

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Яковлева Ильи Александровича «Фазовая характеристика коррелированных систем с топологически-защищенными магнитными структурами при помощи методов машинного обучения и теории структурной сложности», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

**Актуальность** темы исследования обусловлена как выбором объекта исследования, так и новизной методов решения поставленных задач. В настоящее время наблюдается бурное развитие методов искусственного интеллекта и анализа данных и их внедрение в различные области научных исследований. Одним из актуальных приложения таких методов является разработка алгоритмов детектирования и распознавания сложных структурных паттернов в изучаемом объекте. Применительно к задачам физики конденсированного состояния и материаловедения, речь может идти, например, об идентификации различных фаз и определении границ их существования. В данной работе такая задача решалась для детектирования магнитных фаз в спиновых системах, в которых присутствует взаимодействие Дзялошинского-Мории. Данный класс магнитных материалов интересен как богатым и сложным поведением, так и перспективами использования в качестве материалов для спинтроники. Таким образом, в диссертационной работе Яковлева И.А. исследуются перспективные и сложные системы с использованием современных методов машинного обучения и анализа данных, что и определяет ее актуальность.

Диссертационная работа имеет стандартную структуру и 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.

**В первой главе** приведен обзор используемых в работе методов исследования. В частности, рассмотрена базовая модель — спиновый гамильтониан модели Гейзенберга с анизотропным взаимодействием Дзялошинского-Мории, используемая для моделирования нетривиальных магнитных структур, таких как магнитные спирали, скирмионы и бимероны. Также, приведен краткий обзор метода Монте-Карло и методов,

используемых для детектирования и анализа фазовых переходов, как классических, так и основанных на алгоритмах машинного обучения.

**Во второй главе** приводятся результаты исследования методом Монте-Карло фазовых диаграмм двумерной и трехмерной ферромагнитных систем, описываемых гамильтонианом с взаимодействиями Гейзенберга и Дзялошинского-Мории. Построены фазовые диаграммы данной модели в переменных магнитное поле – величина анизотропного вклада. Основной целью данного этапа работы было определение значений параметров модели, при которых реализуются смешанные состояния спиновых спиралей и скирмионов, изучение которых будет осуществляться на последующих этапах работы. Кроме того, в данной главе был описан оригинальный метод разделения магнитных фаз по профилям намагниченности. Суть метода заключается в представлении магнитной конфигурации в виде вектора значений магнитного момента на атомах, отсортированного по величине этого момента. Автором было показано, что анализ зависимостей компонент такого вектора позволяет достаточно эффективно разделять некоторые магнитные фазы.

**Третья глава** посвящена разработке методов классификации магнитных фаз при помощи алгоритмов машинного обучения и их применению к детектированию спиновых состояний в изучаемой модели. В качестве основного инструмента, автор выбрал простейшую полносвязную нейронную сеть прямого распространения с одним скрытым слоем. Одной из методических особенностей явилось использование мультиметок, что заметно повышает точность классификации фаз при наличии смешанных конфигураций. Было показано, что даже такая простая модель позволяет успешно детектировать критические точки и определять переходные области и их состав как при низкой, так и при более высокой температуре. Также было показано, что предварительная сортировка профилей намагниченности, предложенная ранее, значительно улучшает точность получаемых результатов. Также хочется отметить попытку автора проанализировать процесс обучения нейронной сети путем анализа значений ее весов. Подобный анализ позволяет лучше понять логику работы модели и оптимизировать процесс ее обучения.

**В четвертой главе** представлен алгоритм, позволяющий количественно оценить структурную сложность системы на основе информации о паттернах, реализуемых в ней на разных масштабах. Разработанный подход применен к задаче детектирования фазовых

переходов в спиновых системах. Было показано, что анализ зависимостей структурной сложности от магнитного поля и температуры позволяет эффективно определять точки фазовых переходов, в частности, детектировать границы переходных областей фазовой диаграммы в модели Гейзенберга с взаимодействием Дзялошинского-Мории. Результаты данной главы являются крайне интересными и обладают существенной новизной, а предложенный подход имеет перспективы применения для решения широкого спектра задач.

**В заключении** формулируются основные результаты и выводы диссертации, а также обсуждаются перспективы дальнейшей разработки темы.

**Достоверность** полученных результатов, обусловлена использованием надежных методов моделирования и анализа данных, применением известных программных продуктов и библиотек для их реализации, а также сравнением полученных данных с экспериментальными и теоретическими результатами других авторов. **Научная новизна** работы определяется, главным образом, разработкой новых методов анализа магнитной структуры спиновых систем и получением с их помощью новых фундаментальных результатов. **Практическая и теоретическая значимость** полученных результатов определяется возможностью применения разработанных методов для количественной характеристики фазовых диаграмм систем со сложными магнитными фазами, в частности, топологически-защищенными структурами – скирмионами, бимеронами и др.

В процессе чтения работы возникли следующие **вопросы и замечания**.

1. Представленная на Рис. 2.3 фазовая диаграмма ферромагнитной системы с взаимодействием Дзялошинского-Мории, получена путем охлаждения системы из неупорядоченного состояния, в ходе которого, при некоторой температуре, происходит переход из парамагнитного состояния в упорядоченные фазы. Данная диаграмма, очевидно, не отражает основное состояние системы, а скорее представляет результаты моделирования при фиксированных условиях. В связи с этим было бы крайне полезным указать температурные интервалы, в которые образуются те или иные фазы, а также обсудить их зависимость от условий моделирования. Также неплохо было бы провести верификацию результатов моделирования путем их сравнения с аналитическими решениями исследуемой модели

- (хотя бы среднеполевыми), а также с экспериментальными данными для реальных магнитных систем, адекватно описываемых изучаемой моделью.
2. Из текста работы непонятно являются ли полученные в моделировании структуры статичными или в них может наблюдаться динамика движения отдельных скирмионов или бимеронов как некоторых «псевдоатомов». Могут ли при достаточно высоких температурах наблюдаться процессы типа «плавления» скирмионной решетки или изменения ее симметрии?
  3. В разделе 2.3 был предложен метод классификации магнитных фаз, основанный на анализе профилей магнитных моментов атомов, отсортированных по их величине. В некоторых случаях (например, для фаз скирмионных сфер и скирмионных трубок на Рис. 2.12с) различие профилей скорее количественное, чем качественное. Возможно, что построение функций распределения магнитных моментов было бы более информативным для проведения классификации фаз.
  4. В главе 3 для классификации магнитных фаз используется полносвязная нейронная сеть прямого распространения. При таком подходе никак не учитывается пространственная корреляция между спиновыми конфигурациями, поскольку каждый спин системы подается на вход модели независимо от остальных. Несмотря на успешное решение поставленной задачи с помощью данной модели, предположу, что использование сверточных нейронных сетей было бы гораздо более эффективным.

Указанные замечания носят дискуссионный характер и не снижают общей положительной оценки работы. Работа написана грамотно с соблюдением научной стилистики и общепринятой терминологии. Научные положения, выносимые на защиту, обоснованы и достоверны. Содержание диссертации полностью отражено в опубликованных работах. Автореферат полностью отражает основное содержание диссертационной работы. Также хочется отметить высокий уровень журналов, в которых опубликованы основные результаты работы.

#### **Заключение по работе.**

Диссертационная работа «Фазовая характеристика коррелированных систем с топологически-защищенными магнитными структурами при помощи методов машинного обучения и теории структурной сложности» отвечает критериям пункта 9 Положения о присуждении ученых степеней в

УрФУ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Яковлев Илья Александрович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент:

Рыльцев Роман Евгеньевич,

доктор физико-математических наук,

ФГБУН Институт металлургии Уральского отделения

Российской академии наук, ведущий научный сотрудник

лаборатории неупорядоченных систем отдела физической химии,

Адрес: 620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 101

Телефон: +7 (961) 767-65-96

e-mail: rrylcev@mail.ru

 /Рыльцев Р.Е./

«20» июль 2024 г.

Подпись Рыльцева Р.Е. заверяю:

Ученый секретарь ИМЕТ УрО РАН, к.ф.н.



Котенков П.В.