EIEI ACOFI 2025
5º Congreso Latinoamericano de Ingeniería
Más Información: www.acofi.edu.co/eiei
Ingeniería de impacto para cuidar y transformar la vida
ACOFI: 50 años por la excelencia de la educación en ingeniería.

Implementación de machine learning en el micromagnetismo computacional: un enfoque para la optimización y descubrimiento de nuevas texturas magnéticas

Jesus Andrés Cabezas Erazo, Arnol Ferney Pérez Paniagua

Fundación Universitaria Los Libertadores
Bogotá, Colombia

Resumen

Las técnicas de aprendizaje automático están teniendo un impacto transformador en el campo del micromagnetismo computacional, al facilitar la modelación precisa de fenómenos complejos como la dinámica de magnetización en nanopartículas magnéticas. Modelos supervisados, en particular las redes neuronales profundas (DNN), han demostrado una notable capacidad predictiva, alcanzando métricas de rendimiento elevadas como un AUC de 0.997, lo cual valida su aplicabilidad en estudios micromagnéticos.

La reducción de orden no lineal, mediante enfoques de aprendizaje en variedades (manifold learning), ha permitido disminuir la dimensionalidad de los sistemas conservando una alta fidelidad en los resultados, lo que conlleva una significativa mejora en la eficiencia computacional. Técnicas como el análisis de componentes principales con núcleo (kernel PCA) y la regresión ridge con núcleo (kernel ridge regression) han sido empleadas para optimizar el procesamiento y análisis de grandes volúmenes de datos.

El entrenamiento de modelos requiere conjuntos de datos altamente curados, como imágenes TEM segmentadas manualmente, lo que introduce desafíos asociados al costo computacional y a la necesidad de anotaciones expertas. A esto se suma la implementación limitada de la ecuación de Landau–Lifshitz–Gilbert (LLG) en plataformas como COMSOL, debido a restricciones numéricas que buscan conservar la norma de la magnetización.

Asimismo, campos adyacentes como la nanotoxicología y la educación adaptativa ofrecen perspectivas útiles en torno al ajuste de hiperparámetros, la robustez de los modelos y el diseño de arquitecturas eficientes, que pueden ser transferidas al dominio del magnetismo computacional.

DOI: https://doi.org/10.26507/paper.4392

Finalmente, las redes neuronales físico-informadas (PINN) y las arquitecturas basadas en imágenes, como las redes convolucionales (CNN), están revolucionando la predicción de campos magnéticos y propiedades materiales, acelerando el desarrollo de nuevos dispositivos y materiales con aplicaciones tecnológicas avanzadas.

Palabras clave: Machine Learning (ML); magnetismo computacional; micromagnetismo; Landau-Lifshitz-Gilbert equation (LLG); Redes neuronales profundas (DNN); Redes físico-informadas (PINN)

Abstract

Machine learning techniques are having a transformative impact on the field of computational micromagnetism by enabling accurate modeling of complex phenomena such as the magnetization dynamics in magnetic nanoparticles. Supervised models—particularly deep neural networks (DNNs)—have demonstrated remarkable predictive capabilities, achieving high-performance metrics such as an AUC of 0.997, thus validating their applicability in micromagnetic studies.

Nonlinear order reduction through manifold learning approaches has made it possible to decrease the dimensionality of systems while maintaining high fidelity in the results, significantly improving computational efficiency. Techniques such as kernel principal component analysis (kernel PCA) and kernel ridge regression have been employed to optimize the processing and analysis of large datasets.

Training these models requires highly curated datasets, such as manually segmented TEM images, which introduces challenges related to computational cost and the need for expert annotations. Additionally, the implementation of the Landau–Lifshitz–Gilbert (LLG) equation in platforms like COMSOL remains limited due to numerical constraints necessary to preserve the magnetization norm. Furthermore, adjacent fields such as nanotoxicology and adaptive learning offer valuable insights into hyperparameter tuning, model robustness, and efficient architectural design, which can be transferred to computational magnetism research.

Finally, physics-informed neural networks (PINNs) and image-based architectures such as convolutional neural networks (CNNs) are revolutionizing the prediction of magnetic fields and material properties, significantly accelerating the development of novel devices and materials for advanced technological applications.

Keywords*: Machine Learning (ML); computational magnetism; micromagnetism; Landau–Lifshitz–Gilbert Equation (LLG); Deep Neural Networks (DNN); Physics-Informed Neural Networks (PINNs)*

1. Introducción

En el campo del magnetismo computacional, las técnicas de aprendizaje automático (ML) están demostrando ser muy útiles para acelerar las simulaciones de cómo se magnetiza un material y para predecir fenómenos importantes, como cuándo la magnetización en partículas pequeñas

puede invertir su dirección (Miao, 2019). Los modelos de clasificación basados en Random Forest (RF), Support Vector Machine (SVM) y Deep Neural Network (DNN) han alcanzado un área bajo la curva (AUC) de hasta 0,997, incluso con conjuntos de datos reducidos (Miao, 2019). En contraste, los métodos de reducción de orden no lineal, fundamentados en el aprendizaje de manifesto, facilitan la adquisición de esquemas de integración temporal que operan en espacios latentes de reducida dimensión, sin requerir la reevaluación del campo externo posterior al entrenamiento (Schaffer et al., 2021).

2. Clasificación de inversiones de magnetización

En el presente estudio se aborda la clasificación de eventos de inversión de la magnetización en partículas monodomino mediante el uso de una red neuronal profunda (DNN) supervisada. Los resultados obtenidos muestran que la DNN alcanza una área bajo la curva (AUC) de 0,997, lo que supera a las técnicas de aprendizaje por red neuronal (RF) (0,964) y a las de aprendizaje por soporte vectorial (SVM) (0,836). Estos hallazgos pueden validar el potencial de las redes profundas en el campo de los estudios micromagnéticos (Miao, 2019).

3. Modelado en espacios latentes y reducción de orden

En este estudio se propone un algoritmo que aprende el paso del tiempo en micromagnetismo mediante la reducción de orden no lineal con métodos kernel. Este algoritmo describe toda la dinámica con apenas dos variables en espacio latente (Exl et al., 2020).

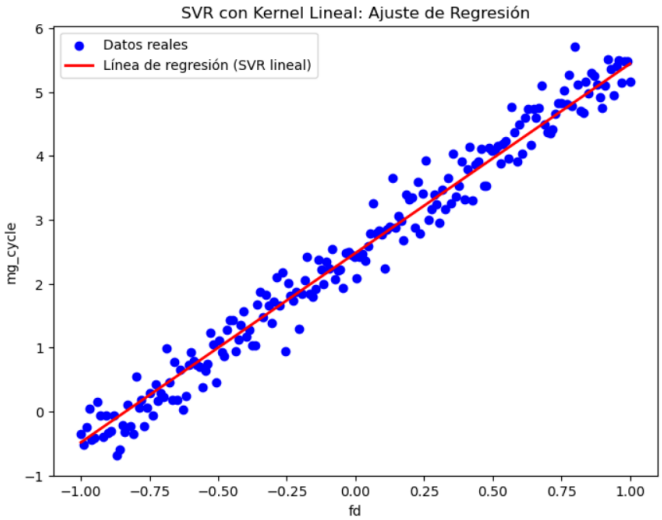

Figura 1. Representación de gráfica de regresión lineal: datos reales y línea de predicción. Fuente: Elaboración propia

Este enfoque incorpora una aproximación de bajo rango al kernel, combinando kernel PCA (análisis de componentes principales) y kernel ridge regression para manejar grandes volúmenes de datos sin sacrificar la precisión en la predicción de la respuesta al campo externo (Exl et al., 2021).

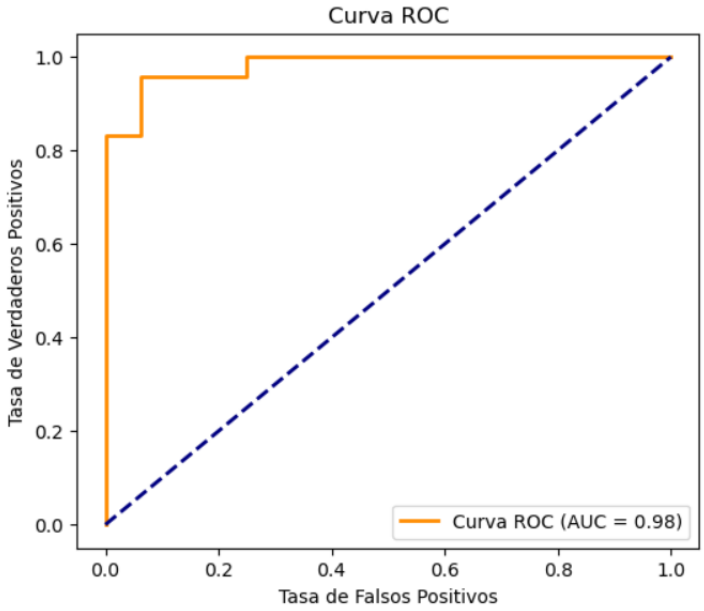

Figura 2. Representación gráfica de Curva ROC y AUC Fuente: Elaboración propia

4. Necesidades de datos y simulación de alto rendimiento

Para la instrucción de modelos de aprendizaje automático (ML) en magnetismo computacional, se hace indispensable disponer de conjuntos de datos exhaustivos y meticulosamente registrados. Un ejemplo ilustrativo es el conjunto de datos TEM de nanohilos, que exhibe cuatro morfologías distintas (bundle, singular, dispersed, network). Cada una de estas morfologías contiene un total de 100 imágenes, junto con segmentaciones manuales destinadas a facilitar las tareas de clasificación y segmentación automática (Papers with Code, n.d.). En lo que respecta a la implementación numérica de la ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert en entornos de elementos finitos, como es el caso de COMSOL, esta se lleva a cabo de manera débil y se añaden restricciones puntuales con el propósito de preservar la norma de la magnetización.

5. Aplicación de ML en nanomateriales: lecciones para el magnetismo

En el campo de la nanotoxicología, se han empleado diversas técnicas de aprendizaje automático, como redes neuronales, modelos ensemble, reducción de dimensionalidad y métodos bayesianos, para predecir propiedades finales como viabilidad, agregación y estrés oxidativo de diversos nanomateriales. Este enfoque ha permitido establecer buenas prácticas de ajuste, robustez y dominio de aplicabilidad, que pueden servir como guía para el diseño de modelos predictivos de las propiedades magnéticas (Furxhi et al., 2020).

Las revisiones sistemáticas en educación adaptativa ponen de manifiesto la relevancia del empleo de algoritmos como SVM, árboles de decisión y redes neuronales para la clasificación y predicción

en espacios multidimensionales, evidenciando la versatilidad de estos métodos para abordar problemas de clasificación compleja, análogos a la clasificación de estados de magnetización.

6. Modelado y predicción de fenómenos magnéticos

Redes Físico-Informadas para micromagnetismo

Los PINN incorporan la ecuación LLG en la función de entrenamiento, lo que permite resolver flujos de campo magnético con alta fidelidad sin mallas. Este hecho abre posibilidades para simulaciones rápidas de dominios magnéticos en geometrías complejas (Gokhale, 2025).

Predicción de campos de nucleación y permeabilidad efectiva

Se ha demostrado que los modelos de aprendizaje profundo (ML) pueden predecir con precisión suficiente para reconstruir curvas de histéresis en segundos los campos locales de nucleación en imanes permanentes a partir de imágenes de difracción de electrones por barrido (EBSD), lo que acelera el análisis multiescala.

En el ámbito de los composites magnéticos, la CNN ha sido empleada para predecir tensores de permeabilidad macroscópica, logrando una significativa reducción en el tiempo de cálculo en comparación con los métodos tradicionales (Ding et al., 2020).

Implementación numérica y buenas prácticas

En la ejecución práctica de la implementación de la ecuación LLG en COMSOL, se hace indispensable el empleo de la formulación en forma débil, así como la adición de restricciones puntuales con el propósito de conservar la norma del vector magnetización (|M >=1), garantizando de este modo la estabilidad numérica en simulaciones temporales.

Este recorrido evidencia la viabilidad de adaptar las estrategias de generación de datos, selección de características y modelado multimodal, previamente empleadas en otros dominios de la nanotecnología y la ciberseguridad, al campo del magnetismo computacional (Mohan et al., 2019). La integración de redes profundas, algoritmos físico-informados y prácticas de aprendizaje automático (ML) avanzadas promete potenciar el descubrimiento y la optimización de materiales y dispositivos magnéticos, lo que conllevaría a una reducción de los costes computacionales y a la apertura de nuevas oportunidades de diseño (Essa et al., 2023).

7. Referencias

- Miao, J.-Y. (2019). Machine learning and micromagnetic studies of magnetization switching. *Chinese Physics Letters, 36*(9), 097501. https://doi.org/10.1088/0256-307X/36/9/097501
- Schaffer, S., Mauser, N. J., Schrefl, T., Suess, D., & Exl, L. (2021). Machine learning methods for the prediction of micromagnetic magnetization dynamics. *IEEE Transactions on Magnetics*, *58*(2), 1–6. https://doi.org/10.1109/tmag.2021.3095251
- Exl, L., Mauser, N. J., Schrefl, T., & Suess, D. (2020). Learning time-stepping by nonlinear dimensionality reduction to predict magnetization dynamics. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, *84*, 105205. https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2020.105205

- Exl, L., Mauser, N. J., Schaffer, S., Schrefl, T., & Suess, D. (2021). Prediction of magnetization dynamics in a reduced dimensional feature space setting utilizing a low-rank kernel method. *Journal of Computational Physics*, *444*, 110586. https://doi.org/10.1016/j.jcp.2021.110586
- Swapneel Amit Pathak, Kurt Rahir, Sam Holt, Martin Lang, Hans Fangohr; Machine learning based classification of vector field configurations. *AIP Advances* 1 February 2024; 14 (2): 025004. https://doi.org/10.1063/9.0000686
- Gokhale, S. (2025). Well-posedness for the stochastic Landau–Lifshitz–Gilbert equation with helicity driven by jump noise. *Statistics & Probability Letters, 216*, 110285. https://doi.org/10.1016/j.spl.2024.110285
- Ding, Z., Pascal, E., & De Graef, M. (2020). Indexing of electron back-scatter diffraction patterns using a convolutional neural network. *Acta Materialia, 199*, 370–382. https://doi.org/10.1016/j.actamat.2020.08.046
- Schaffer, S., Schrefl, T., Oezelt, H., Kovacs, A., Breth, L., Mauser, N. J., Suess, D., & Exl, L. (2023). Physics-informed machine learning and stray field computation with application to micromagnetic energy minimization. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 576*, 170761. https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2023.170761
- Mohan, S., Thirumalai, C., & Srivastava, G. (2019). Effective heart disease prediction using hybrid machine learning techniques. *IEEE Access, 7*, 81542–81554. https://doi.org/10.1109/ACCESS.2019.2923707
- Essa, S. G., Celik, T., & Human-Hendricks, N. E. (2023). Personalized adaptive learning technologies based on machine learning techniques to identify learning styles: A systematic literature review. *IEEE Access, 11*, 48392–48409. https://doi.org/10.1109/ACCESS.2023.3276439
- Khoei, A. R., Seddighian, M. R., & Rezaei Sameti, A. (2024). Machine learning–based multiscale framework for mechanical behavior of nano-crystalline structures. *International Journal of Mechanical Sciences, 265*, 108897. https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2023.108897
- Furxhi, I., Murphy, F., Mullins, M., Arvanitis, A., & Poland, C. A. (2020). Practices and trends of machine learning application in nanotoxicology. *Nanomaterials, 10*(1), 116. https://doi.org/10.3390/nano10010116
- Winkler, D. A. (2020). Role of artificial intelligence and machine learning in nanosafety. *Small, 16*, 2001883. https://doi.org/10.1002/smll.202001883
- *Papers with Code - TEM nanowire morphologies for classification and segmentation Dataset*. (n.d.). https://paperswithcode.com/dataset/tem-nanowire-morphologies-for-classification

Sobre los autores

- **Jesus Andrés Cabezas Erazo**: Estudiante de Ingeniería de Sistemas de la Fundación Universitaria Los Libertadores. jacabezase@libertadores.edu.co
- **Arnol Ferney Pérez Paniagua**: Estudiante de Ingeniería de Sistemas de la Fundación Universitaria Los Libertadores. afperezp02@libertadores.edu.co

Los puntos de vista expresados en este artículo no reflejan necesariamente la opinión de la Asociación Colombiana de Facultades de Ingeniería.

Copyright © 2025 Asociación Colombiana de Facultades de Ingeniería (ACOFI)