



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

Заявка на соискание грантов молодых ученых ОИЯИ, стипендий им. М.Г. Мещерякова и Н.Н. Говоруна на 2025 год

А.Р. Рахмонова
НТОВКРиС

младший научный сотрудник



10. 12. 2024

Актуальность работы

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.

Экосистема ML/DL/HPC платформы HybriLIT



Component for HPC and data analysis

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

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

Development component

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

[<https://studhub2.jinr.ru>]

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

Component for carrying out resource-intensive calculations

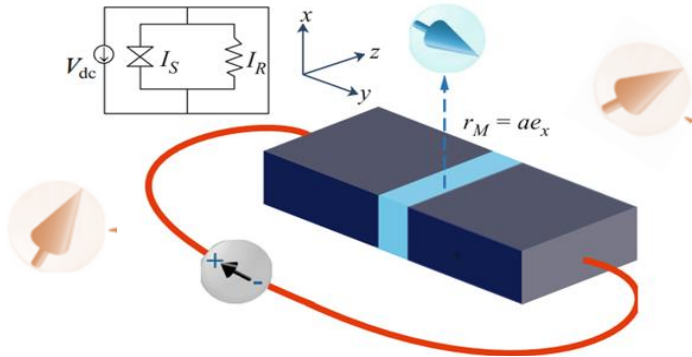
Server with NVIDIA Volta [<https://jhub1.jinr.ru>]

[<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

Исследование систем, основанных на джозефсоновских переходах

Блок символьных вычислений



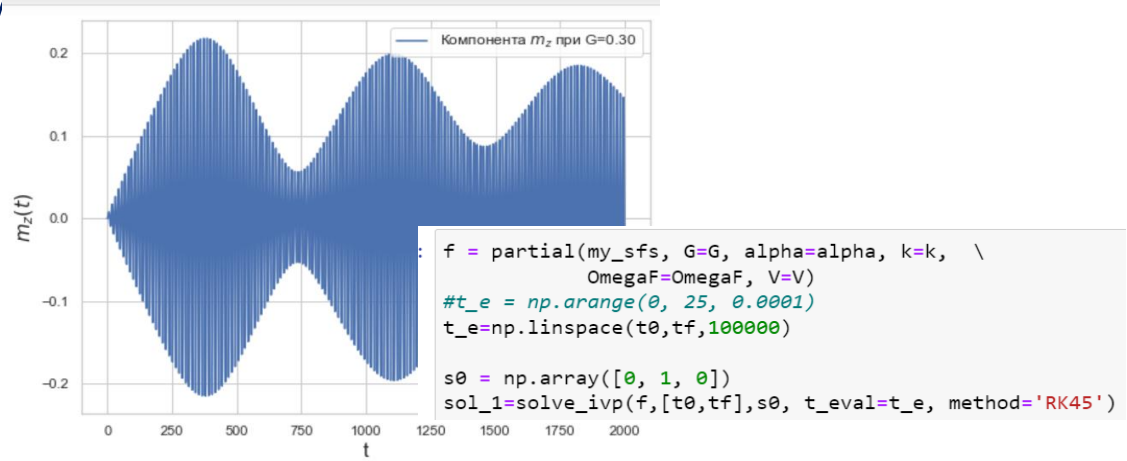
$$\gamma_{m_i} = -\frac{\mu_0}{2\Phi_0} \int d\mathbf{r}_i \frac{\mathbf{M}_i \times \mathbf{r}_i}{r^3}$$

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



SymPy is a Python library for symbolic mathematics.

Блок численных расчетов и анализа



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

Ускорение многопараметрических расчетов

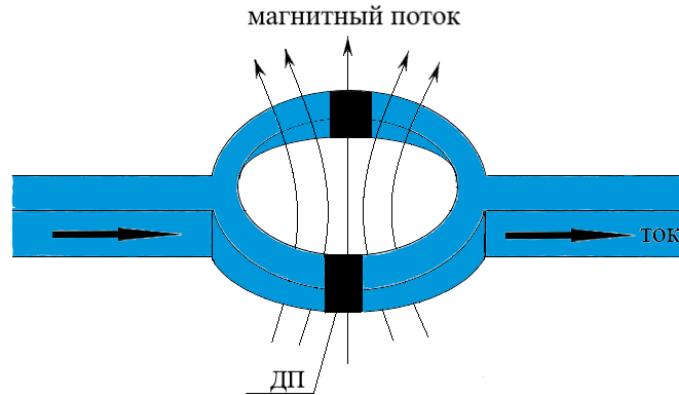


Joblib is a set of tools to provide lightweight pipelining in Python

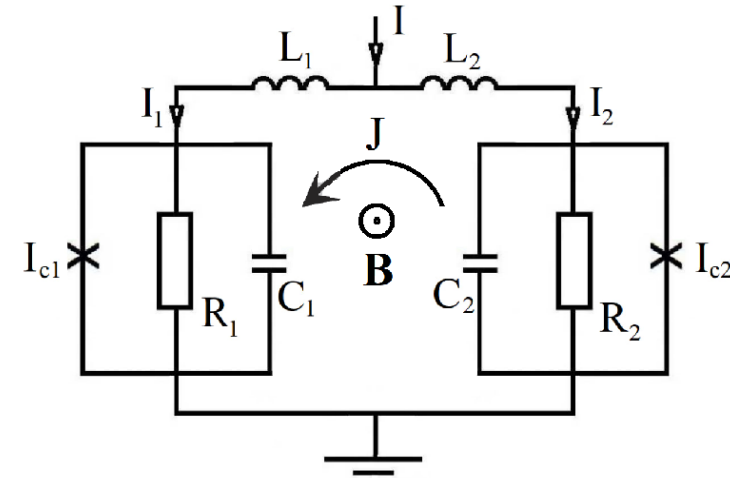


Numba is an open source JIT compiler that translates a subset of Python and NumPy code into fast machine code.

Моделирование двухконтактного СКВИДа



Схематический вид СКВИДа



Эквивалентная схема СКВИДа

Сверхпроводниковые квантовые интерференционные устройства, известные как **СКВИД** (от английского **SQUID** – **Superconducting Quantum Interference Device**) представляют собой сверхпроводящее кольцо с джозефсоновскими переходами.

СКВИД состоящий из двух параллельно соединенных джозефсоновских переходов называют СКВИДом постоянного тока и применяется как устройство для измерения слабых магнитных полей.

Начальная задача для системы уравнений двухконтактного СКВИДа

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dV_1(t)}{dt} = \frac{1}{\beta_c} \left[\frac{I}{2} - \frac{d\varphi_1(t)}{dt} - \sin[\varphi_1(t)] + \frac{1}{2\beta_L} [\varphi_2(t) - \varphi_1(t) + 2\pi(n - \varphi_{ext})] \right] \\ \frac{d\varphi_1(t)}{dt} = V_1(t) \\ \frac{dV_2(t)}{dt} = \frac{1}{\beta_c} \left[\frac{I}{2} - \frac{d\varphi_2(t)}{dt} - \sin[\varphi_2(t)] + \frac{1}{2\beta_L} [\varphi_2(t) - \varphi_1(t) + 2\pi(n - \varphi_{ext})] \right] \\ \frac{d\varphi_2(t)}{dt} = V_2(t) \end{array} \right.$$

$\varphi_1(0) = 0, V_1(0) = 0, \varphi_2(0) = 0, V_2(0) = 0$ начальные условия

Искомые функции

$\varphi_1(t)$ - разность фаз первого ДП

$\varphi_2(t)$ - разность фаз второго ДП

$V_1(t)$ - напряжение на первом ДП

$V_2(t)$ - напряжение на втором ДП

Параметры модели

I - внешний электрический ток

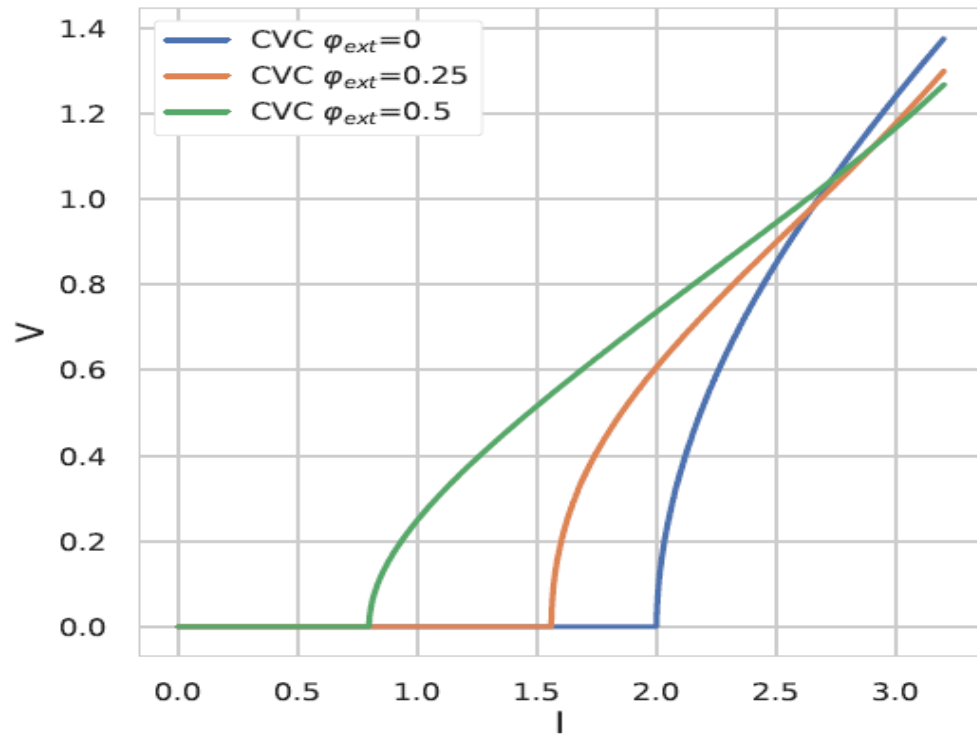
β_c - параметр МакКамбера

β_L - нормированная индуктивность

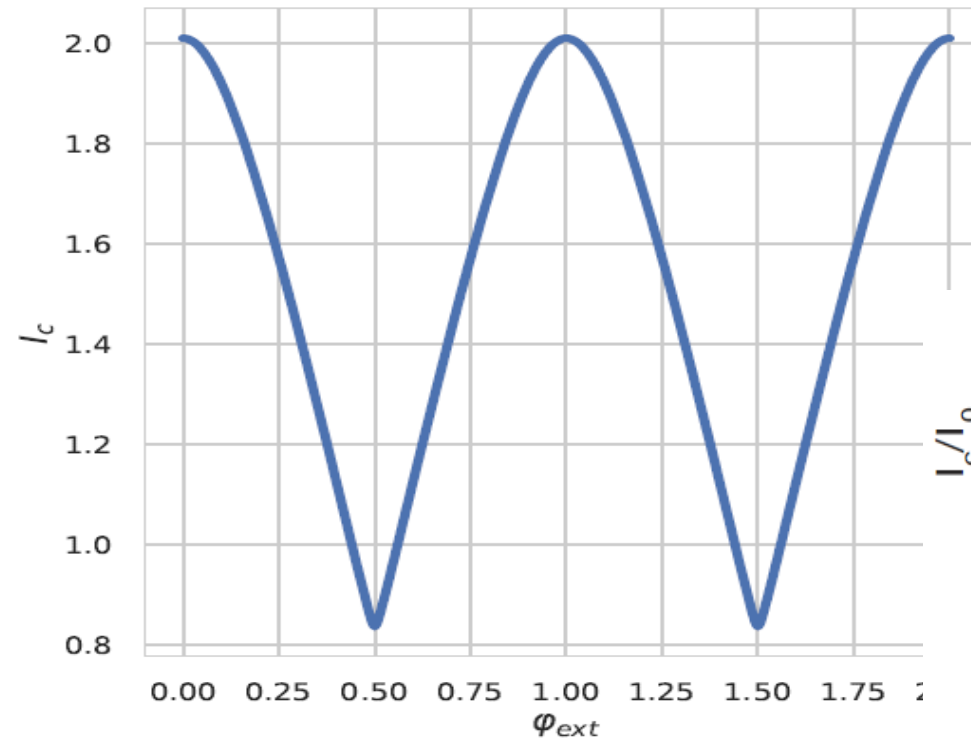
φ_{ext} - нормированный поток внешнего магнитного поля

n - число квантования магнитного потока

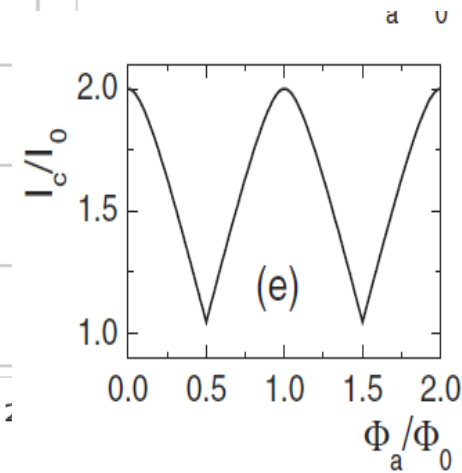
Зависимость критического тока СКВИДа от потока внешнего магнитного поля



Рассчитанные ВАХ при значениях потока внешнего магнитного поля: 0, 0.25 и 0.5



Зависимость критического тока от величины потока внешнего магнитного поля



А. Р. Рахмонова, О. И. Стрельцова, М. И. Зуев, И. Р. Рахмонов, А. В. Нечаевский, Материалы Всероссийской конференции с международным участием стр. 347-353, 2024

J. Clarke, A.I. Braginski, The SQUID Handbook: Applications of SQUIDs and SQUID Systems, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2006

Результаты исследования эффективности параллельных вычислений

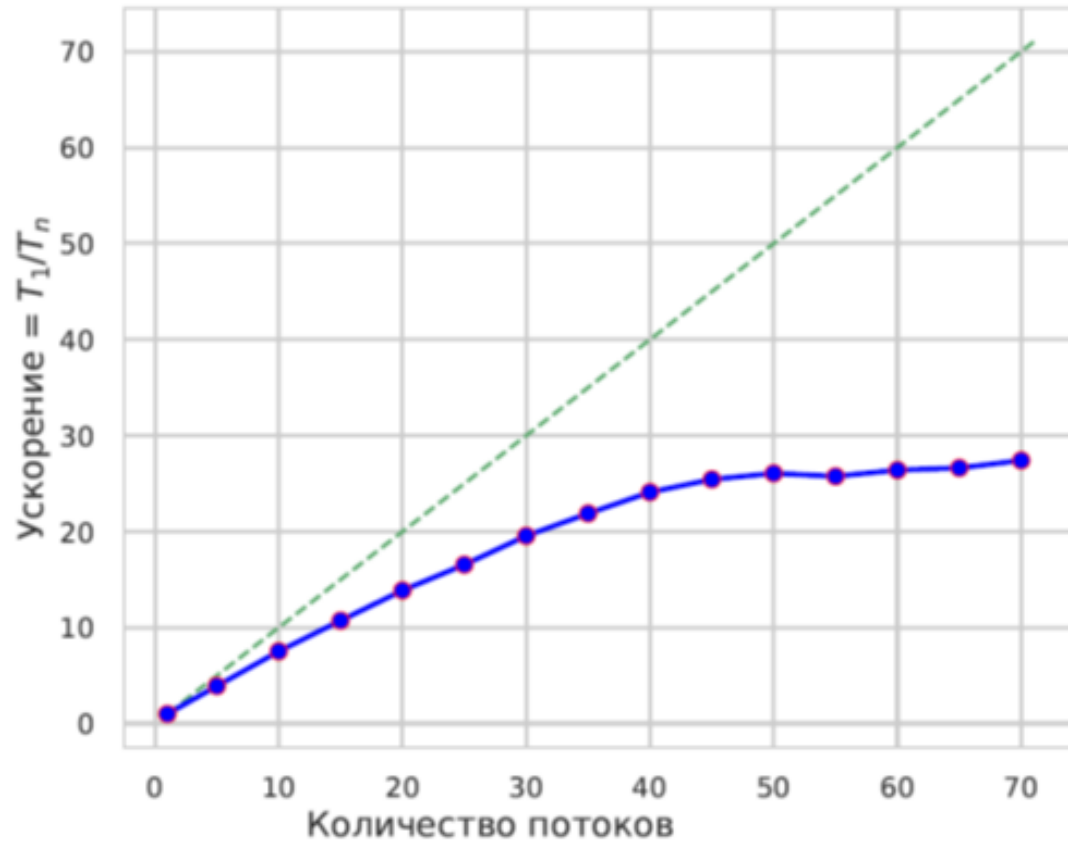


График зависимости ускорения параллельных вычислений от количества потоков

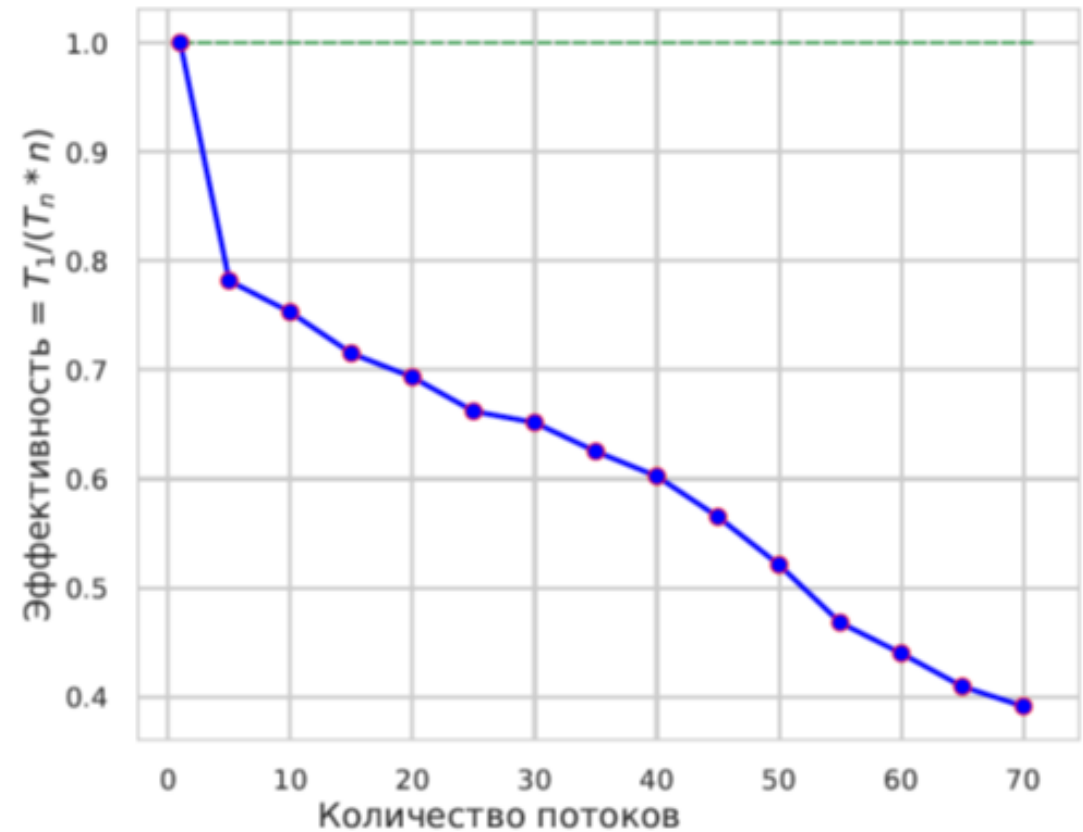
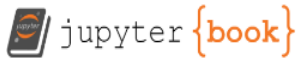


График зависимости эффективности параллельных вычислений от количества потоков

При использовании параллельного вычисления достигнуто ускорение в **27 раз**.



Welcome to HLIT Jupyter Book

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

Численное решение задачи

Коши: библиотека SciPy

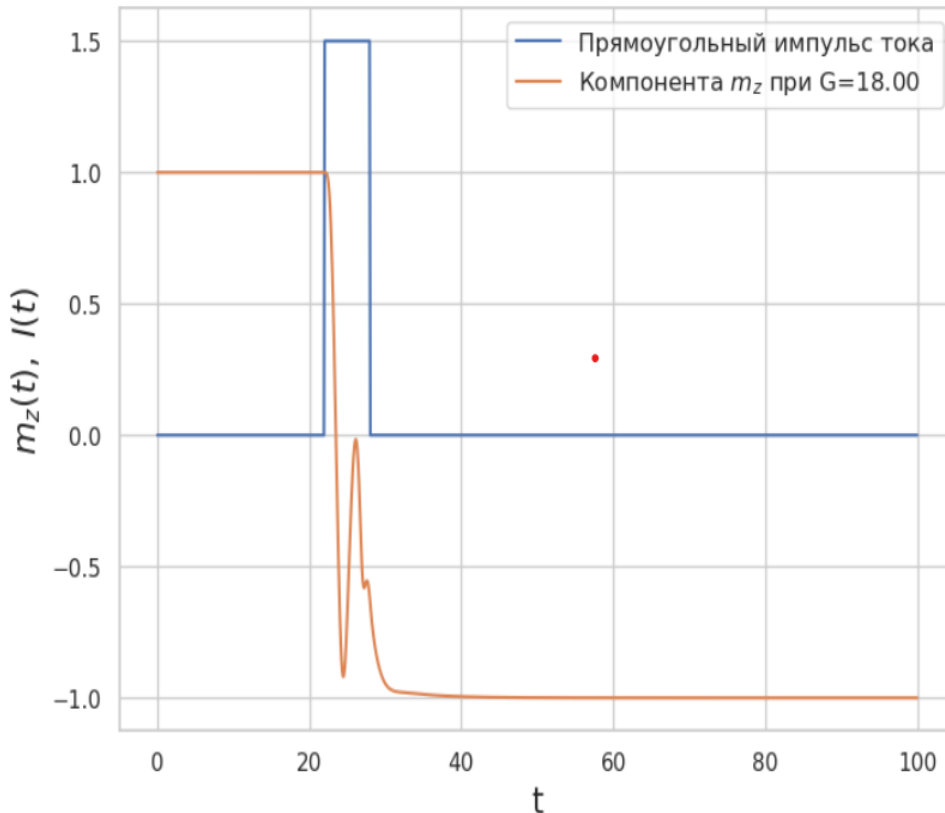
Параллельные вычисления на Python

Задача 1: Линеаризованное уравнение на магнитный момент

Задача 2. Периодичность появления интервалов переворота намагниченности в Φ_0 джоуфсоновском переходе под воздействием импульса тока

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

```
%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

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:

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

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

Пример 1: Численно решить задачу Коши:

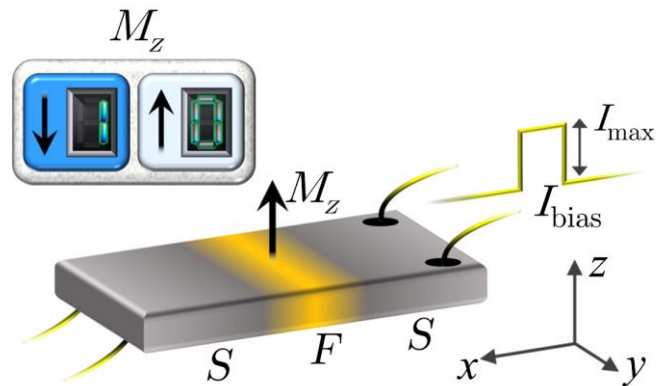
$$\begin{cases} \frac{dy}{dt} = y \cos(t), \\ y(0) = y_0. \end{cases} \quad (2)$$

Для сравнения приведем аналитическое решение задачи (2):

$$y_{exact} = y_0 e^{\sin(t)}.$$

Cryogenic Memory Element Based on an Anomalous Josephson Junction

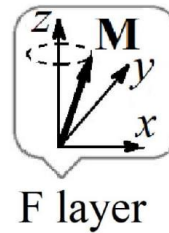
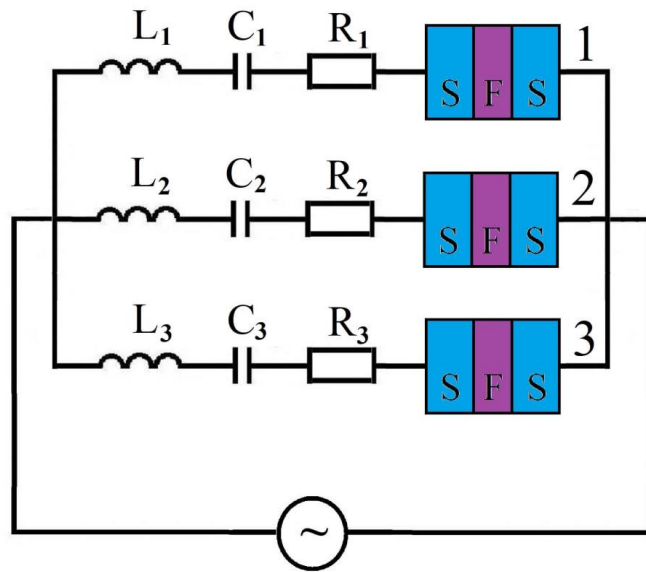
C. Guarcello^{1,2,*} and F.S. Bergeret^{1,3}



К S/F/S джозефсоновскому переходу приложен импульс тока. Направление z-компоненты намагниченности определяет состояние криогенной памяти 0 и 1.

На основе переворота намагниченности в Фи-0 переходе предложена разработка криогенной памяти

Модель криогенной памяти на основе трех Фи-0 переходов



Рассмотрим три Фи-0 перехода, каждый из которых соединен последовательно к LCR-контур.

Каждая из LCR-контуров имеет свою собственную частоту, которую можно найти выражением

$$\omega_c = \sqrt{\frac{1}{LC}}$$

Мы можем подать переменный импульс напряжения с фиксированной частотой ω_{pulse}

Подбирая частоту ω_{pulse} равной к собственной частоте выбранной ветви цепи, мы можем осуществить переворот намагниченности в выбранном Фи-0 переходе.

Динамическими переменными рассматриваемой системы являются: вектор намагниченности \mathbf{M} , джозефсоновская разность фаз φ и напряжение на емкости цепи u_c .

Динамика \mathbf{M} описывается уравнениями Ландау-Лифшица-Гильберта, φ описывается уравнением резистивно-емкостной шунтированной модели, а уравнение для u_c может быть получено по правилам Кирхгофа

Система уравнений

$$\frac{dm_{xi}}{dt} = -\frac{\omega_F}{1 + \alpha^2 m_i^2} \{m_{yi} h_{zi} - m_{zi} h_{yi} + \alpha [m_{xi} (m_{xi} h_{xi} + m_{yi} h_{yi} + m_{zi} h_{zi}) - h_{xi} m_i^2]\} ,$$

$$\frac{dm_{yi}}{dt} = -\frac{\omega_F}{1 + \alpha^2 m_i^2} \{m_{zi} h_{xi} - m_{xi} h_{zi} + \alpha [m_{yi} (m_{xi} h_{xi} + m_{yi} h_{yi} + m_{zi} h_{zi}) - h_{yi} m_i^2]\} ,$$

$$\frac{dm_{zi}}{dt} = -\frac{\omega_F}{1 + \alpha^2 m_i^2} \{m_{xi} h_{yi} - m_{yi} h_{xi} + \alpha [m_{zi} (m_{xi} h_{xi} + m_{yi} h_{yi} + m_{zi} h_{zi}) - h_{zi} m_i^2]\} ,$$

$$\frac{d\varphi_i}{dt} = C_i U_i - \sin(\varphi_i - r m_{yi}) + r \frac{dm_{yi}}{dt} ,$$

$$\frac{du_{ci}}{dt} = U_i , \quad \frac{dU_i}{dt} = \left[V_{pulse} - C_i R_i U_i - u_{ci} - \frac{d\varphi_i}{dt} \right] \omega_{ci}^2$$

Компоненты эффективного поля

$$h_{xi} = 0$$

$$h_{yi} = Gr \sin(\varphi_i - r m_{yi})$$

$$h_{zi} = m_{zi}$$

$\omega_{c,i}$ - собственная частота i -го LCR контура

C_i - емкость i -го контура

R_i - сопротивление i -го контура

$i = 1, 2, 3$ - номера ветвей цепи

m_{xi}, m_{yi}, m_{zi} - компоненты намагниченности

φ_i - разность фаз

u_{ci} - напряжение на емкости

ω_F - частота ферромагнитного резонанса

α - параметр гильбертовского затухания

r - параметр спин-орбитального взаимодействия

G - отношение джозефсоновской энергии к магнитной

Численный метод

Здесь V_{pulse} это импульс переменного напряжения и определяется как

$$V_{pulse} = \begin{cases} A \sin \omega_{pulse}, & (t_0 - \delta t/2) < t < (t_0 + \delta t/2) \\ 0, & \left(t_0 - \frac{\delta t}{2}\right) > t, \quad \left(t_0 + \frac{\delta t}{2}\right) < t \end{cases}$$

t_0 - середина интервала действия импульса

ω_{pulse} - частота импульса

δt - продолжительность импульса

A - амплитуда импульса

начальные условия

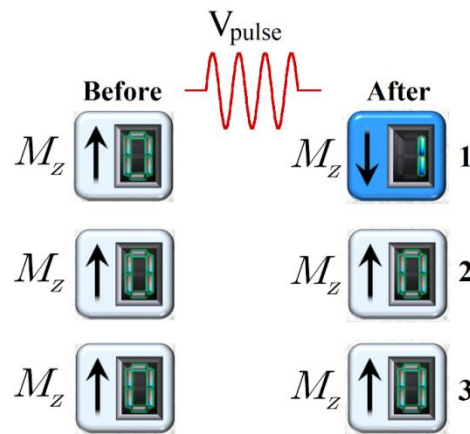
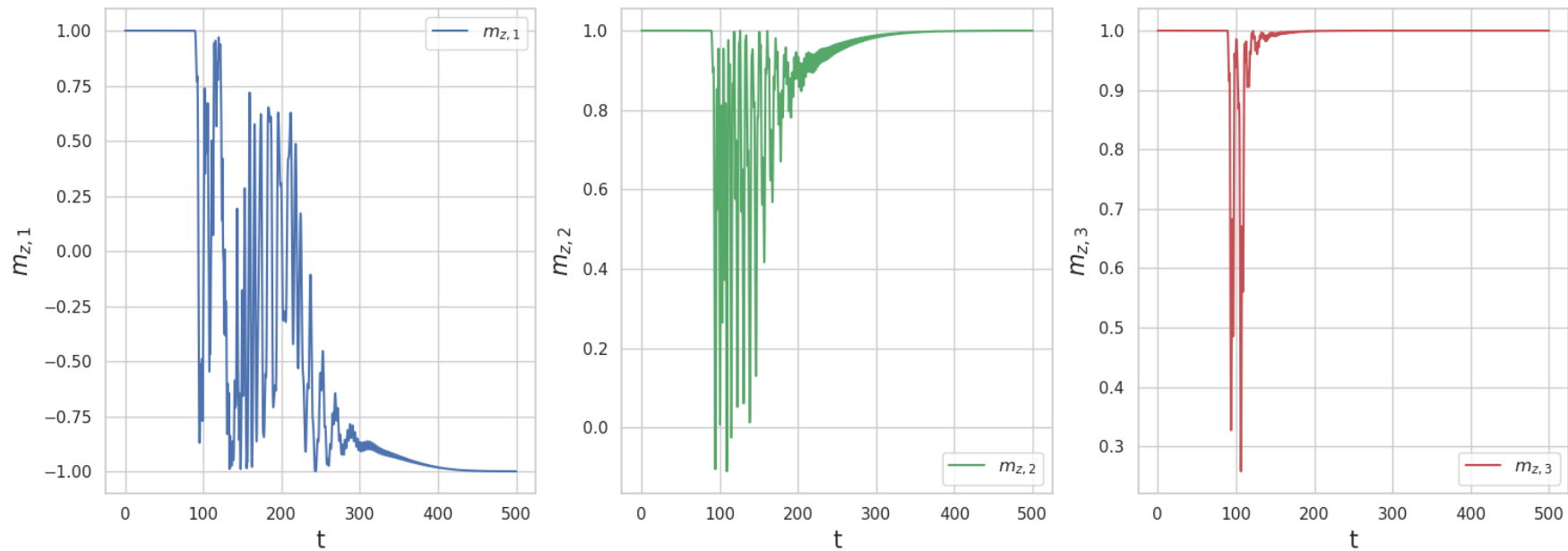
$$m_{xi} = 0, m_{yi} = 0, m_{zi} = 1, \varphi_i = 0, u_{ci} = 0, U_i = 0$$

Система уравнений решается с использованием функции `SOLVE_IVP` из библиотеки `SCIPY`

Функция `MY_SFS` определяет правую часть системы уравнений.

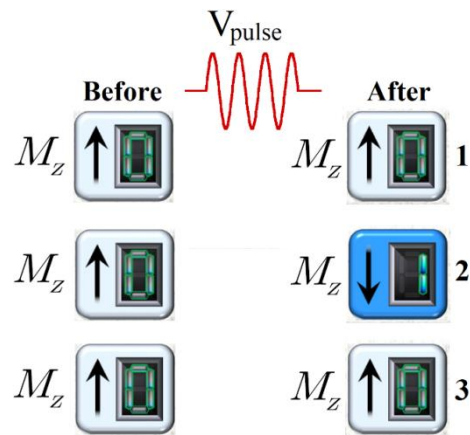
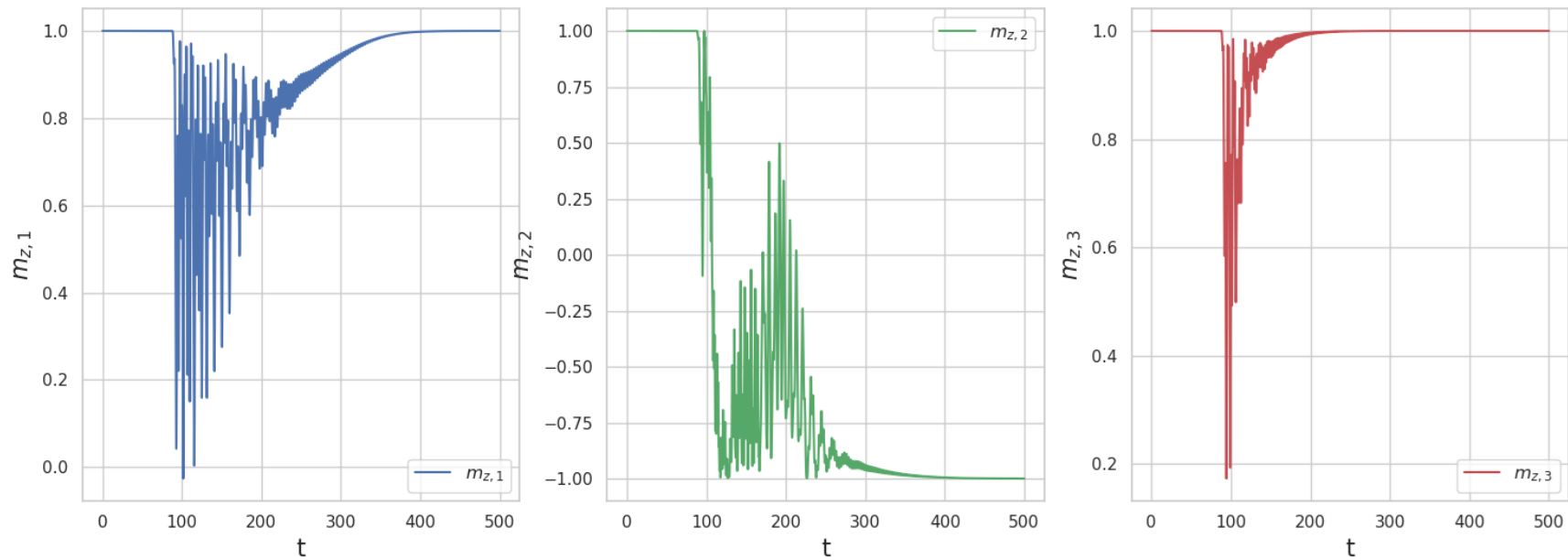
```
omega=1.5
f = partial(my_sfs, G=G, r=r, alpha=alpha, wF=wF, C1=C1, C2=C2, C3=C3, R1=R1, R2=R2, R3=R3, \
            omega_c1=omega_c1, omega_c2=omega_c2, omega_c3=omega_c3, As=As, omega=omega, t_s=t_s, \
            delta_t=delta_t)
t_e = np.linspace(t0, tf, nt)
s0 = np.array([0.000001, 0, 1, 0, 0, 0, 0.000001, 0, 1, 0, 0, 0, 0.0000001, 0, 1, 0, 0, 0])
sol_1 = solve_ivp(f, [t0, tf], s0, t_eval=t_e, method='BDF', rtol=1e-8, atol=1e-8)
```

Результаты управляемого переворота



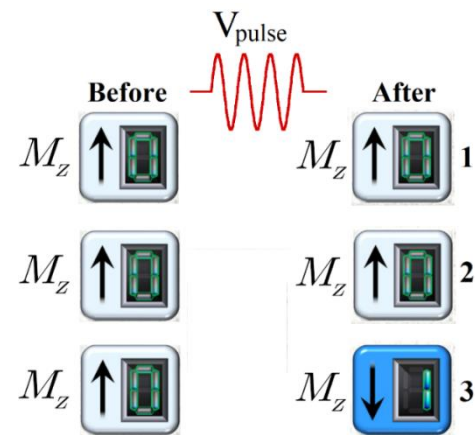
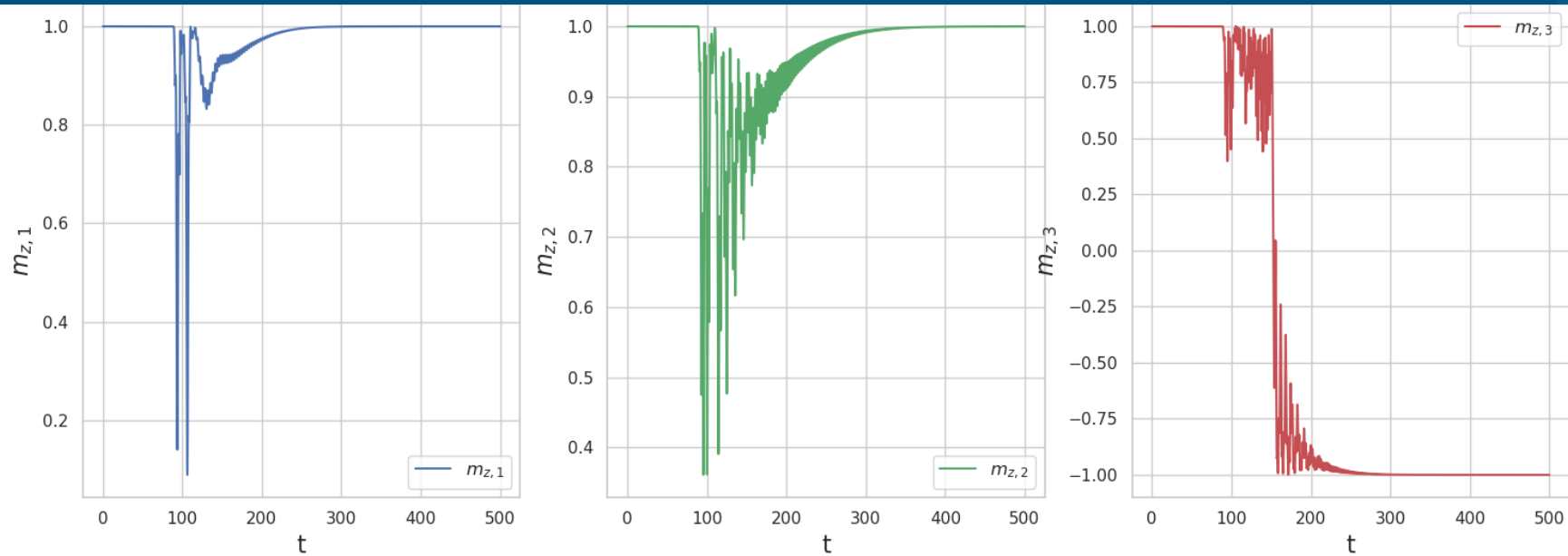
Приложив импульс напряжения с частотой, соответствующей собственной частоте первого LCR-контура, можно реализовать переворот намагниченности в первом Φ_0 переходе.

Результаты управляемого переворота



Приложив импульс напряжения с частотой, соответствующей собственной частоте второго LCR-контура, можно реализовать переворот намагниченности во втором Φ_0 переходе.

Результаты управляемого переворота



Приложив импульс напряжения с частотой, соответствующей собственной частоте третьего LCR-контура, можно реализовать переворот намагниченности в третьем Фи-0 переходе.

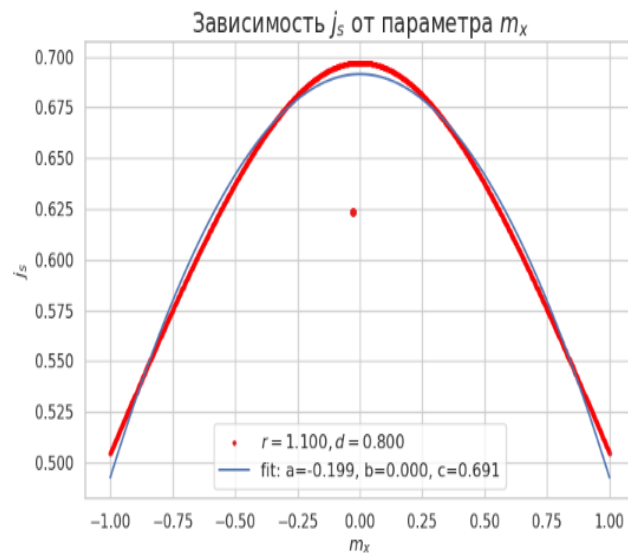
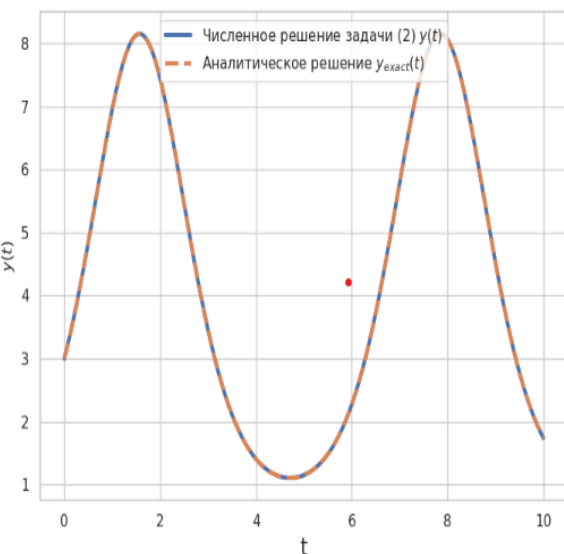
Научно-образовательная деятельность



Практическое занятие в рамках Осенней ИТ-школы ОИЯИ-2024

Математическое моделирование джозефсоновского перехода сверхпроводник/ферромагнетик/сверхпроводник на поверхности трехмерного топологического изолятора #

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



<https://studhub.jinr.ru:8080/itschool2024>

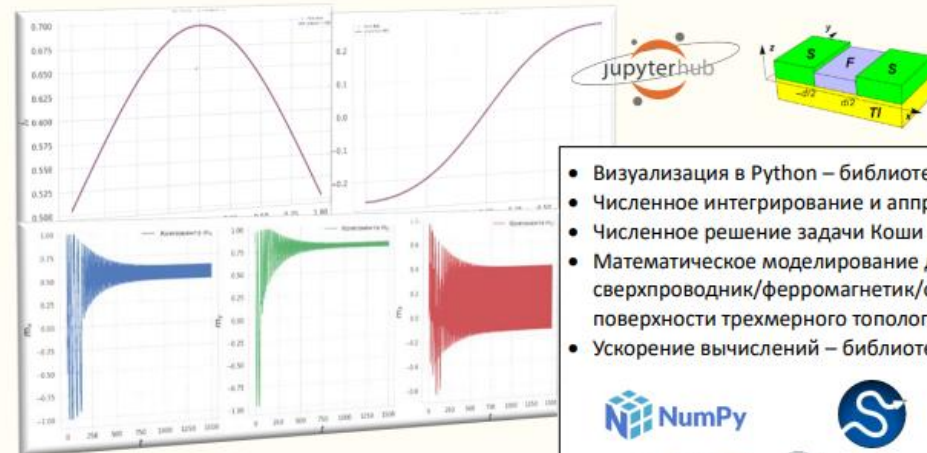
Хакатон по математическому моделированию



54 участника

15 команд

Методическое пособие для практического занятия в рамках ИТ-школы



- Визуализация в Python – библиотеки **matplotlib**, **seaborn**
- Численное интегрирование и аппроксимация
- Численное решение задачи Коши – библиотека **SciPy**
- Математическое моделирование джозефсоновского перехода сверхпроводник/ферромагнетик/сверхпроводник на поверхности трехмерного топологического изолятора
- Ускорение вычислений – библиотека **Joblib**



<https://indico.jinr.ru/event/4735/contributions/28435/attachments/20321/35302/Practice-Booklet.pdf>

Публикации

Публикации в рецензируемых журналах

1. I. R. Rahmonov, A. R. Rahmonova 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 ISSN 1063-7796, **Physics of Particles and Nuclei**, 2024, Vol. 55, No. 3, pp. 528–531. © Pleiades Publishing, Ltd., 2024
3. Anikina A., Belyakov D., Bezhanyan T., Kirakosyan M., Kokorev A., Lyubimova M., Matveev M., Podgainy D., Rakhmonova A., Shadmehri S., Streltsova O., Torosyan Sh., Valya M., Zuev M. Capabilities of the software and information environment of the HybriLIT heterogeneous computing platform for JINR tasks. . **Distributed Computer and Communication Networks**. 244-249 (2024)
4. A. Rahmonova, O. I. Streltsova, I. Rahmonov and M. Zuev. Simulation of a controllable magnetization reversal in a chain of Phi-0 junctions by an alternating voltage pulse (**направлено в журнал Physics of Particles and Nuclei**).

Прочие публикации

1. А. Р. Рахмонова, О. И. Стрельцова, М. И. Зуев, И. Р. Рахмонов, А. В. Нечаевский, Моделирование динамики сверхпроводникового квантового интерферометра с двумя джозефсоновскими переходами на основе Python в среде Jupyter Book Материалы Всероссийской конференции с международным участием стр. 347-353, 2024
2. 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>
3. 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>

Участие в научных мероприятиях 2024

1. Инструментарий для моделирования динамики сверхпроводникового квантового интерферометра с двумя джозефсоновскими переходами

А.Р. Рахмонова, О.И. Стрельцова, М.И. Зуев, И.Р. Рахмонов. **ИТТММ, Moscow, Apr 08-12, 2024**

2. Simulation of a Controllable Magnetization Reversal in a Chain of Phi-0 Junctions by an Alternating Voltage Pulse

A. R. Rahmonova, O. I. Streltsova, I. R. Rahmonov, M. I. Zuev and D. A. Kokaev. **ММСР, Yerevan, Oct 20-25, 2024**

3. Toolkit in Python for simulation of controllable magnetization reversal in a chain of Phi-0 junctions by an alternating voltage pulse

A.R. Rahmonova, O.I. Streltsova, I.R. Rahmonov, M.I. Zuev, D.I. Kokaev, A.V. Nechaevskiy **AYSS-2024, Dubna, Oct 27-Nov 1**

4. Осенняя Школа по информационным технологиям ОИЯИ, 16-20 октября 2023. Инструментарий на основе Python-библиотек и экосистемы Jupyter для решения научных и прикладных задач (проведение практического занятия).

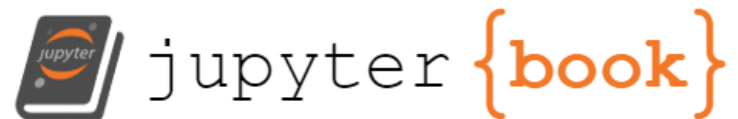
План работ на 2025

1. Разработка алгоритмов для моделирования криогенной памяти на основе цепочки Фи-0 переходов: реализация управляемого переворота намагниченности
2. Разработка вычислительной схемы для моделирования динамики кольцевой системы параллельных Фи-0 переходов.
3. Алгоритмы для моделирования сверхпроводниковых квантовых интерференционных устройств.
4. Моделирования цепочки наноманитов связанных с джозефсоновским переходом.
5. Развитие среды на базе экосистемы ML/DL/HPC гетерогенной платформы HybriLIT для моделирования систем, основанных на джозефсоновских переходах.



Thank you for your attention!

**Toolkit based on Python libraries and Jupyter ecosystems for
solution scientific and applied problems**



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

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