

Ускорение вычислений на Python для задач моделирования динамики джозефсоновского перехода под воздействием внешнего излучения

А. Р. Рахмонова^{1,2}, И. О. Стрельцова^{1,2}, М. И. Зуев¹, И. Р. Рахмонов^{1,2,3}

¹Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Московская обл.

²Государственный университет Дубна, Дубна, Московская обл.

³Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Московская обл.

В работе представлены результаты исследования по ускорению проведения расчетов на основе Python-реализаций вычислительных схем, разработанных для моделирования динамики джозефсоновского перехода под воздействием внешнего излучения. С использованием Numba в среде Jupyter Book разработаны алгоритмы для вычисления вольт-амперной характеристики джозефсоновского перехода. На примере расчета зависимости ширины ступеньки Шапиро от амплитуды внешнего излучения показана возможность многократного ускорения проведения вычислений. Также реализован параллельный алгоритм для расчета зависимости ширины ступеньки Шапиро от амплитуды внешнего излучения и продемонстрирована эффективность параллельного вычисления.

Введение

В слабой связи двух сверхпроводников посредством несверхпроводящего барьера, называемого джозефсоновским переходом (ДП) наблюдается эффект Джозефсона [1], который является одним из интереснейших явлений физики сверхпроводимости. Под воздействием внешнего излучения при частотном захвате джозефсоновских осцилляций внешним излучением на вольт-амперной характеристике (ВАХ) ДП возникает ступенька постоянного напряжения, широко известная под названием ступеньки Шапиро [2]. Ширина ступеньки Шапиро зависит от амплитуды и частоты внешнего излучения. При численном моделировании динамики ДП и исследовании влияния параметров модели на ступеньку необходимо провести времязатратные вычисления при различных значениях параметров. В связи с этим актуальной проблемой для исследователей является разработка эффективных алгоритмов для вычисления ВАХ и зависимости ширины ступеньки Шапиро от параметров модели.

В настоящей работе представлены разработанные алгоритмы с использованием языка программирования Python в среде Jupyter Notebook для вычисления ВАХ ДП под воздействием внешнего излучения и нахождения ширины ступеньки в процессе вычисления ВАХ. Также реализован параллельный алгоритм для расчета зависимости ширины ступеньки Шапиро от амплитуды внешнего излучения и продемонстрировано многократное ускорение процесса вычисления.

Теоретическая модель

Динамика джозефсоновского перехода описывается моделью Resistively Capacitively Shunted Junction (RCSJ) [3]. Учет влияния внешнего излучения на динамику ДП реализуется путем добавления гармонического внешнего тока. Таким образом, система дифференциальных уравнений (СДУ) для описания динамики ДП под воздействием излучения [4] в нормированных величинах принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{dV}{dt} &= I - \sin(\varphi) - \beta V + A \sin(\omega t), \\ \frac{d\varphi}{dt} &= V, \end{aligned} \quad (1)$$

где V – напряжение, φ – разность фаз, β – параметр диссипации, I – внешний ток, A – амплитуда, ω – частота внешнего излучения. Здесь ω нормирована на плазменную частоту $\omega_p = \sqrt{2e I_c / \hbar C}$, время t на ω_p^{-1} , где C – емкость ДП, I_c – критический ток, напряжение нормировано на $V_0 = \omega_p \hbar / 2e$, внешний ток и амплитуда нормированы на I_c .

Алгоритм вычисления

Вкратце опишем алгоритм вычисления ВАХ и зависимости ширины ступеньки от амплитуды. При заданном значении параметров и начальных условий при фиксированном значении тока I численно решается СДУ (1) в интервале времени $[0, T_{max}]$ с шагом Δt . Полученная временная зависимость напряжения усредняется по времени по формуле

$$V = 1 / (T_{max} - T_{min}) \int_{T_{min}}^{T_{max}} V(t) dt,$$

и в результате вычисляется одна точка ВАХ. При ус-

реднении интегрирование начинается от времени T_{min} , после которого решение стабилизируется. Далее меняется значение тока на ΔI и повторяются вышеописанные действия. Таким образом увеличивая ток до максимального I_{max} и уменьшая его обратно до нуля, получаем ВАХ ДП.

Для определения ширины ступеньки Шапиро в процессе вычисления ВАХ фиксируются максимальное и минимальное значения тока, при которых выполняется условие $\omega = V$, и их разность равна величине ширины ступеньки Шапиро.

Для численного решения СДУ нами использована библиотека SciPy [5] и Numba. Представленные в работе результаты рассчитаны на компоненте ML/DL/HPC экосистемы гетерогенной платформы HybriLIT [6] со следующими характеристиками: 2x Intel Xeon Gold 6148 (20 cores @ 2.4 Ghz), 512 GB DDR4 RAM.

Результаты

На рис. 1, а показана рассчитанная ВАХ ДП при наличии внешнего излучения. Как видно, при напряжении $V = \omega$ образуется ступенька постоянного на-

пряжения, т. е. основная гармоника ступеньки Шапиро, и при $V = 2\omega$ – вторая гармоника.

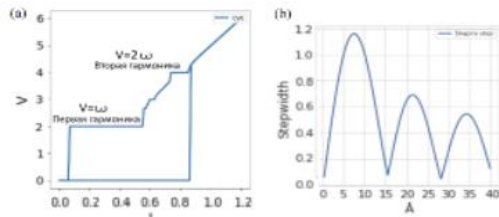


Рис. 1. ВАХ джозефсоновского перехода под воздействием внешнего излучения (а) и зависимость ширины ступеньки Шапиро от амплитуды внешнего излучения (б)

На рис. 1, б представлена рассчитанная зависимость ширины ступеньки Шапиро от амплитуды внешнего излучения.

Сначала проанализируем ускорение вычисления с использованием библиотеки SciPy. Для 160 значений амплитуды с шагом $\Delta A = 0,25$ продолжительность вычисления в последовательном режиме составляла 29 часов. Для ускорения вычислений была использована функция Parallel из библиотеки Joblib [7, 8]. В этом случае при использовании 40 потоков время вычисления занимало чуть больше 1 часа, и таким образом получено ускорение порядка 28,5 раза.

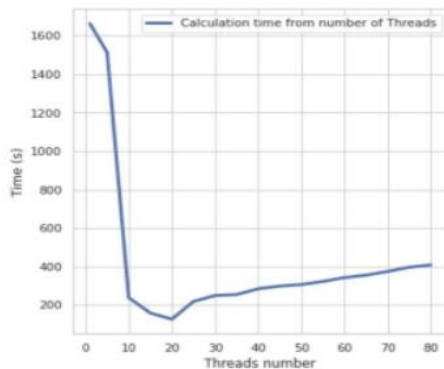


Рис. 2. Время расчета зависимости ширины ступеньки Шапиро как функция от числа вычислительных потоков при использовании библиотеки Numba

Процесс вычисления значительно ускорился при использовании библиотеки Numba. Вычисления проведены для тех же значений параметров, что и в случае использования SciPy и продолжительность вычисления в последовательном режиме составляла порядка 5 мин. На рис. 2 представлена зависимость времени расчетов от числа задействованных вычислительных потоков при использовании Numba.

В параллельном режиме с использованием 20 потоков время расчета составило 26 с и получено ускорение в 11 раз.

Если сравнивать с результатами SciPy, то при использовании Numba было достигнуто ускорение в 70 раз, что является достаточно весомым аргументом в пользу Numba.

Заключение

В заключении отметим, что нами разработан инструментарий на языке Python для вычисления вольт-амперной характеристики джозефсоновского перехода под воздействием внешнего излучения и вычисления зависимости ширины ступеньки Шапиро от амплитуды внешнего излучения. Показано, что в параллельном режиме используя библиотеку Joblib достигнуто ускорение в 28,5 раза по сравнению с последовательным режимом. На основе проведенного сравнительного анализа использования библиотек SciPy и Numba показано ускорение в 70 раз.

Подготовленный инструментарий может быть полезным для проведения лабораторных и исследовательских работ студентов и научных сотрудников. Также разработанные алгоритмы и инструменты позволяют ускорить получение результатов в процессе исследований поведения ступеньки Шапиро в различных типах джозефсоновских переходов.

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

Литература

1. B. D. Josephson // *Physics Letters*. 1962. V. 1, no. 7. P. 251–253.
2. S. Shapiro // *Phys. Rev. Lett.* 1963. V. 11, no. 2. P. 80–82.
3. D. E. McCumber // *Journal of Applied Physics*. 1968. V. 39, no. 7. P. 3113–3118.
4. W. C. Stewart // *Journal of Applied Physics*. 1968. V. 12, no. 8. P. 277–280.
5. SciPy. Integration and ODEs [Electronic resource]. Available at: https://docs.scipy.org/doc/scipy/reference/generated/scipy.integrate.solve_ivp.html (accessed 01.10.2023).
6. Gh. Adam, M. Bashashin, D. Belyakov, et al. IT-ecosystem of the HybriLIT heterogeneous platform for high-performance computing and training of IT-specialists // *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.
7. Joblib: running Python functions as pipeline jobs. [Electronic resource]. Available at: <https://joblib.readthedocs.io> (accessed 01.10.2023).
8. Joblib. Parallel: Helper class for readable parallel mapping. [Electronic resource]. Available at: <https://joblib.readthedocs.io/en/latest/generated/joblib.Parallel.html> (accessed 01.10.2023).