

# Tarea: Cadenas de Markov y el Diseño de Nuevos Materiales

Aplicación de Recocido Simulado (Simulated Annealing)

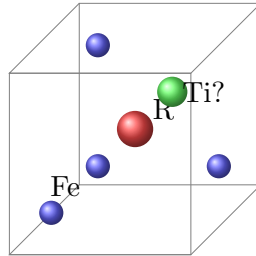
Freddy Hernández-Romero, Gabriel Gomez-Eslava

## 1. Introducción y Contexto Físico

En esta tarea aplicaremos los métodos de Cadenas de Markov de Monte Carlo (MCMC), y en particular el **Recocido Simulado (Simulated Annealing)**, para resolver un problema de optimización de vanguardia en la ciencia de materiales. El objetivo es determinar la configuración atómica óptima que maximiza la estabilidad de un nuevo tipo de imán permanente.

Los imanes de la familia **RT<sub>12</sub>** (donde R es una “tierra rara” y T es un metal de transición como el Hierro, Fe) son candidatos prometedores para futuras tecnologías sostenibles, pero su forma pura es estructuralmente inestable. Una estrategia para estabilizarlos es introducir “impurezas” o dopantes, como el Titanio (Ti), que reemplazan a algunos de los átomos de Hierro. La ubicación precisa de estos átomos de Titanio es crítica: una buena configuración estabiliza el material, mientras que una mala puede desestabilizarlo aún más.

El problema se reduce a encontrar la configuración de los átomos de Titanio que **minimiza la energía cohesiva total** del sistema. Dado que el número de configuraciones posibles es astronómico, este es un problema ideal para los métodos estocásticos que hemos estudiado.



Visualización del desafío: posicionar átomos dopantes en una estructura cristalina.

### 1.1. El Modelo de Energía: Potencial de Morse

La energía total del sistema ( $E_{\text{total}}$ ) se calcula sumando la energía de interacción de todos los pares de átomos en la red. Esta energía se modela con el **Potencial de Morse**:

$$U(r) = D_0 \left[ e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)} \right]$$

donde  $r$  es la distancia entre dos átomos, y los parámetros  $D_0$ ,  $\alpha$ , y  $r_0$  dependen del tipo de átomos que interactúan (ver Tabla 1). La energía total es la suma de todas las interacciones de pares únicos en el sistema:  $E_{\text{total}} = \sum_i \sum_{j>i} U_{ij}(r_{ij})$ .

Cuadro 1: Parámetros del Potencial de Morse para las interacciones atómicas (unidades arbitrarias de energía y distancia, basadas en eV y Å). R se refiere al Neodimio (Nd) en este problema.

Interacción	$D_0$ (energía)	$\alpha$ (ancho)	$r_0$ (dist. equilibrio)
Fe - Fe	0.764	1.5995	2.7361
Fe - R (Nd)	0.6036	1.6458	3.188
R (Nd) - R (Nd)	0.312	0.945	4.092
Fe - Ti	0.8162	1.448	2.914
R (Nd) - Ti	0.4964	1.4401	3.4309
Ti - Ti	0.6540	1.2118	3.3476

## Parte I

# Problema 1: Calentamiento en un Modelo 2D Sencillo

Comenzaremos con un modelo simplificado para familiarizarnos con la función de energía.

## 1.2. Descripción del Sistema

Considera una red 2D de 4x4. Las posiciones de los átomos fijos (4 de tipo R y 12 de tipo Fe) se dan en la Figura 1. El objetivo es encontrar la mejor posición para sustituir **un único átomo de Fe por uno de Ti**.

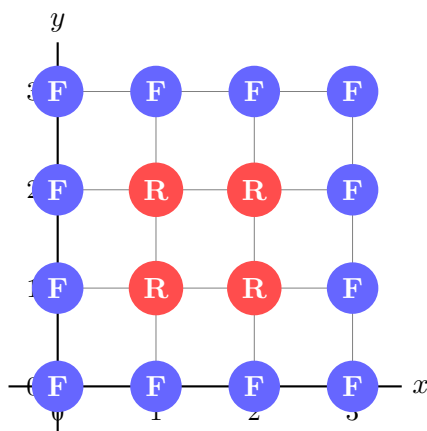


Figura 1: Red 2D 4x4. Los 12 sitios 'F' son los candidatos para la sustitución.

## 1.3. Tareas

1. **Función de Energía y Fuerza Bruta:** Implementa una función que calcule la energía total de la red. Úsala para encontrar la posición óptima y la energía mínima global mediante fuerza bruta (evaluando las 12 posibilidades).
2. **Recocido Simulado:** Implementa el algoritmo de recocido simulado para este problema. Verifica que tu algoritmo converja consistentemente a la solución óptima encontrada por fuerza bruta. Experimenta con el esquema de enfriamiento.
3. **Análisis Físico:** ¿Cuál es la característica principal del sitio óptimo? Compara tu hallazgo con la conclusión de la tesis de Skelland: el Titanio prefiere sitios alejados de las tierras raras (R).

## Parte II

# Problema 2: Un Desafío Combinatorio en 2D

Ahora, aumentamos la complejidad. El problema ya no puede resolverse por fuerza bruta.

### 1.4. Descripción del Sistema

Considera una red 2D más grande, de **10x10**. La configuración inicial consiste en:

- 84 átomos de Fe.
- 16 átomos de R, ubicados en un cuadrado central en las posiciones  $(x,y)$  con  $x,y \in \{3,4,5,6\}$ .

El objetivo es encontrar la configuración óptima para colocar **8 átomos de Titanio (Ti)** en los sitios de Fe. El número de configuraciones posibles es  $\binom{84}{8} \approx 1,5 \times 10^{10}$ .

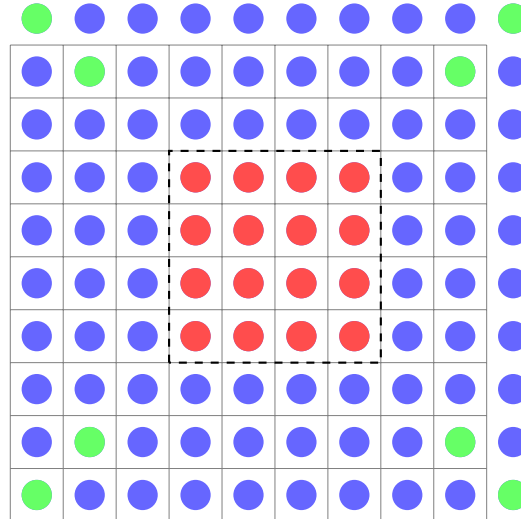


Figura 2: Esquema de la red 10x10 con una región central de átomos R. Se muestra una posible (y probable) configuración para 8 átomos de Ti.

### 1.5. Tareas

1. **Estado y Movimientos:** Define el espacio de estados. Un estado es un conjunto de 8 coordenadas para los átomos de Ti. Un movimiento en la cadena de Markov podría ser un **intercambio (swap)**: elige un átomo de Ti al azar y un átomo de Fe al azar, e intercambia sus posiciones.
2. **Implementación Eficiente del Recocido Simulado:**
  - Adapta tu implementación de SA para este nuevo espacio de estados y movimiento.
  - La clave del éxito será un **esquema de enfriamiento** bien diseñado. Justifica tu elección de temperatura inicial ( $T_0$ ), tasa de enfriamiento, y criterio de parada.
  - Es crucial que tu función de energía sea eficiente. Dado que un movimiento de intercambio solo cambia localmente las interacciones, puedes calcular  $\Delta E = E_{\text{nuevo}} - E_{\text{actual}}$  de forma muy rápida sin recalculando la energía de toda la red. **Implementa este cálculo incremental de  $\Delta E$ .**

### 3. Análisis de Resultados:

- Ejecuta tu algoritmo varias veces. Visualiza la configuración final de menor energía que encuentres.
- Describe el “patrón” de la solución óptima. ¿Dónde tienden a ubicarse los átomos de Ti? ¿Se agrupan o se dispersan? ¿Confirma esto la hipótesis de la Parte 1?
- Grafica la energía del sistema en función del paso de la simulación para una de tus ejecuciones. ¿Puedes identificar las fases de “exploración” (alta T) y “explotación” (baja T)?

## Parte III

# Problema 3: El Desafío 3D de la Tesis de Skelland

Finalmente, abordaremos el problema tridimensional real de la tesis.

### 1.6. Descripción del Sistema

El sistema es la estructura cristalina de  $\text{NdFe}_{12}$ . Utilizaremos una “supercelda” de  $2 \times 2 \times 1$ , una repetición de la celda unitaria básica. Esta supercelda contiene:

- 16 átomos de Nd (Neodimio, la tierra rara ‘R’).
- 96 átomos de Fe (Hierro).

El objetivo es encontrar la configuración óptima para **8 átomos de Titanio (Ti)** que sustituyen a 8 de los 96 átomos de Fe.

Se proporcionan dos archivos de datos:

- `Nd_positions.txt`: Coordenadas  $(x, y, z)$  de los 16 átomos de Nd.
- `Fe_positions.txt`: Coordenadas  $(x, y, z)$  de los 96 sitios de Fe candidatos.

La distancia ahora es la euclidiana en 3D:  $r = \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2 + \Delta z^2}$ .

### 1.7. Tareas

1. **Implementación 3D:** Generaliza tu código de la Parte 2 para trabajar con coordenadas 3D. El espacio de estados y el movimiento de intercambio son conceptualmente los mismos.
2. **Ejecución y Optimización:** Este problema es computacionalmente intensivo.
  - Ejecuta tu algoritmo de recocido simulado. Una única ejecución larga puede ser más práctica.
  - Documenta y justifica cuidadosamente tu esquema de enfriamiento.
3. **Comparación con los Resultados de la Tesis:**
  - La Figura 29a en la tesis de Skelland [1] muestra el patrón de llenado óptimo que él encontró para 8 sustituciones de Ti. Esta figura es una proyección 2D de la estructura 3D.

- Visualiza tu propia solución final. Puedes hacer proyecciones 2D (por ejemplo, graficando solo las coordenadas (x,y) de tus átomos de Ti) para compararla cualitativamente con la figura de la tesis.
- **Análisis cuantitativo:** Skelland concluye que el patrón óptimo maximiza la distancia entre los átomos de Ti (evitando interacciones Ti-Ti) y, al mismo tiempo, los mantiene alejados de los átomos de Nd. Calcula las siguientes métricas para tu solución final:
  - La distancia promedio entre cada átomo de Ti y su vecino de Nd más cercano.
  - La distancia promedio entre cada átomo de Ti y su vecino de Ti más cercano.
- Discute si tu resultado, obtenido con un método estocástico general, es consistente con el patrón específico encontrado por Skelland, quien utilizó un método determinista heurístico (“Probabilidades en Cascada”). ¿Qué similitudes y diferencias observas?

## Referencias

1. Skelland, Connor. *Impact of Chemical and Morphological Changes on the Phase Stability of Magnetic Materials*. Tesis Doctoral, Universidad de Exeter, 2021.
2. Kirkpatrick, S., Gelatt, C. D., Jr., & Vecchi, M. P. (1983). “Optimization by Simulated Annealing.” *Science*, 220(4598), 671–680.
3. Frenkel, D., & Smit, B. (2001). *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*. Academic Press.