



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

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

Лаборатория информационных технологий им. М.Г. Мещерякова
Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова

Объединенный институт ядерных исследований

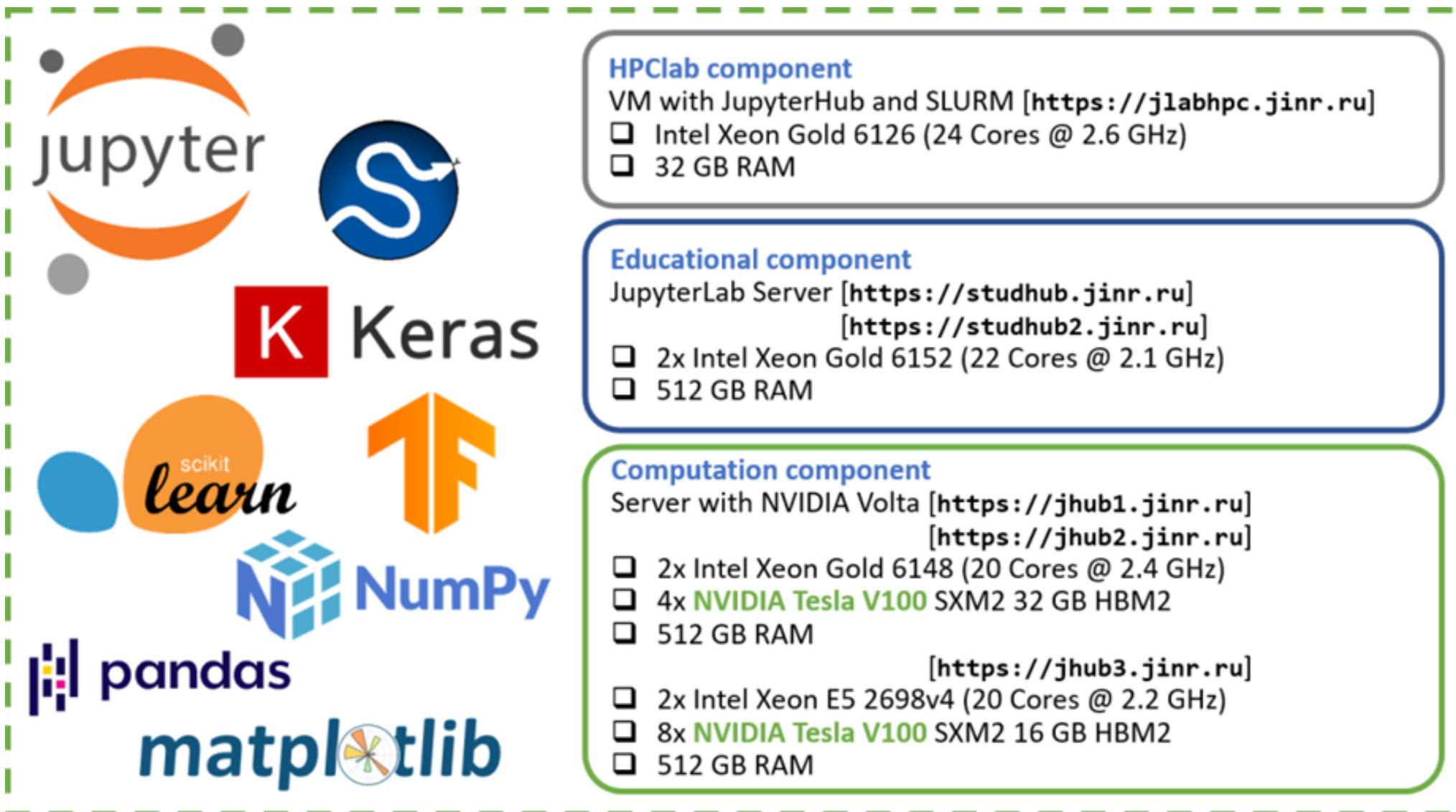
Дубна
2023



В рамках совместного проекта ЛИТ и ЛТФ разрабатывается экосистема для задач исследования системы основанных на джозефсоновских переходах с использованием Python в виде Jupyter Book.

Поставленные задачи:

1. Разработать алгоритм вычисления вольт-амперной характеристики джозефсоновского перехода под воздействием внешнего излучения.
2. Разработать алгоритм расчета зависимости ширины ступеньки Шапиро от амплитуды внешнего излучения
3. Ускорения вычислений с помощью библиотеки Joblib и Numba
4. Создать электронную книгу в виде Jupyter Book



Процесс проведения численных исследований

**Математическая
постановка
задачи**



**Разработка
вычислительной
схемы**



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



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

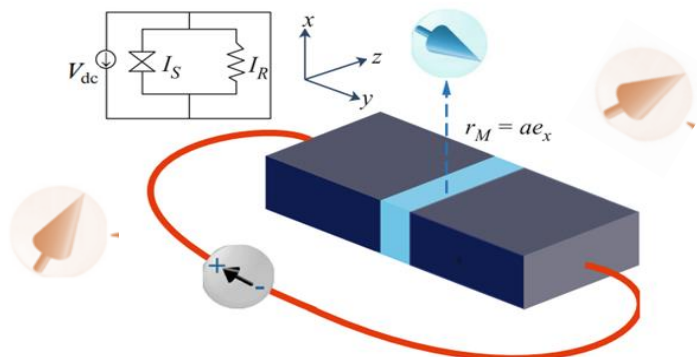


**Проведение
расчетов на
вычислительных
платформах**



**Программная
реализация**

Блок символьных вычислений



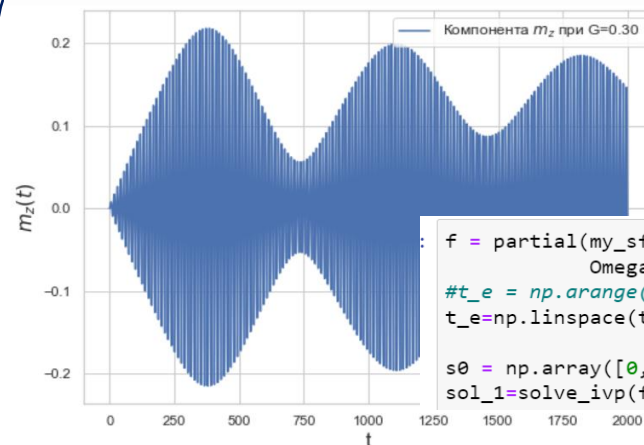
$$\gamma_{m_i} = -\frac{\mu_0}{2\Phi_0} \int d\mathbf{r}_i \frac{\mathbf{M}_i \times \mathbf{r}_i}{r^3}$$

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



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.

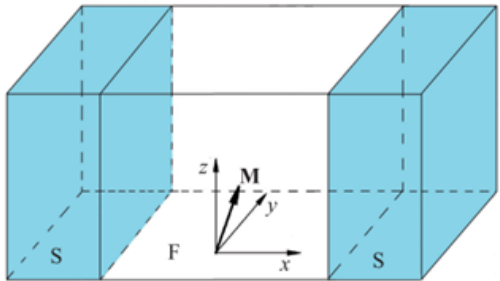
Ускорение многопараметрических расчетов



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 обращения магнитного момента джозефсоновского φ_0 -перехода



Математическая постановка задачи

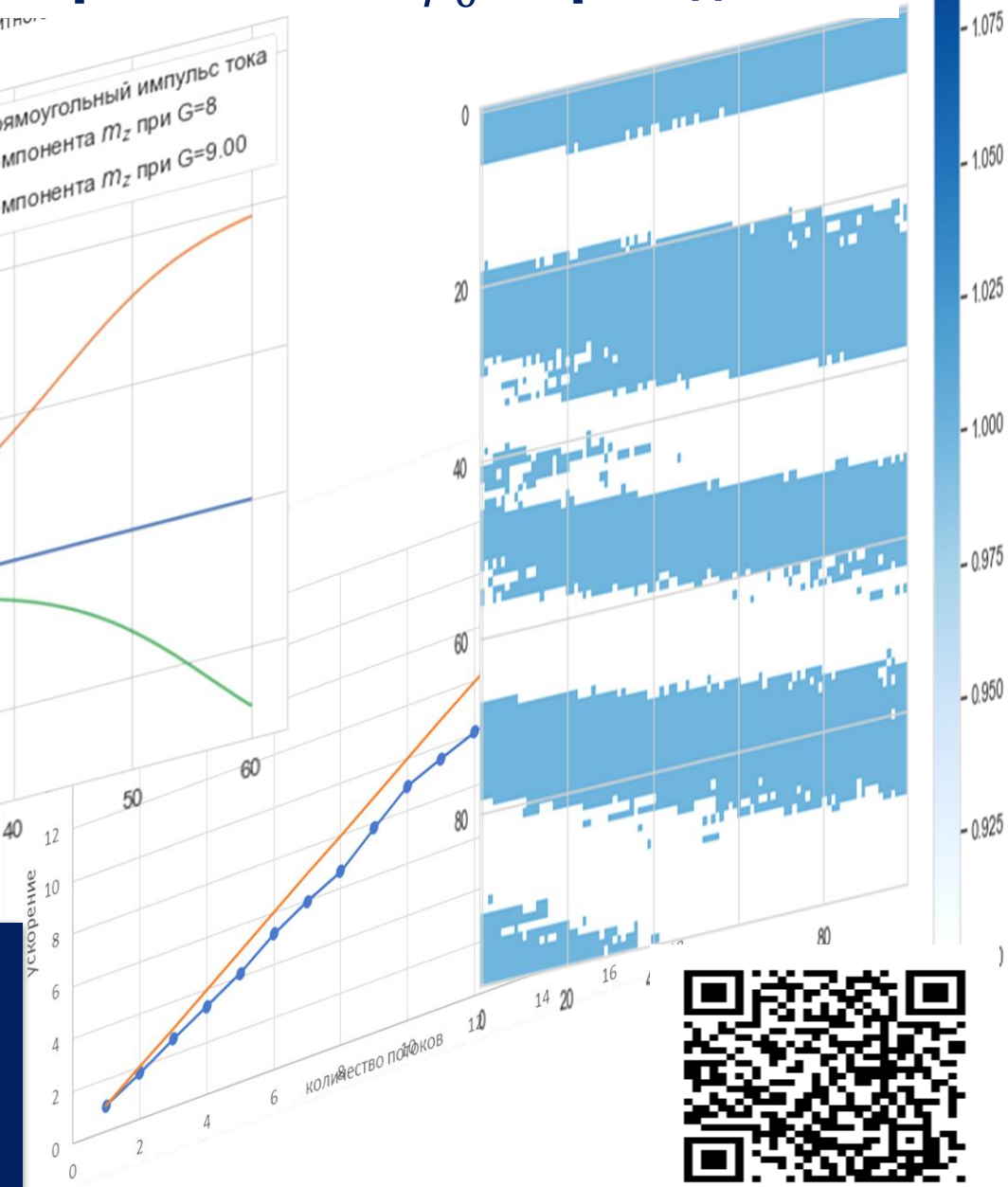
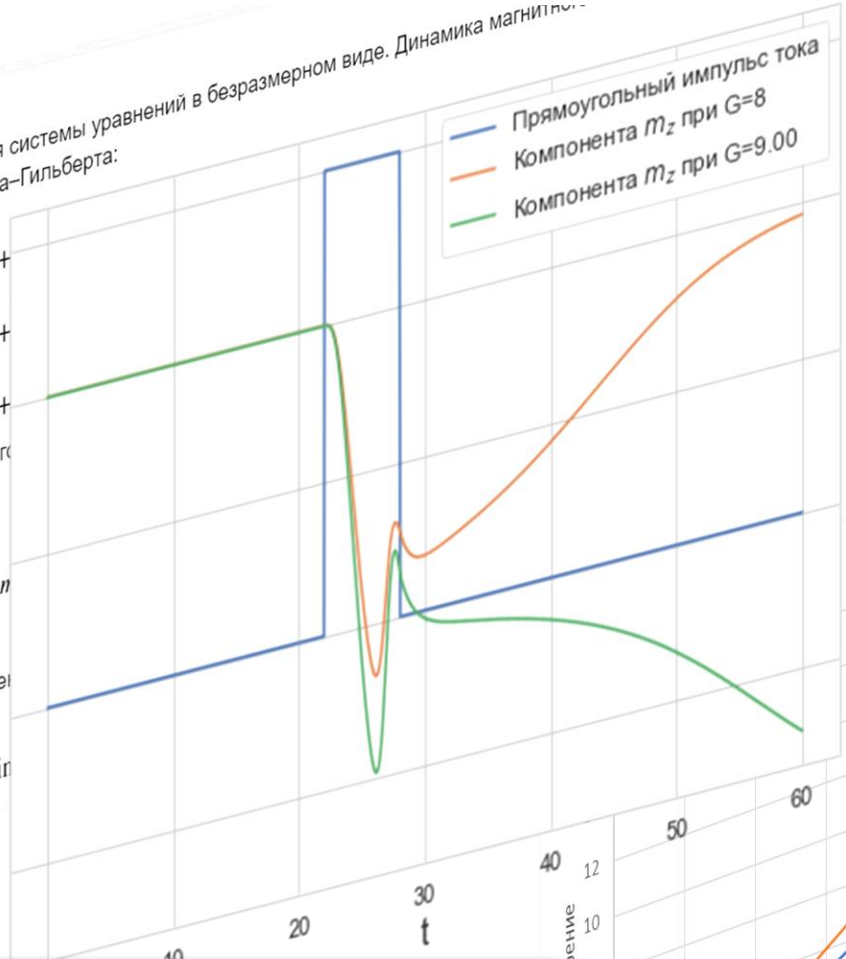
Основные уравнение представлены в работе [1]. Ниже приведена задача Коши для системы уравнений в безразмерном виде. Динамика магнитного момента M рассматриваемой системы описывается уравнением Ландау-Лифшица-Гильберта:

$$\begin{aligned} \frac{dm_x}{dt} &= -\frac{1}{1+M^2\alpha^2} \{m_y H_z - m_z H_y\} + \\ \frac{dm_y}{dt} &= -\frac{1}{1+M^2\alpha^2} \{m_z H_x - m_x H_z\} + \\ \frac{dm_z}{dt} &= -\frac{1}{1+M^2\alpha^2} \{m_x H_y - m_y H_x\} + \end{aligned}$$

где $M = [m_x, m_y, m_z]$ - компоненты магнитного момента, компоненты эффективного поля ϕ определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} H_x(t) &= 0, \\ H_y &= Gr \sin(\phi(t)) - r\dot{\phi} \\ H_z(t) &= m_z \end{aligned}$$

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

<http://studhub.jinr.ru:8080/books>



 jupyter {book}

Welcome to HLIT 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"

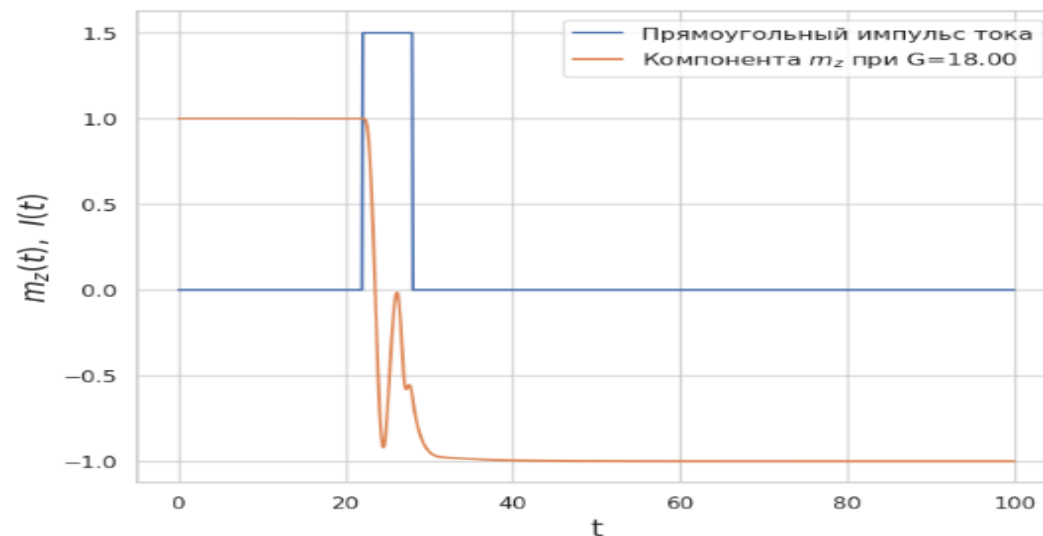


Находим численное решение с использованием библиотекой SciPy

```
# Параметры численного счета
t0 = 0
tf = 100
nt = 1000
```


```
f = partial(my_sfs, G=G, r=r, alpha=alpha,
            As=As, t_s=t_s, delta_t=delta_t)
t_e = np.linspace(t0, tf, nt)
s0 = np.array([0, 0, 1, 0])
sol_1 = solve_ivp(f, [t0, tf], s0, t_eval=t_e,
                 method='BDF', rtol=1e-8, atol=1e-8)
```

```
%matplotlib inline
plt.figure(figsize = (8, 6))
plt.plot(t_e, y_I, label= 'прямоугольный импульс тока')
plt.plot(sol_1.t, sol_1.y[2], label= 'Компонента $m_z$ $ при G=%4.2f$ %G)
plt.xlabel('t', size=16)
plt.ylabel('$m_z(t), \sim I(t)$', size=16)
plt.legend(fontsize=12)
plt.show()
```



Contents

- Python-realization
- Математическая постановка задачи
- Начальные условия
- Вид тока
- Определим правые части уравнений
- Определим параметры модели**
- Расчеты при различных значениях параметров
- Проведение расчетов при различных значениях параметров: плоскость (α, G)
- Параллельная реализация
- Пример использования библиотеки Joblib
- Нахождение решений задачи при различных значениях параметров в параллельном режиме

 jupyter {book}

Welcome to HLIT 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
 Φ_0 джозефсоновском переходе
под воздействием импульса
тока**

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



Пример использования библиотеки Joblib

```
from joblib import Parallel, delayed
import numpy as np

def random_square(seed):
    np.random.seed(seed)
    random_num = np.random.randint(0, 10)
    return random_num**2
```

```
time_s = time.time()
results = Parallel(n_jobs=1)(delayed(random_square)(i) for i in range(10000))
time_f = time.time()
print(f'Execution time {time_f - time_s} s')
```

Execution time 0.3337514400482178 s

```
time_s = time.time()
results = Parallel(n_jobs=4)(delayed(random_square)(i) for i in range(10000))
time_f = time.time()
print(f'Execution time {time_f - time_s} s')
```

Execution time 1.3746991157531738 s

☰ Contents

Python-realization

Математическая постановка задачи

Начальные условия

Вид тока

Определим правые части уравнений

Определим параметры модели

Расчеты при различных значениях
параметров

Проведение расчетов при
различных значениях параметров:
плоскость (α, G)

Параллельная реализация

**Пример использования
библиотеки Joblib**

Нахождение решений задачи при
различных значениях параметров в
параллельном режиме

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

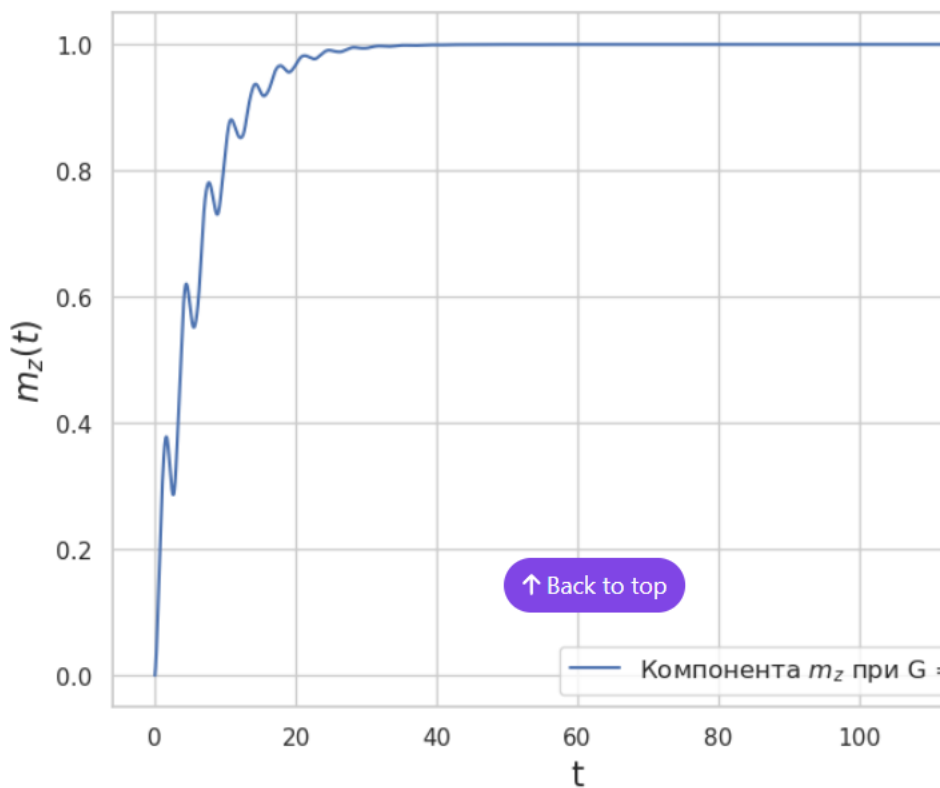
Задача 3. Ферромагнитный резонанс и динамика магнитного момента в системе "джозефсоновский переход-наномагнит"

.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:

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

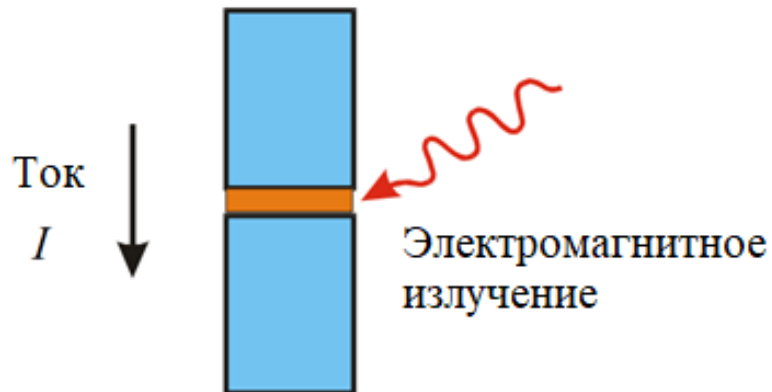
где $y = (y_1, \dots, y_n)^T$ - вектор-функция.

Пример 1: Численно решить задачу Коши:

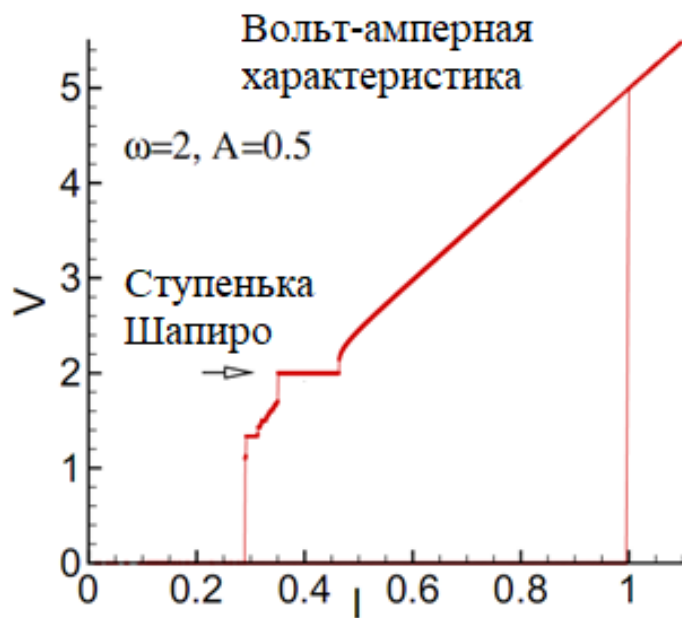
$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = y \cos(t), & (2) \\ y(0) = y_0. \end{cases}$$

Для сравнения приведем аналитическое решение задачи (2):

Влияние внешнего излучения на динамику джозефсоновского перехода

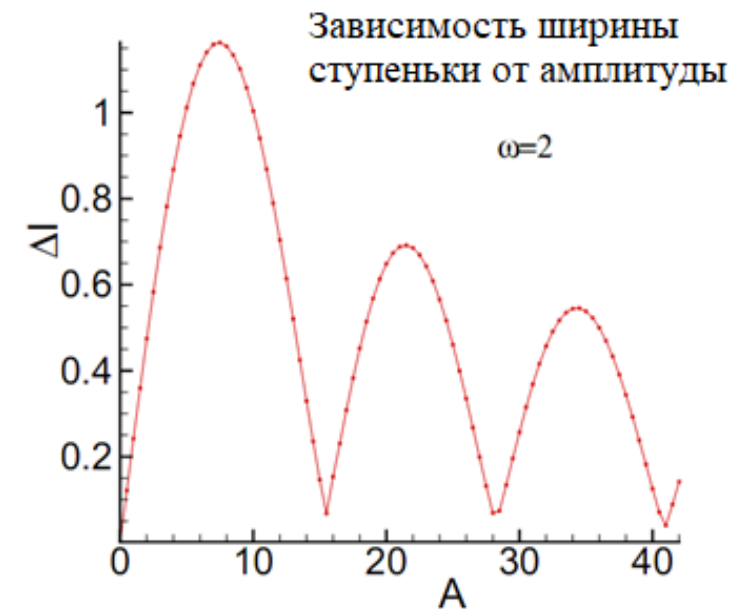


Под воздействием внешнего излучения при условии кратности частоты Джозефсона к частоте излучения ($n \omega_J = k \omega$) возникает ступенька постоянного напряжения на ВАХ джозефсоновского перехода. Эта ступенька называется **ступенькой Шапиро**.



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

$$\frac{dV}{dt} = I - \beta V - \sin \varphi + A \sin(u)$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = V$$

$$\frac{du}{dt} = \omega$$

Начальные условия

$$t=0, V=0, \varphi=0, u=0$$

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 $\Delta t = T/50$.

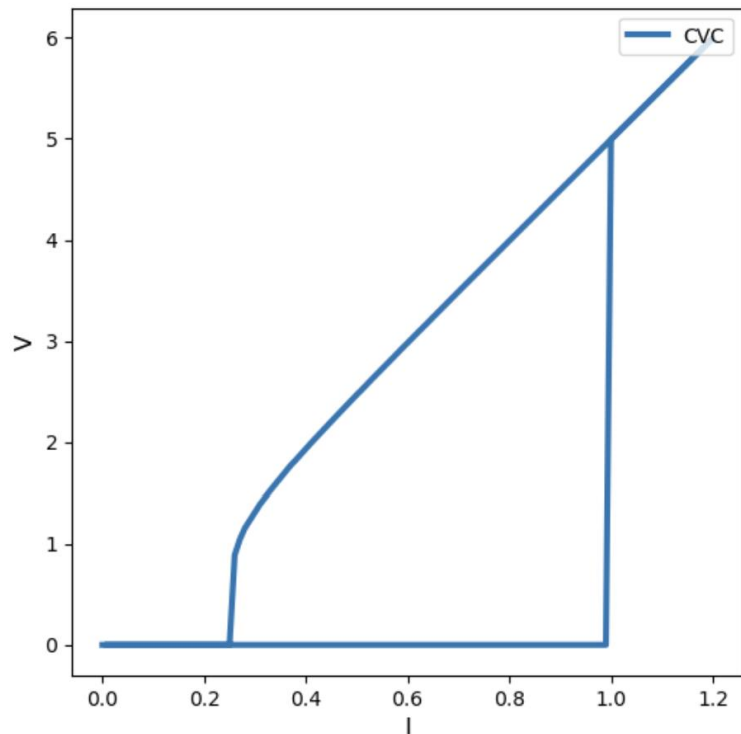
```
T = 2 * np.pi/omega # Период внешнего излучение
Tmin = 20 * T # Начало интервала для интегрирования для усреднения
Tmax = 80 * T # Максимальное значение времени
deltat = T/50 # шаг по времени
ntmin = int(Tmin/deltat)
nt = int(Tmax/deltat)

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

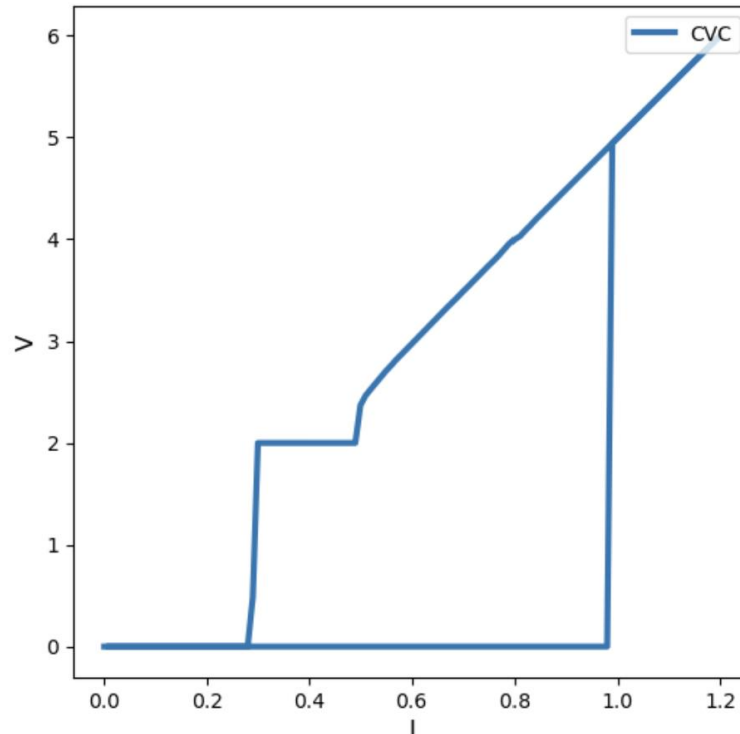
Введем параметр `Tlimit` ограничивающий интервал изменения по току для избежания заикливания

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

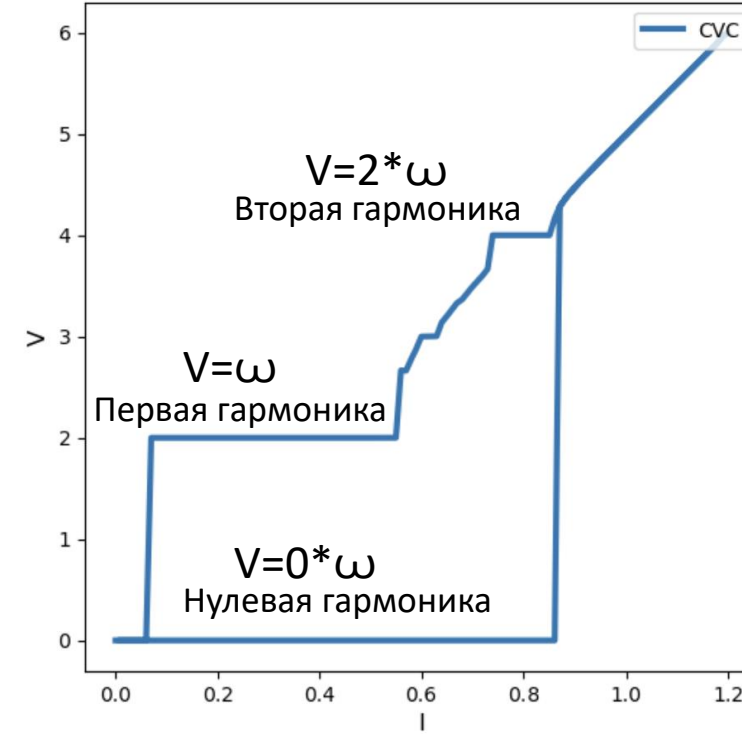
Вычисленные вольт-амперные характеристики при $\omega=2$ и значений амплитуды: $A=0$, $A=1$, $A=3$



ВАХ без излучения

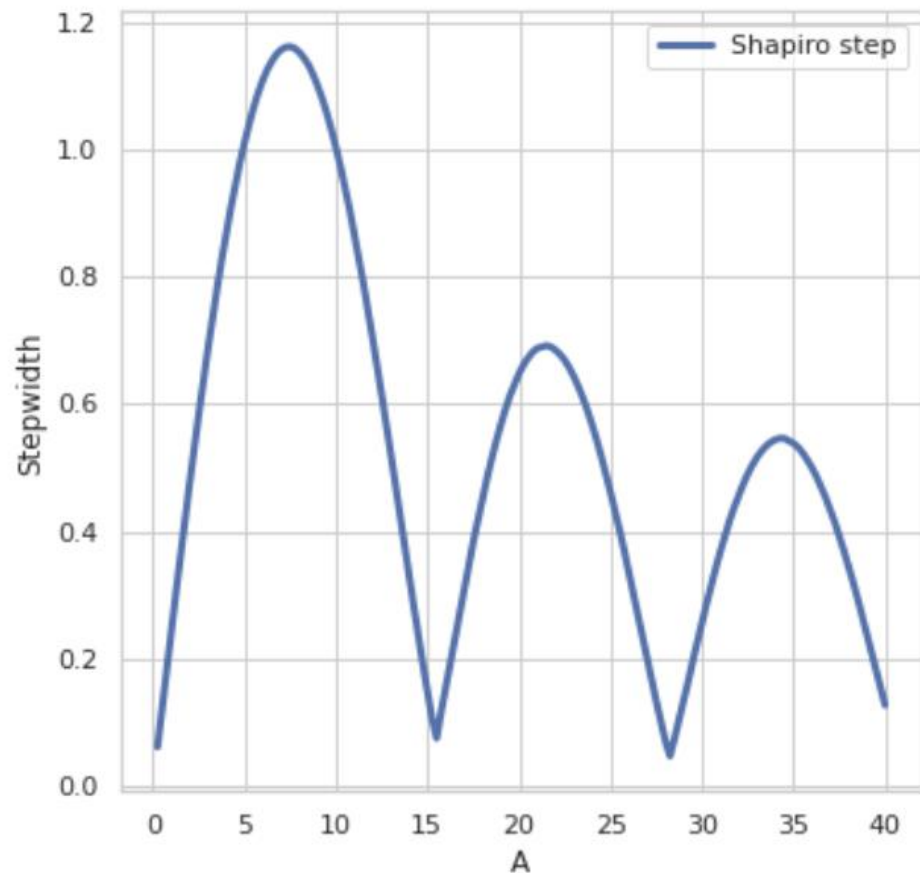


ВАХ с излучением при $\omega=2$ и $A=1$

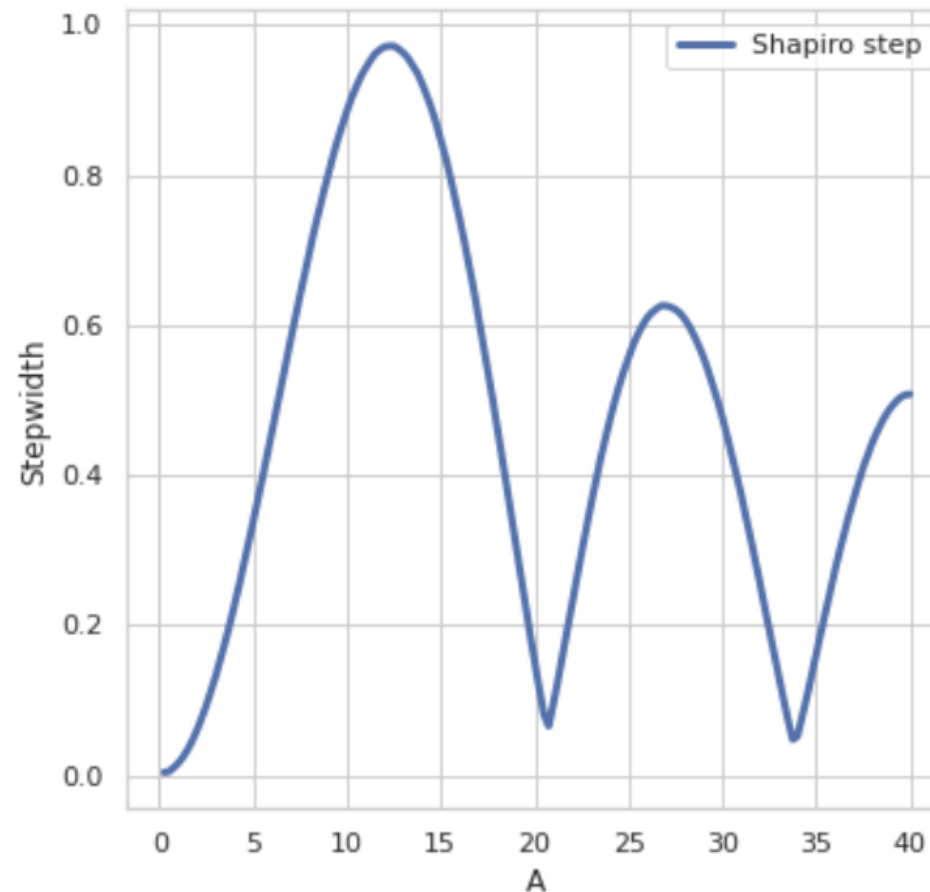


ВАХ с излучением при $\omega=2$ и $A=3$

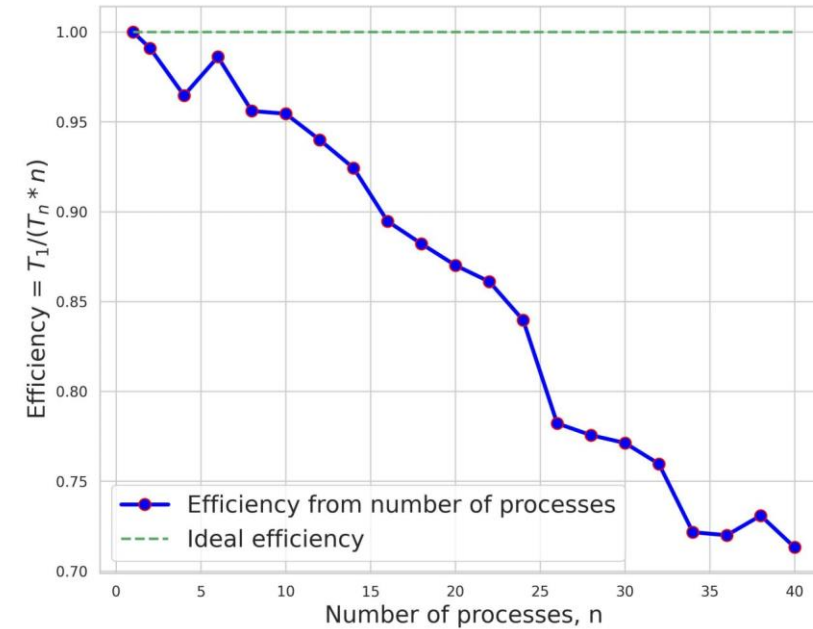
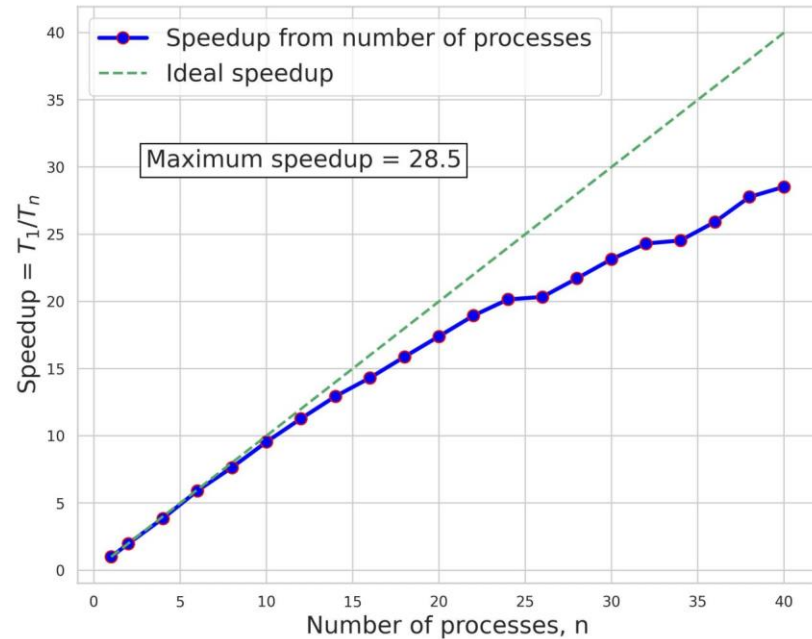
Графики зависимости ширины ступеньки Шапиро от амплитуды при $\omega=2$, для первой и второй гармоники



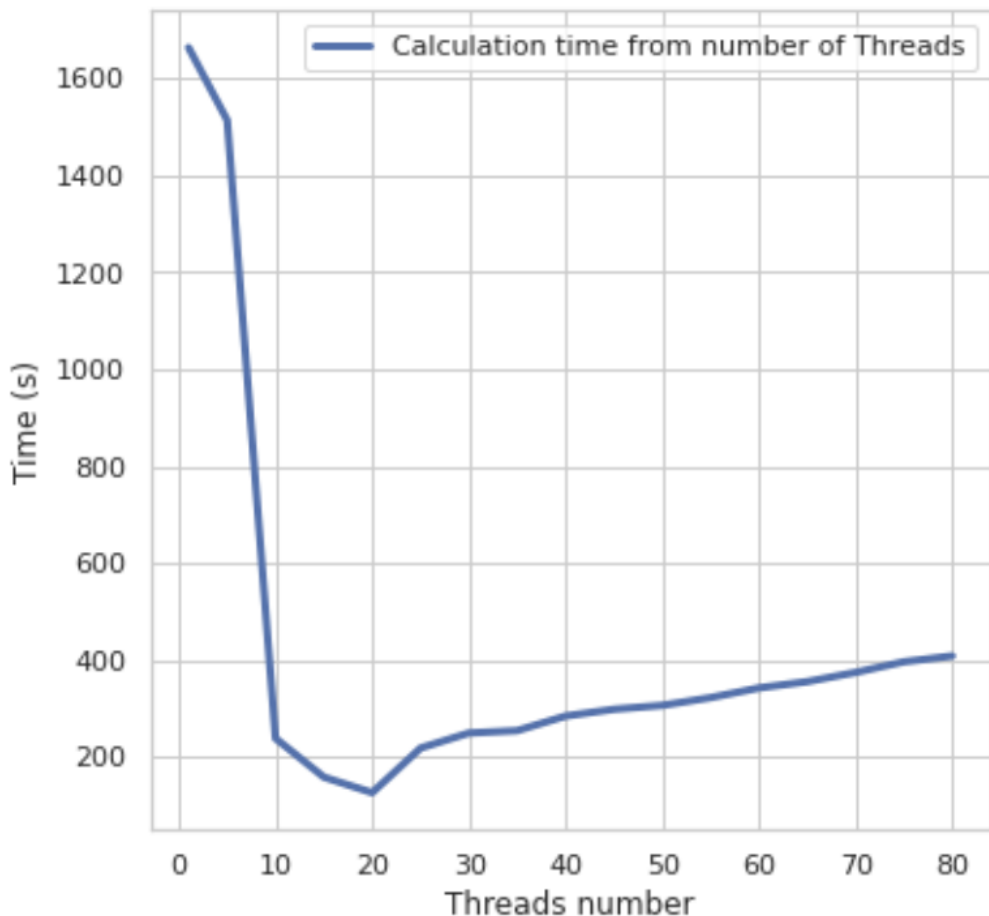
Первая (основная) гармоника



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.**

В параллельном режиме с использованием **20 потоков** время расчета составило **26 сек.**

Ускорение вычислений - **11 раз**

Также, если сравнивать времена расчетов с использования **Numba**, то было достигнуто ускорение в **70 раз**

Материал для публикаций пишется на языке разметки (Markdown). Можно писать как на обычном языке разметки, так и на расширенном [MyST](#) (Markedly Structured Text), который поддерживает цитаты, перекрестные ссылки, математические формулы и уравнения, а также рисунки.

Пояснительные материалы добавляются прямо в Jupyter Notebook, что позволяет вставлять ячейки с кодом и результатом выполнения в книгу.

Код выполняется и кэшируется в блокнотах в формате [.ipynb](#) или на языке разметки можно выполнить и вставить в книгу.

Результаты вычислений или графики могут быть вставлены внутри потока текста или даже сбоку от него.

Создание интерактивности книге. Можно скрывать ячейки с кодом и/или результатом, а также добавить интерактивности с библиотеками [Plotly](#) или [Pandas](#), показывая координаты точек или перемещая ползунок для прокрутки столбцов.

Генерация различных видов материалов. Можно получить книгу в виде одного или многостраничного веб-сайта, а также экспортировать в PDF.



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}

