**Использование машинного обучения для предсказние обменного смещения в магнитных наночастицах**

***Капранова К.А., Кладько Д.В.***

*Студент, 2 курс магистратура*

*ИТМO, Санкт-Петербургский государственный университет информационных технологий, механики и оптики, Санкт-Петербург, Россия*

*E-mail: kapranova@scamt-itmo.ru*

Развитие магнитных материалов играет ключевую роль в таких областях, как спинтроника, магнитная запись и катализ. Одним из важных факторов, определяющих их свойства, является обменное смещение, возникающее при взаимодействии ферромагнитных и антиферромагнитных фаз в гетероструктурах.Оптимизация обменного смещения в магнитных наночастицах является сложной задачей, требующей значительных вычислительных ресурсов при использовании традиционных методов, таких как теория функционала плотности и микромагнитное моделирование[1-2]. В этом исследовании рассматривается применение машинного обучения для предсказания обменного смещения, что значительно сокращает вычислительные затраты.

Машинное обучение предоставляет мощный инструмент для прогнозирования магнитных характеристик наноматериалов. В ходе исследования был собран и проанализирован датасет, включающий 980 образцов магнитных гетероструктурных наночастиц, описанных 37 параметрами, такими как геометрические, магнитные и кристаллографические свойства. Анализ состава наночастиц позволил выявить ключевые зависимости между структурными характеристиками и эффектом обменного смещения.

На основе полученных данных были обучены и протестированы несколько моделей, включая XGBoost и Kolmogorov-Arnold Network (KAN)[3]. Для оценки их производительности использовалась пятикратная кросс-валидация, что позволило объективно оценить предсказательные возможности моделей.

Таблица 1. Сравнение точности моделей прогнозирования ОС

| Модель  | R² (обучение) | R² (тест) | R² (валидация) | RMSE |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| XGBoost | 0.75 | 0.74 | 0.75 | 0.24 |
| Random Forest | 0.76 | 0.73 | 0.75 | 0.25 |
| KAN | 0.93 | 0.67 | 0.35 | 0.27 |

Как видно из таблицы, что XGBoost наиболее точен, а KAN эффективен для предсказания высоких значений обменного смещения. Использование этих методов позволяет находить баланс между точностью и выявлением сложных магнитных закономерностей.

Исследование демонстрирует эффективность машинного обучения для прогнозирования обменного смещения, что открывает новые возможности для разработки магнитов и спинтронных устройств. Будущие работы будут направлены на расширение базы данных и использование глубинного обучения для улучшения точности предсказаний.

*Работа финансировалась Российским научным фондом No. 23-23-00334. Авторы также благодарят федеральную программу лидерства в академических кругах 2030 года за поддержку инфраструктуры.*

**Литература**

1. Kurichenko, V. L.; Karpenkov, D. Y.; Degtyarenko, A. Y. Experimental and micromagnetic investigation of texture influence on magnetic properties of anisotropic Co/Co3O4 exchange-bias composites. J. Magn. Magn. Mater. 2023, 565 (September 2022), No. 170232.

2. Brown, W. F. Virtues and weaknesses of the domain concept. Rev. Mod. Phys. 1945, 17 (1), 15−19.