

УДК 004.4

## Моделирование динамики сверхпроводникового квантового интерферометра с двумя джозефсоновскими переходами на основе Python в среде Jupyter Book

А. Р. Рахмонова<sup>1,2</sup>, О. И. Стрельцова<sup>1,2</sup>, М. И. Зуев<sup>1</sup>, И. Р. Рахмонов<sup>2,3,4</sup>, А. В. Нечаевский<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Лаборатория информационных технологий им. М. Г. Мещерякова,  
Объединённый институт ядерных исследований,  
ул. Жолио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия, 141980

<sup>2</sup>Государственный университет Дубна,  
ул. Университетская 19, Дубна, Московская область, Россия, 141980

<sup>3</sup>Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова,  
Объединённый институт ядерных исследований,  
ул. Жолио-Кюри 6, Дубна, Московская область, Россия, 141980

<sup>4</sup>Московский физико-технический институт,  
Институтский пер. 9, Долгопрудный, Московская область, Россия, 141701

Email: rahmonova@jinr.ru, strel@jinr.ru, zuevmax@jinr.ru, rahmonov@theor.jinr.ru, nechav@jinr.ru

В работе представлены результаты разработки инструментария для моделирования физических характеристик сверхпроводникового квантового интерферометра с двумя джозефсоновскими переходами (superconducting quantum interference device – SQUID, СКВИД). С использованием Python в среде Jupyter Book разработаны алгоритмы для вычисления вольт-амперной характеристики СКВИДа под воздействием внешнего магнитного поля и вычисления зависимости критического тока СКВИДа от внешнего магнитного поля. Исследования проведены на базе экосистемы ML/DL/HPC Гетерогенной платформы HybridIT (ЛИТ ОИЯИ). Моделирования проведены с использованием библиотеки Numba, также реализован параллельный алгоритм вычисления зависимости критического тока от внешнего магнитного поля и показана эффективность параллельных вычислений.

**Ключевые слова:** математическое моделирование, джозефсоновские переходы, сверхпроводниковый квантовый интерферометр, параллельные вычисления, язык программирования Python

### 1. Введение

Эффект Джозефсона, наблюдаемый в джозефсоновском переходе (ДП), который представляет собой связь двух сверхпроводников посредством несверхпроводящего барьера [1], является одним из интереснейших явлений физики сверхпроводимости. Системы, содержащие ДП, давно нашли свое применение в различных отраслях науки и техники [2, 3]. Одним из таких примеров являются сверхпроводниковые квантовые интерференционные устройства, известные как СКВИД (от английского SQUID – Superconducting Quantum Interference Device) [4]. Различают два типа СКВИД: СКВИД постоянного тока (DC-SQUID) и СКВИД переменного тока (RF-SQUID). СКВИД постоянного тока представляет собой сверхпроводниковое кольцо, состоящее из двух параллельно соединенных ДП, и применяется как устройство для измерения очень слабых магнитных полей. При этом, СКВИД переменного тока может применяться, например, в качестве чувствительного прибора для измерения слабого переменного поля.

В этой работе проведено моделирование вольт-амперной характеристики (ВАХ) СКВИДа постоянного тока и зависимости его критического тока от внешнего магнитного поля. При решении этих задач возникает необходимость проведения времязатратных вычислений при различных значениях параметров. В связи с этим актуальной проблемой для исследователей является разработка эффективных алгоритмов вычисления.

В настоящей работе представлены разработанные алгоритмы с использованием языка программирования Python в среде Jupyter Notebook для вычисления ВАХ СКВИДа под воздействием внешнего магнитного поля и нахождения критического тока в процессе вычисления ВАХ. Также реализован параллельный алгоритм для расчёта зависимости критического тока от величины внешнего магнитного поля и показана эффективность параллельной реализации с помощью библиотеки Numba. Разработанный инструмент для моделирования СКВИДа является частью развиваемой экосистемы для моделирование систем, основанных на джозефсоновских переходах [5], и представлен в виде электронной книги Jupyter Book [6], а скачанный Jupyter Notebook позволяет воспроизводить полученные результаты и служить основой для моделирования подобных систем.

## 2. Математическая модель

Рассмотрим СКВИД постоянного тока (DC-SQUID) [4], схематический вид которого представлен на Рис. 1 (а). Плоскость, на которой лежат ДП, ограниченная соединяющими сверхпроводящими проводниками, будем называть поверхностью СКВИДа. Предположим, что через СКВИД протекает электрический ток (слева направо). А также полагаем, что перпендикулярно к поверхности СКВИДа приложено постоянное магнитное поле  $B$  с потоком  $\Phi_{ext} = BS$ , где  $S$  – площадь поверхности СКВИДа.

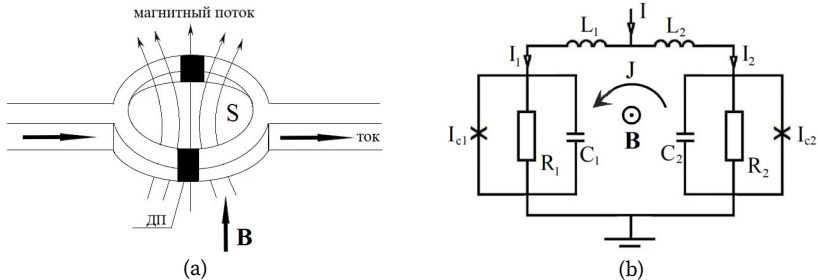


Рис. 1. (а) Схематический вид СКВИДа; (б) Эквивалентная схема СКВИДа

Динамика перехода описывается *Resistively Capasitevely Shunted Junction* (RCSJ) моделью [2, 3, 7], в рамках которой ДП рассматривается как параллельное соединение конденсатора, резистора и сверхпроводника, через которые протекают, соответственно, ток смещения, квазичастичный и сверхпроводящий токи. Учитывая индуктивности сверхпроводящих проводников, соединяющих ДП, можно составить эквивалентную схему СКВИДа, которая представлена на Рис. 1 (б). Индексами 1 и 2 обозначены, соответственно, левый и правый ДП. Приложенный внешний ток  $I$  к СКВИДу протекает, распределяясь на токи  $I_1$  и  $I_2$ , и в резистивном состоянии ДП приводит к среднему напряжению  $V$ . Кроме того, из-за наличия потока внешнего магнитного поля  $\Phi_{ext}$  возникает циркулирующий сверхпроводящий ток  $J$ . На эквивалентной схеме через  $L_1$  и  $L_2$  обозначены индуктивности сверхпроводящих проводников, соединяющих ДП, а через  $C_i$ ,  $R_i$ ,  $I_{ci}$  обозначены, соответственно, емкость, сопротивление и критический ток  $i$ -го ДП ( $i = 1, 2$ ). В рассматриваемой модели будем полагать, что индуктивности проводников равны друг другу  $L_1 = L_2 = L$  и ДП СКВИДа имеют одинаковое значение параметров, т.е.  $C_1 = C_2 = C$ ,  $R_1 = R_2 = R$  и  $I_{c1} = I_{c2} = I_c$ .

Учитывая соотношение Джозефсона, выражения для токов через ДП 1 и 2, и выражения для квантования магнитного потока, можно записать замкнутую систему уравнений в нормированных (безразмерных) величинах для описания динамики СКВИДа постоянного тока в следующем виде:

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

где  $\beta_c = C\Phi_0\omega_c^2/(2\pi I_c)$  – параметр МакКамбера,  $\omega_c = 2\pi R I_c / \Phi_0$  – характеристическая частота Джозефсона,  $\beta_L = 2\pi L I_c / \Phi_0$  – безразмерная индуктивность,  $\Phi_0 = h/(2e)$  – квант магнитного потока,  $\varphi_{ext} = \Phi_{ext}/\Phi_0$  – безразмерный поток внешнего магнитного поля. Здесь напряжение нормировано на  $V_c = I_c R$ , ток на  $I_c$  и время  $t$  на  $\omega_c^{-1}$ , где  $\omega_c = 2\pi V_c / \Phi_0$ . Начальные условия для системы уравнений (1) заданы в виде  $V_1(0) = V_2(0) = 0$  и  $\varphi_1(0) = \varphi_2(0) = 0$ .

### 3. Вычислительная схема и программная реализация

#### Вычислительная схема

Ниже опишем алгоритм вычисления ВАХ и зависимости критического тока от внешнего магнитного поля. При заданном значений параметров и начальных условий при фиксированном значении тока  $I$  численно решается система дифференциальных уравнений (1) на временном интервале  $[0, T_{\max}]$  с шагом  $\Delta t$  и в результате получают временные зависимости  $V_i(t)$  и  $\varphi_i(t)$  ( $i = 1, 2$ ). Далее, полученные временные зависимости напряжения усредняются по времени по формуле

$$\bar{V}_i = \frac{1}{T_{\max} - T_{\min}} \int_{T_{\min}}^{T_{\max}} V_i(t) dt, \quad (i = 1, 2), \quad (2)$$

где  $T_{\min}$  выбирается таким, что начиная с него происходит стабилизация решения.

Среднее напряжения СКВИДа  $\bar{V}$  находится как среднеарифметическое значение  $\bar{V}_1$  и  $\bar{V}_2$ . Полученное значение  $\bar{V}$  при заданном значении тока  $I$  считается, как одна точка ВАХ. Далее, меняется значение тока на  $\Delta I$  и повторяются вышеописанные расчеты. При этом, вычисленные для предыдущего значения тока  $\varphi_i(T_{\max})$  и  $V_i(T_{\max})$ ,  $i = 1, 2$ , используются в качестве начальных условий для вычислений при текущем значении тока. Таким образом, увеличивая ток до  $I_{\max}$  и затем, уменьшая его обратно до нуля, получаем ВАХ СКВИДа. Значение внешнего тока, при которой появляется ненулевое среднее напряжение, т.е. выполняется условие  $\bar{V} > 0$ , Критическим током СКВИДа.

#### Программная реализация

Вычислительной схемы осуществлялась на языке Python с использованием библиотеки Numba [9], которая позволяет ускорить работу с NumPy-массивами и математическими функциями, что достигается за счет динамической (Just-in-time, JIT) компиляции наиболее времязатратных функций, которые декорируются (декоратор `numba.njit`) и в процессе выполнения программы транслируются в машинный код. Для решения задач Коши для системы уравнений (1) использовалась Numba-реализация (wrapper) метода LSODA из ODEPACK, представленная в репозитории [11], с применением библиотеки Numba. Отметим, что такой выбор библиотеки

позволяет ускорить вычисления более, чем в 60 раз по сравнению с использованием функции библиотеки SciPy. Еще одна возможность существенного сокращения времени расчетов при вычислении зависимости критического тока от потока  $\varphi_{ext}$  достигается при ее параллельной реализации. Распараллеливание осуществлялось по значениям потока  $\varphi_{ext}$  с применением функции `numba.prange`, механизм которой аналогичен циклам `parallel for` в OpenMP. Параллелизация вычисления в функции происходит автоматически и количество точек, которое будет посчитано каждым потоком, регулируется внутренними механизмами библиотеки.

Вычисления проводились на компоненте ML/DL/HPC экосистемы гетерогенной платформы HubsIT [10] со следующими характеристиками: 2x Intel Xeon Gold 6148 (2.4 ГГц, 20 ядер / 40 потоков), 512 ГБ оперативной памяти DDR4.

#### 4. Результаты расчетов и анализ эффективности параллельной реализации

Были проведены расчеты ВАХ при значениях параметров  $\beta_c = 0.5$ ,  $\beta_L = 1$ ,  $n = 0$  и значениях потока внешнего магнитного поля  $\varphi_{ext} = 0$ ,  $\varphi_{ext} = 0.25$  и  $\varphi_{ext} = 0.5$ , результаты которых показаны на Рис. 2 (а). Численное моделирование проводилось в интервале времени  $[0, T_{max}]$  ( $T_{max} = 1000$ ) с шагом  $\Delta t = 0.05$ . Для нахождения усредненных значений напряжений, согласно формуле (2),  $T_{min}$  выбиралось равным 50. В ходе расчетов ток увеличивался от нуля до  $I_{max} = 3.2$  с шагом  $\Delta I = 0.001$ . Как видно из Рис. 2 (а), при  $\varphi_{ext} = 0$  критический ток равен  $I_c = 2$ , при  $\varphi_{ext} = 0.25 - I_c = 1.58$ , а при  $\varphi_{ext} = 0.5 - I_c = 0.8$ , т.е. с изменением  $\varphi_{ext}$  изменяется величина критического тока. Отметим, что поскольку ток нормирован на  $I_c$ , и критический ток каждого ДП в нормированных единицах равен 1, и соответственно критический ток СКВИДа получается равным 2 (при  $\varphi_{ext} = 0$ ).

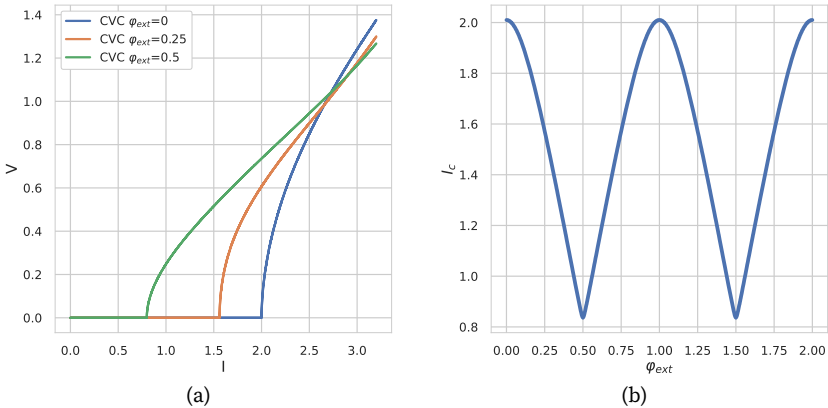


Рис. 2. (а) Вольт-амперные характеристики, рассчитанные при  $\varphi_{ext} = 0$ ,  $\varphi_{ext} = 0.25$  и  $\varphi_{ext} = 0.5$ ; (б) Зависимость критического тока СКВИДа от потока внешнего магнитного поля

Для выяснения характера зависимости критического тока СКВИДа от потока  $\varphi_{ext}$  была рассчитана зависимость критического тока в интервале потока  $[0, 2]$ , результаты которой представлен на Рис. 2 (б). Данная зависимость демонстрирует модулирование критического тока с изменением  $\varphi_{ext}$ , что согласуется с известными результатами [4].

### Анализ эффективности параллельной реализации

Для вычисления зависимости критического тока СКВИДа от  $\varphi_{ext}$ , представленной Рис. 2 (b), интервал  $[0, 2]$  разбивался на равномерную сетку с  $point=1001$ , при этом время расчета в последовательном режиме составляло порядка 20 минут.

Результаты исследования эффективности проведения расчетов в параллельном режиме представлены на Рис. 3 и 4, а именно график ускорения и эффективности параллельных вычислений в зависимости от количества потоков. На графиках зеленым пунктиром отмечены линии, соответствующие случаю идеального распараллеливания. Из графиков видно, что было достигнуто ускорение в 27 раз при вычислениях на 70 потоках, а время расчетов сократилось с 20 минут до 47 секунд.

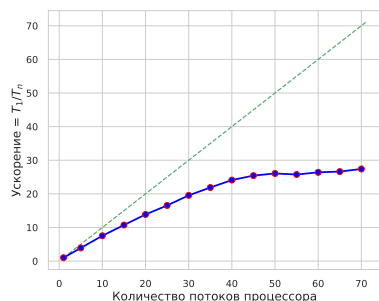


Рис. 3. График зависимости ускорения параллельных вычислений от количества потоков

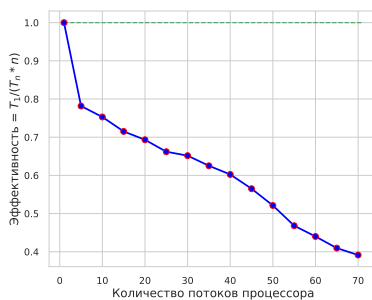


Рис. 4. Зависимость эффективности параллельных вычислений от количества потоков

## 5. Заключение

Разработан инструментарий для моделирования физических свойств сверхпроводникового квантового интерферометра с двумя джозефсоновскими переходами. На языке программирования Python разработаны и реализованы алгоритмы для вычисления вольт-амперной характеристики СКВИДа под воздействием внешнего магнитного поля и зависимости критического тока СКВИДа от внешнего магнитного поля. При программной реализации разработанных алгоритмов использовались функции библиотеки Numba, в том числе механизм распараллеливания при вычислении зависимости критического тока от потока внешнего магнитного поля. Благодаря этому было достигнуто ускорение в 27 раз. Представленные результаты были получены на экосистеме ML/DL/HPC Гетерогенной платформы HybridIT (ЛИТ ОИ-ЯИ), а разработанный инструментарий в виде JupyterBook доступен по ссылке: <http://studhub.jinr.ru:8080/squid>.

## Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ в рамках проекта № 22-71-10022.

### Литература

1. Josephson B.D. Physics Letters, V. 1, no. 7., P. 251–253, 1962.
2. Likharev K. K. Dynamics of Josephson Junctions and Circuits. New York: Gordon and Breach, 1986.
3. Barone A., Paterno G. Physics and Applications of the Josephson Effect. New York: John Wiley & Sons, 1982.
4. Clarke J., Braginski A.I. The SQUID Handbook: Applications of SQUIDs and SQUID Systems, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2006.
5. Python-инструментарий для моделирования динамики джозефсоновского перехода под воздействием внешнего излучения (ЛИТ – ЛТФ ОИЯИ), (2023-2024). URL: <http://studhub.jinr.ru:8080/jjbook>
6. Инструментарий для моделирования гибридных наноструктур сверхпроводник/магнетик (ЛИТ – ЛТФ ОИЯИ), (2022-2024) URL: <http://studhub.jinr.ru:8080/books>
7. Stewart W.C. Appl. Phys. Lett. 12, 277–280, 1968.
8. SciPy. Integration and ODEs [Electronic resource]. Available at: [https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.integrate.solve\\_ivp.html](https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.integrate.solve_ivp.html) (Accessed 20.03.2024).
9. Numba: A High Performance Python Compiler [Electronic resource]. Available at: <https://numba.pydata.org/> (Accessed 20.03.2024).
10. Adam Gh., Bashashin M., Belyakov D. et al. // Selected Papers of the 8th International Conference «Distributed Computing and Grid-technologies in Science and Education» (GRID 2018), Dubna, Russia, September 10–14 2018. P. 638–644.
11. numbalsoda [Electronic resource]. Available at: <https://github.com/Nicholaswogan/numbalsoda> (Accessed 20.03.2024).

UDC 004.4

## Simulation of the dynamics of a superconducting quantum interferometer with two Josephson junctions based on Python in the Jupyter Book environment

A. R. Rahmonova<sup>1,2</sup>, O. I. Streltsova<sup>1,2</sup>, M. I. Zuev<sup>1</sup>, I. R. Rahmonov<sup>2,3,4</sup>, A. V. Nechaevskiy<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> MLIT, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia  
Joliot-Curie 6, Dubna, Moscow region, 141980, Russia

<sup>2</sup> BLTP, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia  
Joliot-Curie 6, Dubna, Moscow region, 141980, Russia

<sup>3</sup> Dubna State University, Dubna, Russia

<sup>4</sup> Moscow Physical and Technical Institute, Dolgoprudny, Russia

Email: rahmonova@jinr.ru, strel@jinr.ru, zuevmax@jinr.ru, rahmonov@theor.jinr.ru, nechav@jinr.ru

We have presented the results of the development of toolkit for modeling the physical characteristics of a superconducting quantum interference device (SQUID) with two Josephson junctions. Using Python in the Jupyter Book environment, algorithms for calculation of the current-voltage characteristic of a SQUID under the influence of an external magnetic field and calculation of the dependence of the critical current of the SQUID on the external magnetic field. The research was carried out on the basis of the ML/DL/HPC ecosystem of the Heterogeneous Platform HybriLIT (LIT JINR). The simulation was carried out using the

---

Numba library; a parallel algorithm for calculating the dependence of the critical current on the external magnetic field was also implemented and the efficiency of parallel calculations was shown.

**Key words and phrases:** mathematical modeling, Josephson junctions, superconducting quantum interferometer, parallel computing, programming language Python