



Заявка на конкурс на соискание грантов МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ

м.н.с. Башашина М.В.



Актуальность работы

Экспериментальные и теоретические исследования, проводимые ОИЯИ требуют алгоритмической и вычислительной поддержки для проведения высокопроизводительного компьютерного моделирования, в том числе, с использованием вычислительных ресурсов МИВК ОИЯИ. В этой связи актуальными задачами являются:

- разработка и модернизация методов и проблемно-ориентированных программных комплексов, направленных на решение ресурсоемких вычислительных задач в рамках проектов Тематического плана ОИЯИ с учетом архитектурных особенностей конкретных вычислительных систем;
- развитие ориентированного на широкий круг пользователей инструментария для удобной работы с проблемно-ориентированными пакетами на системах с параллельной и гетерогенной архитектурой;
- проведение на этой основе высокопроизводительного компьютерного моделирования для получения физически значимых численных результатов в рамках конкретных математических моделей физических систем.



План работ на следующий год

Планируется работа в двух направлениях, связанных с программной реализацией и тестированием методов высокопроизводительного компьютерного моделирования физических систем и проведением на этой основе численного моделирования сложных физических систем:

- Моделирование сверхпроводящих процессов в системах джозефсоновских переходов различных конфигураций, включая исследование интервалов переворота магнитного момента в моделях с φ_0 -джозефсоновским переходом с целью подбора параметров, позволяющих добиться устойчивой периодичности.
- Развитие и программная реализация методов повышения производительности компьютерного моделирования нелинейных процессов в конденсированных средах, включая задачу анализа устойчивости локализованных структур в ϕ^4 системах и высокопроизводительное моделирование автолокализованных процессов, описываемых динамической моделью полярона.



Публикации

Количество основных публикаций за 5 лет: 24.

Публикации за 2023 год:

- Башашин М.В., Земляная Е.В., Волохова А.В., Практический анализ возможностей инструментария Python для ресурсоемких вычислений на примере задачи расчета вольтамперных характеристик в системе длинных джозефсоновских переходов, Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем 2023 Материалы Всероссийской конференции с международным участием, с.167-170, 2023
- М. А. Киселев, Е. В. Земляная, Е. И. Жабицкая, М. В. Башашин, А. И. Иванов, Исследование возможностей анализа везикулярной структуры нанолечарств на основе ФТНС по данным малоуглового рассеяния нейтронов, Поверхность Рентгеновские синхротронные и нейтронные исследования, Т. 17, №1, с.3-8, 2023
- M. Bashashin, E. Zemlyanaya, I. Rahmonov, Parallel simulation of the magnetic moment reversal within the φ_0 -Josephson junction model, Physics of Elementary Particles and Atomic Nuclei, Letters, V. 20, №5, 2023
- В.Д. Лахно, И.В. Амирханов, А.В. Волохова, Е.В. Земляная, И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина, В.С. Рихвицкий, М.В. Башашин, Динамическая модель полярона для исследования процесса гидратации электрона, Физика элементарных частиц и атомного ядра, Т. 54, №5, с.1076-1105, 2023
- Нечаевский А.В., Стрельцова О.И., Куликов К.В., Башашин М.В., Бутенко Ю.А., Зуев М.И., Разработка вычислительной среды для математического моделирования сверхпроводящих наноструктур с магнетиком, Компьютерные исследования и моделирование, Т.15, № 5, с. 1349-1358, 2023
- M. Bashashin, E. Zemlyanaya, I. Rahmonov, Simulation of the magnetization reversal effect depending on the current pulse duration within the φ_0 Josephson junction model using MPI and OpenMP parallel computing techniques, Physics of Elementary Particles and Atomic Nuclei, 2023 - *accepted for publication*
- E. Zemlyanaya, A. Bogolubskaya, M. Bashashin, N. Alexeeva, The φ^4 oscillons in a ball: numerical approach and parallel implementation, Physics of Elementary Particles and Atomic Nuclei, 2023 - *accepted for publication*
- Elena Zemlyanaya, Alla Bogolubskaya, Maxim Bashashin, Nora Alexeeva, Numerical study of the φ^4 standing waves in a ball of finite radius, Discrete and Continuous Models and Applied Computational Science, 2023 - *accepted for publication*



Научные мероприятия

Количество участия в научных мероприятиях за 5 лет: 20.

Научные мероприятия за 2023 год:

- М. В. Башашин, Практический анализ возможностей инструментария Python для ресурсоемких вычислений на примере задачи расчета вольтамперных характеристик в системе длинных джозефсоновских переходов, Information and Telecommunication Technologies and Mathematical Modeling of High-Tech Systems 2023 (ITTMM 2023), Москва, 17-21 апреля 2023,
- M.V. Bashashin, E.V. Zemlyanaya, I.R. Rahmonov, Parallel computer simulation of the implementation of the magnetization flip in φ_0 Josephson junctions depending on the amplitude and duration of the current pulse, 10th International Conference `Distributed Computing and Grid Technologies in Science and Education` (GRID`2023), Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia, 3-7 July 2023,
- M.V. Bashashin, A.R. Rahmonova, E.V. Zemlyanaya, I.R. Rahmonov, Yu. M. Shukrinov, Simulation of magnetization reversal by pulse of magnetic field in RF-SQUID with φ_0 junction, International workshop "Superconducting and Magnetic Hybrid Structures", Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia, 11-15 July 2023,
- M.V. Bashashin, A.R. Rahmonova, E.V. Zemlyanaya, Yu. M. Shukrinov, I.R. Rahmonov, Numerical simulation of the magnetization reversal within the RF-SQUID model with φ_0 junction depending on the external magnetic field pulse, The XXVII International Scientific Conference of Young Scientists and Specialists (AYSS-2023), Dubna, Russia, 30 October- 3 November 2023.



Выполненные работы за последний год

Проведен практический анализ возможностей инструментария Python для ресурсоемких вычислений на примере задачи расчета вольтамперных характеристик в системе длинных джозефсоновских переходов. Результаты данной работы были доложены на конференции Information and Telecommunication Technologies and Mathematical Modeling of High-Tech Systems (2023) и опубликованы в сборнике трудов этой конференции.

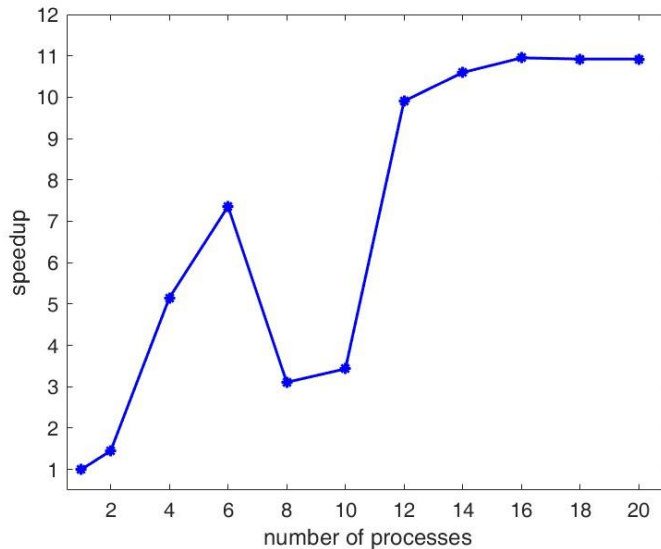
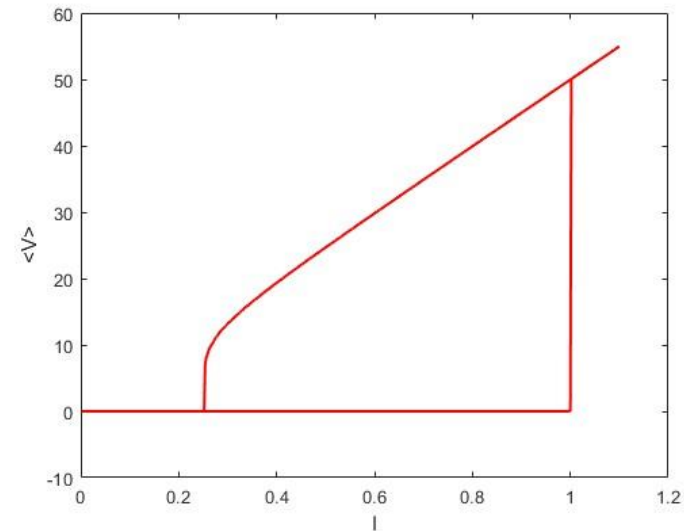


График ускорения Python+MPI реализации



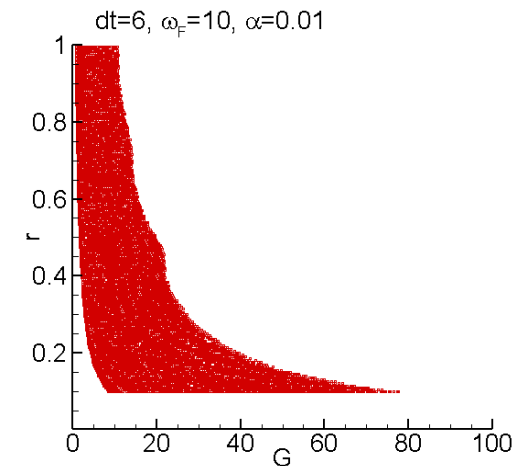
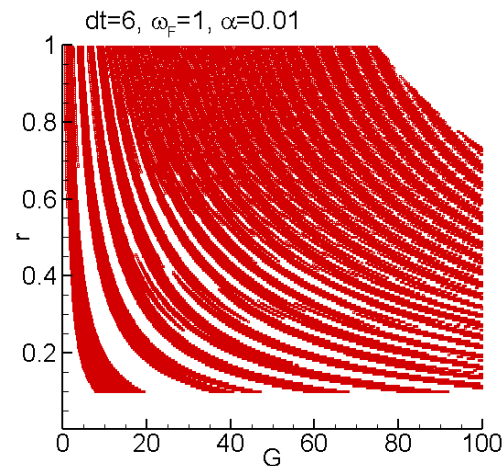
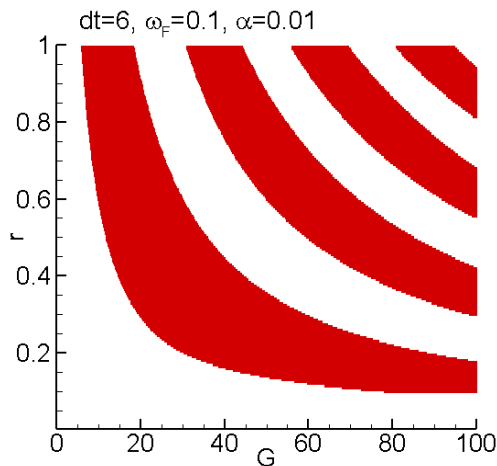
Вольт-амперная характеристика получаемая при расчете с тестовыми параметрами

Тестирование проводилось на кластере «HybriLIT» со следующими параметрами: N (число контактов)=10, L (длина контакта)=10. Число шагов по току: 550, шагов по времени: 5000, шагов по координате: 50.



Выполненные работы за последний год

Проведены численные исследования моделирования сверхпроводящих процессов в системах с точечным φ_0 -джозефсоновским переходом с целью оценки влияния параметров системы на периодичность структуры областей переворота магнитного момента. Результаты представлены на конференции 10th International Conference `Distributed Computing and Grid Technologies in Science and Education` (GRID`2023) и приняты к публикации в журнал Physics of Elementary and Atomic Nuclei.



Представлена диаграмма переворота магнитного момента на плоскости (G, r) при различных значениях нормализованной частоты магнитного резонанса ω_F . Результаты получены при шаге по G : $\Delta G=0.1$, шаге по r , $\Delta r=0.005$ при $A_s = 1.5$; $t_0=25$.



Выполненные работы за последний год

Разработана параллельная MPI программа для моделирования структуры областей переворота магнитного момента в SQUID (superconducting quantum interference device) устройстве с одиночным φ_0 -джозефсоновским переходом под действием импульса магнитного поля. С использованием данной программы проведены исследования по оценке влияния параметров системы на периодичность структуры областей переворота магнитного момента. Результаты данной работы были доложены на конференции The XXVII International Scientific Conference of Young Scientists and Specialists (AYSS-2023), готовится публикация.

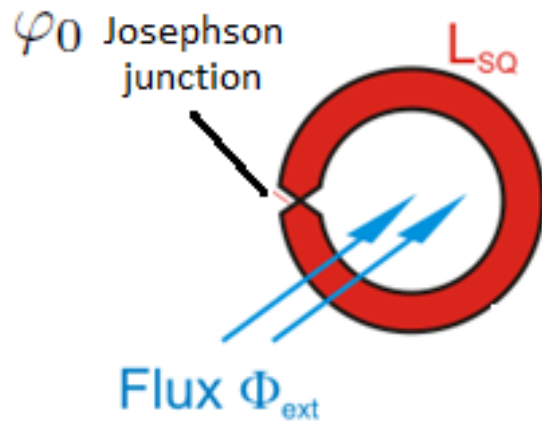
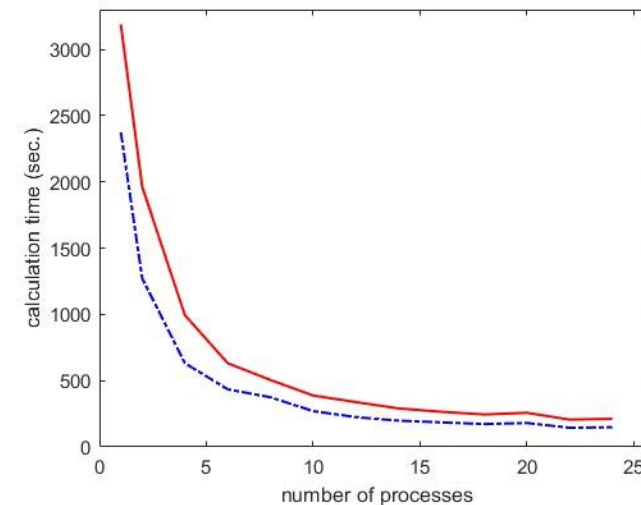


Схема SQUIDa



Время вычисления в зависимости от MPI-процессов.

Красная кривая: MPI реализация скомпилированная с параметрами по умолчанию;

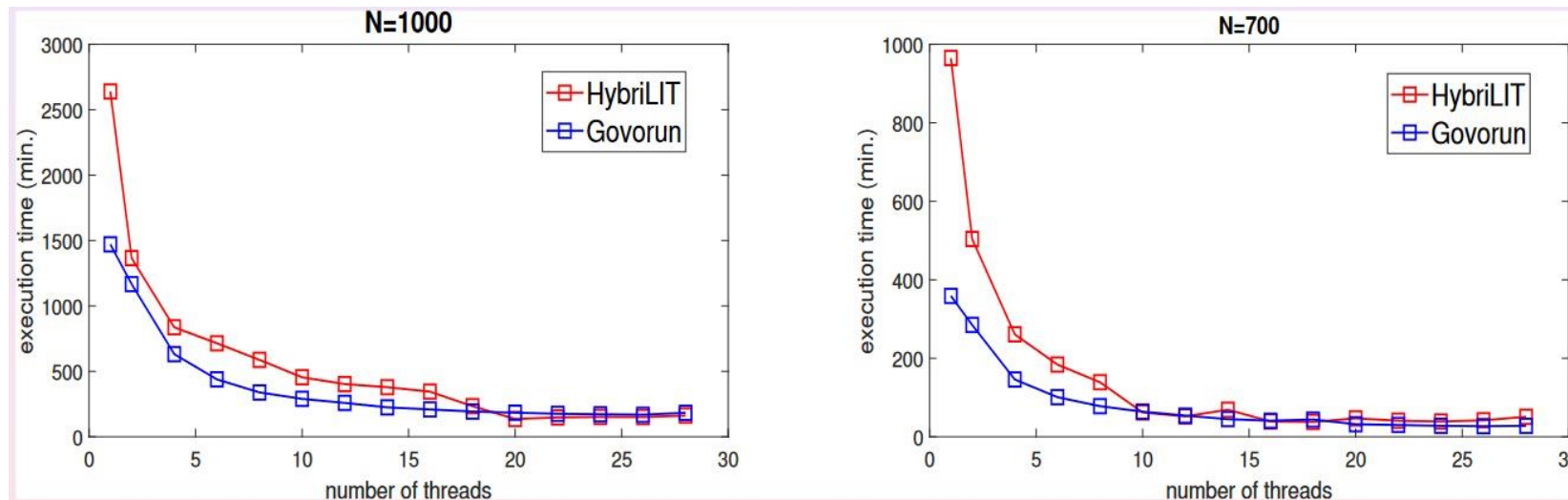
Синяя линия: MPI реализация с опцией AVX-512, дополнительное ускорение составило 1.3-1.6 раз.

Вычисления производились на суперкомпьютере Говорун.



Выполненные работы за последний год

Разработана параллельная реализация в среде MATLAB метода анализа устойчивости локализованных структур в модели ϕ^4 , обеспечивающая ускорение вычислений на вычислительных ресурсах HybriLIT от 10 до 20 раз. Результаты представлены на конференции 10th International Conference `Distributed Computing and Grid Technologies in Science and Education` (GRID`2023) и приняты к публикации в журнал Physics of Elementary Particles and Atomic Nuclei.





Организационно-административная и педагогическая деятельность за год

- Проведение семинарских занятий в рамках курсов «Архитектура вычислительных систем», «Технология высокопроизводительных вычислений» и «Параллельные и распределенные вычисления» в Университете «Дубна».
- Разработано и находится на стадии публикации учебное пособие для студентов Университета «Дубна» «Введение в параллельное программирование на основе технологий MPI и OpenMP»



MESHCHERYAKOV LABORATORY
OF INFORMATION TECHNOLOGIES

Спасибо за внимание