

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.

Диссертация Яковлева Ильи Александровича посвящена изучению применимости компьютерных алгоритмов, в частности методов машинного обучения, к распознаванию фазовых состояний и переходов между ними в магнитно-коррелированных системах. Актуальность подобных систем для технологического прогресса связана с возможностью использования наномagnetизма в приборах спинтроники и магноники в том числе для компактного и энергонезависимого хранения информации. В настоящее время особый интерес вызывают свойства топологически-защищенных объектов, таких как магнитные скирмионы в металлических ферромагнетиках. Возможность стабилизации этих вихревых структур, а также доступные способы манипулировать ими с помощью магнитных и электрических полей делает их весьма перспективными для технологических приложений, в том числе для квантовых вычислений. Кроме скирмионов существует целый ряд других магнитных топологически-защищенных структур. Так, например, бимероны, ассоциируются с фрагментами спиновых спиралей и встречаются в переходных областях фазовой диаграммы материалов, в которых присутствует взаимодействие Дзялошинского-Мории. Принимая во внимание интерес к исследованию механизмов, ответственных за формирование магнитных структур, а также за переход между смежными

магнитными фазами в результате изменения температуры или магнитного поля, следует отметить высокую востребованность универсальных компьютерных алгоритмов, способных выявить магнитные фазы и их комбинации в картинах распределения спинов, полученных численно или экспериментально. Именно таким алгоритмам посвящена настоящая диссертационная работа, что в полной мере обеспечивает ее актуальность.

Структура и содержание работы

Диссертация объемом 115 страниц включает в себя введение, 4 главы и заключение, а также список цитируемой литературы из 145 библиографических ссылок. Введение посвящено поставленным целям исследования, актуальности темы диссертации, практической и научной значимости полученных результатов, новизне и личному вкладу автора.

В первой главе описываются основные методы, при помощи которых проводится численное моделирование поведения магнитных систем с топологически защищенными скирмионными структурами. Рассматриваются метод Монте-Карло с алгоритмом Метрополиса и спиновая динамика, а также описываются базовые принципы работы алгоритмов машинного обучения.

Во второй главе при помощи метода Монте-Карло и алгоритма Метрополиса строятся детальные фазовые диаграммы магнитных систем в состояниях скирмионной решетки, скирмионного газа, смешанной фазы, состоящей из скирмионов и бимеронов, а также в ферромагнитном состоянии и в состоянии со спиновыми спиралями. Предложен способ оптимального представления магнитных конфигураций, позволяющий определять их фазовое состояние без дополнительного расчета спиновых корреляционных функций. В основе подхода лежит графическое построение отсортированного вектора, содержащего z компоненту спина.

Третья глава посвящена применению методов машинного обучения для автоматического определения фаз магнитных конфигураций. Было показано,

что простейшей полносвязной нейронной сети прямого распространения с одним скрытым слоем достаточно для восстановления низкотемпературной фазовой диаграммы двумерной системы спинов 48×48 . Было показано, что нейронная сеть способна верно определять тип спиновых структур, полученных за пределами области параметров гамильтониана, используемых для обучения. Проведен сравнительный анализ работы нейронной сети с другими базовыми алгоритмами машинного обучения.

В четвертой главе обсуждаются алгоритмы вычисления структурной сложности в применении к магнитным системам. Структурная сложность вычислялась по неоднородности поведения паттернов, возникающих в системе на различных пространственных масштабах. Показано, что вычисленный таким образом параметр сложности позволяют стабильно отследить изменения в поведении системы с измерением температуры. Было показано, что метод позволяет с высокой точностью определять фазовые переходы различной природы, встречающиеся в магнитных системах, в том числе фазовые переходы неизвестной природы.

В заключении ясно сформулированы основные результаты и выводы диссертации, а также описаны перспективы дальнейшей разработки темы.

Обоснованность настоящей работы связана с необходимостью расширить понимание магнитно-коррелированных систем, выйдя за рамки изучения чистых топологически-защищенных состояний и сфокусироваться на переходных областях фазовой диаграммы, где происходит формирование смешанных состояний скирмион-ферромагнетик, комбинации скирмионов и спиновых спиралей, а также магнитных структур нового типа – бимеронов. Научная новизна исследования состоит в получении качественного и количественного описания переходных областей магнитных фазовых диаграмм без привлечения субъективных человеко-зависимых оценок. Предлагаемые в работе алгоритмы превосходят по этому параметру существующие подходы, основанные на идентификации топологических

магнитных фаз вещества с помощью расчета корреляционных функций. Так, в работе впервые была показана возможность количественного описания фазового состава магнитных систем с топологически защищенными скирмионными магнитными структурами при помощи алгоритмов машинного обучения в широком диапазоне температур, а также был предложен алгоритм количественной оценки структурной сложности магнитных состояний. Достоверность полученных результатов в рамках диссертационной работе апробирована в рамках участия в международных и отечественных конференциях, а также рядом публикаций в международных и отечественных журналах. Практическая и теоретическая значимость положений и выводов работы тесно связана с существующей в настоящее время необходимостью совершенствования компьютерных алгоритмов, в частности алгоритмов машинного обучения для классификации данных научного эксперимента, в том числе для точного определения фазовых состояний и оценки параметров микроскопических моделей. Разработанный алгоритм оценки структурной сложности объектов на основе анализа паттернов, может найти свое применение для анализа изображений, получаемых в ходе физических и биологических экспериментов.

Вопросы и замечания

Рассмотренные в работе методы распознавания различных фазовых состояний магнитной системы применялись к спиновым массивам, рассчитанным с помощью моделей. В таком варианте у алгоритма имеется в распоряжении точный набор данных для распознавания. Интересно было бы услышать, насколько рассмотренные методики применимы к результатам конкретных экспериментов, в которых измеряется распределение намагниченности в плоскости, например с помощью магнитной зондовой микроскопии (MFM) или фотоэмиссионной электронной микроскопии с

