

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: Tatiana Vargicová
Název práce: Reconstruction of magnetic configurations using machine learning approaches
Studijní program a obor: Fyzika, Obecná fyzika (FOF)
Rok odevzdání: 2022

Jméno a tituly vedoucího: RNDr. Pavel Baláž, Ph. D.
Pracoviště: Katedra fyziky kondenzovaných látek, MFF UK
Kontaktní e-mail: balaz@karlov.mff.cuni.cz

Odborná úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Věcné chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu přiměřený počet méně podstatné četné závažné

Výsledky:

- originální původní i převzaté netriviální kompilace citované z literatury opsané

Rozsah práce:

- veliký standardní dostatečný nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Tiskové chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet četné

Celková úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího:

Vo svojej bakalárskej práci sa Tatiana Vargicová zaoberá teoretickou analýzou topologických magnetických konfigurácií pomocou metód strojového učenia, konkrétne, neurónových sietí typu *autoenkodér*. Učenie takejto neurónovej siete prebieha bez potreby zásahu učiteľa, tzv. *unsupervised learning*, len na základe vstupných dát, ktoré sú ďalej spracované jednotlivými vrstvami neurónovej siete. Úlohou autoenkodéru je skomprimovať (zakódovať) dáta, ktoré obdržal na vstupe, a následne ich čo najpresnejšie zrekonštruovať na výstupe. Kritériom úspešnosti tréningu autoenkodéru je podobnosť vstupných a výstupných dát. V hodnotenej práci študentka pracuje s datasetom zloženým z magnetických konfigurácií získaných pomocou Monte Carlo simulácií 2D Heisenbergovho modelu na štvorcovej mriežke veľkosti 200×200 . Okrem výmennej interakcie a vonkajšieho magnetického poľa nasmerovaného kolmo k rovine mriežky obsahoval Hamiltonián simulovaného systému aj interakciu typu Dzyaloshinskii-Moriya pôsobiacu medzi najbližšími susedmi na mriežke. Základným stavom takéhoto modelu môže byť homogénna feromagnetická konfigurácia, skyrmiónová mriežka, alebo magnetická špirála. Cieľom predkladanej bakalárskej práce bolo vytvoriť funkčný model autoenkodéru schopný zakódovať získané magnetické konfigurácie do efektívnej nízkorozmernej reprezentácie. Zvláštna pozornosť bola venovaná použitej stratovej funkcii, ktorá hrá kľúčovú úlohu pri tréningu neurónových sietí. Okrem štandardnej euklidovskej metriky medzi vstupnými a výstupnými dátami, študentka analyzovala vplyv rozšírenia stratovej funkcie o fyzikálne veličiny, predovšetkým energie vstupnej a výstupnej magnetickej konfigurácie, na tréning uvažovaných výpočtových modelov.

Tatiana Vargicová pracovala pod vedením školiteľa samostatne. Implementovala a analyzovala navrhnuté modely neurónových sietí a samostatne formulovala závery. Študentka pristupovala k zadanej téme od začiatku veľmi iniciatívne. Počas práce si rýchlo osvojila tak základné znalosti z oblasti mnohočasticových spinových systémov, ako aj praktické programátorské zručnosti. Použité programy si pripravovala samostatne v programovacom jazyku Python a využitím modulu TensorFlow. Okrem štatistickej analýzy predložených dát sa študentka detailne sústredila na samotné fungovanie použitých autoenkodérov na jednotlivých typoch magnetických konfigurácií. Na základe týchto analýz dospela k viacerým zaujímavým pozorovaniam, ktoré prezentuje vo svojej práci. Za všetky spomením navrhovaný detektor nestabilných topologických magnetických štruktúr (str. 30).

Hlavná časť práce sa zaoberá analýzou vplyvu stratovej funkcie na tréning autoenkodéru. Okrem štandardnej chyby rekonštrukcie, \mathcal{L}_{rec} , vstupných dát, študentka uvažovala rozšírenú stratovú funkciu vo forme

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_{\text{rec}} + c \mathcal{L}_E,$$

kde \mathcal{L}_E predstavuje energetickú stratovú funkciu vo forme sumy kvadrátov rozdielov lokálnych energií vstupných a výstupných konfigurácií v jednotlivých uzloch mriežky. Štatistickou analýzou výsledkov autoenkodéru, študentka nachádza rozumný rozsah hodnôt parametru c , ktorý vedie k zlepšeniu učenia študovaných neurónových sietí. Tento výsledok je pomerne netriviálny a otvára možnosti pre ďalšie štúdie.

Práca je napísaná v anglickom jazyku. Hoci hlavné myšlienky a postupy práce sú dobre zrozumiteľné, študentka používa miestami neformálne až hovorové formulácie, ktoré znižujú kvalitu odborného textu. Navyše niektoré dôležité rovnice, napr. (1.2) na strane 6, alebo (4.4) na strane 33, sú zapísané matematicky nekorektne. V rovniciach chýbajú indexy sumácií, alebo vzťahy medzi jednotlivými indexami.

Graficky je práca spracovaná na veľmi dobrej úrovni. V bakalárskej práci študentka prezentuje len vlastné originálne obrázky. Zrozumiteľnosť študovanej témy zvyšujú hlavne ručne kreslené obrázky magnetických konfigurácií a použitých autoenkodérov v úvodných kapitolách práce.

Predkladaná bakalárska práca obsahuje pomerne málo technických údajov. Hoci študentka používala dva rôzne autoenkodéry, v práci chýba ich technické porovnanie (hyperparametre modelov,

počet trénovaných parametrů). Študentka neopisuje detaily tréningu neurónových sítí (potrebný počet trénovacích epoch, vývoj stratovej funkcie počas tréningu, porovnanie dĺžky tréningu). Z textu tiež nie je zrejmé, či pri porovnávaní výsledkov jednotlivých podskupín magnetických konfigurácií, bola neurónová sieť trénovaná vždy len na danej podskupine, alebo na celom datasete. Ďalej chýba zmienka o možnostiach rozšírenia použitého datasetu (dátovej augmentácii). Pretože hodnotená bakalárska práca má prevažne technický charakter, bolo by vhodné uviesť v práci aspoň najdôležitejšie časti kódov, ktoré boli použité. Tieto nedostatky však neznižujú kvalitu fyzikálnej časti práce.

Tatiana Vargicová vo svojej bakalárskej práci splnila všetky požadované ciele. Okrem toho práca obsahuje aj pridanú hodnotu vo forme originálneho prístupu študentky k skúmanému datasetu. Z vyššie uvedených dôvodov hodnotím prácu stupňom *výborně*.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- Ako má vyzerat' matematicky korektné zapísaná stratová funkcia použitá pri tréningu autoenkodéru, rov. (4.4) na strane 33?

Práci:

- doporučuji
 nedoporučuji

uznat jako bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

- výborně velmi dobře dobře neprospěl

Místo, datum a podpis vedoucího:

Praha, 24. srpna 2022