



Разработка инструментария с использованием Python в среде Jupyter Book для математического моделирования динамики систем, основанных на Джозефсоновских переходах

Заявка на соискание грантов молодых ученых и специалистов ОИЯИ, стипендий им. М.Г. Мещерякова и Н.Н. Говоруна на 2024 год

А.Р. Рахмонова
Объединенный институт ядерных исследований

Дубна
2023



Активные исследования возможных применений систем, основанных на джозефсоновских переходах, сверхпроводниковой электроники и спинтроники, обуславливает необходимость разработки эффективного инструментария для математического моделирования таких систем. В рамках совместного проекта ЛИТ и ЛТФ разрабатывается экосистема для задач исследования системы основанных на джозефсоновских переходах. Отличительной особенностью этой экосистемы является:

- объединение в себе вычислительных схем
- возможность проследить за всеми этапами математического моделирования
- проведение параллельных вычислений
- построение графиков и диаграмм

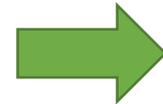
Отметим, что ряд задач требует проведения многочисленных и ресурсоемких расчетов, что приводит к необходимости существенного ускорения вычислительных схем, реализованных на *Python* и разработке параллельных алгоритмов.

Процесс проведения численных исследований

**Математическая
постановка
задачи**



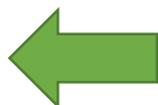
**Разработка
вычислительной
схемы**



**Подбор библиотек,
апробация на модельных
расчетах, визуализация**



**Анализ
результатов,
построение
графиков,
диаграмм....**

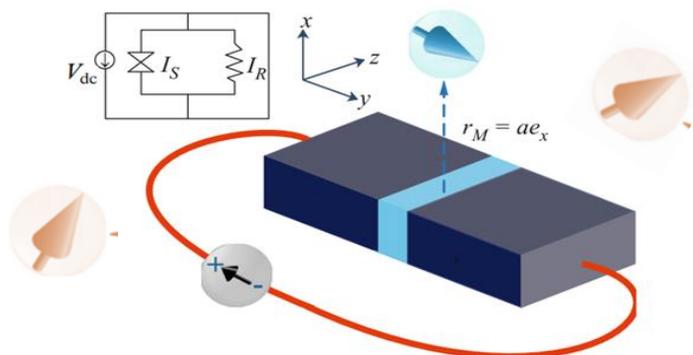


**Проведение
расчетов на
вычислительных
платформах**



**Программная
реализация**

Блок символьных вычислений



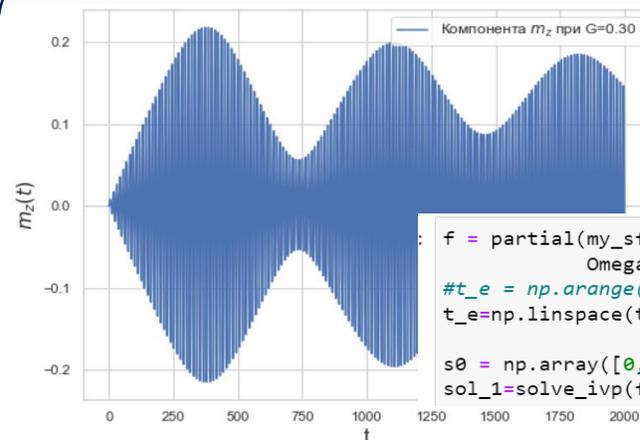
$$\gamma_{m_i} = -\frac{\mu_0}{2\Phi_0} \int d\mathbf{r}_i \frac{\mathbf{M}_i \times \mathbf{r}_i}{r^3}$$

$$B_{12}(r_{12}, m_1) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left(\frac{3(m_1 \cdot \hat{r})\hat{r}}{b^5} - \frac{m_1}{b^3} \right)$$



SymPy is a Python library for symbolic mathematics.

Блок численных расчетов и анализа



```
f = partial(my_sfs, G=G, alpha=alpha, k=k, \
            OmegaF=OmegaF, V=V)
#t_e = np.arange(0, 25, 0.0001)
t_e=np.linspace(t0,tf,100000)

s0 = np.array([0, 1, 0])
sol_1=solve_ivp(f,[t0,tf],s0, t_eval=t_e, method='RK45')
```



SciPy is an open-source software for mathematics, science, and engineering.

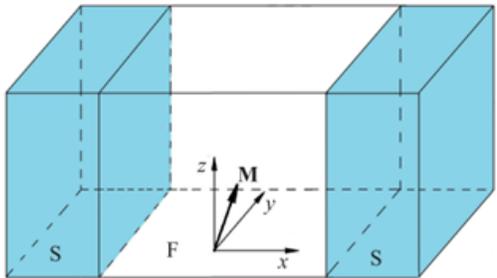
Ускорение многопараметрических расчетов



Joblib is a set of tools to provide lightweight pipelining in Python



Numba is an open source JIT compiler that translates a subset of Python and NumPy code into fast machine code.



Периодичность появления интервалов переворота магнитного момента джозефсоновского φ_0 -перехода



Математическая постановка задачи

Основные уравнение представлены в работе [1]. Ниже приведена задача Коши для системы уравнений в безразмерном виде. Динамика магнитного момента M рассматриваемой системы описывается уравнением Ландау-Лифшица-Гильберта:

$$\frac{dm_x}{dt} = -\frac{1}{1 + M^2 \alpha^2} \{m_y H_z - m_z H_y\} +$$

$$\frac{dm_y}{dt} = -\frac{1}{1 + M^2 \alpha^2} \{m_z H_x - m_x H_z\} +$$

$$\frac{dm_z}{dt} = -\frac{1}{1 + M^2 \alpha^2} \{m_x H_y - m_y H_x\} +$$

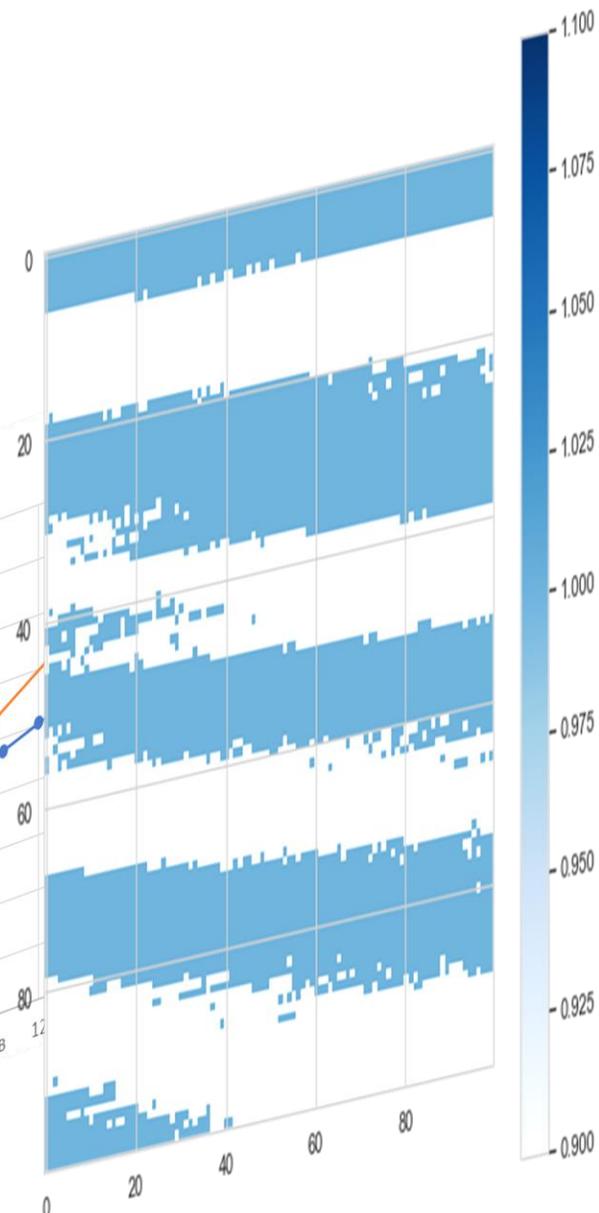
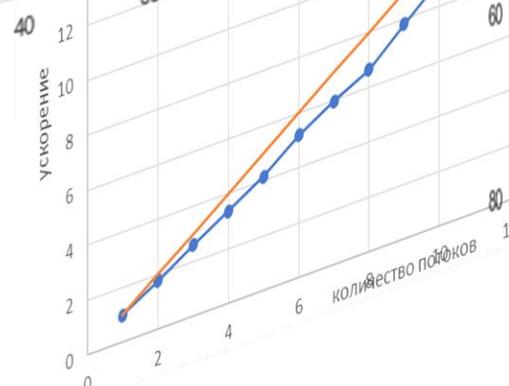
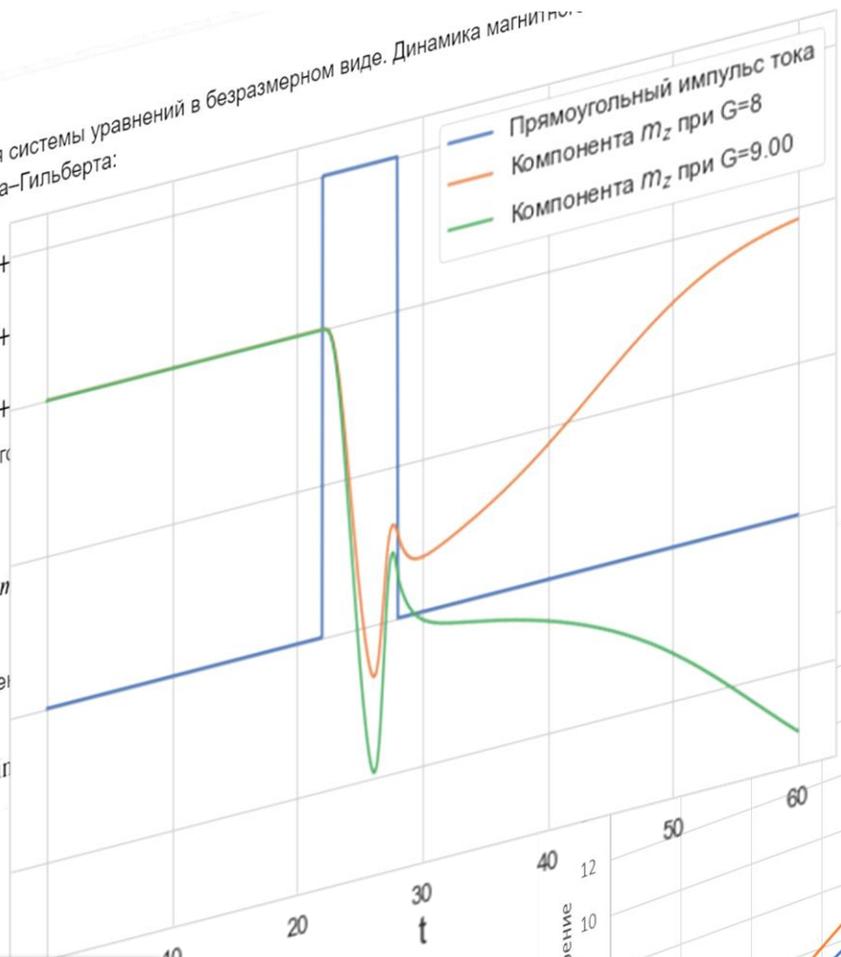
где $M = [m_x, m_y, m_z]$ - компоненты магнитного момента, компоненты эффективного магнитного поля $H_x(t) = 0$, $H_y = Gr \sin \phi(t) - r n$, $H_z(t) = m_z$ определяются следующим образом:

$$H_x(t) = 0,$$

$$H_y = Gr \sin \phi(t) - r n$$

$$H_z(t) = m_z$$

при этом уравнение на джозефсоновскую разность фаз $\phi(t)$ определяется из уравнения джозефсоновский контакт, измеренный в единицах критического тока I_c :

$$I = w \left(\frac{d\phi}{dt} - r \frac{dm_y}{dt} \right) + \sin \phi$$


Разработка электронного ресурса Jupyter Book для проведения исследований на Python



Welcome to HLT Jupyter Book

Основы работы с Python: инструментарий на Python для решения научных и прикладных задач

Численное решение задачи Коши: библиотека SciPy

Параллельные вычисления на Python

Задача 1: Линеаризованное уравнение на магнитный момент

Задача 2. Периодичность появления интервалов переворота намагниченности в $\Phi 0$ джозефсоновском переходе под воздействием импульса тока

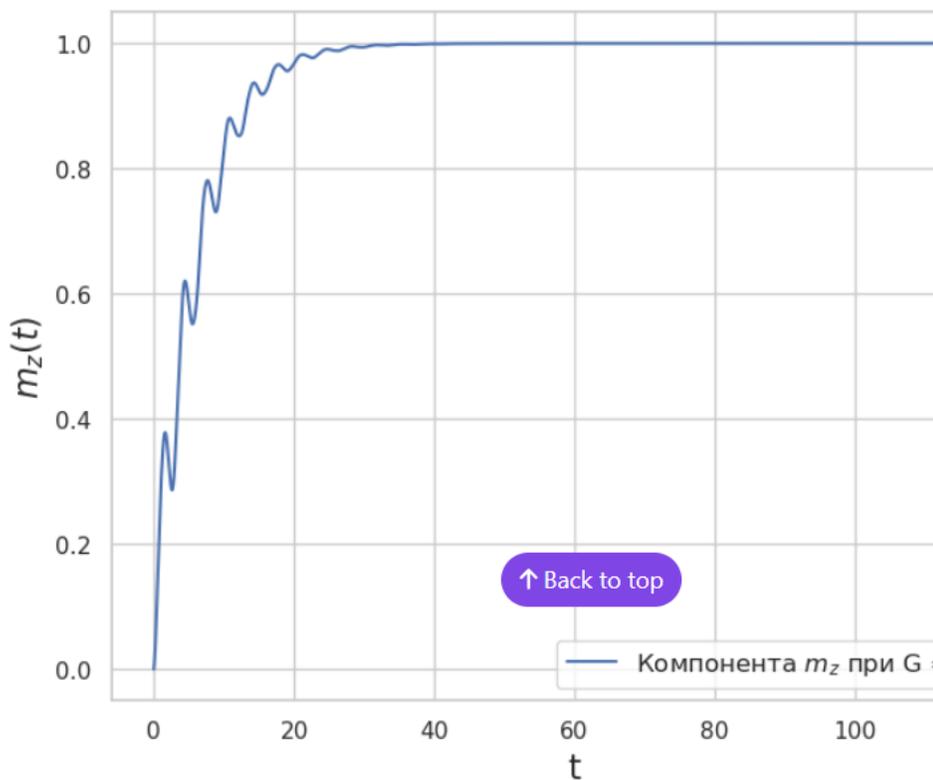
Задача 3. Ферромагнитный резонанс и динамика магнитного момента в системе "джозефсоновский переход-наномагнит"

.ipynb
.pdf

```
f = partial(my_sfs, G=G3, alpha=alpha, k=k, OmegaF=OmegaF, V=V)
t_e = np.linspace(t0, tf, nt)
```

```
s0 = np.array([0, 1, 0])
sol_G3 = solve_ivp(f, [t0, tf], s0, t_eval=t_e, method='RK45',
                  rtol=1e-8, atol=1e-9)
```

```
plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.plot(sol_G3.t, sol_G3.y[2], label='Компонента $m_z$ при G = %4.2f' % G3)
plt.xlabel('t', size=16)
plt.ylabel('$m_z(t)$', size=16)
plt.legend(fontsize=12)
plt.show()
```



↑ Back to top

Welcome to HLT Jupyter Book

Основы работы с Python: инструментарий на Python для решения научных и прикладных задач

Численное решение задачи Коши: библиотека SciPy

Параллельные вычисления на Python

Задача 1: Линеаризованное уравнение на магнитный момент

Задача 2. Периодичность появления интервалов переворота намагниченности в $\Phi 0$ джозефсоновском переходе под воздействием импульса тока

Задача 3. Ферромагнитный резонанс и динамика магнитного момента в системе "джозефсоновский переход-наномагнит"

Математическая постановка задачи

Инструментарий для численного моделирования

Численное моделирование: исследование переориентации намагниченности в системе

Численное моделирование: проявление ФМР на зависимости $m_z^{\max}(V)$



Contents

Пример 1: Численно решить задачу Коши:

Коши:

Пример 2: Численно решить задачу Коши:

Коши:

Численное решение задачи Коши: библиотека SciPy

Материалы этой части основаны на книге (JBook):

Qingkai Kong, Timmy Siau, Alexandre M. Bayen. «Python Programming And Numerical Methods: A Guide For Engineers And Scientists»: <https://pythonnumericalmethods.berkeley.edu/notebooks/Index.html>

Задача Коши: Рассмотрим решение начальной задачи (*Initial value problem*) для системы обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, разрешенных относительно производной:

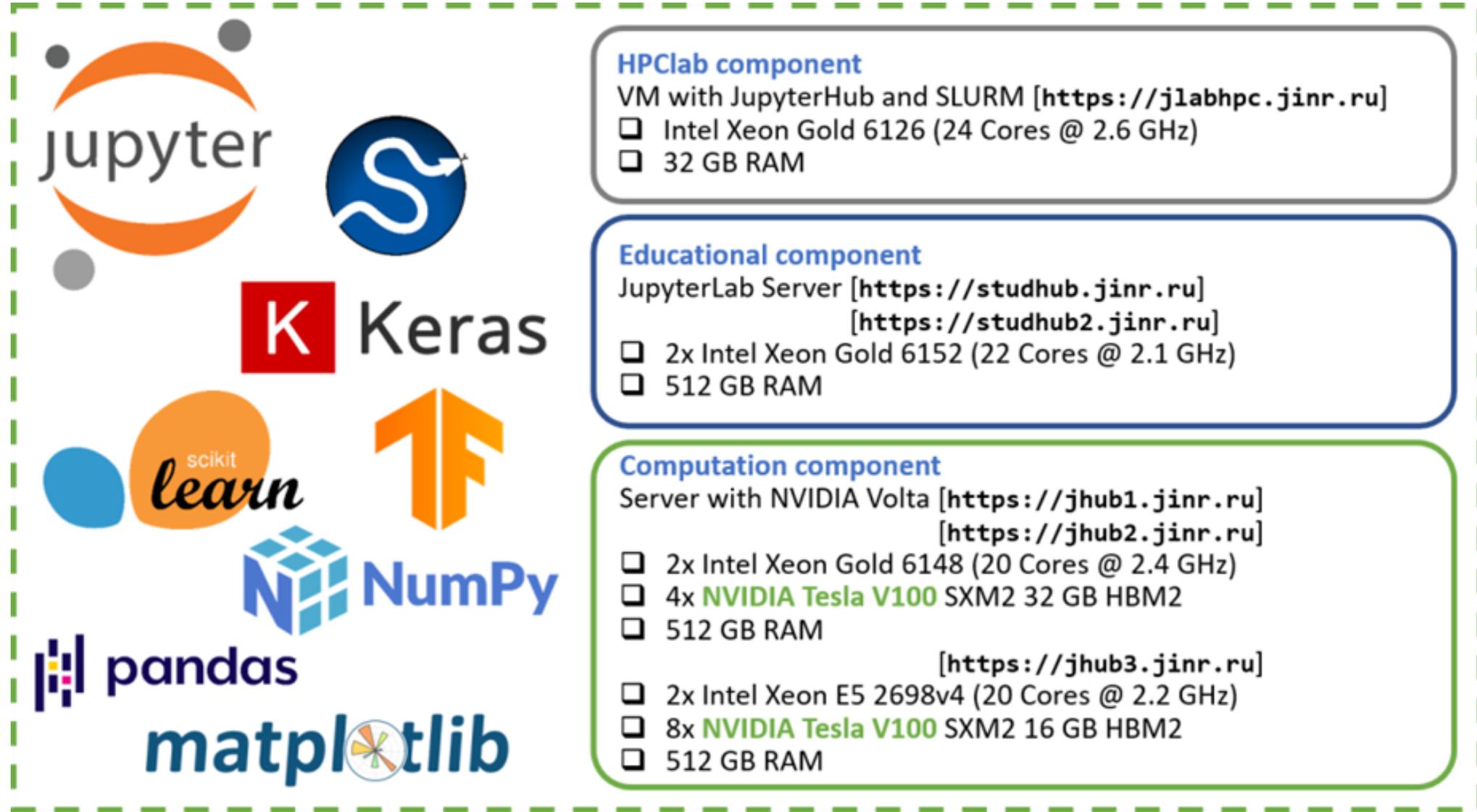
$$\begin{cases} \frac{dy(t)}{dt} = f(t, y(t)), & (1) \\ y|_{t=t_0} = y_0, \end{cases}$$

где $y = (y_1, \dots, y_n)^T$ - вектор-функция.

Пример 1: Численно решить задачу Коши:

$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = y \cos(t), & (2) \\ y(0) = y_0. \end{cases}$$

Для сравнения приведем аналитическое решение задачи (2):



HPClab component

VM with JupyterHub and SLURM [<https://jlabhpc.jinr.ru>]

- ❑ Intel Xeon Gold 6126 (24 Cores @ 2.6 GHz)
- ❑ 32 GB RAM

Educational component

JupyterLab Server [<https://studhub.jinr.ru>]
[<https://studhub2.jinr.ru>]

- ❑ 2x Intel Xeon Gold 6152 (22 Cores @ 2.1 GHz)
- ❑ 512 GB RAM

Computation component

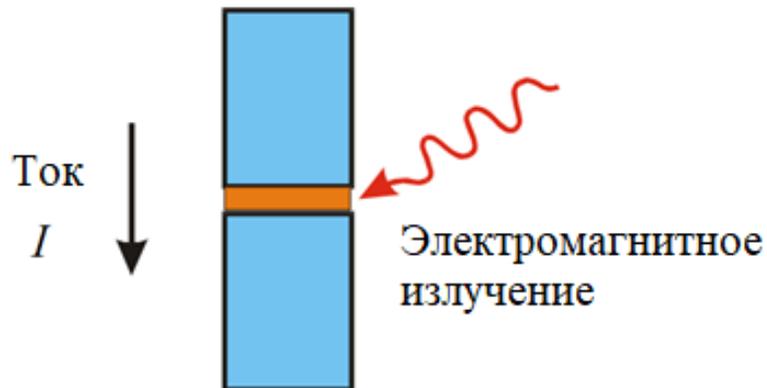
Server with NVIDIA Volta [<https://jhub1.jinr.ru>]
[<https://jhub2.jinr.ru>]

- ❑ 2x Intel Xeon Gold 6148 (20 Cores @ 2.4 GHz)
- ❑ 4x **NVIDIA Tesla V100** SXM2 32 GB HBM2
- ❑ 512 GB RAM

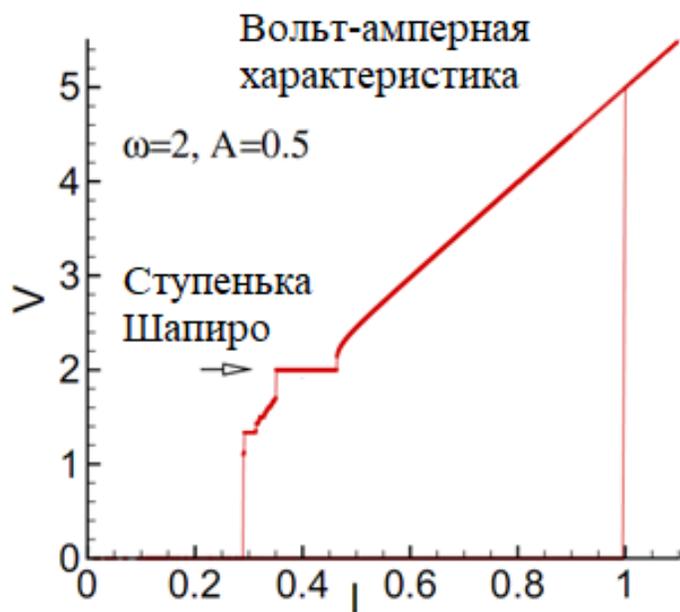
[<https://jhub3.jinr.ru>]

- ❑ 2x Intel Xeon E5 2698v4 (20 Cores @ 2.2 GHz)
- ❑ 8x **NVIDIA Tesla V100** SXM2 16 GB HBM2
- ❑ 512 GB RAM

Влияние внешнего излучения на динамику джозефсоновского перехода

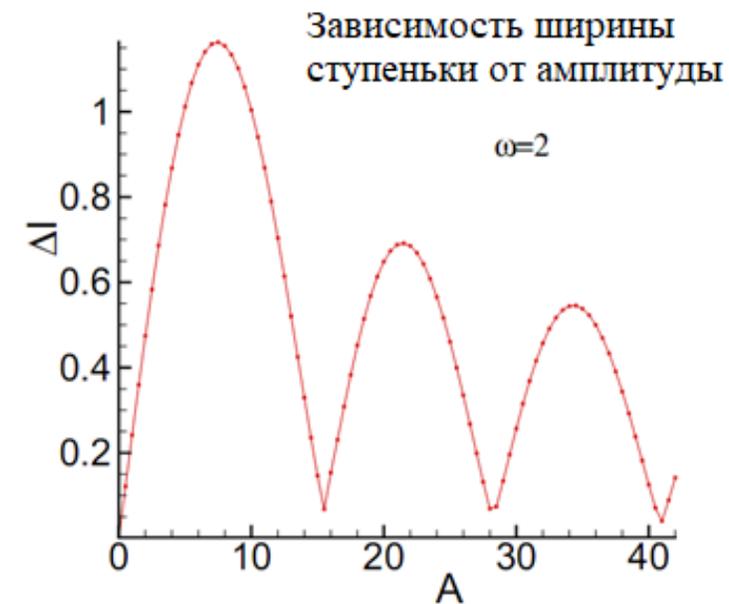


Под воздействием внешнего излучения при условии кратности частоты Джозефсона к частоте излучения ($n \omega_J = k \omega$) возникает ступенька постоянного напряжения на ВАХ джозефсоновского перехода. Эта ступенька называется **ступенькой Шапиро**.



Ширина ступеньки Шапиро зависит от амплитуды и частоты излучения.

Ступенька Шапиро имеет практический интерес, например на ее основе реализована **стандарт напряжения**



Динамические уравнения для описания джозефсоновского перехода под воздействием излучения

$$\begin{aligned}\frac{dV}{dt} &= I - \beta V - \sin \varphi + A \sin(u) \\ \frac{d\varphi}{dt} &= V \\ \frac{du}{dt} &= \omega\end{aligned}$$

Задача

- Вычисления вольт-амперной характеристики джозефсоновского перехода под воздействием внешнего излучения.
- Вычисления зависимости ширины ступеньки Шапиро от амплитуды

HLIT Jupyter book

[Welcome to HLIT Jupyter Book](#)

Python-инструментарий для моделирования динамики джозефсоновского перехода под воздействием внешнего излучения

Вычисляем ВАХ

Задаем значения параметров для вычисления ВАХ

Отметим, что при вычислении необходимо согласовать все временных характеристики с периодом внешнего излучения во избежании накопления ошибок при усреднении. Для этого нужно вычислить период внешнего излучения $T = 2\pi/\omega$. Из построенных выше графиков видно, что решения стабилизируется после $T_{\min} = 60$ (для $\omega = 2$), это соответствует примерно $T_{\min} = 20T$ (начало интервала для усреднения). Для вычисления ВАХ если выберем временной интервал $T_{\max} = 250$ это будет соответствовать примерно $T_{\max} = 80T$ (максимальное значение времени) и, соответственно, шаг по времени $\Delta t = T/50$.

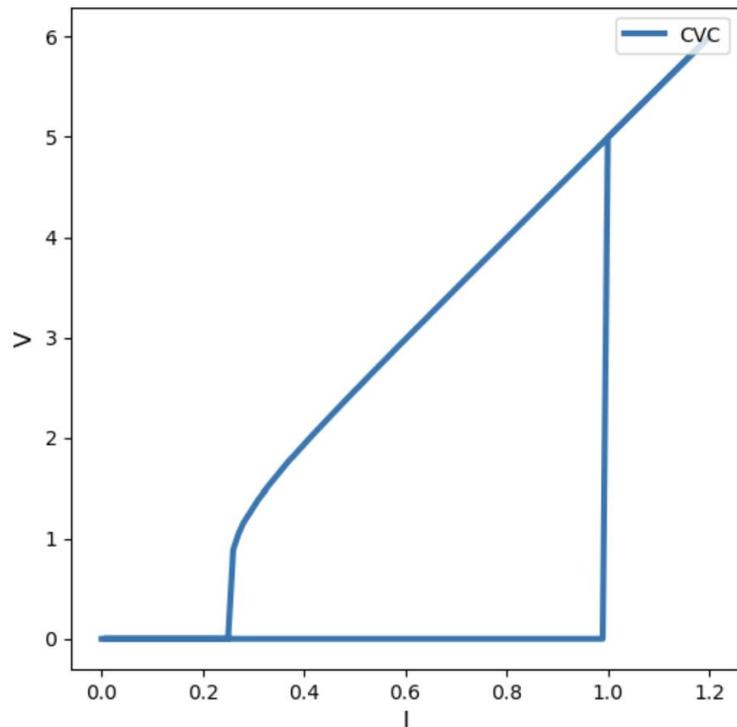
```
T = 2 * np.pi/omega # Период внешнего излучение
Tmin = 20 * T # Начало интервала для интегрирования для усреднения
Tmax = 80 * T # Максимальное значение времени
deltat = T/50 # шаг по времени
ntmin = int(Tmin/deltat)
nt = int(Tmax/deltat)

deltaIext = 0.01
Iext = 0.0
a = 1.0
Iext_max = 1.2
A = 0.5
Vplot = []
Iplot = []
s0 = np.array([0, 0, 0])
```

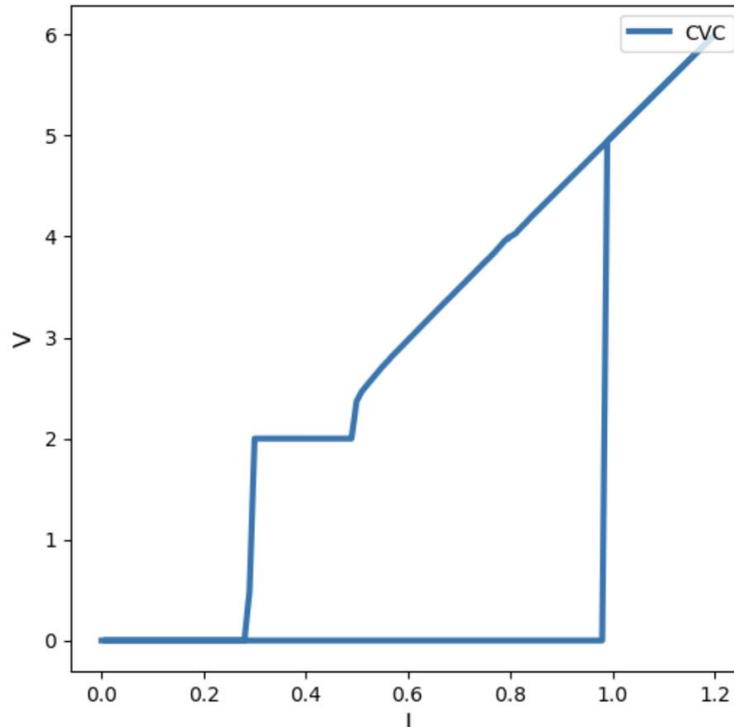
Введем параметр `Tlimit` ограничивающий интервал изменения по току для избежания заикливания

<http://studhub.jinr.ru:8080/jjbook/intro.html>

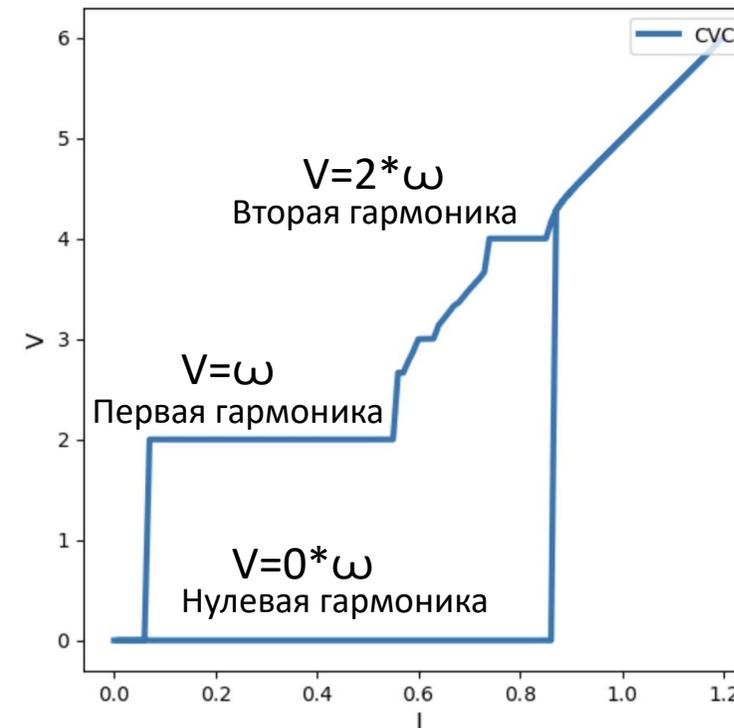
Вычисленные вольт-амперные характеристики при $\omega=2$ и значений амплитуды: $A=0$, $A=1$, $A=3$



ВАХ без излучения

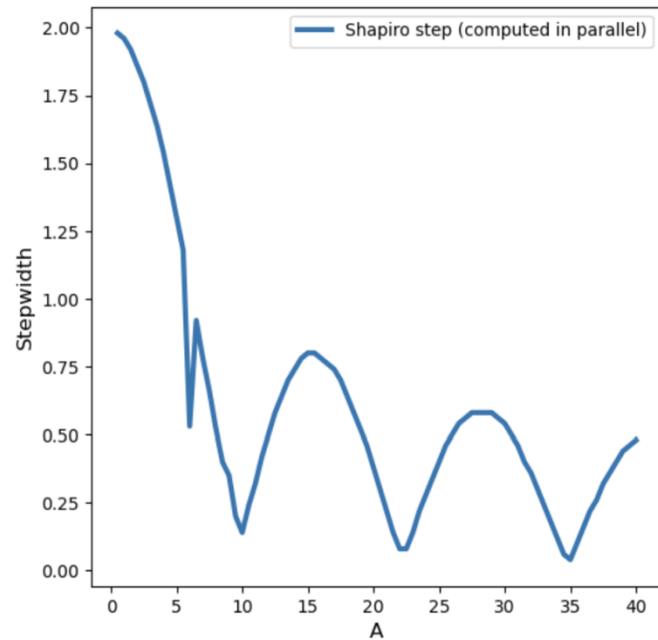


ВАХ с излучением при $\omega=2$ и $A=1$

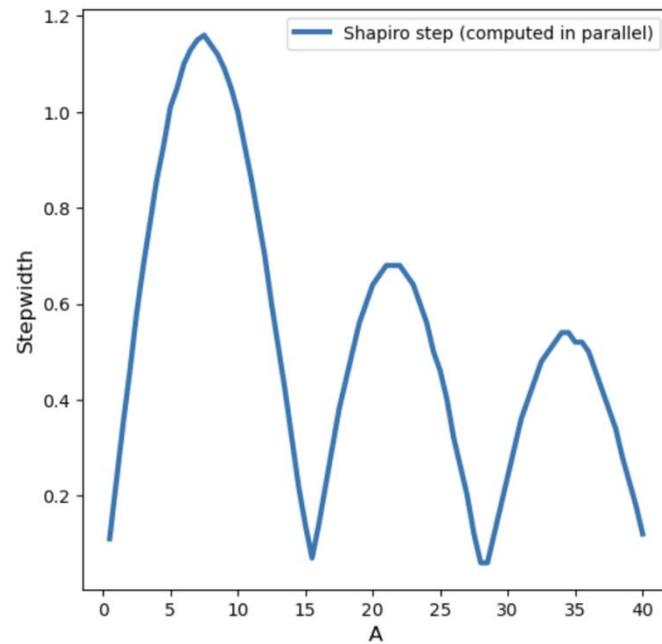


ВАХ с излучением при $\omega=2$ и $A=3$

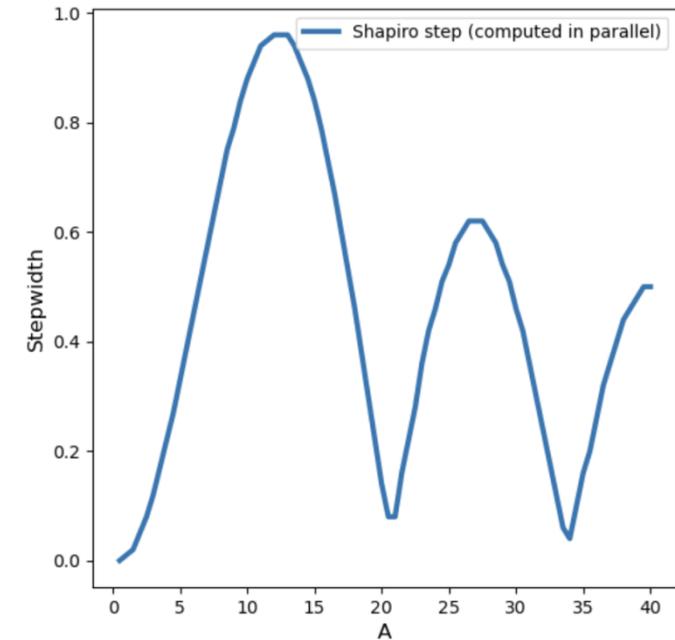
Графики зависимости ширины ступеньки Шапиро от амплитуды при $\omega=2$, для нулевой первой и второй гармоника



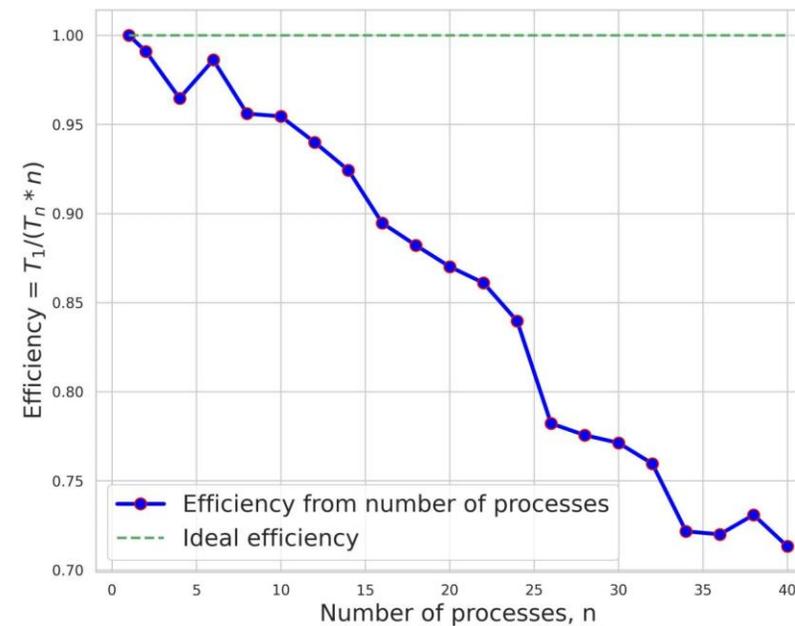
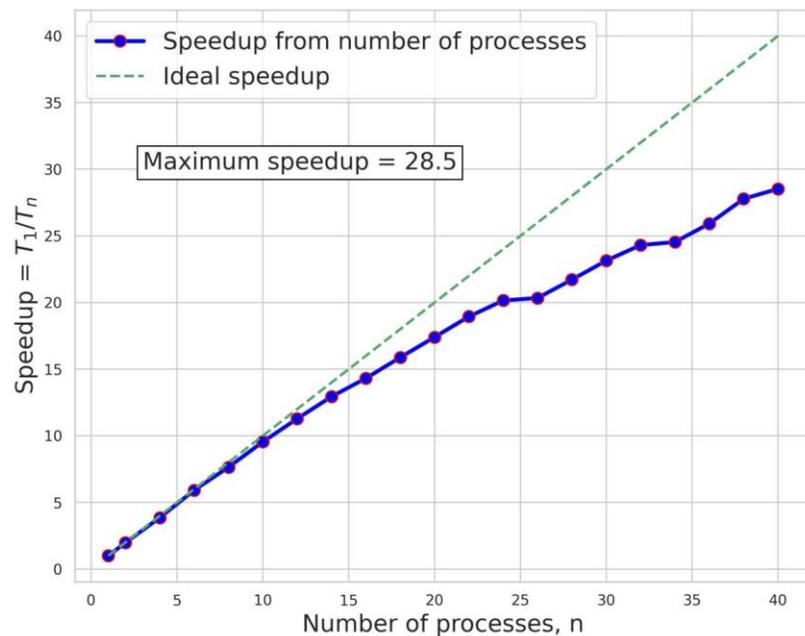
Нулевая гармоника



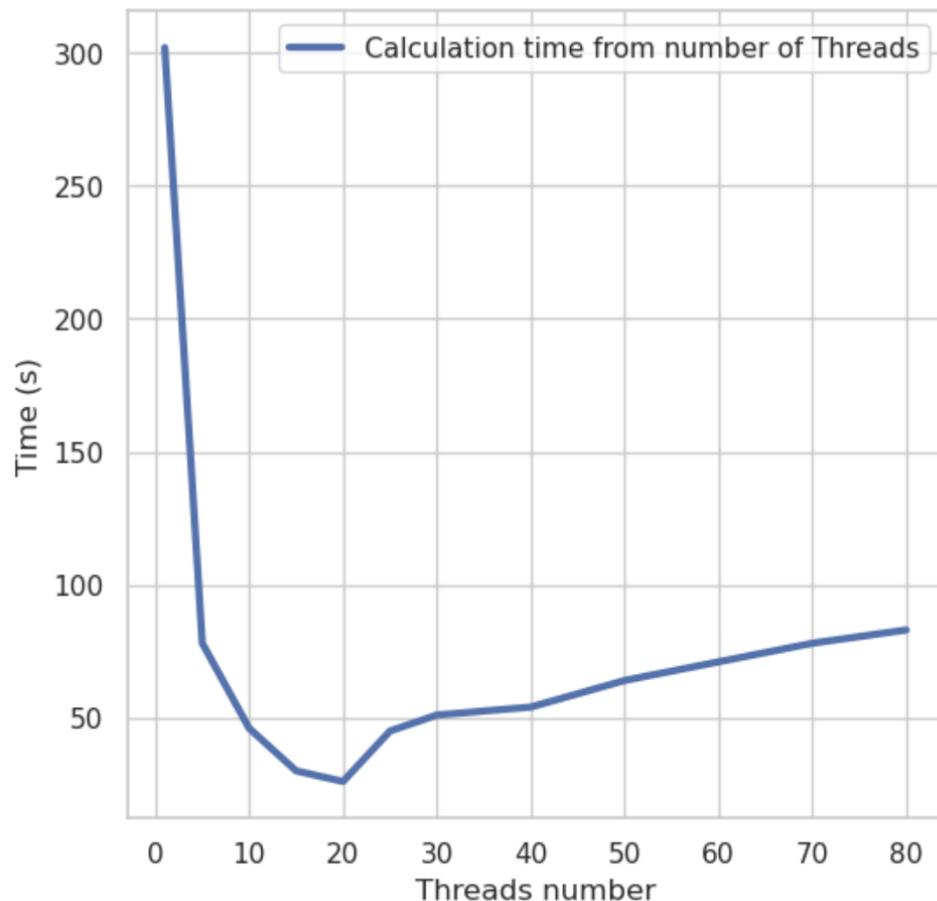
Первая (основная) гармоника



Вторая гармоника



Для 160 значений амплитуды с шагом $\Delta A = 0.25$ продолжительность вычисления в последовательном режиме составляло **29 часов**. Параллельные вычисления проводились с использованием библиотекой **Joblib** Получено порядка 28.5 раз ускорение при использовании 40 потоков и время вычисления сократилось до **1 часа**.



Вычисления проведены для тех же значениях что и на предыдущем слайде, т. е. для 160 значений амплитуды с шагом $\Delta A = 0.25$ продолжительность вычисления в последовательном режиме **5 мин.**

При параллельном вычислении при 20 потоков получено **26 сек.**
Ускорение в 11 раз

Также если сравнивать предыдущие результаты с результатами использования **Numba**,

Удалось получить:

Ускорение в 348 раз при последовательном

Ускорение 138 раз при параллельном

Публикации в рецензируемых журналах

1. I. R. Rakhmonov, A. R. Rakhmonova and Yu. M. Shukrinov, Magnetization Reversal by Pulse of Magnetic Field in SQUID with Single ϕ_0 -Junction, ISSN 1547-4771, **Physics of Particles and Nuclei Letters**, 2023, Vol. 20, No. 5, pp. 1161–1164. © Pleiades Publishing, Ltd., 2023
2. A. R. Rahmonova, I. R. Rahmonov, O. I. Streltsova, M.I. Zuev, Toolkit in Python for simulation of Shapiro step on the current-voltage characteristic of a Josephson junction **Physics of Particles and Nuclei Letters**, (2023) *submitted*

Прочие публикации

1. И.Р. Рахмонов, А.Р. Рахмонова, О.И. Стрельцова, М.И. Зуев, Python-реализация алгоритмов и инструментарий для моделирования динамики джозефсоновского перехода под воздействием внешнего излучения (2023) <http://studhub.jinr.ru:8080/jjbook>
2. М.В. Башашин, Ю.А. Бутенко, К.В. Куликов, А.В. Нечаевский, И.Р. Рахмонов, А.Р. Рахмонова, О.И. Стрельцова, М.И. Зуев, Инструментарий для моделирования гибридных наноструктур сверхпроводник/магнетик (2022) <http://studhub.jinr.ru:8080/books/intro.html>
3. А. Р. Рахмонова, О. И. Стрельцова, И. Р. Рахмонов, М. И. Зуев, Численное моделирование взаимодействия одиночного длинного джозефсоновского перехода с ферромагнитной тонкой плёнкой, Труды XI Всероссийская конференция «Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем» 457-460 (2021).
4. I.R. Rahmonov, E.V. Zemlyanaya, M.V. Bashashin, P. Atanasova, A.R. Rahmonova, Yu.M. Shukrinov, Numerical Study of Josephson Nanostructures Using Parallel Computing, Armenian Journal of Physics 12, 233-239 (2019)
5. А. Р. Рахмонова, Анализ производительности компьютерного моделирования физических процессов в системе длинных джозефсоновских переходов на кластере HybriLIT, VIII Всероссийская конференция "Информационно-телекоммуникационные технологии и математическое моделирование высокотехнологичных систем", 269-272 (2018).

1. International Conference Distributed Computing and Grid Technologies in Science and Education (GRID`2023), Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

Разработка инструментария с использованием возможностей параллельных вычислений Python для моделирования ступеньки Шапиро

А.Р. Рахмонова, О.И. Стрельцова, М.И. Зуев, И.Р. Рахмонов

2. Information and Telecommunication Technologies and Mathematical Modeling of High-Tech Systems 2023 (ИТТММ 2023)

Python-реализация алгоритмов и инструментарий для моделирования динамики джозефсоновского перехода под воздействием внешнего излучения.

А.Р. Рахмонова, О.И. Стрельцова, М.И. Зуев, И.Р. Рахмонов

3. Проведен учебный курс

Осенняя Школа по информационным технологиям ОИЯИ, 16-20 октября 2023.

Инструментарий на основе Python-библиотек и экосистемы Jupyter для решения научных и прикладных задач.

План работ на 2024

1. Разработка вычислительной схемы для нахождения ширины ступеньки Шапиро на вольт-амперной характеристике джозефсоновского перехода с диэлектрическим барьером, проведение анализа возможностей различных библиотек для ускорения вычислений (*numba*, *multiprocessing*).
2. Разработка вычислительной схемы для математического моделирования сверхпроводящего квантового интерферометра (СКВИД), включающей нахождение вольт-амперной характеристики, зависимости критического тока и периодичности напряжения от внешнего магнитного поля. Будет изучена применимость библиотек для ускорения расчетов.
3. Разработка вычислительной схемы для моделирования переворота намагниченности импульсом внешнего магнитного поля в сверхпроводящем квантовом интерферометре с одним Фи-0 переходом, а также ускорение разработанных алгоритмов с использованием библиотеки *numba*.
4. Разработка вычислительной схемы для моделирования динамики длинного джозефсоновского перехода и вычисления ее вольт-амперной характеристики с использованием JIT компилятора.
5. Включение в экосистему всех разработанных моделей и их реализаций в виде электронной книги Jupyter Book.



Инструментарий на основе Python-библиотек и экосистемы Jupyter для решения научных и прикладных задач

 jupyter {book}

