

Machine learning prediction of topological quantities on Skyrmion systems

Yu-Ju Cheng, Kwai-Kong Ng

Department of Applied physics, Tunghai University, Taichung, Taiwan

摘要

近年來，機器學習 (Machine Learning, ML) 技術在凝聚態物理學各種問題中受到越來越多的關注。

此次研究將使用卷積神經網路(Convolution Neural Network,CNN)的監督式學習用於回歸問題，目標將skyrmion拓譜結構的自旋組態圖像中預測一些相關的數值型物理量，包括chirality(χ)、magnetization (B)、energy。訓練完後，即可將模型應用於全部數據進行高效的預測。

研究方法

- CNN是將自旋結構作為輸入資料，之後會經過卷積層、池化層和過濾器從自旋結構中提取特徵。隨後提取的特徵會被展平層輸入到全連接神經網路層進行處理。

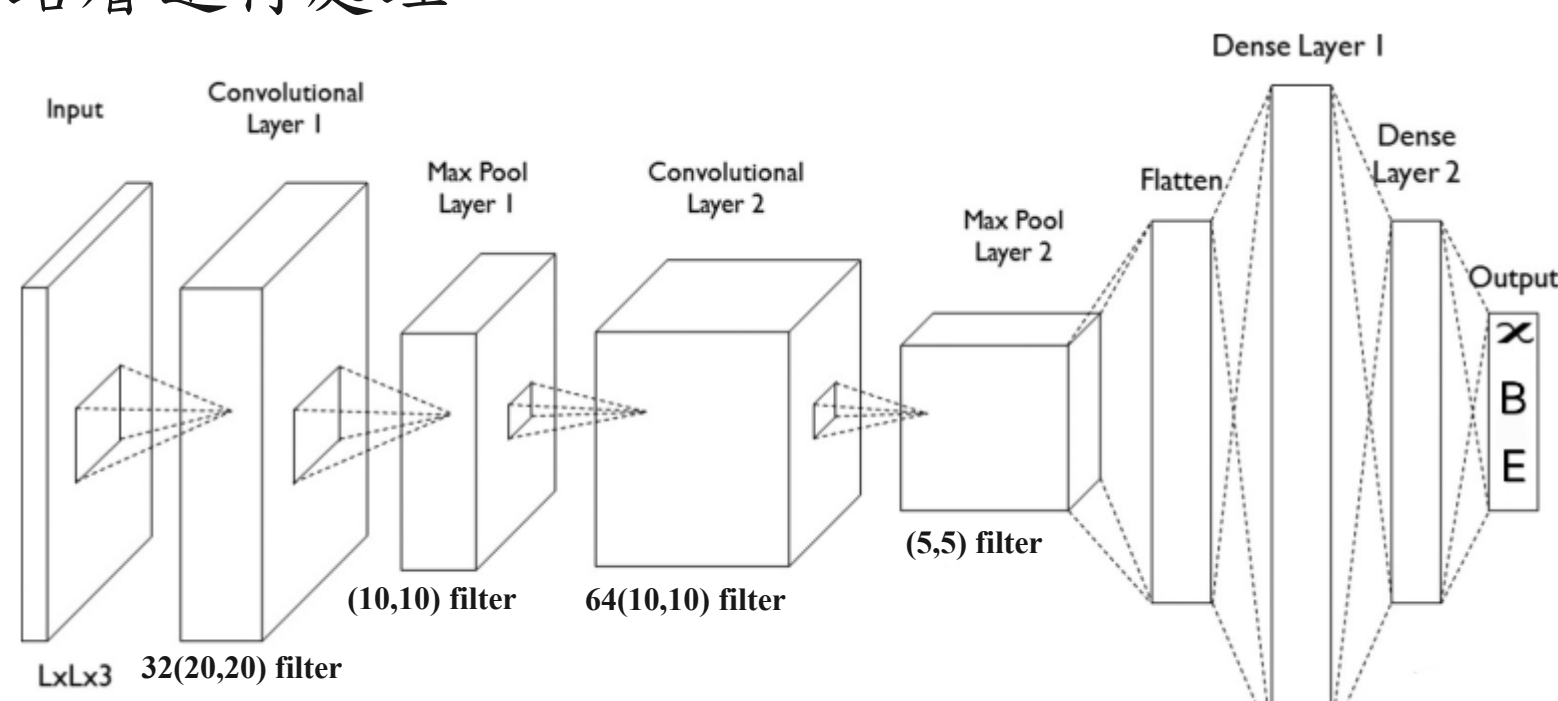


Fig.1 為CNN的運作原理(參考文獻[2])

- Skymions 是一種獨特的磁性紋理，呈現旋渦狀的排列。
- 結合了鐵磁交換相互作用和 Dzyaloshinskii-Moriya (DM) 相互作用，並施加外部磁場的自旋模型中出現。
- Hamiltonian公式

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{D} \cdot (\vec{S}_i \times \vec{S}_j) - \vec{B} \sum_i \vec{S}_i$$

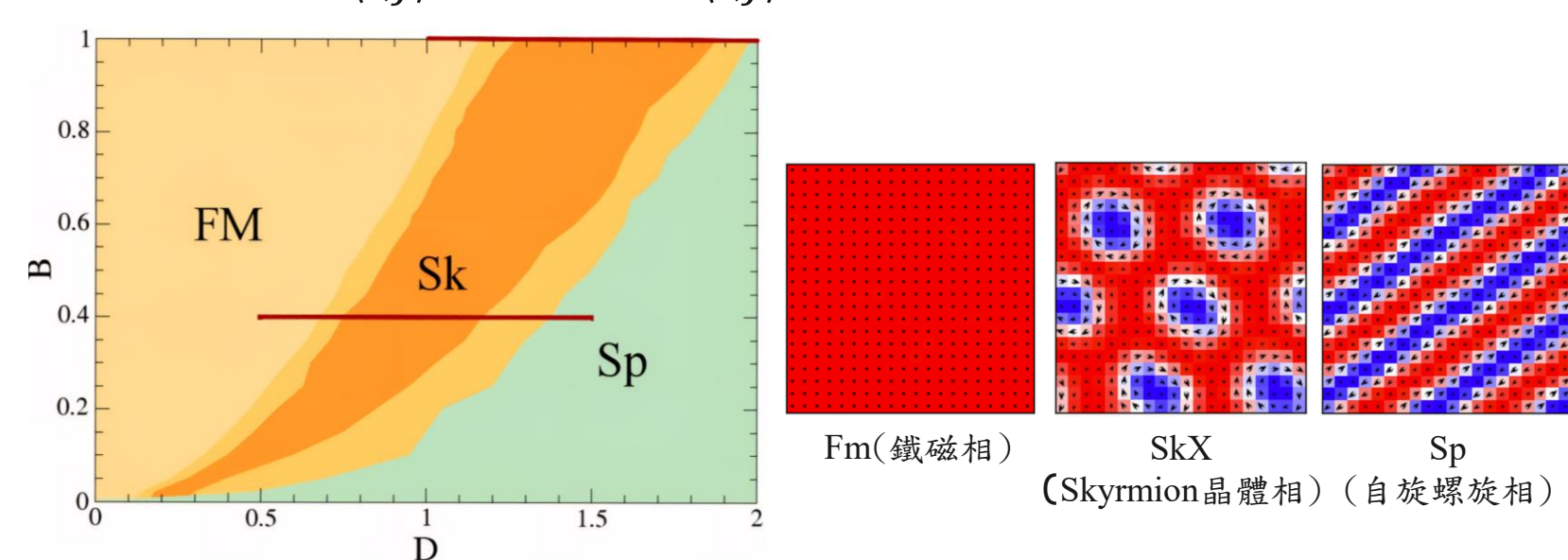


Fig.2 (左)skyrmion在特定溫度下，磁性系統的狀態隨著兩個重要參數的變化而改變。橫軸為Dzyaloshinskii-Moriya(DM)交互作用的強度，縱軸為外部磁場的強度(B)(參考文獻[1])。(右)skyrmion三種相態的自旋組態。

- 在固定磁場下，預測在不同DM交互作用，chirality、magnetization、energy的值
- 用來計算chirality(χ)的公式

$$\chi = \sum_i (\chi_{\vec{r}_i, \vec{r}_i + \hat{x}, \vec{r}_i + \hat{y}} + \chi_{\vec{r}_i, \vec{r}_i - \hat{x}, \vec{r}_i - \hat{y}}) / L^2$$

$$\chi_{ijk} = \vec{n}_i \cdot \vec{n}_j \times \vec{n}_k / 2$$

- 用來計算magnetization(B)的公式

$$m = \left| \sum_i \vec{S}_i \right| / L^2$$

- 用來計算energy的公式

$$E = \langle H \rangle$$

參考文獻

- A. Iakovlev, O. M. Sotnikov, and V. V. Mazurenko, "Bimeron nanoconfined design," *Phys. Rev. B* **97**, 184415 (2018)
- V. K. Singh and J. H. Han, *Phys. Rev. B* **99**, 174426 (2019)
- F. A. Gómez Albarracín and H. D. Rosales, "Machine learning techniques to construct detailed phase diagrams for skyrmion systems," *Phys. Rev. B* **105**, 214423 (2022)

結果

在固定磁場B=0.4

用CNN訓練DM交互作用D=0.5~0.6、0.9~1.0、1.4~1.5 每個區間各3000筆資料做訓練，2000筆資料做驗證

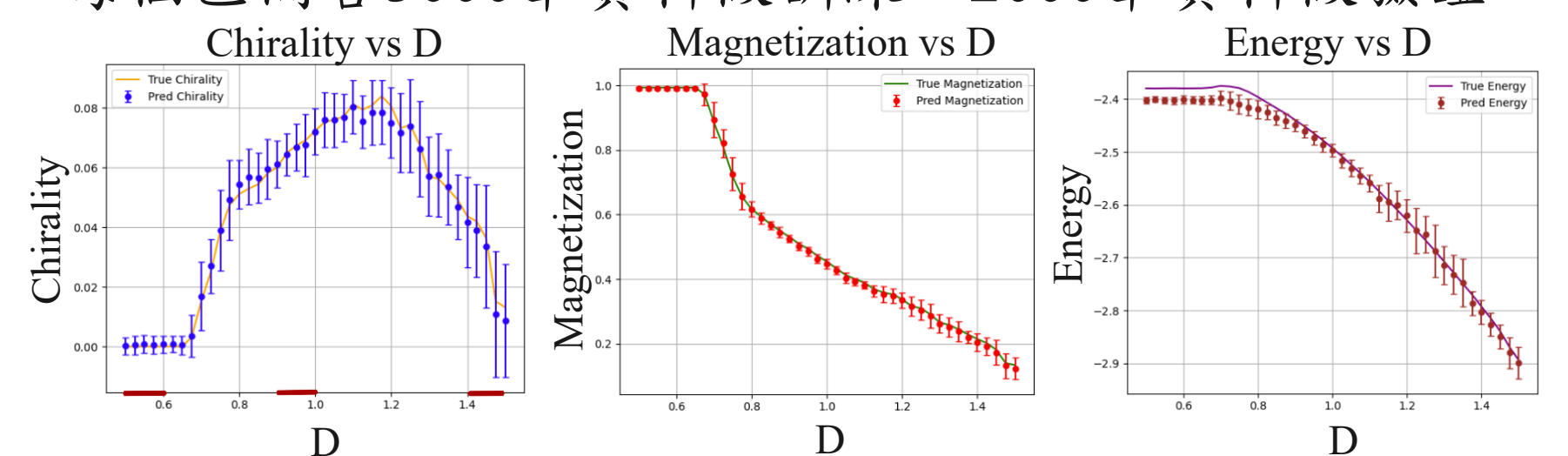


Fig.3 使用B=0.4的訓練結果，預測B=0.4的整筆資料(D=0.5~1.5)

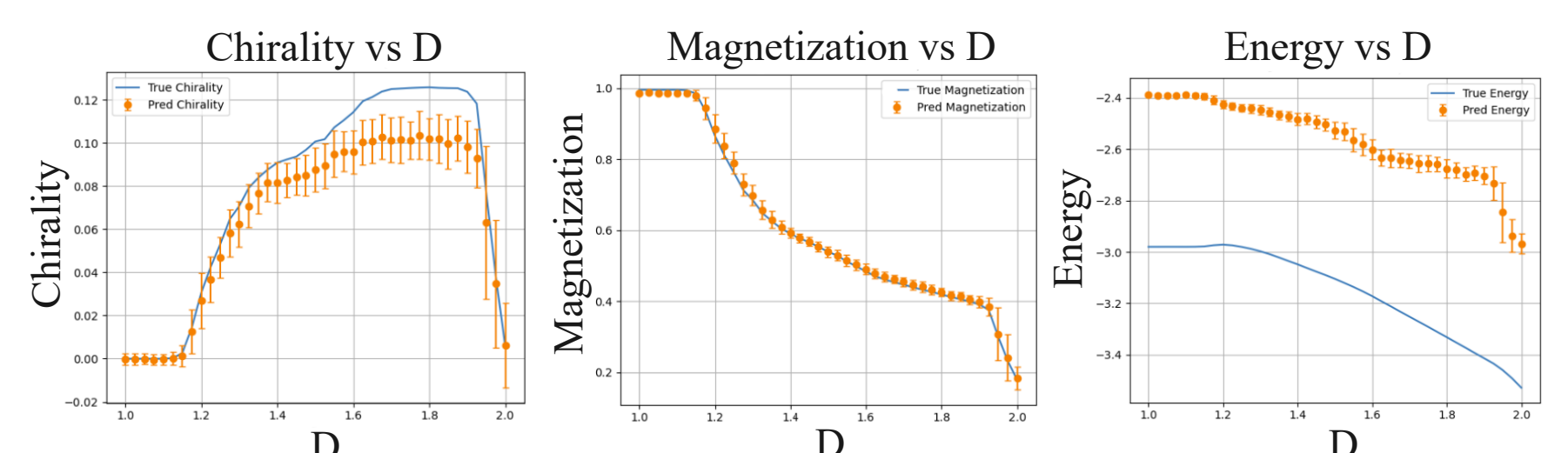


Fig.4 使用B=0.4的訓練結果，預測B=1.0的整筆資料(D=1.0~2.0)

在固定磁場B=1.0

用CNN訓練DM交互作用D=1.0~1.1、1.3~1.4、1.8~1.9、2.0，每個區間各1000筆做訓練400筆做驗證(因為D=2.0那邊只有1080筆，所以最後全部拿來做驗證的只有1280筆資料)

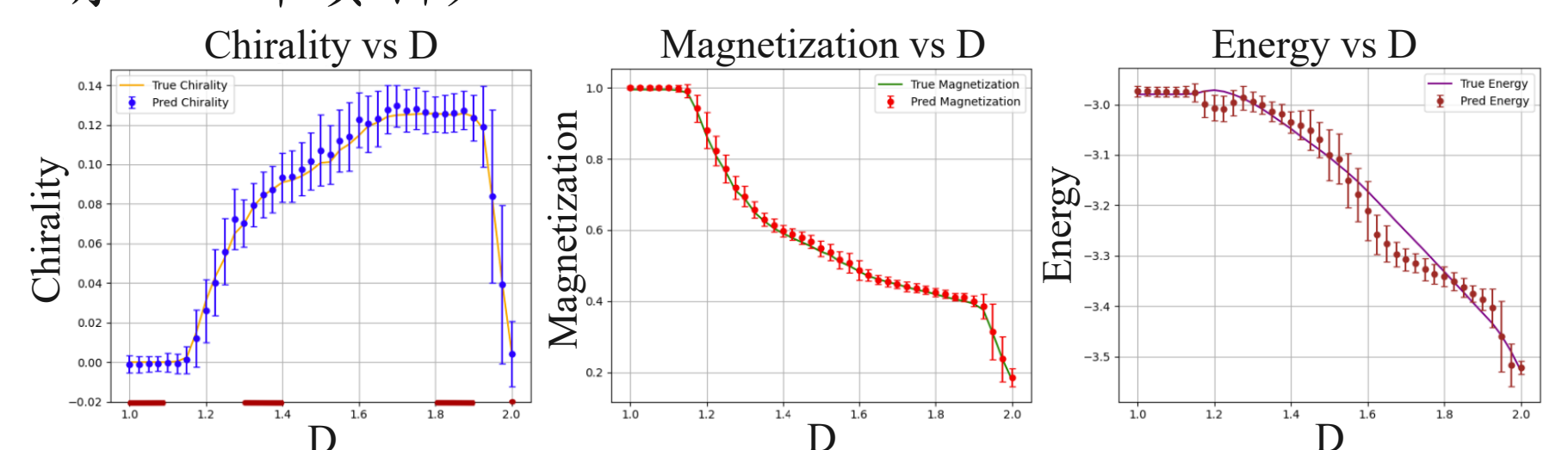


Fig.5 使用B=1.0的訓練結果，預測B=1.0的整筆資料(D=1.0~2.0)

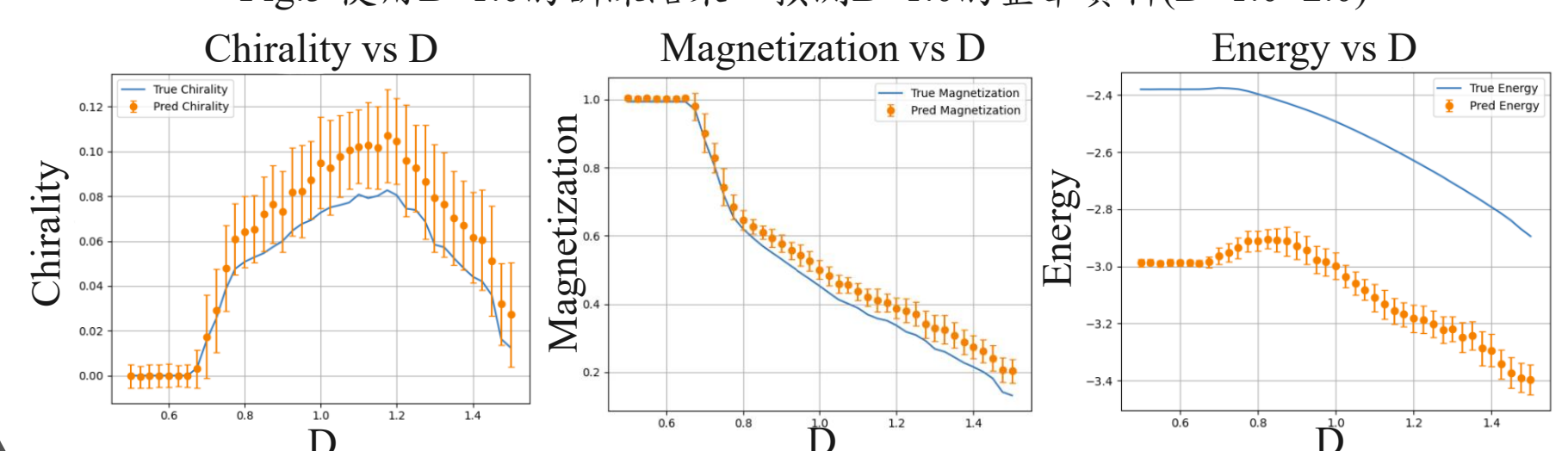


Fig.6 使用B=1.0的訓練結果，預測B=0.4的整筆資料(D=0.5~1.5)

結論

- 訓練集與預測的資料的磁場B相同時，預測的結果與實際的結果幾乎是一樣的。
- 訓練集與預測的資料的磁場B不同時：chirality的預測與結果大概在SkX(Skyrmion晶體相)的時候與實際值有些差異。magnetization的預測結果與實際值幾乎是一樣的。Energy的預測結果與實際結果會有磁場大小差的水平差距。