

Explorando la Relación entre la Composición de los Elementos y la Superconductividad a Altas Temperaturas mediante Redes Neuronales Densas

Eber David Gaytán Medina

Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada - Introducción a la Ciencia de Datos
eber@cicese.edu.mx

Resumen—Este artículo explora la relación entre la composición de elementos y la superconductividad a altas temperaturas mediante redes neuronales densas. A partir de un dataset extendido con 167 atributos, se entrenó un modelo que logró un R^2 de 0.96 y un RMSE de 6.49 en el conjunto de prueba, superando métodos previos. Los resultados destacan el potencial del aprendizaje automático para identificar materiales superconductores de manera eficiente, ahorrando tiempo y costos en experimentos físicos.

Index Terms—superconductividad, redes neuronales, predicción, temperatura crítica, aprendizaje automático

I. INTRODUCCIÓN

El desarrollo de superconductores a temperatura ambiente es uno de los desafíos más importantes en la física de materiales. La necesidad de materiales que sean fáciles de producir, estables a temperaturas cercanas a las ambientales, y que mantengan sus propiedades a lo largo de un rango térmico, es fundamental para diversas aplicaciones tecnológicas que podrían transformar sectores clave de la economía global.

Un área de gran impacto es la computación cuántica, donde los superconductores son esenciales para la operación de los qubits, unidades básicas de información cuántica. Estos dispositivos requieren temperaturas extremadamente bajas para mantener la coherencia de los qubits y evitar la pérdida de información cuántica, pero el desarrollo de materiales que funcionen a temperatura ambiente podría superar las limitaciones actuales y acelerar la adopción de la computación cuántica a gran escala [1].

Por otro lado, los superconductores ofrecen soluciones potenciales para problemas críticos en la producción y transporte de energía eléctrica. Actualmente, una gran cantidad de energía se pierde durante el transporte debido a la resistencia en las líneas de transmisión, lo que genera calor y reduce la eficiencia energética [2]. Los superconductores eliminan esta resistencia, permitiendo la transmisión de energía sin pérdidas y mejorando la eficiencia de las redes eléctricas, lo cual podría ser revolucionario para la industria energética global.

Además, los superconductores tienen aplicaciones en trenes de levitación magnética, dispositivos de almacenamiento de energía como los sistemas de almacenamiento de energía magnética por superconducción (SMES) que almacenan energía de la misma forma que lo haría un inductor

convencional, con la principal diferencia de que la corriente directa fluye a través de un alambre superconductor significando que el alambre se encuentra a temperaturas criogénicas y no muestra resistencia conductiva alguna [3]. Otros ejemplos son en la diagnosis médica (para imágenes de resonancia magnética), centros de investigación (equipos de resonancia magnética nuclear, aceleradores, reactores de fusión) y procesos industriales (separación magnética), donde la eficiencia y el control de los campos magnéticos son esenciales.

Dada la relevancia de estos avances, las investigaciones sobre nuevos materiales superconductores ya no solo son valiosas, sino necesarias. Para acelerar el descubrimiento de nuevos materiales con estas propiedades, el uso de herramientas avanzadas como el aprendizaje automático se vuelve crucial, permitiendo predecir y validar compuestos prometedores antes de su fabricación y prueba experimental [4].

II. METODOLOGÍA

Se utilizaron dos Datasets, el primero se hizo a partir un conjunto de datos con descriptores químicos y físicos de materiales, con el objetivo de establecer una relación entre la composición de los elementos y la superconductividad a altas temperaturas [5]. El segundo es la base y tiene el formato de material y temperatura crítica. Para asegurarse de condensar la mayor cantidad de información en un solo dataset se hizo un “merge” a partir de la temperatura crítica, uniendo 82 columnas del primer dataset y 87 del segundo.

II-A. Conjunto de datos

El conjunto de datos empleado consta de 168 atributos que describen la composición y las propiedades de los materiales superconductores, con temperaturas críticas que oscilan entre 0 y 140 K. Los atributos se generaron a partir de análisis químicos, físicos y estadísticas descriptivas de los elementos que componen cada material.

II-B. Preprocesamiento

II-B1. Gestión de Datos Desbalanceados: Se exploró la distribución de las temperaturas críticas para identificar posibles desbalances. Se emplearon histogramas y gráficos de densidad para visualizar la distribución.

II-B2. Estandarización: Se obtuvo que los datos se desbalanceaban hacia temperaturas cercanas al 0 absoluto como se puede observar en la figura 1, por lo tanto se hizo una transformación z-score para que todos los atributos contribuyan de manera equitativa al entrenamiento del modelo, evitando que los atributos con mayores magnitudes dominen el proceso.

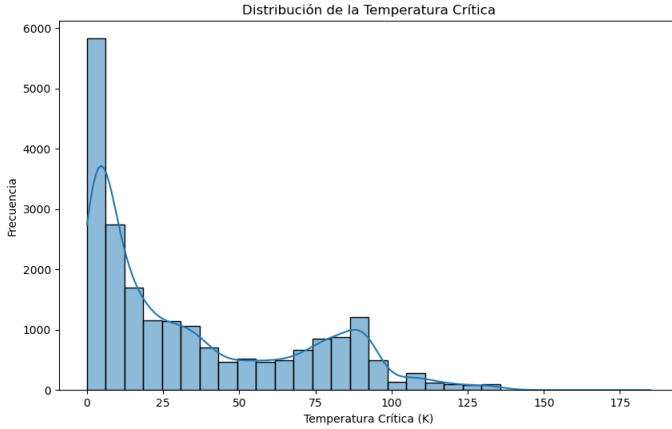


Figura 1. Distribución de temperaturas críticas en el dataset.

II-B3. División del Conjunto de Datos: El conjunto de datos fue dividido en un conjunto de entrenamiento (80 %) y un conjunto de prueba (20 %) de manera aleatoria, asegurando que las propiedades estadísticas de la distribución se mantuvieran.

II-C. Arquitectura del Modelo

Se diseñó un modelo de red neuronal profunda utilizando Keras y se usaron capas densas con la justificación de atacar una problemática con muchos atributos. La arquitectura es la siguiente:

- Una capa densa de 256 neuronas con función de activación ReLU, seguida de una capa de Dropout (0.3) para prevenir el sobreajuste.
- Una segunda capa densa de 128 neuronas con ReLU, seguida de una capa de Dropout (0.3).
- Capas adicionales de 64, 32 y 16 neuronas con ReLU para capturar características complejas.
- Una capa de salida de 1 neurona sin función de activación, adecuada para un problema de regresión.

El modelo fue compilado con el optimizador Adam y una tasa de aprendizaje inicial de 0.001, utilizando el error cuadrático medio (MSE) como función de pérdida y el error absoluto medio (MAE) como métrica de evaluación.

II-D. Entrenamiento

Se entrenó el modelo durante 25 épocas con un tamaño de lote de 32 muestras. Se implementó un programador de tasa de aprendizaje que redujo la tasa a la mitad cada 10 épocas para optimizar la convergencia. La figura 2 muestra cómo el error de entrenamiento y validación disminuyó durante el proceso.

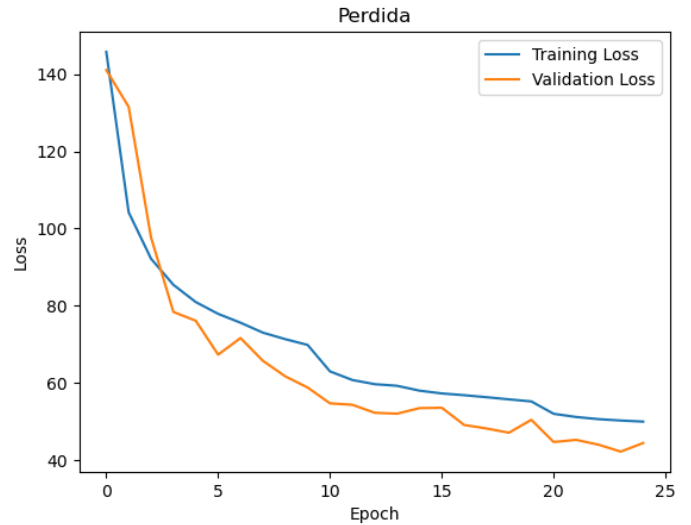


Figura 2. Evolución de la función de pérdida **Loss** durante el entrenamiento. La curva azul representa el conjunto de entrenamiento y la curva naranja el conjunto de validación.

II-E. Evaluación

El rendimiento del modelo se evaluó utilizando el MAE, el RMSE y el coeficiente de determinación (R^2) en el conjunto de prueba. Además, se compararon los resultados con modelos de referencia, como Random Forests y métodos de regresión tradicionales, reportados en estudios previos. Se generaron gráficos de dispersión para analizar visualmente las predicciones frente a los valores reales de temperatura crítica.

III. RESULTADOS

En esta sección, se presentan los resultados obtenidos al aplicar el modelo de red neuronal profunda para predecir la temperatura crítica de los materiales superconductores. Se analizan las métricas de rendimiento, visualizaciones clave y la importancia de los atributos.

III-A. Desempeño del Modelo

Usando el modelo propuesto, se hicieron las predicciones del apartado de prueba. El resultado, como se puede observar en la figura 3, es fácil de apreciar que en su mayoría, las predicciones de temperatura crítica fueron acertadas.

Se usó R^2 , RMSE y MAE para hacer las validaciones, dando como resultado:

$$RMSE : 6,4965$$

$$R^2_{Train} : 0,9621$$

$$R^2_{Test} : 0,9592$$

Métrica / Modelo	SVD	Bagged Tree	DNN (Propuesto)
R^2	0.90	0.93	0.96
RMSE	9.67	8.91	6.49

Para la comparación de desempeño entre diferentes modelos predictivos en el conjunto de datos evaluado, el modelo DNN

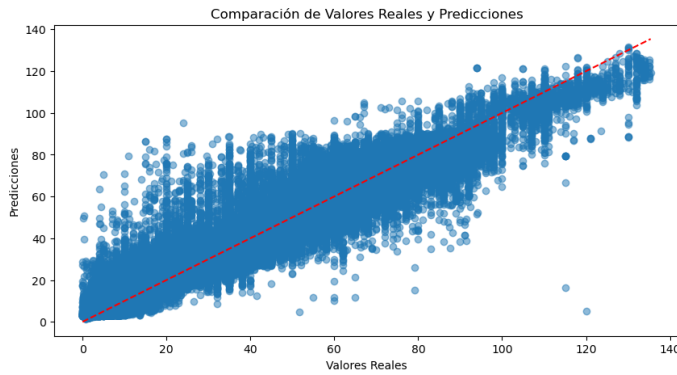


Figura 3. Gráfico de dispersión de las temperaturas reales enfrentados contra las temperaturas predichas.

(propuesto) mostró un desempeño superior en términos de R^2 y RMSE.

Como se muestra en la tabla III-A, el modelo propuesto basado en redes neuronales densas (DNN) superó a los modelos SVD y Bagged Tree, logrando un R^2 de 0.96 y un RMSE de 6.49 [6].

III-B. Análisis de Errores

A pesar del alto R^2 , los errores más altos se observaron en compuestos con temperaturas críticas superiores a 100 K, indicando que el modelo podría beneficiarse de más datos en ese rango.

IV. DISCUSIÓN Y CONCLUSIONES

- Se obtuvo un modelo de Redes Neuronales Densas capaz de predecir con una R^2 de 95 %, el cual, podría ayudar a validar aquellos superconductores teóricos sin necesidad de crearlos físicamente.
- Los modelos recurrentes entrenados en otros trabajos habían usado solo una tabla de composición del material, es decir, una tabla que indicaba el porcentaje del elemento usado para crear el material. Las conclusiones de este proyecto nos sugieren que para una mayor exactitud al predecir críticas, es necesario combinar la tabla de composición con la extensión de características del material y no solo entrenar a partir de la tabla del material.
- Este estudio demuestra la eficacia de las redes neuronales densas para predecir temperaturas críticas en materiales superconductores. El modelo propuesto no solo superó los investigaciones anteriores, sino que también subraya la importancia de combinar descriptores químicos y físicos para mejorar las predicciones. Estos hallazgos representan un paso hacia el diseño computacional de materiales superconductores, optimizando recursos y tiempo en la investigación experimental.

Como trabajo a futuro se propone automatizar el proceso de la generación del dataset extendido de tal manera que baste con ingresar la fórmula química para obtener la mayor cantidad de datos útiles.

Comparado con trabajos previos que emplearon Random Forests y regresiones lineales, el modelo propuesto logró un 3 % de mejora en el R^2 . Sin embargo, se identificaron limitaciones como la sensibilidad a atributos específicos que requieren validación experimental. Además, se sugiere explorar arquitecturas más avanzadas como Transformers para tareas similares.

REFERENCIAS

- [1] L. Bassman Oftelie, A. De Pasquale, and M. Campisi, "Dynamic cooling on contemporary quantum computers," *PRX Quantum*, vol. 5, July 2024.
- [2] I. Sarajcev, M. Majstrovic, and I. Medic, "Calculation of losses in electric power cables as the base for cable temperature analysis," *WIT Transactions on Engineering Sciences*, vol. 27, 2000.
- [3] G. González, "Almacenamiento de energía magnética por superconducción," 2013.
- [4] M. Coll and A. Palau, "Superconductividad," 2017.
- [5] Tunguz, "Superconductivity data dataset." <https://www.kaggle.com/datasets/tunguz/superconductivity-data-data-set/code>, 2020. Último acceso: 19 de noviembre de 2024.
- [6] B. Roter and S. V. Dordevic, "Predicting new superconductors and their critical temperatures using machine learning," *Physica C: Superconductivity and its applications*, vol. 575, p. 1353689, 2020.