырех типов магнитных структур. Расчеты проводились при  $\Lambda = 2$

## 4.5 Анализ динамических процессов

На следующем этапе нами была изучена эволюция структурной сложности магнитной системы во времени в ходе моделирования ее спиновой динамики. В качестве примера были рассмотрены процессы, происходящие с единичным изолированным скирмионом под действием ультракоротких импульсов магнитного поля [58]. Для симуляций был использован спиновый гамильтониан следующего вида, определенный на квадратной решетке размера  $128 \times 128$  с периодическими граничными условиями:

$$H = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_{i \neq j} \mathbf{D}_{ij} \cdot [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j] - K \sum_i (S_i^z)^2, \quad (4.6)$$

где  $K$  – величина одноузельной анизотропии вдоль оси  $z$ . Вектор Дзялошинского-Мории направлен вдоль связей. Взаимодействие учитывалось только между ближайшими соседями, при этом каждая пара вошла в гамильтониан два раза. В ходе работы были использованы следующие параметры:  $J = 0.5$  мэВ,  $|\mathbf{D}| = 0.12$  мэВ и  $K = 0.1$  мэВ, адаптированные из статьи [58].

Моделирование спиновой динамики путем решения уравнения Ландау-Лившица-Гильберта (1.6) выполнялось в программном пакете Uppsala Atomistic Spin Dynamics (UppASD) [34]. Параметр затухания был выбран равным  $\alpha = 0.36$ . Одиночный импульс магнитного поля, инициализирующий динамические процессы в системе, имел форму функции Гаусса [58]:

$$\mathbf{B}_p(t) = B_0 \exp\left(-\frac{(t - t_p)^2}{2t_w^2}\right) \mathbf{e}_B, \quad (4.7)$$

где  $B_0$  – амплитуда магнитного поля,  $t_w$  – ширина импульса, а  $t_p$  – позиция его максимума во времени. Пространственная ориентация задается единичным вектором  $\mathbf{e}_B$ , определяемым полярным и азимутальным углами  $\theta$  и  $\varphi$ . В расчетах мы фиксировали  $B_0 = 2$  Тл,  $t_p = 40$  пс,  $\theta = 40^\circ$  и  $\varphi = 0^\circ$ . Шаг по времени был выбран равным  $\Delta t = 1$  пс. Подробная фазовая диаграмма процессов, реализуемых в такой системе, приведена в одной из наших недавних работ [98].

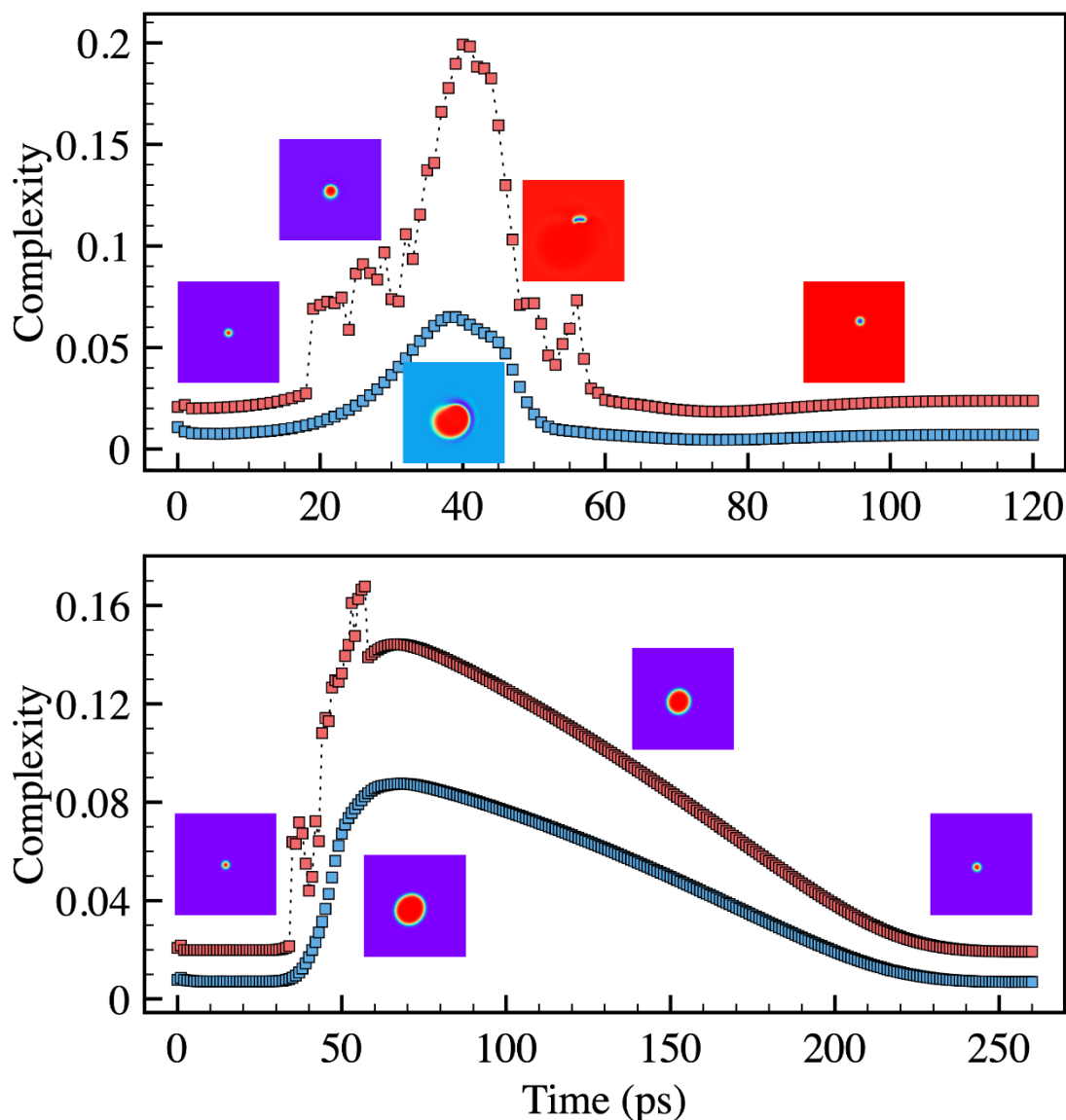


Рисунок 4.10 – Эволюция структурной сложности для процессов «переключения» (верхняя панель) и «дыхания» (нижняя панель) скирмиона. Ширина импульса равнялась  $t_w = 28$  пс и  $t_w = 8$  пс, соответственно. Синими квадратами обозначена  $C$ , рассчитанная для массивов  $128 \times 128$ , содержащих  $z$  компоненты спинов, а красными – для изображений текущего состояния в разрешении  $2048 \times 2048$  с цветовой схемой rainbow. Расчеты проводились при  $N = 6$ ,  $\Lambda = 2$ ,  $k \geq 0$

Нами было проведено моделирование, так называемых, процессов «дыхания» и «переключения» скирмиона. Первый из них характеризуется увеличением размеров данной вихревой структуры с последующей их релаксацией до исходных после выключения импульса магнитного поля. Вторым, в свою очередь, явля-

ется процессом переворота скирмиона, и сопровождается изменением  $S^z$  компонент спинов атомов окружения на противоположные. Очевидно, что «переключение» вызывается импульсом большей длительности, чем «дыхание». Зависимости структурной сложности системы от времени были посчитаны для двух случаев представления данных: матриц  $128 \times 128$ , содержащих  $z$  компоненты спинов магнитных атомов, а также изображений, представляющих собой визуализацию текущих состояний, в разрешении  $2048 \times 2048$ . Как видно из рисунка 4.10, максимум  $C$  соответствует наиболее возмущенным состояниям скирмиона для обоих процессов. Несмотря на то, что в случае изображений возникают шумы, связанные с искусственным повышением разрешения и выбранной цветовой схемой, получаемые графики  $C(t)$  довольно хорошо отражают поведение кривых, рассчитанных для исходных спиновых конфигураций. Это говорит об универсальности предложенного подхода по вычислению структурной сложности по отношению к формату имеющихся данных. Так, для анализа системы достаточно использовать визуальные данные (изображения, полученные при помощи, различных типов микроскопии, дифракционные паттерны и др.).

#### 4.6 Сравнение с подходами, основанными на компрессии данных

В последние несколько лет был предложен ряд подходов для детектирования фазовых переходов неизвестной природы как в равновесных, так и в неравновесных системах, использующих компрессию данных [140–145]. Идея, лежащая у них в основе, довольно проста: чем сильнее упорядочено состояние системы, тем короче инструкция, необходимая для его восстановления, и тем меньше отношение размеров сжатого и исходного текстовых файлов, содержащих это состояние. Степень сжатия в данном контексте может выступать как альтернативный метод оценки сложности, следовательно, интересно будет провести его сравнение с предложенным нами алгоритмом. Для этого были рассмотрены два частных примера: переход ферромагнетик-парамагнетик в двумерной модели Изинга и процесс переворота скирмиона под действием импульса магнитного поля. Степень



сжатия вычислялась с использованием стандартного zip архиватора. При этом файлы с состояниями системы содержали по одной непрерывной строке символов, в соответствии с рекомендациями, приведенными в работе [140].

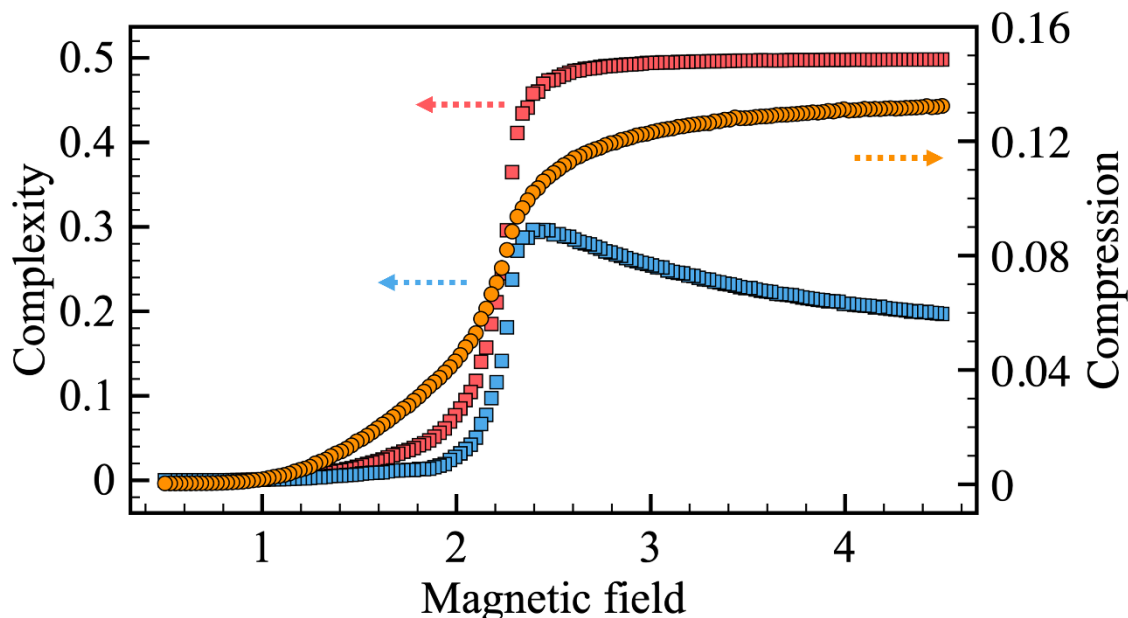


Рисунок 4.11 – Сравнение температурных зависимостей структурной сложности и степени сжатия для двумерной модели Изинга. Красными и синими квадратами обозначены  $C$  для случаев  $k \geq 0$  и  $k \geq 1$ , соответственно. Коэффициент сжатия представлен оранжевыми кругами. Расчеты проводились при  $N = 8$ ,  $\Lambda = 2$

Из рисунка 4.11 видно, что оба подхода позволяют с высокой точностью определить критическую температуру перехода в модели Изинга. В то же время зависимость степени сжатия файлов для динамического процесса не отражает реального поведения системы (см. рисунок 4.12). Это связано с тем, что в первом случае спины имеют только два значения и могут быть представлены как «0» и «1», что не приводит к возникновению численных артефактов. В свою очередь, при моделировании спиновой динамики проекции моментов на оси принимают вещественные значения в диапазоне  $[-1, 1]$ , а значит в итоговом файле две близких ориентации вектора будут иметь разную запись (к примеру,  $S^z = 0.593$  и  $S^z = 0.612$ ), что приводит к невозможности их компактного сжатия.

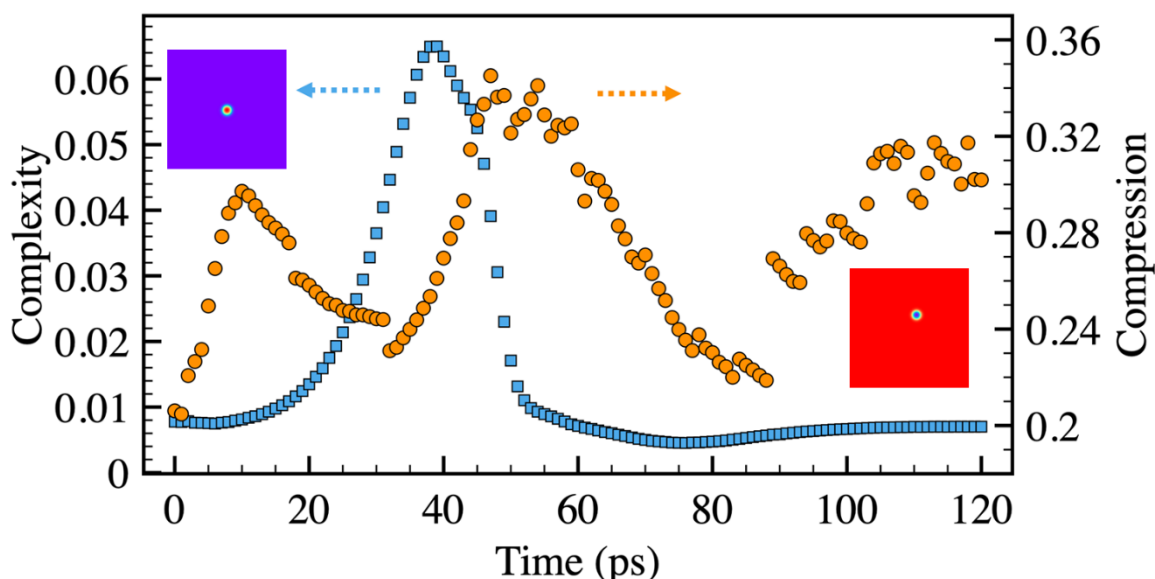


Рисунок 4.12 – Сравнение температурных зависимостей структурной сложности и степени сжатия для процесса «переключения» скирмиона. Синими квадратами обозначена  $C$ , рассчитанная для массивов  $128 \times 128$ , содержащих  $z$  компоненты спинов. Коэффициент сжатия представлен оранжевыми кругами. Расчеты проводились при  $N = 6$ ,  $\Lambda = 2$ ,  $k \geq 0$

Еще одной характерной особенностью предложенного нами алгоритма является возможность отслеживать вклады  $C_k$  в структурную сложность, пришедшие с разных масштабов. Подходы, основанные на компрессии, оперируют лишь итоговой величиной степени сжатия и не позволяют получить более детальный взгляд на проблему.

#### 4.7 Выводы к главе

В данной главе был описан алгоритм, позволяющий количественно оценить структурную сложность системы на основе информации о паттернах, реализуемых в ней на разных масштабах. Было показано, что помимо соответствия нашему интуитивному представлению о «простом» и «сложном», он позволяет с высокой точностью определять фазовые переходы различной природы, встречающиеся в магнитных системах. Так, были оценены критические температуры в двумерной

и трехмерной моделях Изинга, а также успешно детектированы переходные области фазовой диаграммы модели Гейзенберга с взаимодействием Дзялошинского-Мории. Примечательно, что характер получаемой зависимости в последнем случае практически не зависит от температуры системы и объема предоставляемой информации о проекциях отдельных спинов. Кроме этого, на примере динамики одиночного скирмиона под действием импульса магнитного поля, была продемонстрирована возможность использования в качестве входных данных изображений. Это открывает перспективы применения нашего метода для анализа экспериментальных данных, полученных, к примеру, при помощи различных типов микроскопии. В заключительной части были продемонстрированы преимущества предложенного подхода по отношению к алгоритмам, используемым ранее для анализа фазовых переходов неизвестной природы.

Предложенный алгоритм был в дальнейшем адаптирован для анализа квантовых систем [28]. Кроме этого, в настоящее время ведется активная работа над расширением области его применимости. Стоит также отметить, что методика, основанная на анализе структурной сложности, получила широкий отклик в научном сообществе и уже используется для определения фазовых переходов как в классических [31], так и в квантовых [29, 30] системах различной природы.

Результаты данной главы были опубликованы в работах [38] и [39].

## Заключение

### Основные результаты и выводы диссертации

1) При помощи метода Монте-Карло были построены и детально проанализированы низкотемпературные фазовые диаграммы двумерной и трехмерной ферромагнитных систем, описываемых гамильтонианом с взаимодействиями Гейзенберга и Дзялошинского-Мории. Определены диапазоны параметров, при которых реализуются смешанные состояния скирмионов и спиновых спиралей, что должно облегчить дальнейшие экспериментальные и теоретические исследования в данной области фазовой диаграммы. Было установлено, что конфигурации, принадлежащие чистым фазам, могут быть легко идентифицированы путем визуализации их отсортированных профилей намагниченности. Продемонстрирована универсальность данного подхода по отношению к размерности системы и геометрии расположения магнитных центров. Кроме этого, было показано, что возможность однозначного разделения фазовых состояний не зависит от ориентации внешнего магнитного поля и имеющихся в наличии проекций спина.

2) Было показано, что нейронная сеть с одним скрытым слоем, обученная на небольшом количестве конфигураций, принадлежащих чистым состояниям, может быть использована для количественного построения фазовых диаграмм двумерных и трехмерных систем, описываемых гамильтонианом с взаимодействиями Гейзенберга и Дзялошинского-Мории. Помимо детектирования критических точек фазовых переходов, она также способна с высокой точностью определять переходные области и их состав как при низкой, так и при высокой температуре. Было установлено, что предложенная предварительная сортировка профилей намагниченности значительно улучшает точность получаемых результатов и позволяет избежать необходимости использования более сложных архитектур. Кроме этого, было показано, что конфигурации, принадлежащие чистым фазам, могут быть легко разделены при помощи базовых алгоритмов машинного обучения.

3) Был предложен алгоритм, позволяющий количественно оценить структурную сложность системы на основе информации о паттернах, реализуемых в ней на разных пространственных масштабах. Было показано, что он позволяет с высокой точностью определять фазовые переходы различной природы, встречающиеся в магнитных системах. Кроме этого, была продемонстрирована возможность использования в качестве входных данных изображений. Это открывает перспективы применения предложенного метода для анализа экспериментальных данных, полученных, к примеру, при помощи различных типов микроскопии. В заключительной части были продемонстрированы преимущества предложенного подхода по отношению к алгоритмам, используемым ранее для анализа фазовых переходов неизвестной природы.

### **Перспективы дальнейшей разработки темы**

В дальнейшем планируется разработка методов автоматической классификации фазовых состояний и автономного контроля над динамическими процессами, протекающими в системах со скирмионными структурами, на основе алгоритмов машинного обучения. Будет осуществлен поиск технологически важных состояний, анализ которых может быть упрощен с использованием профилей намагниченности. Существенные усилия планируется направить на расширение области применимости алгоритма расчета структурной сложности. Так, уже была проведена его успешная адаптация для анализа квантовых систем [28].

## Список сокращений и условных обозначений

SVM – support vector machine, метод опорных векторов

$k$ -NN –  $k$ -nearest neighbors algorithm, метод  $k$ -ближайших соседей

СТМ – сканирующая туннельная микроскопия

DMI – взаимодействие Дзялошинского-Мории

FM – ферромагнитное состояние

S+FM – фаза скирмионного газа

SkL – скирмионная решетка

S+B – смешанная фаза, состоящая из скирмионов и бимеронов

Sp – спиновые спирали

SkT – скирмионные трубки

SkS – скирмионные сферы

PM – парамагнитное состояние

PCA – principal component analysis, метод главных компонент

t-SNE – t-distributed Stochastic Neighbor Embedding, стохастическое вложение соседей с t-распределением

## Список литературы

1. Magnetic control of ferroelectric polarization / T. Kimura [et al.] // *Nature*. – 2003. – Vol. 426, – Iss. 6962. – PP. 55–58.
2. Spaldin, N. A. The renaissance of magnetoelectric multiferroics / N. A. Spaldin, M. Fiebig // *Science*. – 2005. – Vol. 309, – Iss. 5733. – PP. 391–392.
3. Smith, T. The Magnetic Properties of Hematite / T. Smith // *Phys. Rev.* – 1916. – Vol. 8, – Iss. 6. – PP. 721–737.
4. Borovik-Romanov, A. S. Magnetic properties of cobalt and manganese carbonates / A. S. Borovik-Romanov, M. P. Orlova // *Sov. Phys. JETP*. – 1957. – Vol. 4, – № 4. – 531.
5. Matarrese, L. M. Magnetic Anisotropy of  $\text{NiF}_2$  / L. M. Matarrese, J. W. Stout // *Phys. Rev.* – 1954. – Vol. 94, – Iss. 6. – PP. 1792–1793.
6. Dzyaloshinskii, I. E. Thermodynamic Theory of "Weak" Ferromagnetism In Antiferromagnetic Substances / I. E. Dzyaloshinskii // *Sov. Phys. JETP*. – 1957. – Vol. 5, – № 6. – 1259.
7. Moriya, T. Anisotropic Superexchange Interaction and Weak Ferromagnetism / T. Moriya // *Phys. Rev.* – 1960. – Vol. 120, – Iss. 1. – PP. 91–98.
8. Dzyaloshinskii, I. E. Theory of Helicoidal Structures in Antiferromagnets. I. Nonmetals / I. E. Dzyaloshinskii // *Sov. Phys. JETP*. – 1964. – Vol. 19, – № 4. – 960.
9. Ishikawa, Y. Helical spin structure in manganese silicide  $\text{MnSi}$  / Y. Ishikawa, K. Tajima, D. Bloch, M. Roth // *Solid State Commun.* – 1976. – Vol. 19, – № 6. – PP. 525–528.
10. Lebech, B. Magnetic structures of cubic  $\text{FeGe}$  studied by small-angle neutron scattering / B. Lebech, J. Bernhard, T. Freltoft // *J. Phys. Condens. Matter*. – 1989. – Vol. 1, – № 35. – 6105.
11. Beille, J. Helimagnetic structure of the  $\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}\text{Si}$  alloys / J. Beille, J. Voiron, F. Towfiq, M. Roth, Z. Y. Zhang // *J. Phys. F: Met. Phys.* – 1981. – Vol. 11, – № 10. – 2153.

12. Beille, J. Long period helimagnetism in the cubic B20  $\text{Fe}_x\text{Co}_{1-x}\text{Si}$  and  $\text{Co}_x\text{Mn}_{1-x}\text{Si}$  alloys / J. Beille, J. Voiron, M. Roth // *Solid State Commun.* – 1983. – Vol. 47, – № 5. – PP. 399–402.
13. Bogdanov, A. N. Thermodynamically stable "vortices" in magnetically ordered crystals. The mixed state of magnets / A. N. Bogdanov, D. A. Yablonskii // *Sov. Phys. JETP.* – 1989. – Vol. 68, – № 1. – 101.
14. Bogdanov, A. N. Thermodynamically stable magnetic vortex states in magnetic crystals / A. N. Bogdanov, A. Hubert // *J. Magn. Magn. Mater.* – 1994. – Vol. 138, – № 3. – PP. 255–269.
15. Bogdanov, A. N. The Properties of Isolated Magnetic Vortices / A. N. Bogdanov, A. Hubert // *Phys. Status Solidi (B).* – 1994. – Vol. 186, – № 2. – PP. 527–543.
16. Skyrmion Lattice in a Chiral Magnet / M. S. Mühlbauer [et al.] // *Science.* – 2009. – Vol. 323, – Iss. 5916. – PP. 915–919.
17. Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal / X. Z. Yu [et al.] // *Nature.* – 2010. – Vol. 465, – Iss. 7300. – PP. 901–904.
18. Realization of ground-state artificial skyrmion lattices at room temperature / D. A. Gilbert, [et al.] // *Nat. Comm.* – 2015. – Vol. 6, – № 1. – 8462.
19. Psaroudaki, C. Skyrmion Qubits: A New Class of Quantum Logic Elements Based on Nanoscale Magnetization / C. Psaroudaki, C. Panagopoulos // *Phys. Rev. Lett.* – 2021. – Vol. 127, – Iss. 6. – 067201.
20. Göbel, B. Beyond skyrmions: Review and perspectives of alternative magnetic quasiparticles / B. Göbel, I. Mertig, O. A. Tretiakov // *Phys. Rep.* – 2021. – Vol. 895, – PP. 1–28.
21. Ezawa, M. Compact merons and skyrmions in thin chiral magnetic films / M. Ezawa // *Phys. Rev. B.* – 2011. – Vol. 83, – Iss. 10. – 100408(R).
22. Carrasquilla, J. Machine learning phases of matter / J. Carrasquilla, R. G. Melko // *Nat. Phys.* – 2017. – Vol. 13, – Iss. 5. – PP. 431–434.
23. Beach, M. J. S. Machine learning vortices at the Kosterlitz-Thouless transition / M. J. S. Beach, A. Golubeva, R. G. Melko // *Phys. Rev. B.* – 2018. – Vol. 97, – Iss. 4. – 045207.



24. Lloyd, S. Measures of complexity: a nonexhaustive list / S. Lloyd // *IEEE Contr. Syst. Mag.* – 2001. – Vol. 21, – PP. 7–8.
25. Salcedo-Gallo, J. S. Deep learning approach for image classification of magnetic phases in chiral magnets / J.S. Salcedo-Gallo, C.C. Galindo-González, E. Restrepo-Parra // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2020. – Vol. 501, – 166482.
26. Gómez Albarracín, F. A. Machine learning techniques to construct detailed phase diagrams for skyrmion systems / F. A. Gómez Albarracín, H. D. Rosales // *Phys. Rev. B.* – 2022. – Vol. 105, – Iss. 21. – 214423.
27. Matthies, T. Topological Characterization of Dynamic Chiral Magnetic Textures Using Machine Learning / T. Matthies, A. F. Schäffer, T. Posske, R. Wiesendanger, E. Y. Vedmedenko // *Phys. Rev. Appl.* – 2022. – Vol. 17, – Iss. 5. – 054022.
28. Certification of quantum states with hidden structure of their bitstrings / O. M. Sotnikov [et al.] // *npj Quantum Inf.* – 2022. – Vol. 8, – Iss. 1. – 41.
29. Thermally induced magnetic order from glassiness in elemental neodymium / B. Verlhac [et al.] // *Nat. Phys.* – 2022. – Vol. 18, – Iss. 8. – PP. 905–911.
30. Extracting Off-Diagonal Order from Diagonal Basis Measurements / Verlhac [et al.] // – arXiv:2209.10565. – 2022.
31. Wang, P. Characterizing systems by multi-scale structural complexity / P. Wang, C. Gu, H. Yang, H. Wang, J. M. Moore // *Phys. A: Stat. Mech. Appl* – 2023. – Vol. 609, – 128358.
32. Cook, S. *CUDA Programming: A Developer's Guide to Parallel Computing with GPUs* (1st ed.) // Morgan Kaufmann Publishers Inc. – 2012. – 592 pp.
33. Scikit-learn: Machine Learning in Python / F. Pedregosa [et al.] // *J. Mach. Learn. Res.* – 2011. – Vol. 12, – № 85. – PP. 2825–2830.
34. Skubic, B. A method for atomistic spin dynamics simulations: Implementation and examples / B. Skubic, J. Hellsvik, L. Nordstrom, O. Eriksson // *J. Phys. Condens. Matter.* – 2008. – Vol. 20, – № 31. – 315203.
35. Iakovlev, I. A. Bimeron nanoconfined design / I. A. Iakovlev, O. M. Sotnikov, V. V. Mazurenko // *Phys. Rev. B.* – 2018. – Vol. 97, – Iss. 18. – 184415.

36. Iakovlev, I. A. Profile approach for recognition of three-dimensional magnetic structures / I. A. Iakovlev, O. M. Sotnikov, V. V. Mazurenko // *Phys. Rev. B.* – 2019. – Vol. 99, – Iss. 2. – 024430.
37. Iakovlev, I. A. Supervised learning approach for recognizing magnetic skyrmion phases / I. A. Iakovlev, O. M. Sotnikov, V. V. Mazurenko // *Phys. Rev. B.* – 2018. – Vol. 98, – Iss. 17. – 174411.
38. Bagrov, A. A. Multiscale structural complexity of natural patterns / A. A. Bagrov, I. A. Iakovlev, A. A. Iliasov, M. I. Katsnelson, V. V. Mazurenko // *Proc. Natl. Acad. Sci.* – 2020. – Vol. 117, – № 48. – PP. 30241–30251.
39. Mazurenko, V. V. Estimating Patterns of Classical and Quantum Skyrmion States / V. V. Mazurenko, I. A. Iakovlev, O. M. Sotnikov, M. I. Katsnelson // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 2023. – Vol. 92, – № 8. – 081004.
40. Ising, E. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus / E. Ising // *Zeitschrift für Physik.* – 1925. – Vol. 31, – Iss. 1. – PP. 253–258.
41. Onsager, L. Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition / L. Onsager // *Phys. Rev.* – 1944. – Vol. 65, – Iss. 3–4. – PP. 117–149.
42. Huembeli, P. Identifying quantum phase transitions with adversarial neural networks / P. Huembeli, A. Dauphin, P. Wittek // *Phys. Rev. B.* – 2018. – Vol. 97, – Iss. 13. – P. 134109.
43. Pajerowski, D. M. Magnetic neutron diffraction study of  $\text{Ba}(\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x)_2\text{As}_2$  critical exponents through the tricritical doping / D. M. Pajerowski, C. R. Rotundu, J. W. Lynn, R. J. Birgeneau // *Phys. Rev. B.* – 2013. – Vol. 87, – Iss. 13. – P. 134507.
44. Edwards, S. F. Theory of spin glasses / S. F. Edwards, P. W. Anderson // *J. Phys. F: Met. Phys.* – 1975. – Vol. 5, – № 5. – 965.
45. Hopfield, J. J. Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities / J. J. Hopfield // *Proc. Natl. Acad. Sci.* – 1982. – Vol. 79, – № 8. – PP. 2554–2558.

46. Heisenberg, W. Zur theorie des ferromagnetismus / W. Heisenberg // Zeitschrift für Physik. – 1928. – Vol. 49, – Iss. 9. – PP. 619–636.
47. Current-induced motion of twisted skyrmions / C. Jin [et al.] // Appl. Phys. Lett. – 2019. – Vol. 114, – № 19. – 194201.
48. Stepanov, E. A. Dynamical and Reversible Control of Topological Spin Textures / E. A. Stepanov, C. Dutreix, M. I. Katsnelson // Phys. Rev. Lett. – 2017. – Vol. 118, – Iss. 15. – 157201.
49. Mazurenko, V. V. Role of direct exchange and Dzyaloshinskii-Moriya interactions in magnetic properties of graphene derivatives:  $C_2F$  and  $C_2H$  / V. V. Mazurenko, A. N. Rudenko, S. A. Nikolaev, D. S. Medvedeva, A. I. Lichtenstein, M. I. Katsnelson // Phys. Rev. B. – 2016. – Vol. 94, – Iss. 21. – 214411.
50. Metropolis, N. The Monte-Carlo method /N. Metropolis, S. Ulam // J. Am. Stat. Assoc. – 1949. – Vol 44, – № 247. – PP. 335–341.
51. И. М. Соболев, Численные методы Монте-Карло // М.: Наука. – 1973. – 305с.
52. D. P. Landau and K. Binder, A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Second Edition // Cambridge University Press. – 2000. – 432 pp.
53. Landau, L. D. On the Theory of the Dispersion of Magnetic Permeability in Ferromagnetic Bodies / Landau, L.D., Lifshitz, E.M. // Phys. Z. Sowjetunion. – 1935. – Vol 8, – PP. 153–164.
54. Gilbert, T. L. A Lagrangian formulation of the gyromagnetic equation of the magnetic field / T. L. Gilbert // Phys. Rev. D – 1955. – Vol. 100, – 1243.
55. U. M. Ascher, L. R. Petzold, Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations // SIAM. – 1998. – 331 pp.
56. Маханьков, В. Г. МОДЕЛЬ СКИРМА И СИЛЬНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ / В. Г. Маханьков, Ю. П. Рыбаков, В. И. Санюк // Успехи физических наук. – 1992. – т. 162, – № 2. – 61с.
57. Berg, V. Definition and statistical distributions of a topological number in the lattice  $O(3)$   $\sigma$ -model / V. Berg, M. Lüscher // Nucl. Phys. B. –1981. – Vol. 190, – № 2. – PP. 412–424.

58. Heo, C. Switching of chiral magnetic skyrmions by picosecond magnetic field pulses via transient topological states / C. Heo, N. S. Kiselev, A. K. Nandy, S. Blügel, T. Rasing // *Sci. Rep.* – 2016. – Vol. 6, – Iss. 1. – 27146.
59. Rosales, H. D. Three-sublattice skyrmion crystal in the antiferromagnetic triangular lattice / H. D. Rosales, D. C. Cabra, P. Pujol // *Phys. Rev. B.* – 2015. – Vol. 92, – Iss. 21. – 214439.
60. Skyrmion lattice in the doped semiconductor  $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$  / M. S. Münzer [et al.] // *Phys. Rev. B.* – 2010. – Vol. 81, – Iss. 4. – 041203(R).
61. M. Nielsen, *Neural Networks and Deep Learning* [Электронный ресурс] / M. Nielsen – 2017. – Режим доступа: <http://neuralnetworksanddeeplearning.com>
62. C. MacLeod, *An Introduction to Practical Neural Networks and Genetic Algorithms for Engineers and Scientists* // Robert Gordon University, Aberdeen, Scotland, – 2010. – 157 pp.
63. Б. Е. Поляк, *Введение в оптимизацию* // М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы. – 1983. – 384с.
64. Cortes, C. Support-Vector Networks / C. Cortes, V. Vapnik // *Mach. Learn.* – 1995. – Vol. 20, – Iss. 3. – PP. 273–297.
65. Cover, T. Nearest neighbor pattern classification / T. Cover, P. Hart // *IEEE Trans. Inf. Theory.* – 1967. – Vol. 13, – № 1. – PP. 21–27.
66. Goldberger, J. Neighborhood Components Analysis / J. Goldberger, G. Hinton, S. Roweis, R. Salakhutdinov // *Adv. Neural Inf. Process. Syst.* – 2004. – Vol. 17, – PP. 513–520.
67. Tibshirani, R. Diagnosis of multiple cancer types by shrunken centroids of gene expression / R. Tibshirani, T. Hastie, B. Narasimhan, G. Chu // *Proc. Natl. Acad. Sci.* – 2002. – Vol. 99, – № 10. – PP. 6567–6572.
68. Barrett, S. E. Optically Pumped NMR Evidence for Finite-Size Skyrmions in GaAs Quantum Wells near Landau Level Filling  $\nu = 1$  / S. E. Barrett, G. Dabbagh, L. N. Pfeiffer, K.W. West, R. Tycko // *Phys. Rev. Lett.* – 1995. – Vol. 74, – Iss. 25. – PP. 5112–5115.

69. Кукушкин, И. В. Экспериментальная проверка концепции скирмионов / И. В. Кукушкин // Конференции и симпозиумы. – 1997. – т. 167. – № 5. – с. 555–558.
70. Khawaja, U. Al Skyrmions in a ferromagnetic Bose–Einstein condensate. / U. Al Khawaja, H. T. C. Stoof // Nature. – 2001. – Vol. 411, – Iss. 6840. – PP. 918–920.
71. Baskaran, G. Possibility of Skyrmion Superconductivity in Doped Antiferromagnet  $K_2Fe_4Se_5$ . / G. Baskaran // – arXiv:1108.3562 – 2011.
72. Fukuda, J. Quasi-two-dimensional Skyrmion lattices in a chiral nematic liquid crystal. / J. Fukuda, S. Žumer // Nat. Commun. – 2011. – Vol. 2, – Iss. 1. – 246.
73. Rosch, A. Skyrmions: Moving with the current / A. Rosch // Nat. Nanotechnol. – 2013. – Vol. 8, – Iss. 3. – PP. 160–161.
74. Röblier, U. K. Spontaneous skyrmion ground states in magnetic metals / U. K. Röblier, A. N. Bogdanov, C. Pfleiderer // Nature. – 2006. – Vol. 442, – Iss. 7104. – PP. 797–801.
75. Near room-temperature formation of a skyrmion crystal in thin-films of the helimagnet FeGe / X. Z. Yu [et al.] // Nat. Mater. – 2011. – Vol. 10, – Iss. 2. – PP. 106–109.
76. Possible skyrmion-lattice ground state in the B20 chiral-lattice magnet MnGe as seen via small-angle neutron scattering / N. Kanazawa [et al.] // Phys. Rev. B. – 2012. – Vol. 86, – Iss. 13. – 134425.
77. Experimental observation of multiple-Q states for the magnetic skyrmion lattice and skyrmion excitations under a zero magnetic field / M. Nagao [et al.] // Phys. Rev. B. – 2015. – Vol. 92, – Iss. 14. – 140415.
78. Spontaneous atomic-scale magnetic skyrmion lattice in two dimensions / S. Heinze [et al.] // Nat. Phys. – 2011. – Vol. 7, – Iss. 9. – PP. 713–718.
79. Magnetic skyrmion transistor: skyrmion motion in a voltage-gated nanotrack / X. Zhang [et al.] // Sci. Rep. – 2015. – Vol. 5, – Iss. 1. – 11369.
80. Zhou, Y. A reversible conversion between a skyrmion and a domain-wall pair in a junction geometry / Y. Zhou, M. Ezawa // Nat. Commun. – 2014. – Vol. 5, – Iss. 1. – 4652.

81. Unwinding of a Skyrmion Lattice by Magnetic Monopoles / P. Milde [et al.] // *Science*. – 2013. – Vol. 340, – Iss. 6136. – PP. 1076–1080.
82. Silva, R. L. Emergence of skyrmion lattices and bimerons in chiral magnetic thin films with nonmagnetic impurities / R. L. Silva, L. D. Secchin, W. A. Moura-Melo, A. R. Pereira, R. L. Stamps // *Phys. Rev. B*. – 2014. – Vol. 89, – Iss. 5. – 054434.
83. Rybakov, F. N. New Type of Stable Particlelike States in Chiral Magnets / F. N. Rybakov, A. B. Borisov, S. Blügel, N. S. Kiselev // *Phys. Rev. Lett.* – 2015. – Vol. 115, – Iss. 11. – 117201.
84. Rybakov, F. N. Three-dimensional skyrmion states in thin films of cubic helimagnets / F. N. Rybakov, A. B. Borisov, A. N. Bogdanov // *Phys. Rev. B*. – 2013. – Vol. 87, – Iss. 9. – 094424.
85. Rybakov, F. N. New spiral state and skyrmion lattice in 3D model of chiral magnets / F. N. Rybakov, A. B. Borisov, S. Blügel, N. S. Kiselev // *New J. Phys.* – 2016. – Vol 18, – № 4. – 045002.
86. Park, J.-H. Zero-temperature phases for chiral magnets in three dimensions / J.-H. Park, J. H. Han // *Phys. Rev. B*. – 2011. – Vol. 83, – Iss. 18. – 184406.
87. Suchsland, P. Parameter diagnostics of phases and phase transition learning by neural networks / P. Suchsland, S. Wessel // *Phys. Rev. B*. – 2018. – Vol. 97, – Iss. 17. – 174435.
88. Singh, V. K. Application of machine learning to two-dimensional Dzyaloshinskii-Moriya ferromagnets / V. K. Singh, J. H. Han // *Phys. Rev. B*. – 2019. – Vol. 99, – Iss. 17. – 174426.
89. Wenjian, H. Discovering phases, phase transitions, and crossovers through unsupervised machine learning: A critical examination / W. Hu, R. R. P. Singh, R. T. Scalettar // *Phys. Rev. E*. – 2017. – Vol. 95, – Iss. 6. – 062122.
90. Wetzel, S. J. Unsupervised learning of phase transitions: From principal component analysis to variational / S. J. Wetzel // *Phys. Rev. E*. – 2017. – Vol. 96, – Iss. 2. – 022140.

91. Zhang, W. Machine learning of phase transitions in the percolation and XY models / W. Zhang, J. Liu, T.-C. Wei // *Phys. Rev. E.* – 2019. – Vol. 99, – Iss. 3. – 032142.
92. Ambrose, M. C. Melting of hexagonal skyrmion states in chiral magnets / M. C. Ambrose, R. L. Stamps // *New J. Phys.* – 2013. – Vol 15, – № 5. – 053003.
93. Hotelling, H. Analysis of a complex of statistical variables into principal components / H. Hotelling // *J. Educ. Psychol.* – 1933. – Vol. 24, – Iss 6. – PP. 417–441.
94. Walker, N. Identifying structural changes with unsupervised machine learning methods / N. Walker, K.-M. Tam, B. Novak, M. Jarrell // *Phys. Rev. E.* – 2018. – Vol. 98, – Iss. 5. – 053305.
95. van der Maaten, L. J. P. Visualizing data using t-SNE / L. J. P. van der Maaten, G. E. Hinton // *J. Mach. Learn. Res.* – 2008. – Vol. 9, – PP. 2579–2605.
96. Binnig, G. Scanning tunneling microscopy / G. Binnig, H. Rohrer // *Surf. Sci.* – 1983. – Vol. 126, – № 1. – PP. 236–244.
97. Hale, M. E. Magnetic Domain Observations by Electron Microscopy / M.E. Hale, H.W. Fuller, H. Rubenstein // *J. Appl. Phys.* – 1959. – Vol. 30, – № 5. – PP. 789–791.
98. Deviatov, A. Y. Recurrent network classifier for ultrafast skyrmion dynamics / A. Y. Deviatov, I. A. Iakovlev, V. V. Mazurenko // *Phys. Rev. Appl.* – 2019. – Vol. 12, – Iss. 5. – 054026.
99. Carleo, G. Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks / G. Carleo, M. Troyer // *Science.* – 2017. – Vol. 355, – Iss. 6325. – PP. 602–606.
100. Broecker, P. Machine learning quantum phases of matter beyond the fermion sign problem / P. Broecker, J. Carrasquilla, R. G. Melko, S. Trebst // *Sci. Rep.* – 2017. – Vol. 7, – Iss. 1. – 8823.
101. Ch'ng, K. Machine Learning Phases of Strongly Correlated Fermions / K. Ch'ng, J. Carrasquilla, R. G. Melko, E. Khatami // *Phys. Rev. X.* – 2017. – Vol. 7, – Iss. 3. – 031038.

102. Zhang, Y. Machine learning  $\mathbb{Z}_2$  quantum spin liquids with quasiparticle statistics / Y. Zhang, R. G. Melko, E.-A. Kim // *Phys. Rev. B.* – 2017. – Vol. 96, – Iss. 24. – 245119.
103. Nomura, Y. Restricted Boltzmann machine learning for solving strongly correlated quantum systems / Y. Nomura, A. S. Darmawan, Y. Yamaji, M. Imada // *Phys. Rev. B.* – 2017. – Vol. 96, – Iss. 20. – 205152.
104. Saito, H. Machine Learning Technique to Find Quantum Many-Body Ground States of Bosons on a Lattice / H. Saito, M. Kato // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 2018. – Vol. 87, – № 1. – 014001.
105. Troyer, M. Computational Complexity and Fundamental Limitations to Fermionic Quantum Monte Carlo Simulations / M. Troyer, U.-J. Wiese // *Phys. Rev. Lett.* – 2005. – Vol. 94, – Iss. 17. – 170201.
106. L. van Nieuwenburg, E. P. Learning phase transitions by confusion / E. P. L. van Nieuwenburg, Y.-H. Liu, S. D. Huber // *Nat. Phys.* – 2017. – Vol. 13, – Iss. 5. – PP. 435–439.
107. Zhang, Y. Quantum Loop Topography for Machine Learning / Y. Zhang, E.-A. Kim // *Phys. Rev. Lett.* – 2017. – Vol. 118, – Iss. 21. – 216401.
108. Stanley, H. E. Dependence of Critical Properties on Dimensionality of Spins / H. E. Stanley // *Phys. Rev. Lett.* – 1968. – Vol. 20, – Iss. 12. – PP. 589–592.
109. LeCun, Y. Deep learning / Y. LeCun, Y. Bengio, G. Hinton // *Nature.* – 2015. – Vol. 521, – Iss. 7553. – PP. 436–444.
110. Rybakov, F. N. New Type of Stable Particlelike States in Chiral Magnets / F. N. Rybakov, A. B. Borisov, S. Blügel, N. S. Kiselev // *Phys. Rev. Lett.* – 2015. – Vol. 115, – Iss. 11. – 117201.
111. Hog, S. E. Stability and phase transition of skyrmion crystals generated by Dzyaloshinskii-Moriya interaction / S. E. Hog, A. Bailly-Reyre, H. T. Diep // *J. Magn. Mater.* – 2018. – Vol. 455, – PP. 32–38.
112. Stepanov, E. A. Heisenberg-exchange-free nanoskyrmion mosaic / E. A. Stepanov, S. A. Nikolaev, C. Dutreix, M. I. Katsnelson, V. V. Mazurenko // *J. Phys. Condens. Matter.* – 2019. – Vol. 31, – № 17. – 17LT01.



113. Adami, C. What is complexity? / C. Adami // *Bioessays*. – 2002. – Vol. 24, – Iss. 12. – PP. 1085–1094.
114. M. Gell-Mann, *The Quark and the Jaguar: Adventures in the Simple and the Complex* // St. Martin's Griffin. – 1995. – 392 pp.
115. P. Bak, *How Nature Works: The Science of Self-Organized Criticality* // Springer. – 1996. – 212 pp.
116. R. Badii, A. Politi, *Complexity. Hierarchical Structures and Scaling in Physics* // Cambridge University Press. – 1997. – 318 pp.
117. Katsnelson, M. I. Toward physical principles of biological evolution / M. I. Katsnelson, Y. I. Wolf, E. V. Koonin // *Phys. Scr.* – 2018. – Vol. 93, – № 4. – 043001.
118. Koonin, E. V. The meaning of biological information / E. V. Koonin // *Phil. Trans. A*. – 2016. – Vol. 374, – № 2063. – 20150065.
119. Wolf, Y. I. Physical foundations of biological complexity / Y. I. Wolf, M. I. Katsnelson, E. V. Koonin // *Proc. Natl. Acad. Sci.* – 2018. – Vol. 115, – № 37. – PP. 8678–8687.
120. Marshall, S. M. A probabilistic framework for identifying biosignatures using Pathway Complexity / S. M. Marshall, A. R. G. Murray, L. Cronin // *Philos. Trans. R. Soc. A*. – 2017. – Vol. 375, – № 2109. – 20160342.
121. Gell-Mann, G. Information measures, effective complexity, and total information / M. Gell-Mann, S. Lloyd // *Complexity*. – 1996. – Vol. 2, – № 1. – PP. 44–52.
122. Valdez, M. A. Quantifying complexity in quantum phase transitions via mutual information complex networks / M. A. Valdez, D. Jaschke, D. L. Vargas, L. D. Carr // *Phys. Rev. Lett.* – 2017. – Vol. 119, – Iss. 22. – 225301.
123. Tononi, G. Complexity and coherency: Integrating information in the brain / G. Tononi, G. M. Edelman, O. Sporns // *Trends Cogn. Sci.* – 1998. – Vol. 2, – Iss. 12. – PP. 474–484.
124. DeGiuli, E. Random language model / E. DeGiuli // *Phys. Rev. Lett.* – 2019. – Vol. 122, – Iss. 12. – 128301.
125. Lakhal, S. Beauty and structural complexity / S. Lakhal, A. Darmon, J.-P. Bouchaud, M. Benzaquen // *Phys. Rev. Res.* – 2020. – Vol. 2, – Iss. 2. – 022058(R).

126. Kolmogorov, A. N. Three approaches to the quantitative definition of information / A. N. Kolmogorov // *Probl. Peredachi Inf.* – 1965. – Vol. 1, – Iss. 1. – PP. 3–11.
127. Bak, P. Self-organized criticality: An explanation of the  $1/f$  noise / P. Bak, C. Tang, K. Wiesenfeld // *Phys. Rev. Lett.* – 1987. – Vol. 59, – Iss. 4. – PP. 381–384.
128. Bak, P. Punctuated equilibrium and criticality in a simple model of evolution / P. Bak, K. Sneppen // *Phys. Rev. Lett.* – 1993. – Vol. 71, – Iss. 24. – PP. 4083–4086.
129. Maslov, S. Avalanches and  $1/f$  noise in evolution and growth models / S. Maslov, M. Paczuski, P. Bak // *Phys. Rev. Lett.* – 1994. – Vol. 73, – Iss. 16. – PP. 2162–2165.
130. C. H. Bennett, “Logical depth and physical complexity” in *The Universal Turing Machine, a Half Century Survey* // Oxford University Press. – 1988. – PP. 227–257.
131. Crutchfield, J. P. Inferring statistical complexity / J. P. Crutchfield, K. Young // *Phys. Rev. Lett.* – 1989. – Vol. 63, – Iss. 2. – PP. 105–108.
132. Wolpert, D. H. Using self-dissimilarity to quantify complexity / D. H. Wolpert, W. Macready // *Complexity*. – 2007. – Vol. 12, – Iss. 3. – PP. 77–85.
133. Wolpert, D. H. Self-dissimilarity: An empirical measure of complexity / D. H. Wolpert, W. Macready // *Sante Fe Institute*. – 1997. – Vol. 97, – PP. 1–12.
134. Lloyd, S. Complexity as thermodynamic depth / S. Lloyd, H. Pagels // *Ann. Phys.* – 1988. – Vol. 188, – Iss. 1. – PP. 186–213.
135. Sinelnikova, A. Multiple scales and phases in discrete chains with application to folded proteins / A. Sinelnikova, A. J. Niemi, J. Nilsson, M. Ulybyshev // *Phys. Rev. E*. – 2018. – Vol. 97, – Iss. 5. – 052107.
136. Ruderman, D. L. Statistics of natural images: Scaling in the woods / D. L. Ruderman, W. Bialek // *Phys. Rev. Lett.* – 1994. – Vol. 73, – Iss. 6. – PP. 814–817.
137. Stephens, S. J. Statistical thermodynamics of natural images / G. J. Stephens, T. Mora, G. Tkačik, W. Bialek // *Phys. Rev. Lett.* – 2013. – Vol. 110, – Iss. 1. – 018701.
138. Fisher, M. E. The theory of equilibrium critical phenomena / M. E. Fisher // *Rep. Prog. Phys.* – 1967. – Vol. 30, – № 2. – PP. 615–730.

139. Sosnin, A. Computational analysis of 3D Ising model using metropolis algorithms / A. Sosnin, M. Cortes, D. R. Nunes, J. V. Gomes, R. S. Costa // *J. Phys. Conf. Ser.* – 2015. – Vol. 630, – № 1. – 012057.
140. Sheinwald, D. Two-dimensional encoding by finite-state encoders / D. Sheinwald, A. Lempel, J. Ziv // *IEEE Trans. Commun.* – 1990. – Vol. 38, – Iss. 3. – PP. 341–347.
141. Martiniani, S. Quantifying hidden order out of equilibrium / S. Martiniani, P. M. Chaikin, D. Levine // *Phys. Rev. X.* – 2019. – Vol. 9, – Iss. 1. – 011031.
142. Cortez, V. Phase diagram and reentrance for the 3D EdwardsAnderson model using information theory / V. Cortez, G. Saravia, E. E. Vogel // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2014. – Vol. 372, – PP. 173–180.
143. Vogel, E. E. Data compressor designed to improve recognition of magnetic phases / E. E. Vogel, G. Saravia, L. V. Cortez // *Phys. A: Stat. Mech. Appl.* – 2012. – Vol. 391, – Iss. 4. – PP. 1591–1601.
144. Melchert, O. Analysis of the phase transition in the two-dimensional Ising ferromagnet using a Lempel-Zivstring-parsing scheme and black-box datacompression utilities / O. Melchert, A. K. Hartmann // *Phys. Rev. E.* – 2015. – Vol. 91, – Iss. 2. – 023306.
145. Avinery, R. Universal and accessible entropy estimation using a compression algorithm / R. Avinery, M. Kornreich, R. Beck // *Phys. Rev. Lett.* – 2019. – Vol. 123, – Iss. 17. – 178102.