

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

На правах рукописи



Яковлев Илья Александрович

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

1.3.8 Физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Екатеринбург – 2024

Работа выполнена на кафедре теоретической физики и прикладной математики Физико-технологического института ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

Научный руководитель:

доктор физико-математических наук, доцент

Мазуренко Владимир Владимирович

Официальные оппоненты:

Дмитриенко Владимир Евгеньевич, доктор физико-математических наук, ФГБУ «Национальный исследовательский центр» «Курчатовский институт», г. Москва, главный научный сотрудник лаборатории теоретических исследований отдела кристаллофизики отделения «Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова» Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники (КККиФ);

Рыльцев Роман Евгеньевич, доктор физико-математических наук, ФГБУН Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, ведущий научный сотрудник лаборатории неупорядоченных систем отдела физической химии;

Сутурин Сергей Михайлович, кандидат физико-математических наук, ФГБУН Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, г. Санкт-Петербург, ведущий научный сотрудник лаборатории оптики конденсированного состояния

Защита диссертации состоится «31» мая 2024 г. в 17:00 часов на заседании диссертационного совета УрФУ 1.3.02.06 по адресу: 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19, ауд. И-420 (зал Ученого совета).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»: <https://dissovet2.urfu.ru/mod/data/view.php?d=12&rid=5855>

Автореферат разослан « ____ » апреля 2024 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета



Ищенко Алексей Владимирович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования

Текущий уровень технологического прогресса неразрывно связан с достижениями в области исследования магнитных материалов, чьи свойства обусловлены наличием сильных корреляций. 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 $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ [1] в 1916 году. Анализ имеющихся данных показал, что наблюдаемый слабый ферромагнетизм чувствителен к симметрии кристалла. Позднее он был обнаружен и в других антиферромагнитных системах. На основе имеющихся данных Игорь Дзялошинский в 1958 году сформулировал концепцию антисимметричного обменного взаимодействия [2]. Впоследствии, Мория разработал теорию сверхобмена с учетом спин-орбитальной связи, объясняющую микроскопический механизм его действия [3].

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. Позднее данные структуры были экспериментально обнаружены в металлических соединениях MnSi и FeGe , а также твердых растворах $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$. 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, а затем и экспериментально, 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 при-

ложениях, от изготовления логических элементов и устройств хранения информации нового поколения, до квантовых вычислений.

Тем не менее скирмионы являются далеко не единственными магнитными топологически-защищенными структурами [4]. Некоторые из них, к примеру, бимероны, ассоциируемые с фрагментами спиновых спиралей, встречаются в переходных областях фазовой диаграммы материалов, в которых присутствует взаимодействие Дзялошинского-Мории [5]. 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. Возможные перспективы технологического применения данных объектов приводят к необходимости точного определения диапазона параметров модели, в котором они реализуются.

Стоит так же 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 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 разделе-

ния 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 [6], 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 диапазона 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 подходов, 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

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. 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.

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 [7], 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 [8]. Моделирование спиновой динамики выполнялось путем решения

уравнения Ландау-Лившица-Гильберта для намагниченности средствами программного пакета UppASD [9].

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 молодеж-

ная 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 7 научных работах, из них 5 статей, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, определенных ВАК РФ и Аттестационным советом УрФУ и индексируемых в зарубежных научных базах Web of Science и Scopus, 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.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, приводится степень разработанности проблемы, сформулированы цели и задачи исследования, демонстрируются научная новизна, теоретическая и практическая значимость полученных результатов, представлены основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе приводятся 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. В частности, рассматриваются метод Монте-Карло с алгоритмом Метрополиса и спиновая динамика. Далее приводятся стандартные методы определения магнитных фазовых переходов в рассматриваемых системах, а также некоторые распространенные алгоритмы машинного обучения, используемые для решения задач фазовой классификации.

Вторая глава посвящена исследованию низкотемпературных фазовых диаграмм ферромагнитных систем, в которых стабилизируются скирмионы и поиску оптимального представления магнитных конфигураций.

На первом этапе при помощи метода Монте-Карло с алгоритмом Метрополиса были построены детальные фазовые диаграммы двумерной системы с квадратной и трехмерной системы с кубической кристаллическими решетками, соответственно. Взаимодействие между атомами в них описывалось спиновым гамильтонианом следующего вида:

$$H = - \sum_{i < j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_{i < j} \mathbf{D}_{ij} \cdot [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j] - \sum_i B S_i^z, \quad (1)$$

где $J_{ij} > 0$ и \mathbf{D}_{ij} константа изотропного обменного взаимодействия Гейзенберга и вектор Дзялошинского-Мории, соответственно. \mathbf{S}_i – единичный вектор в направлении i -го спина, B обозначает перпендикулярное внешнее магнитное поле. Суммирование по $i < j$ означает, что энергия взаимодействия каждой па-

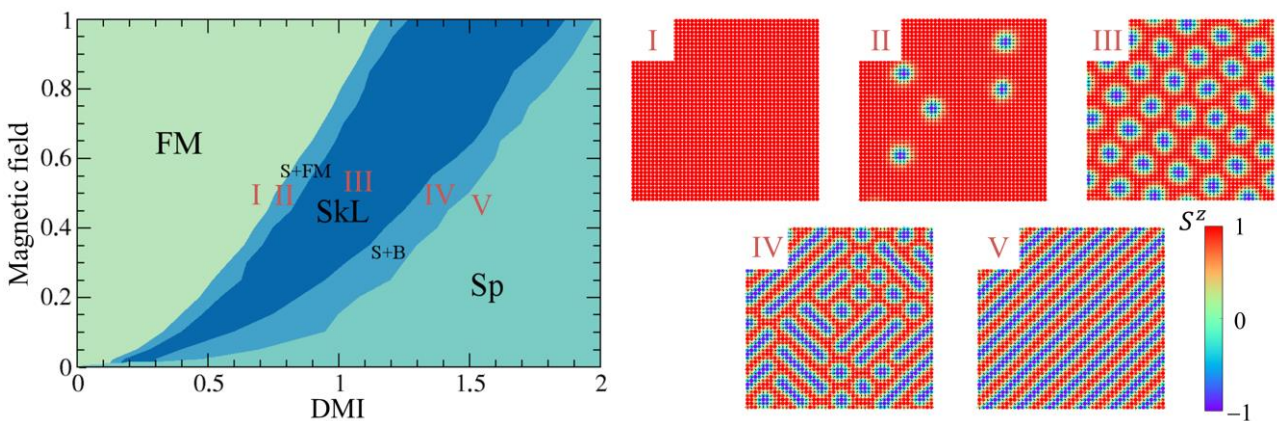


Рисунок 1 – (Правая часть) Фазовая диаграмма двумерной магнитной системы, описываемой гамильтонианом (1), полученная при температуре $T = 0.02$. Аббревиатурами SkL, S+FM, S+B, FM и Sp обозначены скирмионная решетка, скирмионный газ, смешанная фаза, состоящая из скирмионов и бимеронов, ферромагнитное состояние и спиновые спирали, соответственно. (Левая часть) Примеры магнитных конфигураций, стабилизированных на решетке 48×48 . Все параметры приведены в единицах J

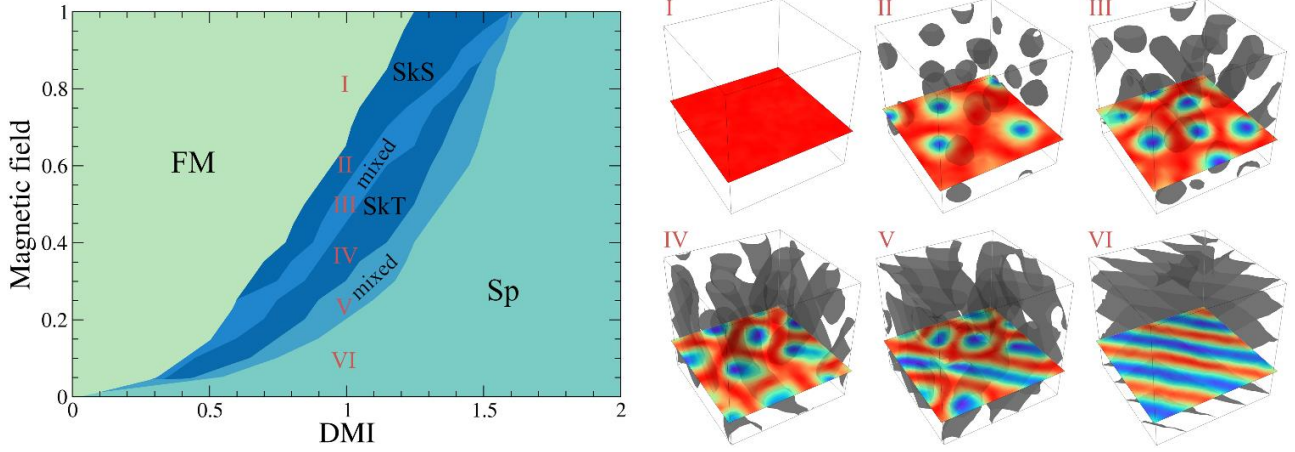


Рисунок 2 – (Правая часть) Фазовая диаграмма трехмерной магнитной системы, описываемой гамильтонианом (1), полученная при температуре $T = 0.02$. Аббревиатурами FM, SkS, SkT и Sp обозначены фазы ферромагнетика, скирмионных сфер, скирмионных трубок и спиновых спиралей, соответственно. (Левая часть) Примеры магнитных конфигураций, стабилизированных на решетке $25 \times 25 \times 25$. Серым показаны поверхности $S^z = 0$. Все параметры приведены в единицах J

ры спинов учитывается только один раз. В данном случае мы ограничились пределом, когда обменное взаимодействие сильно экранируется на расстояниях порядка межатомного. Таким образом, рассматривается вклад в энергию только ближайших соседей. Тем не менее, в ряде случаев такое приближение является достаточным и отлично подходит для воспроизведения экспериментальных фазовых диаграмм соединений, в которых наблюдаются скирмионы [5].

Как видно из рисунков 1 и 2, в обоих случаях присутствуют обширные переходные области, что хорошо согласуется с экспериментальной картиной [5]. Для определения различных фаз, реализующихся в системе, для всех конфигураций были рассчитаны топологический заряд $Q = 1/8\pi \sum_{\langle ijk \rangle} \mathbf{S}_i \cdot [\mathbf{S}_j \times \mathbf{S}_k]$ (приближенное выражение для случая решеточных моделей), спиновые структурные факторы $\chi_q^{\parallel} = \langle \mathbf{S}_q^z \mathbf{S}_{-q}^z \rangle$ и $\chi_q^{\perp} = \langle \mathbf{S}_q^x \mathbf{S}_{-q}^x \rangle + \langle \mathbf{S}_q^y \mathbf{S}_{-q}^y \rangle$ (где \mathbf{q} – вектор обратного пространства), а также произведена визуализация магнитных моментов атомов при конечной температуре. Использование графических ускорителей позволило за разумное время рассматривать решетки большого размера, вплоть до $L = 1024$, для двумерного и $L = 48$ для трехмерного случаев, соответственно, что также отразилось на точности определения границ. Примечательно, что повышение размерности системы ожидаемо привело к росту разнообразия реализуемых структур. Так, в трехмерной системе присутствуют два принципиально различных скирмионных состояния: сферы и трубки.

В заключительной части данной главы нами был предложен способ оптимального представления магнитных конфигураций, позволяющий определять их

фазовое состояние без дополнительного расчета спиновых корреляционных функций. Это особенно актуально для систем с большим числом атомов, так как поиск стандартных характеристик Q и χ_q сопряжен с существенными вычислительными затратами, а в получаемых значениях присутствуют шумы.

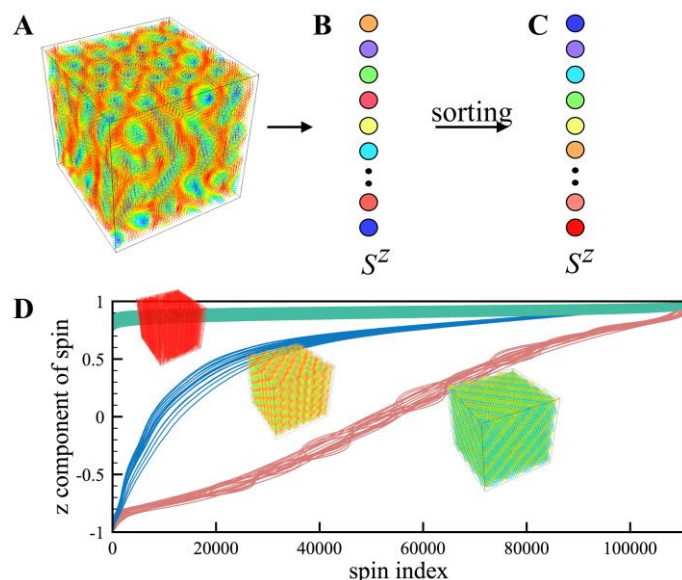


Рисунок 3 – Основная идея подхода. Магнитная структура (A) заменяется одномерным вектором (B), содержащим S^z компоненты спинов, который впоследствии сортируется по возрастанию (C). (D) Визуализация профилей намагниченности конфигураций, принадлежащих чистой спиральной (красные линии), скирмионной (синие линии) и ферромагнитной (зеленые линии) фазам

Далее была продемонстрирована универсальность предложенного подхода по отношению к размерности и геометрии кристаллической решетки, а также его применимость в случаях, когда магнитное поле направлено по оси (111) куба или доступна информация о других компонентах спинов.

Третья глава посвящена изучению возможности применения методов машинного обучения для автоматического определения фаз магнитных конфигураций, полученных в рамках рассматриваемых моделей.

Было показано, что простейшей полносвязной нейронной сети прямого распространения с одним скрытым слоем достаточно для восстановления низкотемпературной фазовой диаграммы двумерной системы, магнитные атомы в которой располагаются в узлах квадратной кристаллической решетки размера 48×48 . При этом обучение проводилось на конфигурациях, принадлежащих

Так как все чистые фазы, представленные в рассматриваемой модели, характеризуются определенным паттерном намагниченности, для их анализа достаточно иметь информацию лишь о векторе, содержащем S^z отдельных атомов. Было установлено, что простая сортировка данного вектора по возрастанию и последующая отрисовка полученного профиля намагниченности позволяет с высокой точностью разделять конфигурации, принадлежащие различным состояниям. Схематично предложенный подход показан на рисунке 3. Стоит отметить, что он не применим для анализа переходных областей, так как профили соответствующих магнитных конфигураций занимают промежуточные положения.

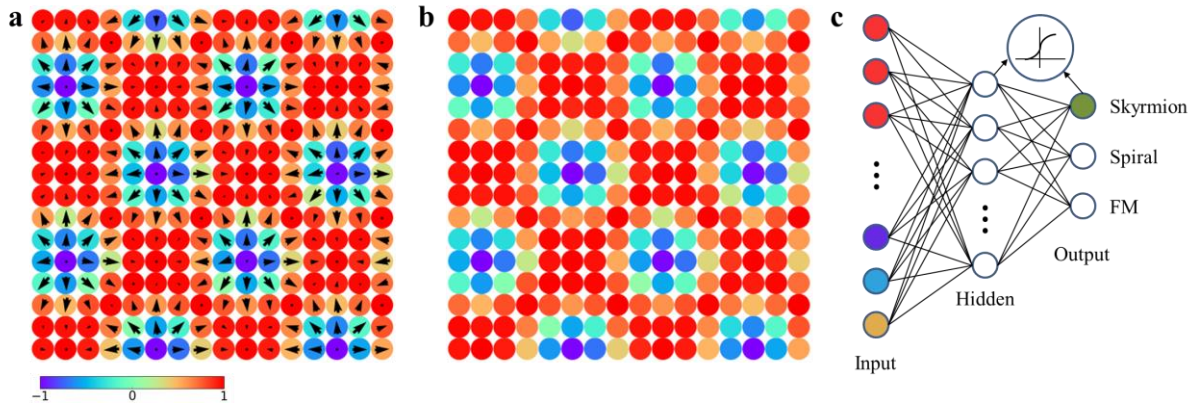


Рисунок 4 – Схематичное представление работы нейронной сети. (а) Скирмионная магнитная конфигурация, полученная при помощи моделирования методом Монте-Карло гамильтониана (1). Атомы изображены кружками, черными стрелками показаны x у компоненты спинов, цветом – z компонента. (б) Матрица, составленная из z проекций исходной магнитной структуры, подлежащей классификации. (с) 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

трем чистым фазам, реализующимся в модели: ферромагнитной, спиральной и скирмионной (по 1000 конфигураций из каждой). Кроме того, в обучающий

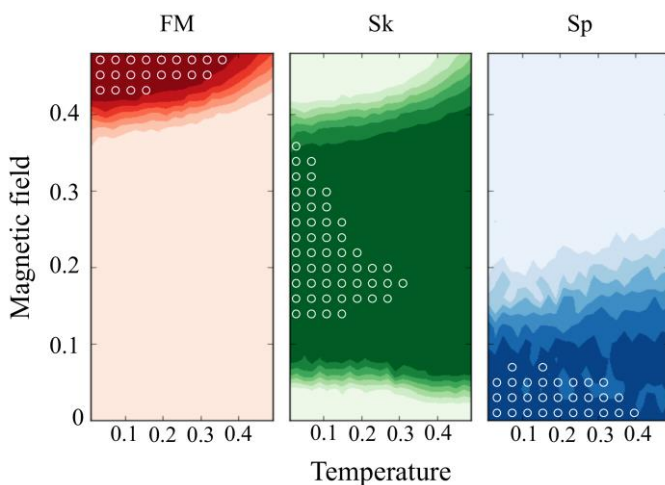


Рисунок 5 – Фазовая диаграмма, полученная при помощи нейронной сети с 64 элементами скрытого слоя, для $|D| = 0.72$. Каждая вкладка соответствует определенному выходному нейрону, а их значения показаны интенсивностью цвета (темная область – 1, светлая – 0). Белыми кружками обозначены области, фазы в которых можно определить путем анализа спиновых структурных факторов. Все параметры приведены в единицах J

набор входили добавочные 1000 конфигураций, принадлежащих парамагнитной фазе при $T \sim 10J$. Это позволило сети определять состояния, не относящиеся ни к одному из искомых. На вход сети подавались вектора, составленные из z компонент спинов атомов. В качестве активационной функции нейронов скрытого и выходного слоев была выбрана сигмоида, что позволило избежать зависимости между значениями отдельных элементов внутри слоя. Процесс подготовки магнитной конфигурации и структура используемой нейронной сети показаны на рисунке 4.

Как видно из рисунка 5, алгоритм способен распознавать все

представленные в модели фазы в широком диапазоне температур, выходящем за пределы применимости стандартных методов (белые кружки). Кроме этого, за счет независимой активации выходных нейронов появляется возможность проведения количественной характеристики состава переходных областей.

В ходе анализа обученной сети было установлено, что компоненты вектора Wx (где W – матрица весов между входным и скрытым слоями сети, x – спиновая конфигурация) линейно зависят от намагниченности. Данный результат согласуется с полученным в работе [10] для модели Изинга, однако в нашем случае возникающие зависимости не объясняются тривиальным образом, а их число увеличивается с ростом числа нейронов скрытого слоя. Это может свидетельствовать о том, что намагниченность является не единственным параметром, который алгоритм использует при проведении фазовой классификации.

Было показано, что нейронная сеть способна не только верно определять тип спиновых структур, полученных за пределами области параметров гамильтониана (1), используемых для обучения, но и отлично работает в случае магнитных конфигураций, стабилизированных в системе на треугольной решетке. Исключение составляют спиновые спирали, вероятность верной идентификации которых составляет лишь 40%. Это объясняется реализацией в данном случае более сложных структур лабиринтного типа и точность классификации может быть повышена добавлением их в тренировочный набор.

Далее была исследована возможность применения предложенной архитектуры нейронной сети для проведения фазовой характеристики трехмерной системы, описываемой гамильтонианом (1), определенным на кубической решетке размера $48 \times 48 \times 48$. Для этого мы протестировали обученный алгоритм на нескольких срезах фазовой диаграммы, включая случай с более высокой температурой, чем та, при которой был получен тренировочный набор. Так как общее число спинов в рассматриваемой системе равняется 110 592, нейронная сеть не может достичь требуемой точности классификации, оперируя исходной информацией о спиновых конфигурациях. Тем не менее, было показано, что предварительная сортировка входных векторов, предложенная в предыдущей главе для идентификации чистых фазовых состояний, помогает справиться с данной проблемой. Более того, появляется возможность разделения состояний с одинаковой намагниченностью – парамагнетика и спиновой спирали.

В заключительной части данной главы был проведен сравнительный анализ работы предложенной нейронной сети с другими базовыми алгоритмами машинного обучения, используемыми в задачах классификации. Так как все они ставят каждой конфигурации в соответствие только одну метку определенного

класса, а значит не способны анализировать переходные области, было принято решение ограничиться данными, принадлежащими чистым фазам. Для простоты большая часть результатов приведена для случая двумерной системы.

В качестве простейших алгоритмов, не имеющих настраиваемых параметров и не требующих как таковой процедуры обучения, нами были рассмотрены методы ближайших центроид и k -ближайших соседей. 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.

Таблица 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 -ближайших соседей (%)
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

Как нетрудно заметить из таблицы 1, в подавляющем большинстве случаев лидирует классификатор на основе центроид. Метод k -ближайших соседей 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. В случае нейросети неверно распознанными считались состояния, 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 и близостью соответствующей центроиды к центроиду парамагнитного состояния.

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. В качестве одного из алгоритмов, на работу которых не оказывает влияние предварительная сортировка входных конфигураций, нами был рассмотрен метод опорных векторов (SVM) с радиальной базисной функцией в качестве ядра преобразования. Было показано, что точность его работы аналогична обученной нейронной сети даже для случая трехмерной системы. Это объясняется тем, что эффективность данного метода слабо снижается с увеличением размерности данных. Тем не менее, его использование для анализа переходных областей все также не представляется возможным ввиду того, что каждой конфигурации ставится в соответствие метка одного определенного класса.

В четвертой главе было сформулировано понятие структурной сложности объектов и предложен алгоритм ее количественной оценки. После чего была исследована возможность применения данной характеристики для анализа фазовых переходов в магнитных системах.

В основу алгоритма количественной оценки структурной сложности легло отслеживание неоднородности поведения паттернов, возникающих в системе на различных пространственных масштабах. Для демонстрации его работы можно рассмотреть магнитную конфигурацию размера $L \times L$ спинов (рисунок 6). 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 компо-

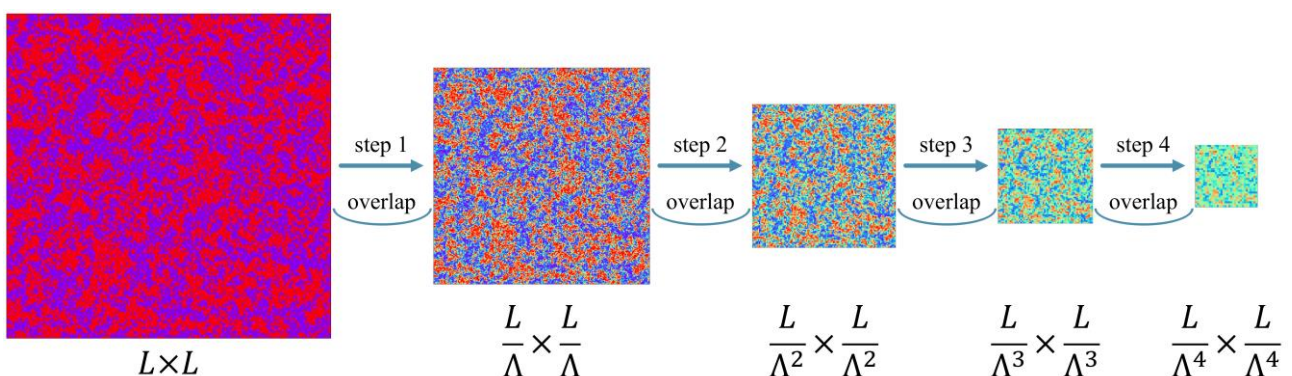


Рисунок 6 – Схематичное представление работы предложенного алгоритма. На рисунке приведены четыре шага перенормировки магнитной конфигурации размера $L \times L$, взятой из переходной области фазовой диаграммы в модели Изинга. При этом количество элементов матрицы на каждом шаге уменьшалось по осям в Λ раз. После чего происходит расчет перекрытий между паттернами на последовательных шагах процедуры перенормировки

ненты, 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. Было обнаружено, что простейшая дискретная схема уменьшения размера системы, основанная на усреднении, приводит к значимым и устойчивым результатам, поэтому все представленные данные были получены с ее помощью. На каждом шаге перенормировки имеющийся паттерн 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. Для расчета перекрытий используется следующая формула:

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

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, и учитывая используемую схему перехода, основанную на усреднении, можно получить:

$$C = \sum_{k=0}^{N-1} C_k = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{N-1} |O_{k+1,k+1} - O_{k,k}|, \quad (3)$$

где N – полное число шагов перенормировки. Ввиду того, что в данной записи отсутствует перекрытие между паттернами на различных шагах перенормировки $O_{k+1,k}$, пропадает необходимость учета изменения размера системы.

Путем выполнения предварительного тестирования на различных изображениях, было установлено, что получаемая величина отражает интуитивное представление о сложности объекта. Для проверки того, может ли структурная сложность использоваться для детектирования фазовых переходов в магнитных системах, нами была рассмотрена модель Изинга с ферромагнитным взаимодействием, определенная на квадратной (2D) и кубической (3D) решетках:

$$H = -J \sum_{i < j} S_i^z \cdot S_j^z, \quad J > 0. \quad (4)$$

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.

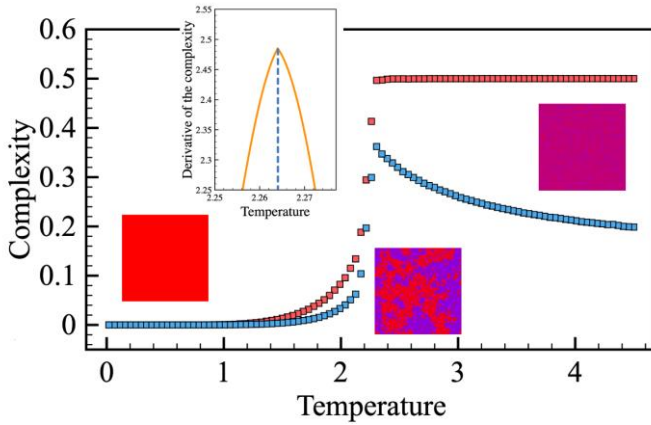


Рисунок 7 – Температурная зависимость сложности в двумерной модели Изинга. Красными и синими квадратами обозначены случаи $k \geq 0$ и $k \geq 1$, соответственно. На вставке изображено поведение первой производной dC/dT , максимум которой позволяет определить критическую температуру. Расчеты проводились при $N = 8$, $\Lambda = 2$

близко к результатам вычисления, на основе высокотемпературного разложения $T_c \approx 4.5103J$ [12] и анализа поведения теплоемкости в Монте-Карло симуляциях $T_c \approx 4.5J$ [13].

Как видно из рисунка 7, при учете вкладов от всех рассматриваемых масштабов $C(T)$ выходит на насыщение в парамагнитной фазе. Это объясняется хаотическим упорядочением магнитных моментов при $T > T_c$, что приводит к значительному вкладу от первого шага перенормировки и перекрытия полученного

Полученные зависимости структурной сложности от температуры не только позволяют отследить изменения в поведении системы, но и являются довольно стабильными – погрешность значений между независимыми Монте-Карло реализациями системы составили всего порядка 0.01%. Кроме этого, 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 $T_c/J = 2/\ln(1 + \sqrt{2}) \approx 2.269$ [11]. В случае кубической решетки была получена температура Кюри $T_c \approx 4.5J$, что

паттерна с исходным. Если отбросить данный шаг, сложность начнет ожидаемо уменьшаться с ростом температуры.

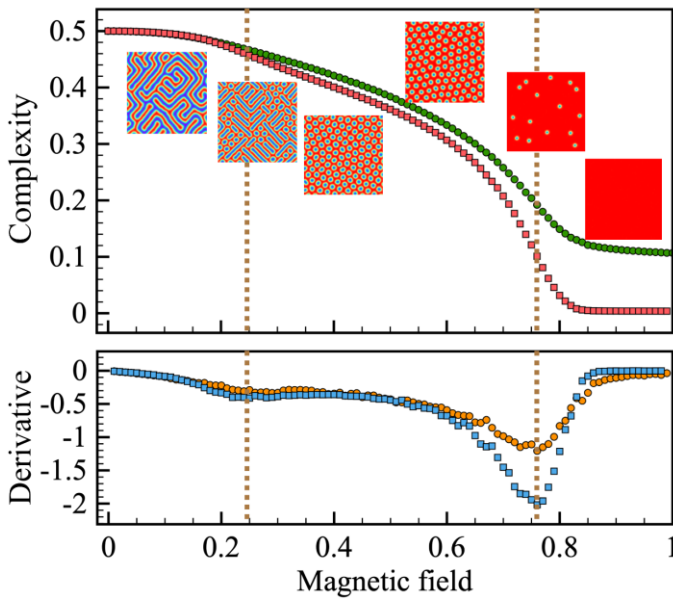


Рисунок 8 – (Верхняя панель) Зависимость структурной сложности от магнитного поля в системе с квадратной кристаллической решеткой, описываемой гамильтонианом (1), при параметрах $J = |\mathbf{D}| = 1$. (Нижняя панель) Первая производная dC/dB , используемая для детектирования фазовых переходов. Кругами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

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.

Было показано, что аналогичная картина наблюдается и при изменении кристаллической решетки с квадратной на треугольную. 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 .

Далее был рассмотрен срез фазовой диаграммы системы с взаимодействием Дзялошинского-Мории, описываемой гамильтонианом (1), при фиксированных параметрах $J = |\mathbf{D}| = 1$ и температуре $T = 0.02$. В качестве переменного параметра выступало внешнее магнитное поле. Было установлено, что экстремумы функции dC/dB соответствуют переходным областям: скирмион-бимеронной фазе и скирмионному газу (рисунок 8). 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

Стоит упомянуть, что итоговое значение структурной сложности C не является единственной доступной информацией о системе. Важно также проводить анализ вкладов с различных пространственных масштабов в эту величину (рисунок 9). Так, было установлено, что спиновые спирали и скирмионы характеризуются наличием существенных вкладов от нескольких масштабов. В это же время структурная сложность парамагнетика обусловлена резкими изменениями при размытии исходного паттерна. В наиболее интересном случае, соответствующем фазовому переходу в модели Изинга, C_k распределены более равномерно по всем представленным масштабам.

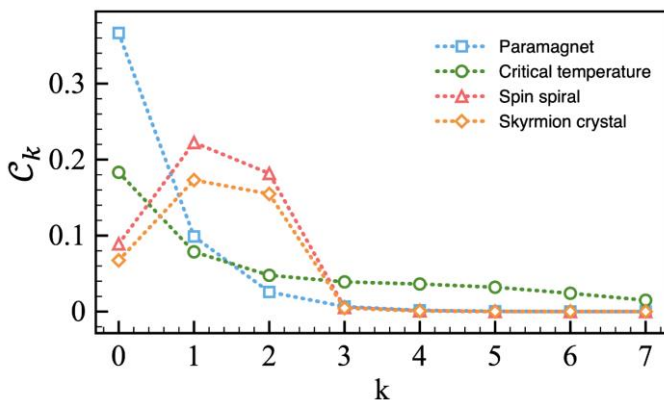


Рисунок 9 – Распределения вкладов в структурную сложность от разных масштабов для четырех типов магнитных структур. Расчеты проводились при $\Lambda = 2$

В заключительной части главы было проведено сравнение предложенной методики расчета структурной сложности с алгоритмами фазовой классификации, использующими компрессию данных. 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 [14]. Было показано, что обе методики позволяют с высокой точностью определить точку перехода в модели Изинга, однако в системе со свободной ориентацией магнитных моментов у алгоритмов, основанных на компрессии, наблюдаются артефакты. Это связано с тем, что в итоговом файле две близких ориентации вектора имеют разную запись (к примеру, $S^z = 0.593$ и $S^z = 0.612$), что затрудняет компактное сжатие. В модели Изинга же спины имеют только два значения и могут быть представлены как «0» и «1», что не приводит к возникновению численных артефактов.

На основе анализа динамических процессов, протекающих в системе с единичным скирмионом под действием ультракороткого импульса магнитного поля, была продемонстрирована универсальность предложенного подхода по отношению к типу обрабатываемых данных. Так, непосредственная спиновая конфигурация может быть заменена ее двумерным изображением, что облегчает анализ экспериментальных данных.

Еще одной характерной особенностью предложенного в работе 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.

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 [15].

СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Smith, T. The Magnetic Properties of Hematite / T. Smith // *Phys. Rev.* – 1916. – Vol. 8, – Iss. 6. – PP. 721–737.
2. Dzyaloshinskii, I. E. Thermodynamic Theory of "Weak" Ferromagnetism In Antiferromagnetic Substances. / I. E. Dzyaloshinskii // *Sov. Phys. JETP.* – 1957. – Vol. 5, – № 6. – 1259.
3. Moriya, T. Anisotropic Superexchange Interaction and Weak Ferromagnetism / T. Moriya // *Phys. Rev.* – 1960. – Vol. 120, – Iss. 1. – PP. 91–98.
4. Göbel, B. Beyond skyrmions: Review and perspectives of alternative magnetic quasiparticles / B. Göbel, I. Mertig, and O. A. Tretiakov // *Phys. Rep.* – 2021. – Vol. 895, – PP. 1–28.
5. Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal / X. Z. Yu [et al.] // *Nature.* – 2010. – Vol. 465, – Iss. 7300. – PP. 901–904.
6. Lloyd, S. Measures of complexity: a nonexhaustive list / S. Lloyd // *IEEE Contr. Syst. Mag.* – 2001. – Vol. 21, – PP. 7–8.
7. Cook, S. *CUDA Programming: A Developer's Guide to Parallel Computing with GPUs* (1st ed.) // Morgan Kaufmann Publishers Inc. – 2012. – 592 pp.
8. Scikit-learn: Machine Learning in Python / F. Pedregosa [et al.] // *J. Mach. Learn. Res.* – 2011. – Vol. 12, – № 85. – PP. 2825–2830.

9. 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.
10. Carrasquilla, J. Machine learning phases of matter / J. Carrasquilla, R. G. Melko // *Nat. Phys.* – 2017. – Vol. 13, – Iss. 5. – PP. 431–434.
11. 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.
12. Fisher, M. E. The theory of equilibrium critical phenomena / M. E. Fisher // *Rep. Prog. Phys.* – 1967. – Vol. 30, – № 2. – PP. 615–730.
13. 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.
14. Sheinwald, D. Two-dimensional encoding by finite-state encoders / D. Sheinwald, A. Lempel, J. Ziv // *IEEE Trans. Commun.* – 1990. – Vol. 38, – Iss. 3. – PP. 341–34.
15. Certification of quantum states with hidden structure of their bitstrings / O. M. Sotnikov [et al.] // *npj Quantum Inf.* – 2022. – Vol. 8, – Iss. 1. – 41.

ПУБЛИКАЦИИ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи в рецензируемых научных журналах, определенных ВАК РФ и Аттестационным советом УрФУ:

1. **Iakovlev, I. A.** Bimeron nanoconfined design / **I. A. Iakovlev**, O. M. Sotnikov, V. V. Mazurenko // *Phys. Rev. B.* – 2018. – Vol. 97, – Iss. 18. – 184415; (0.47 п.л./ 0.38 п.л.) (Web of Science, Scopus).
2. **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; (0.69 п.л./ 0.37 п.л.) (Web of Science, Scopus).
3. **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; (0.8 п.л./ 0.4 п.л.) (Web of Science, Scopus).
4. Bagrov, A. A. Multiscale structural complexity of natural patterns / A. A. Bagrov, **I. A. Iakovlev**, A. A. Piasov, M. I. Katsnelson, V. V. Mazurenko // *Proc. Natl. Acad. Sci.* – 2020. – Vol. 117, – № 48. – PP. 30241–30251; (1.28 п.л./ 0.96 п.л.) (Web of Science, Scopus).
5. 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; (1 п.л./ 0.25 п.л.) (Web of Science, Scopus).

Публикации в других научных изданиях:

6. **Яковлев, И. А.** Классификация двумерных и трехмерных топологических магнитных структур / **И. А. Яковлев**, О. М. Сотников, В. В. Мазуренко // Тезисы докладов LIV Школы ПИЯФ по физике конденсированного состояния (ФКС-2020), г. Санкт-Петербург – 2020. – С. 173. (0.06 п.л. / 0.03 п.л.).

7. **Iakovlev, I. A.** Computational technique for carrying out phase classification in magnetic materials / **I. A. Iakovlev**, A. A. Bagrov, A. A. Piasov, M. I. Katsnelson, V. V. Mazurenko // Тезисы докладов VIII Международной молодежной научной конференции «Физика. Технологии. Инновации» (ФТИ-2021), г. Екатеринбург – 2021. – С. 224–225. (0.1 п.л. / 0.07 п.л.).