

# Integración de aprendizaje automático en el estudio con dispersión de neutrones de sistemas magnéticos

S. A. Grigera<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos, UNLP-CONICET, La Plata 1900, Argentina.*  
[\\*sagr@iflysib.unlp.edu.ar](mailto:sagr@iflysib.unlp.edu.ar)

La investigación sobre materiales cuánticos requiere el diseño conjunto de la teoría y los experimentos, e implica el análisis de grandes cantidades de datos, que suelen incluir el reconocimiento de patrones y la categorización. La inteligencia artificial es una vía natural para optimizar estos procesos y unir la teoría y los experimentos. En esta charla discutiremos un esquema que propusimos para integrar el aprendizaje automático con simulaciones de alto rendimiento y mediciones de dispersión, cubriendo el proceso típico de los experimentos con neutrones[1,2]. Nuestro enfoque utiliza autoencodificadores no lineales entrenados en simulaciones realistas junto con un sustituto rápido para el cálculo de la dispersión en forma de modelo generativo. Como ejemplo de este enfoque discutiré el caso del sistema magnético altamente frustrado,  $Dy_2Ti_2O_7$ , utilizando predicciones de aprendizaje automático para guiar el experimento de dispersión de neutrones bajo presión hidrostática, extraer parámetros de materiales y construir un diagrama de fases. Nuestro esquema proporciona un conjunto completo de capacidades que permite la integración directa de la teoría junto con el procesamiento automatizado de datos y proporciona una visión directa en una escala de tiempo rápida de un sistema de materia condensada.

[1] Machine Learning Assisted Insight to Spin Ice  $Dy_2Ti_2O_7$ , A. M. Samarakoon, K. Barros, Y. W. Li, M. Eisenbach, Q. Zhang, F. Ye, ZL Dun, H. Zhou, S. A. Grigera, C. D. Batista & D. A. Tennant, *Nature Communications* **11** 892 (2020).

[2] Integration of Machine Learning with Neutron Scattering for the Hamiltonian Tuning of Spin Ice under Pressure, A. Samarakoon, D. A. Tennant, F. Ye, Q. Zhang & S. A. Grigera, *Communications Materials*, **3**, 84 (2022)