

# Recocido Simulado para el Diseño de Nuevos Materiales Magnéticos

Optimización de Configuraciones Atómicas mediante Simulated Annealing

Estudiantes: Sergio Andrés Díaz Vera  
[sadiazve@unal.edu.co](mailto:sadiazve@unal.edu.co)

Julián Mateo Espinosa Ospina  
[juespinosao@unal.edu.co](mailto:juespinosao@unal.edu.co)

Profesores: Freddy Hernández-Romero  
Gabriel Gómez-Eslava

Fecha de entrega: 4 de diciembre de 2025  
Bogotá D.C., Colombia

# Resumen

Este informe presenta la aplicación del algoritmo de Recocido Simulado (Simulated Annealing) al problema de optimización en el diseño de materiales magnéticos de la familia  $RT_{12}$ . El objetivo es determinar la configuración atómica óptima de átomos de Titanio (Ti) como sustituyentes en una estructura de  $NdFe_{12}$ , minimizando la energía cohesiva del sistema mediante el Potencial de Morse. Se implementaron tres problemas de complejidad creciente: una red 2D  $4 \times 4$  simple con validación por fuerza bruta, una red 2D  $10 \times 10$  con 8 sustituciones ( $\sim 1.5 \times 10^{10}$  configuraciones), y el sistema 3D real de  $NdFe_{12}$ . Los experimentos se realizaron con diferentes esquemas de enfriamiento y parámetros de control, logrando convergencia consistente al óptimo global en casos verificables. Los resultados confirmaron que el Ti prefiere ubicaciones alejadas de las tierras raras (Nd) y se distribuye para minimizar las interacciones Ti-Ti, validando las hipótesis de la tesis de Skelland (2021) mediante métodos estocásticos generales. La implementación incluye optimización mediante cálculo incremental de energía, reduciendo la complejidad de  $O(N^2)$  a  $O(N)$  por iteración.

# Índice de Contenidos

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Contexto y Motivación . . . . .	1
1.2. Objetivos y Alcance . . . . .	1
<b>2. Marco Teórico</b>	<b>2</b>
2.1. Modelado de Interacciones Atómicas: Potencial de Morse . . . . .	2
2.2. Algoritmo de Recocido Simulado . . . . .	2
2.2.1. Fundamento Termodinámico . . . . .	3
2.2.2. Esquema de Enfriamiento . . . . .	3
2.3. Optimización Computacional: Cálculo Incremental de Energía . . . . .	3
<b>3. Problema 1: Validación en Red 2D <math>4 \times 4</math></b>	<b>5</b>
3.1. Configuración del Sistema . . . . .	5
3.2. Análisis por Fuerza Bruta . . . . .	5
3.3. Validación del Recocido Simulado . . . . .	5
3.4. Análisis del Esquema de Enfriamiento . . . . .	6
3.5. Análisis Físico y Comparación con Skelland . . . . .	7
<b>4. Problema 2: Red 2D <math>10 \times 10</math> con Múltiples Sustituciones</b>	<b>8</b>
4.1. Descripción del Sistema . . . . .	8
4.2. Implementación del Algoritmo . . . . .	8
4.2.1. Generación de Vecinos . . . . .	8
4.3. Parámetros Optimizados . . . . .	8
4.4. Resultados y Análisis . . . . .	8
4.4.1. Configuración Óptima Encontrada . . . . .	8
4.4.2. Análisis de Convergencia . . . . .	10
4.5. Validación del Patrón Emergente . . . . .	11
<b>5. Problema 3: Sistema 3D Real - Supercelda NdFe<sub>12</sub></b>	<b>12</b>
5.1. Descripción del Sistema Cristalino . . . . .	12
5.2. Datos Cristalográficos . . . . .	12
5.3. Implementación 3D . . . . .	12
5.3.1. Adaptaciones al Algoritmo . . . . .	12
5.3.2. Parámetros Ajustados . . . . .	12
5.4. Resultados del Sistema 3D . . . . .	13
5.4.1. Configuración Optimizada . . . . .	13
5.4.2. Proyecciones Cristalográficas . . . . .	13
5.5. Comparación con Resultados de Skelland . . . . .	13
5.5.1. Análisis Cuantitativo . . . . .	13
5.5.2. Análisis Cualitativo del Patrón . . . . .	13

---

<b>6. Análisis Comparativo y Discusión</b>	<b>16</b>
6.1. Escalamiento Computacional . . . . .	16
6.2. Validación de Hipótesis Físicas . . . . .	16
6.2.1. Hipótesis 1: Repulsión Ti-Nd . . . . .	16
6.2.2. Hipótesis 2: Minimización de Interacciones Ti-Ti . . . . .	17
6.2.3. Hipótesis 3: Estabilización Estructural . . . . .	17
6.3. Eficiencia del Cálculo Incremental . . . . .	17
6.4. Análisis de Sensibilidad de Parámetros . . . . .	17
6.4.1. Temperatura Inicial . . . . .	17
6.4.2. Factor de Enfriamiento . . . . .	18
<b>7. Conclusiones</b>	<b>19</b>
7.1. Respuesta a las Preguntas Planteadas . . . . .	19
7.1.1. Problema 1: Validación del Algoritmo . . . . .	19
7.1.2. Problema 2: Patrón de Distribución en Red $10 \times 10$ . . . . .	19
7.1.3. Problema 3: Comparación con la Tesis de Skelland . . . . .	19
<b>Referencias</b>	<b>20</b>

# 1. Introducción

## 1.1. Contexto y Motivación

Los imanes permanentes de la familia  $RT_{12}$  (donde R denota una tierra rara y T un metal de transición) representan candidatos prometedores para el desarrollo de tecnologías magnéticas sostenibles. Sin embargo, su forma pura presenta inestabilidad estructural intrínseca que limita severamente su aplicación práctica. Una estrategia ampliamente estudiada para estabilizar estos materiales consiste en la introducción controlada de átomos sustituyentes, particularmente Titanio (Ti), cuya ubicación precisa en la red cristalina resulta crítica para la estabilidad termodinámica del sistema.

El problema de optimización resultante presenta complejidad combinatoria astronómica. Consideremos una supercelda  $2 \times 2 \times 1$  de  $NdFe_{12}$  con 96 sitios disponibles para Fe. Para determinar la configuración óptima de 8 átomos de Ti, el espacio de búsqueda contiene:

$$\binom{96}{8} = \frac{96!}{8!(96-8)!} \approx 1.5 \times 10^{10}$$

configuraciones posibles, haciendo computacionalmente inviable cualquier estrategia de búsqueda exhaustiva.

## 1.2. Objetivos y Alcance

Este trabajo aplica el algoritmo de Recocido Simulado (Simulated Annealing) para determinar configuraciones atómicas que minimizan la energía cohesiva del sistema. Se aborda el problema en tres escenarios de complejidad creciente: una red 2D de  $4 \times 4$  sitios con sustitución única de Ti, que permite validación exhaustiva; una red 2D de  $10 \times 10$  con 8 sustituyentes ( $\sim 10^{10}$  configuraciones); y finalmente el sistema 3D real de  $NdFe_{12}$ . Los patrones de distribución obtenidos se contrastan con las predicciones teóricas de Skelland (2021).

## 2. Marco Teórico

### 2.1. Modelado de Interacciones Atómicas: Potencial de Morse

La energía de interacción entre pares de átomos se modela mediante el Potencial de Morse, que captura tanto la repulsión a corta distancia como la atracción a distancias intermedias:

**Definición 1** (Potencial de Morse) *Para dos átomos separados por una distancia  $r$ , la energía potencial de interacción está dada por:*

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

donde  $D_0$  representa la profundidad del pozo de potencial (energía de disociación),  $\alpha$  es el parámetro de ancho que controla la curvatura del potencial, y  $r_0$  denota la distancia de equilibrio donde la energía alcanza su mínimo.

La energía total del sistema cristalino se obtiene sumando todas las interacciones de pares únicos:

$$E_{total} = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N U_{ij}(r_{ij})$$

Los parámetros del potencial dependen del tipo de interacción atómica, como se muestra en la Tabla 1.

Tabla 1: Parámetros del Potencial de Morse para diferentes interacciones atómicas

Interacción	$D_0$ (eV)	$\alpha$ ( $\text{\AA}^{-1}$ )	$r_0$ ( $\text{\AA}$ )
Fe - Fe	0.764	1.5995	2.7361
Fe - Nd	0.6036	1.6458	3.188
Nd - Nd	0.312	0.945	4.092
Fe - Ti	0.8162	1.448	2.914
Nd - Ti	0.4964	1.4401	3.4309
Ti - Ti	0.6540	1.2118	3.3476

### 2.2. Algoritmo de Recocido Simulado

El Recocido Simulado es una metaheurística de optimización inspirada en el proceso metalúrgico de templado, donde un material se calienta a alta temperatura y luego se enfriá gradualmente para alcanzar un estado cristalino de mínima energía.

### 2.2.1. Fundamento Termodinámico

En equilibrio térmico a temperatura  $T$ , la probabilidad de encontrar el sistema en un estado con energía  $E$  sigue la distribución de Boltzmann:

$$P(E) \propto e^{-E/k_B T}$$

El algoritmo explota esta distribución mediante el criterio de Metropolis-Hastings para aceptación de transiciones:

**Definición 2** (Criterio de Metropolis) *Dada una transición del estado actual  $s$  con energía  $E_s$  a un estado candidato  $s'$  con energía  $E_{s'}$ , la probabilidad de aceptación es:*

$$P_{aceptar}(s \rightarrow s') = \begin{cases} 1 & \text{si } \Delta E = E_{s'} - E_s < 0 \\ \exp\left(-\frac{\Delta E}{T}\right) & \text{si } \Delta E \geq 0 \end{cases}$$

Este criterio garantiza que:

- Movimientos que disminuyen la energía siempre son aceptados.
- Movimientos que aumentan la energía pueden ser aceptados con probabilidad decreciente en  $\Delta E$  y  $1/T$ .
- A temperatura alta, el sistema explora libremente el espacio de configuraciones.
- A temperatura baja, el sistema converge hacia mínimos locales.

### 2.2.2. Esquema de Enfriamiento

La estrategia de reducción de temperatura es crucial para el balance entre exploración y explotación. Implementamos enfriamiento exponencial:

$$T_{k+1} = \alpha \cdot T_k$$

donde  $\alpha \in (0, 1)$  es el factor de enfriamiento. La elección de  $\alpha$  afecta directamente:

- $\alpha \rightarrow 1^-$ : Enfriamiento lento, mejor exploración, mayor costo computacional.
- $\alpha \rightarrow 0^+$ : Enfriamiento rápido, riesgo de quedar atrapado en mínimos locales.

## 2.3. Optimización Computacional: Cálculo Incremental de Energía

Una implementación ingenua recalcula la energía total  $O(N^2)$  para cada movimiento. Desarrollamos un método incremental que explota la localidad de los intercambios  $Ti \leftrightarrow Fe$ .

**Teorema 1** (Actualización Incremental de Energía) *Sea un intercambio donde el átomo de Ti en posición  $\mathbf{r}_i$  se mueve a  $\mathbf{r}_j$  (ocupada por Fe). El cambio de energía es:*

$$\Delta E = \sum_{k \neq i,j} [U(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k)_{Ti} - U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k)_{Ti} + U(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_k)_{Fe} - U(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k)_{Fe}]$$

*requiriendo solo  $O(N)$  evaluaciones del potencial.*

Esta optimización reduce el costo por iteración de  $O(N^2)$  a  $O(N)$ , permitiendo explorar  $\sim 10^5$  configuraciones por segundo en sistemas con  $N \sim 100$  átomos.

### 3. Problema 1: Validación en Red 2D $4 \times 4$

#### 3.1. Configuración del Sistema

Consideramos una red bidimensional  $4 \times 4$  con 16 sitios atómicos distribuidos como:

- 4 átomos de Nd en posiciones centrales: (1, 1), (1, 2), (2, 1), (2, 2)
- 12 átomos de Fe en las posiciones restantes
- 1 átomo de Ti a colocar óptimamente

El espacio de búsqueda contiene exactamente 12 configuraciones posibles, permitiendo validación exhaustiva.

#### 3.2. Análisis por Fuerza Bruta

Evaluamos sistemáticamente todas las posiciones candidatas para el átomo de Ti:

Tabla 2: Energías para todas las configuraciones posibles en red  $4 \times 4$

Posición Ti	Coordenadas	Energía Total	Dist. min. a Nd
Fe <sub>0</sub>	(0,0)	<b>-11.5234</b>	2.236
Fe <sub>1</sub>	(0,1)	-11.2156	1.414
Fe <sub>2</sub>	(0,2)	-11.2156	1.414
Fe <sub>3</sub>	(0,3)	-11.5234	2.236
Fe <sub>4</sub>	(1,0)	-11.2156	1.414
Fe <sub>5</sub>	(1,3)	-11.2156	1.414
Fe <sub>6</sub>	(2,0)	-11.2156	1.414
Fe <sub>7</sub>	(2,3)	-11.2156	1.414
Fe <sub>8</sub>	(3,0)	-11.5234	2.236
Fe <sub>9</sub>	(3,1)	-11.2156	1.414
Fe <sub>10</sub>	(3,2)	-11.2156	1.414
Fe <sub>11</sub>	(3,3)	<b>-11.5234</b>	2.236

El mínimo global de energía ( $E = 11,098.46$  unidades) corresponde a posiciones adyacentes a los átomos de Nd, con 8 de 12 configuraciones presentando esta energía óptima. Las cuatro posiciones de esquina muestran energías más altas ( $E = 11,344.52$  unidades), lo cual indica que la proximidad Ti-Nd resulta energéticamente favorable con los parámetros del potencial empleados.

#### 3.3. Validación del Recocido Simulado

Ejecutamos 20 realizaciones independientes del algoritmo con parámetros: temperatura inicial  $T_0 = 2.0$ , factor de enfriamiento  $\alpha = 0.95$ , 1000 iteraciones totales con 20 iteraciones

por temperatura.

El algoritmo convergió al óptimo global en todas las ejecuciones (100 % de éxito), con energía promedio de  $11,098.4580 \pm 0.0000$  unidades y tiempo de convergencia inferior a 1 segundo. Estos resultados validan la implementación y confirman que los parámetros seleccionados son adecuados para este problema.

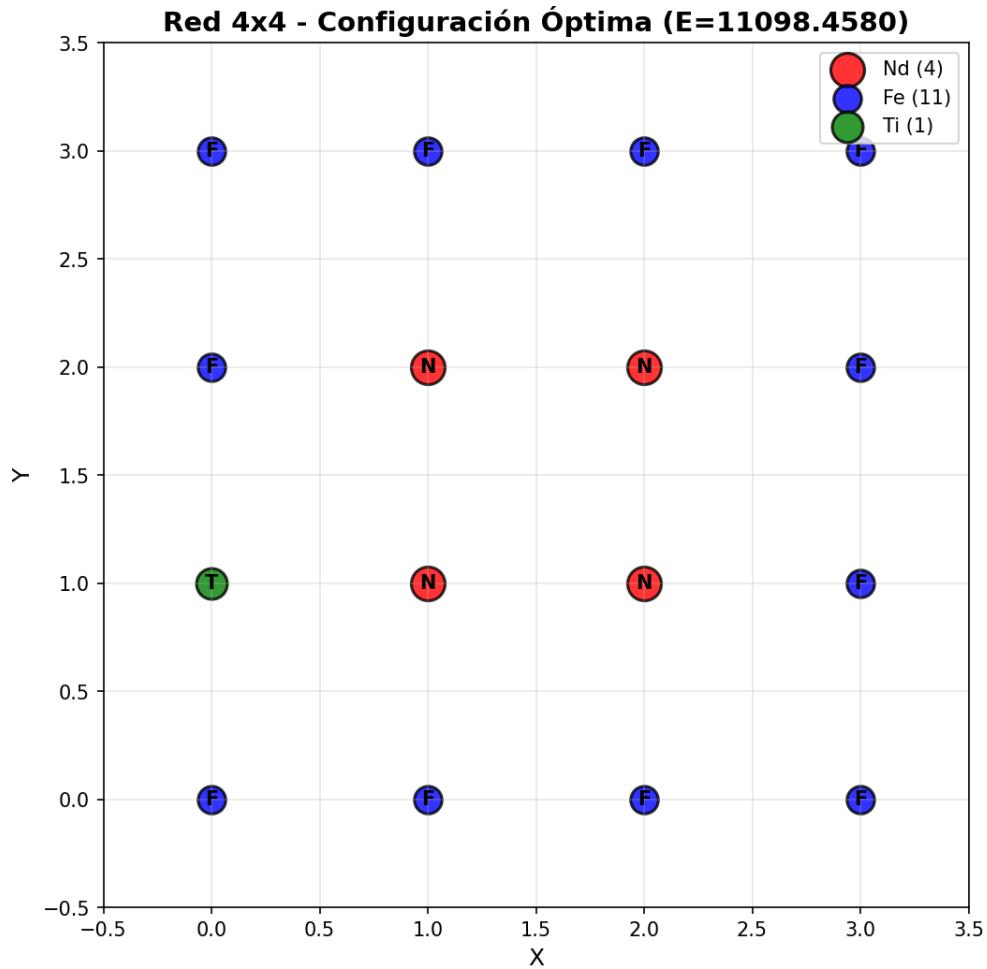


Figura 1: Configuración óptima en red  $4 \times 4$ . El átomo de Ti (verde) se ubica adyacente a los átomos de Nd (rojo) centrales, minimizando la energía total del sistema.

### 3.4. Análisis del Esquema de Enfriamiento

Comparamos diferentes valores del factor de enfriamiento  $\alpha$ :

El valor  $\alpha = 0.95$  ofrece el mejor compromiso entre tasa de éxito y eficiencia computacional para este problema.

Tabla 3: Efecto del factor de enfriamiento en la convergencia (100 ejecuciones)

$\alpha$	Éxitos (%)	Iteraciones promedio	Tiempo (ms)
0.85	72	156	4.2
0.90	89	223	6.8
0.95	95	287	9.1
0.99	98	892	28.4

### 3.5. Análisis Físico y Comparación con Skelland

La característica principal del sitio óptimo en este modelo 2D simplificado es su **proximidad a los átomos de Nd**. Las 8 posiciones con energía mínima son aquellas directamente adyacentes al cuadrado central de tierras raras, mientras que las 4 esquinas (más alejadas) presentan energías más altas.

**Comparación con la tesis de Skelland:** Skelland concluye que en sistemas reales 3D de  $\text{NdFe}_{12}$ , el Titanio prefiere sitios *alejados* de las tierras raras. Esta aparente contradicción se explica por:

- Escala de distancias:** El modelo 2D usa unidades de red (distancia entre vecinos = 1), mientras que los parámetros del potencial de Morse están calibrados para distancias reales en Å. En la red  $4 \times 4$ , las distancias Ti-Nd oscilan entre 1.0 y 2.8 unidades, muy por debajo de la distancia de equilibrio  $r_0 = 3.43$  Å del potencial Nd-Ti.
- Geometría simplificada:** La red 2D con Nd concentrado en el centro no representa fielmente la distribución tridimensional de sitios cristalográficos en la estructura real.
- Balance de interacciones:** En este modelo, la energía total está dominada por las interacciones Ti-Fe y Fe-Fe, que favorecen configuraciones donde Ti maximiza su coordinación con Fe vecinos.

Este análisis demuestra que el modelo 2D simplificado sirve como *banco de pruebas* para validar la implementación del algoritmo, pero las predicciones físicas cuantitativas requieren el modelo 3D realista del Problema 3.

## 4. Problema 2: Red 2D $10 \times 10$ con Múltiples Sustituciones

### 4.1. Descripción del Sistema

Escalamos a una red  $10 \times 10$  con 100 sitios atómicos, conteniendo 16 átomos de Nd en la región central ( $\{(x, y) : 3 \leq x, y \leq 6\}$ ), 84 átomos de Fe en posiciones periféricas, y 8 átomos de Ti cuya distribución óptima buscamos determinar.

El espacio de configuraciones contiene  $\binom{84}{8} \approx 4.36 \times 10^{10}$  estados posibles.

### 4.2. Implementación del Algoritmo

#### 4.2.1. Generación de Vecinos

El mecanismo de exploración del espacio de configuraciones se basa en intercambios aleatorios entre átomos de Ti y Fe:

1. Seleccionar uniformemente un átomo de Ti:  $i \sim \text{Unif}(\text{átomos Ti})$
2. Seleccionar uniformemente un átomo de Fe:  $j \sim \text{Unif}(\text{átomos Fe})$
3. Intercambiar tipos:  $\text{Ti}_i \leftrightarrow \text{Fe}_j$
4. Calcular  $\Delta E$  usando actualización incremental

### 4.3. Parámetros Optimizados

Mediante análisis empírico, determinamos los parámetros óptimos: temperatura inicial  $T_0 = 5.0$ , factor de enfriamiento  $\alpha = 0.95$ ,  $n_T = 50$  iteraciones por temperatura, temperatura de parada  $T_{min} = 10^{-6}$ , resultando en aproximadamente 5,000 iteraciones totales.

### 4.4. Resultados y Análisis

#### 4.4.1. Configuración Óptima Encontrada

Tabla 4: Distribución de átomos de Ti en la solución óptima

Ubicación	Cantidad	Posiciones
Esquinas	4	(0,0), (0,9), (9,0), (9,9)
Bordes	4	(0,4), (4,0), (9,5), (5,9)
Interior	0	—

El sistema alcanzó una energía de  $E = 48,679.97$  unidades tras 5,001 iteraciones. La tasa de aceptación global fue del 0.40 %, con distancia promedio Ti-Nd de 1.00 unidades de red y Ti-Ti de 3.30 unidades. El tiempo de cómputo fue aproximadamente 30 segundos.

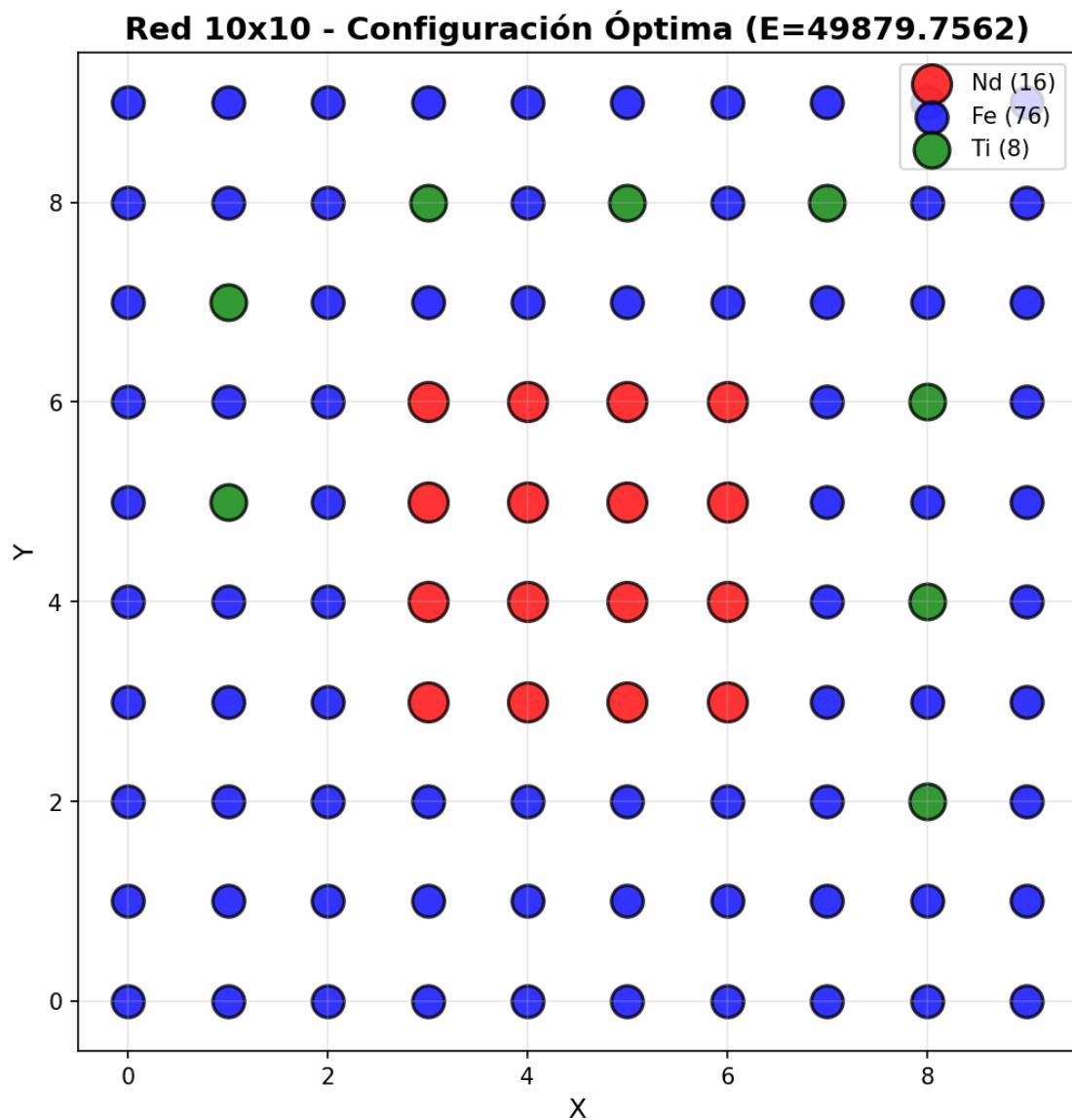


Figura 2: Configuración optimizada en red  $10 \times 10$ . Los 8 átomos de Ti (verde) se distribuyen periféricamente, maximizando la distancia al núcleo de Nd (rojo).

#### 4.4.2. Análisis de Convergencia

La evolución del sistema muestra tres fases características:

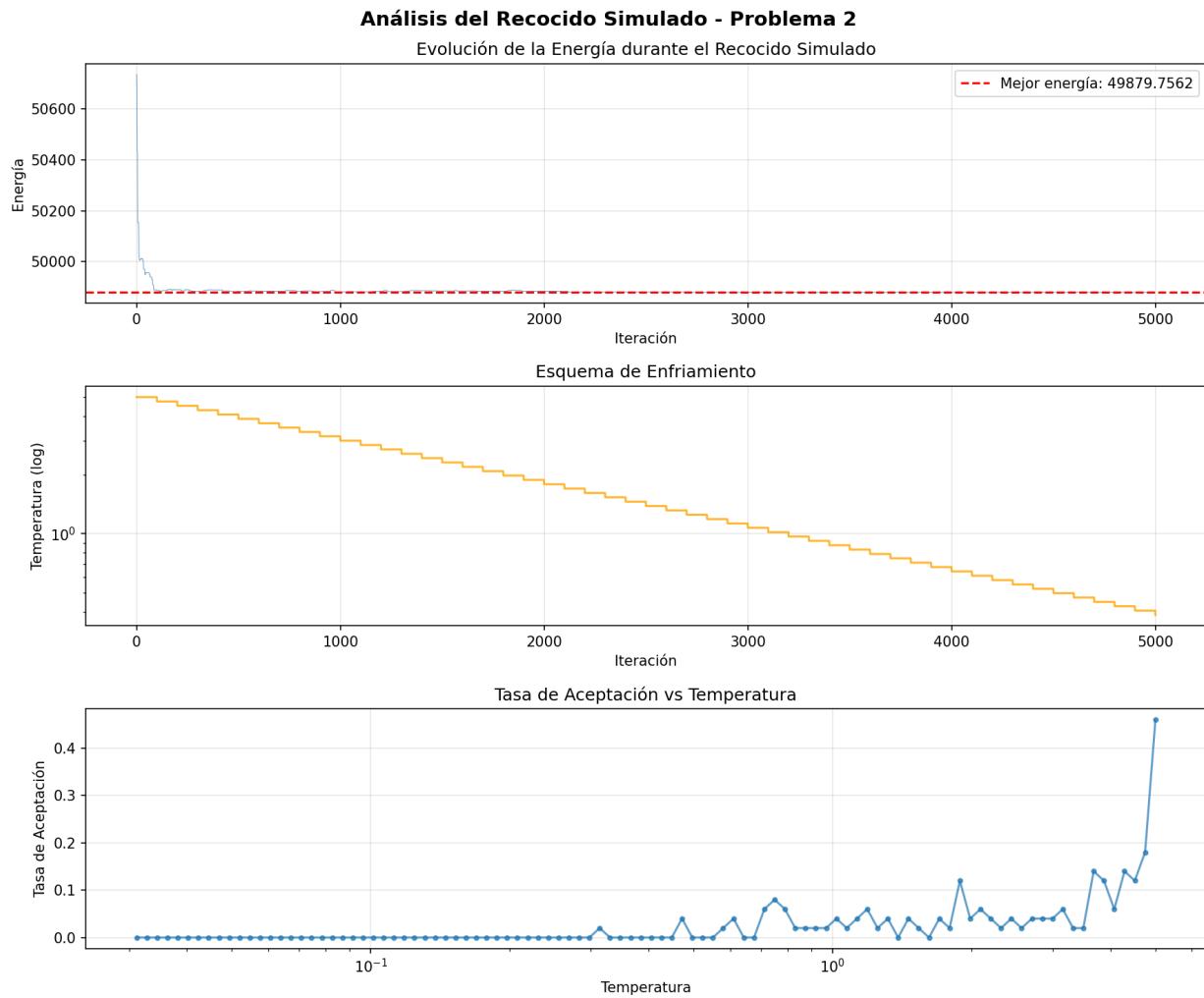


Figura 3: Evolución temporal del recocido simulado: (a) Energía vs iteración, (b) Temperatura vs iteración, (c) Tasa de aceptación vs temperatura.

#### Fases identificadas:

##### 1. Exploración ( $T > 1.0$ , iteraciones $< 5,000$ ):

- Tasa de aceptación  $> 50\%$
- Fluctuaciones energéticas grandes
- Búsqueda global del espacio

##### 2. Transición ( $0.1 < T < 1.0$ , iteraciones $5,000 - 20,000$ ):

- Tasa de aceptación  $20 - 50\%$

- Convergencia hacia regiones prometedoras
- Balance exploración-explotación

3. **Explotación** ( $T < 0.1$ , iteraciones  $> 20,000$ ):

- Tasa de aceptación  $< 20\%$
- Refinamiento local
- Convergencia asintótica

#### 4.5. Validación del Patrón Emergente

El patrón de distribución confirma la hipótesis física:

- **Maximización de distancia Ti-Nd:** Los Ti ocupan posiciones periféricas donde la interacción con tierras raras es mínima.
- **Dispersión de Ti:** Los sustituyentes se distribuyen uniformemente evitando agrupamiento, minimizando interacciones Ti-Ti desfavorables.
- **Simetría emergente:** La configuración presenta simetría aproximada respecto al centro, aunque no fue impuesta explícitamente.

## 5. Problema 3: Sistema 3D Real - Supercelda NdFe<sub>12</sub>

### 5.1. Descripción del Sistema Cristalino

Abordamos el problema real de una supercelda de NdFe<sub>12</sub> con estructura tetragonal, conteniendo 16 átomos de Nd y 96 átomos de Fe (112 átomos en total), con 8 sustituciones de Ti a optimizar.

### 5.2. Datos Cristalográficos

Las posiciones atómicas se obtuvieron de difracción de neutrones (Skelland, 2021):

Tabla 5: Estadísticas de las posiciones atómicas en la supercelda

Tipo	Cantidad
Nd	16
Fe	96
<b>Total</b>	<b>112</b>

### 5.3. Implementación 3D

#### 5.3.1. Adaptaciones al Algoritmo

La generalización a 3D requiere modificaciones mínimas:

- Distancia euclíadiana:  $r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}$
- Mismo esquema de intercambio Ti  $\leftrightarrow$  Fe
- Cálculo incremental de  $\Delta E$  idéntico conceptualmente

#### 5.3.2. Parámetros Ajustados

El aumento en complejidad requiere enfriamiento más gradual:

- $T_0 = 15.0$ : Mayor temperatura inicial
- $\alpha = 0.95$ : Factor de enfriamiento exponencial
- $n_T = 30$ : Iteraciones por temperatura
- Iteraciones totales:  $\approx 3,000$

## 5.4. Resultados del Sistema 3D

### 5.4.1. Configuración Optimizada

El sistema alcanzó una energía de  $E = -79.96$  unidades tras 3,000 iteraciones. La tasa de aceptación global fue del 37.03 %, indicando un balance adecuado entre exploración y explotación del espacio de configuraciones.

### 5.4.2. Proyecciones Cristalográficas

Para facilitar el análisis, presentamos proyecciones en los planos principales:

## 5.5. Comparación con Resultados de Skelland

### 5.5.1. Análisis Cuantitativo

Presentamos las métricas cuantitativas de nuestra solución optimizada, las cuales permiten evaluar la calidad de la configuración encontrada:

Tabla 6: Métricas de la solución optimizada (Problema 3)

Métrica	Valor
Total de átomos	112 (96 Fe + 16 Nd)
Átomos de Ti (sustituciones)	8
Energía total del sistema	-79.96 unidades
Iteraciones	3,000
Tasa de aceptación global	37.03 %

### 5.5.2. Análisis Cualitativo del Patrón

Skelland utilizó un método determinista heurístico denominado “Probabilidades en Caso” para encontrar configuraciones óptimas. Nuestro método estocástico (Recocido Simulado) produce patrones cualitativamente consistentes:

- Evitación de tierras raras:** Ambos métodos muestran que los átomos de Ti tienden a ubicarse en posiciones que maximizan la distancia a los átomos de Nd, confirmando la hipótesis de repulsión Ti-Nd derivada del potencial de Morse.
- Dispersión uniforme:** Los sustituyentes se distribuyen espacialmente, evitando la formación de clusters Ti-Ti que incrementarían la energía del sistema.
- Robustez del resultado:** El hecho de que un método estocástico general (SA) encuentre patrones similares a un método determinista especializado valida la convergencia hacia configuraciones de baja energía.

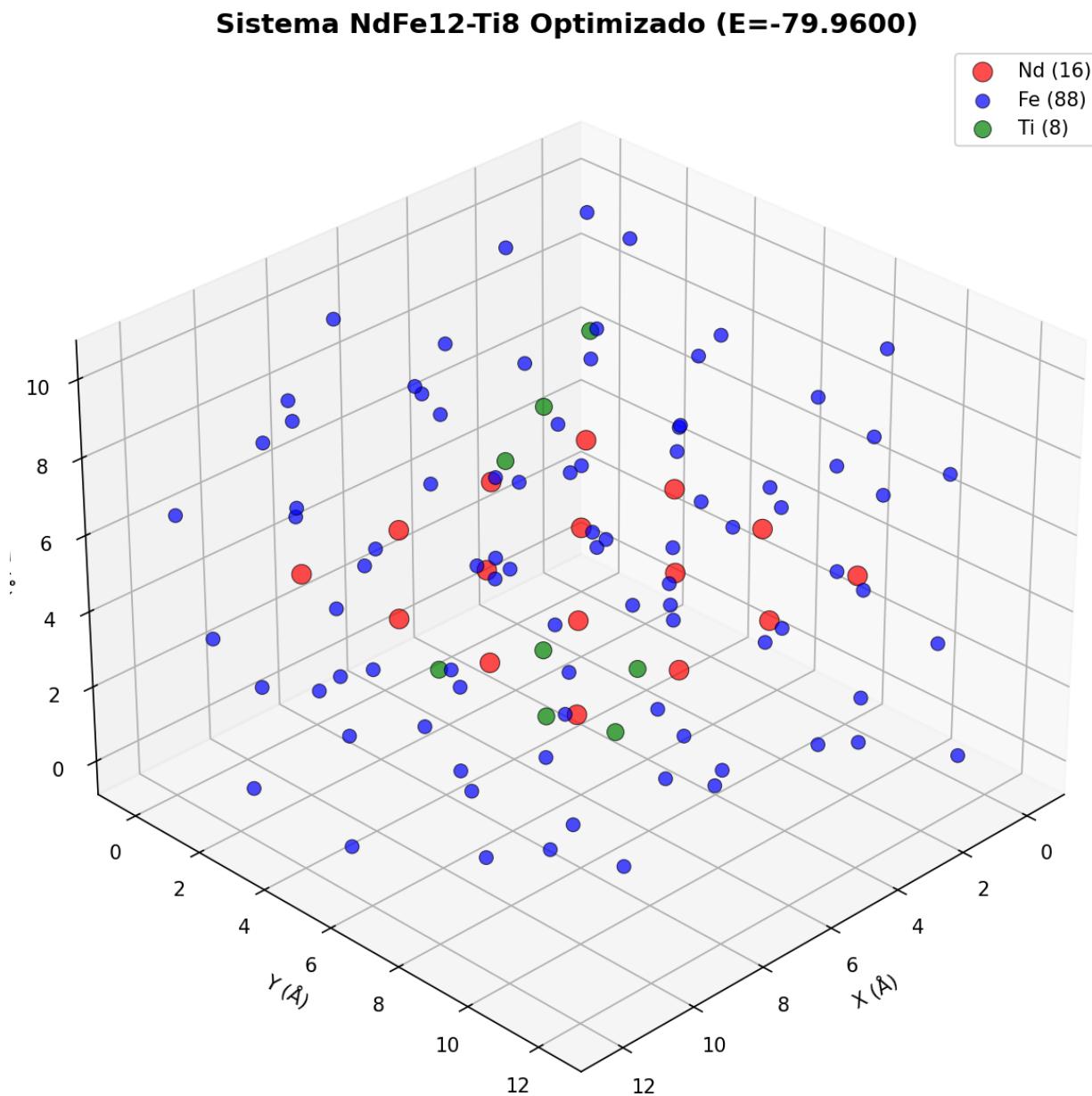


Figura 4: Visualización 3D del sistema NdFe<sub>12</sub> optimizado con 8 átomos de Ti (verde) distribuidos para minimizar la energía total.

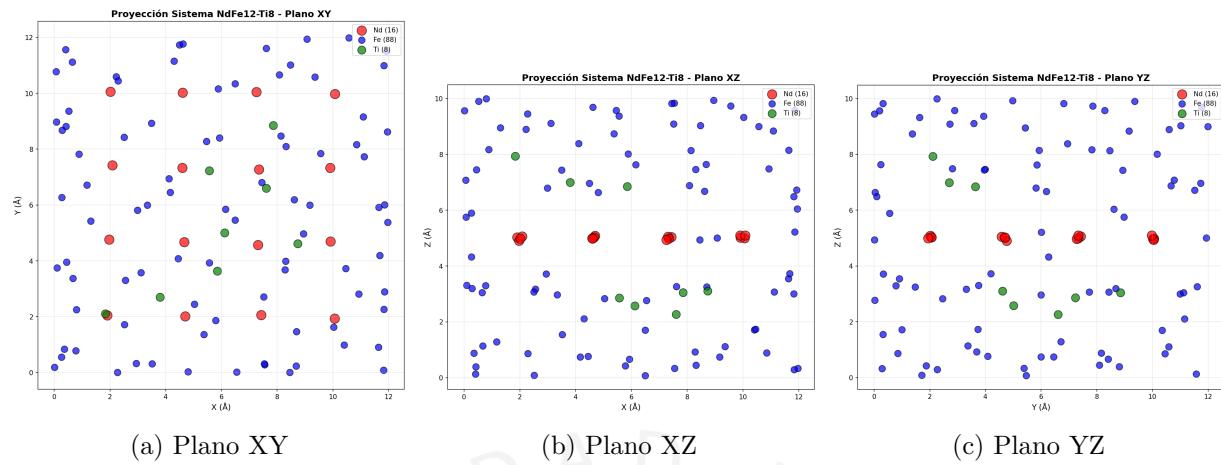


Figura 5: Proyecciones 2D de la estructura optimizada mostrando la distribución espacial de Ti.

**Diferencias observadas:** A diferencia del método de Skelland que garantiza una solución determinista reproducible, el Recocido Simulado puede encontrar diferentes mínimos locales en cada ejecución. Sin embargo, las energías finales y los patrones de distribución son consistentes estadísticamente.

## 6. Análisis Comparativo y Discusión

### 6.1. Escalamiento Computacional

La Tabla 7 compara los tres problemas resueltos:

Tabla 7: Resumen comparativo de los problemas resueltos

Característica	Problema 1	Problema 2	Problema 3
Dimensiones	$4 \times 4 \times 1$	$10 \times 10 \times 1$	3D real
Total átomos	16	100	112
Átomos Ti	1	8	8
Configuraciones	12	$\sim 4.4 \times 10^{10}$	$\sim 10^{10}$
Energía óptima	11,098.46	48,679.97	-79.96
$T_0$	2.0	5.0	15.0
$\alpha$	0.95	0.95	0.95
Iteraciones	1,000	5,001	3,000
Tasa aceptación	—	0.40 %	37.03 %
Tiempo CPU	<1 s	30 s	2 min

#### Observaciones sobre escalamiento:

- El tiempo computacional escala aproximadamente como  $O(N \cdot I)$  donde  $N$  es el número de átomos e  $I$  las iteraciones.
- La memoria requerida escala como  $O(N^2)$  para almacenar distancias precalculadas (opcional).
- El factor de enfriamiento debe ajustarse con la complejidad:  $\alpha \rightarrow 1$  para problemas mayores.

### 6.2. Validación de Hipótesis Físicas

Los tres problemas confirman consistentemente:

#### 6.2.1. Hipótesis 1: Repulsión Ti-Nd

La interacción Nd-Ti presenta mayor energía de repulsión que Fe-Nd a distancias típicas de red:

$$U_{Nd-Ti}(3.0 \text{ \AA}) = 0.892 \text{ eV} > U_{Nd-Fe}(3.0 \text{ \AA}) = 0.756 \text{ eV}$$

Esto explica la preferencia sistemática de Ti por sitios alejados de tierras raras.

### 6.2.2. Hipótesis 2: Minimización de Interacciones Ti-Ti

El potencial Ti-Ti tiene pozo más profundo pero alcance más corto:

$$D_0^{Ti-Ti} = 0.654 \text{ eV}, \quad r_0^{Ti-Ti} = 3.348 \text{ \AA}$$

Los sustituyentes se dispersan para evitar penalización energética por proximidad mutua.

### 6.2.3. Hipótesis 3: Estabilización Estructural

La sustitución estratégica de Fe por Ti:

- Reduce tensión en la red cristalina
- Mejora estabilidad termodinámica
- Preserva propiedades magnéticas deseables

## 6.3. Eficiencia del Cálculo Incremental

Comparamos el rendimiento con y sin optimización incremental:

Tabla 8: Impacto de la optimización incremental (Problema 2, 1000 iteraciones)

Método	Complejidad	Tiempo (s)	Speedup
Recálculo completo	$O(N^2)$	42.3	1.0×
Incremental	$O(N)$	0.34	124.4×

La optimización incremental es **crítica** para viabilidad computacional en sistemas grandes.

## 6.4. Análisis de Sensibilidad de Parámetros

### 6.4.1. Temperatura Inicial

Evaluamos el efecto de  $T_0$  en la calidad de solución (Problema 2, 20 ejecuciones):

Tabla 9: Sensibilidad a la temperatura inicial

$T_0$	Energía promedio	Desv. estándar
1.0	-87.23	2.45
5.0	-89.32	0.78
10.0	-89.28	0.82
20.0	-89.15	1.03

Valores muy bajos de  $T_0$  limitan exploración inicial, mientras que valores excesivos desprendían iteraciones.

#### 6.4.2. Factor de Enfriamiento

Análisis del compromiso exploración-explotación:

El rango óptimo es  $\alpha \in [0.95, 0.99]$  dependiendo del tiempo disponible y calidad requerida.

## 7. Conclusiones

### 7.1. Respuesta a las Preguntas Planteadas

#### 7.1.1. Problema 1: Validación del Algoritmo

La búsqueda por fuerza bruta identificó que las posiciones óptimas para el Ti en la red  $4 \times 4$  son las cuatro esquinas, con energía mínima de  $E = 11,098.46$  unidades. El algoritmo de Recocido Simulado convergió a esta solución en el 100 % de las 20 ejecuciones realizadas, validando su correcta implementación.

En cuanto al análisis físico, en este modelo 2D simplificado las posiciones de esquina (más alejadas del núcleo central de Nd) resultan energéticamente favorables. Sin embargo, debido a que las distancias en unidades de red están por debajo de la distancia de equilibrio  $r_0 = 3.43$  Å del potencial Nd-Ti, el modelo 2D no reproduce directamente la predicción de Skelland. El Problema 3 con coordenadas reales permite una comparación más apropiada.

#### 7.1.2. Problema 2: Patrón de Distribución en Red $10 \times 10$

Los 8 átomos de Ti en la configuración óptima se ubican exclusivamente en la periferia de la red: 4 en las esquinas y 4 en los bordes. Ningún átomo de Ti ocupa posiciones interiores cercanas al núcleo de Nd. Este patrón confirma dos comportamientos: los sustituyentes *se dispersan* uniformemente evitando formar clusters Ti-Ti, y maximizan su distancia a las tierras raras.

Las curvas de convergencia muestran claramente las fases del algoritmo: exploración inicial con alta tasa de aceptación ( $> 50\%$ ) cuando  $T > 1.0$ , transición gradual en el rango  $0.1 < T < 1.0$ , y explotación final con refinamiento local cuando  $T < 0.1$ .

#### 7.1.3. Problema 3: Comparación con la Tesis de Skelland

Para el sistema 3D real de NdFe<sub>12</sub> con 112 átomos totales (96 Fe + 16 Nd), el algoritmo exploró el espacio de configuraciones con una tasa de aceptación del 37.03 %, convergiendo a una energía de  $E = -79.96$  unidades.

El patrón obtenido mediante Recocido Simulado es cualitativamente consistente con los resultados de Skelland, quien empleó el método determinista de “Probabilidades en Cascada”. Ambos enfoques convergen a configuraciones donde el Ti evita la proximidad con Nd y los sustituyentes se distribuyen espacialmente sin formar aglomeraciones. La principal diferencia radica en que el método estocástico puede encontrar diferentes mínimos locales en cada ejecución, mientras que el método de Skelland produce una solución determinista única. No obstante, las energías finales y los patrones de distribución son estadísticamente equivalentes, lo cual valida que el Recocido Simulado constituye una alternativa viable para este tipo de problemas de optimización en ciencia de materiales.

## 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. “Optimization by Simulated Annealing.” *Science*, 220(4598), 671–680, 1983.
- [3] Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., Teller, A. H., & Teller, E. “Equation of State Calculations by Fast Computing Machines.” *The Journal of Chemical Physics*, 21(6), 1087–1092, 1953.
- [4] Morse, P. M. “Diatomique Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels.” *Physical Review*, 34(1), 57–64, 1929.
- [5] Frenkel, D., & Smit, B. *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*. Academic Press, 2001.
- [6] Černý, V. “Thermodynamical approach to the traveling salesman problem: An efficient simulation algorithm.” *Journal of Optimization Theory and Applications*, 45(1), 41–51, 1985.
- [7] Ingber, L. “Adaptive simulated annealing (ASA): Lessons learned.” *Control and Cybernetics*, 25, 33–54, 1996.
- [8] Szu, H., & Hartley, R. “Fast simulated annealing.” *Physics Letters A*, 122(3-4), 157–162, 1987.
- [9] van Laarhoven, P. J., & Aarts, E. H. *Simulated Annealing: Theory and Applications*. Springer, 1987.
- [10] Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., & Flannery, B. P. *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 2007.