Семинар

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

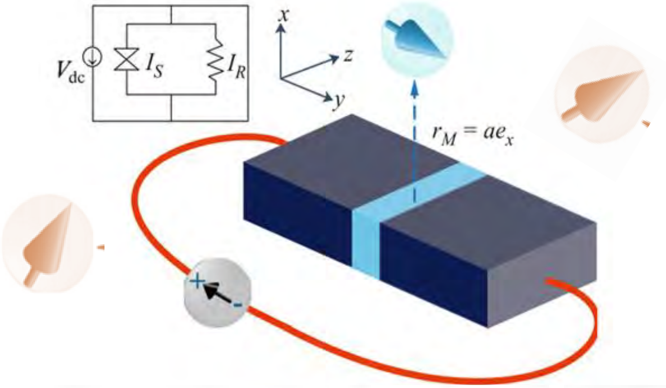
Ю.А. Бутенко, М.В. Башашин, А.С. Воронцов,
М.И. Зуев, А.Р. Рахмонова, И.Р. Рахмонов,
А.В. Нечаевский, Д.И. Пряхина, О.И. Стрельцова

Лаборатория информационных технологий им. М.Г. Мещерякова
Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова
Объединенный институт ядерных исследований

Осенняя Школа по информационным технологиям ОИЯИ
14-19 ноября 2022

Исследование систем, основанных на джозефсоновских перехода

Блок символьных вычислений



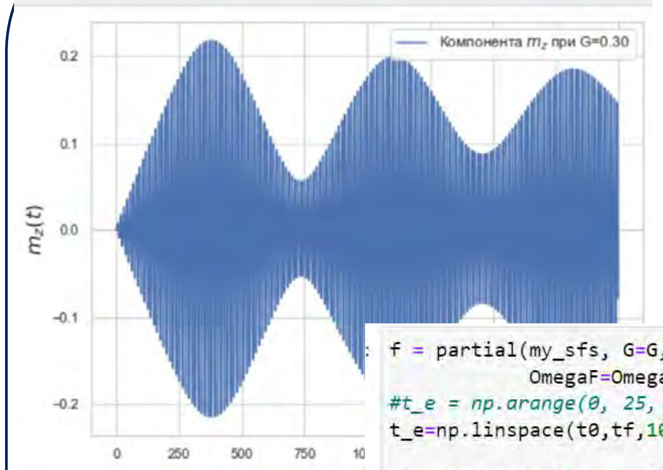
$$\gamma_{m_i} \;=\; = -\frac{\mu_0}{2\Phi_0}\int d\mathbf{r}_i \frac{\mathbf{M}_i \times \mathbf{r}_i}{r^3}$$

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

SymPy is a Python library for symbolic mathematics.

matplotlib is a main library for building graphs, diagrams in Python.

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.

Параллелизация многопараметрических расчетов

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

Процесс проведения численных исследований

Математическая постановка задачи

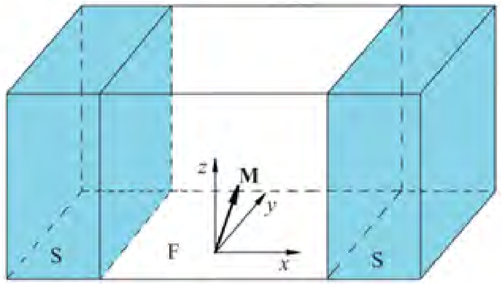
Разработка вычислительной схемы

Подбор библиотек, апробация на модельных расчетах, визуализация

Программная реализация

Проведение расчетов на вычислительных платформах

Анализ результатов, построение графиков, диаграмм….

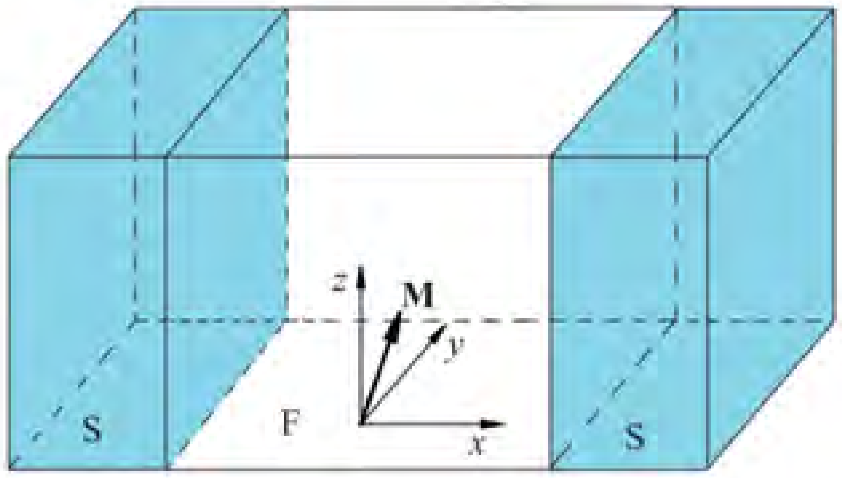


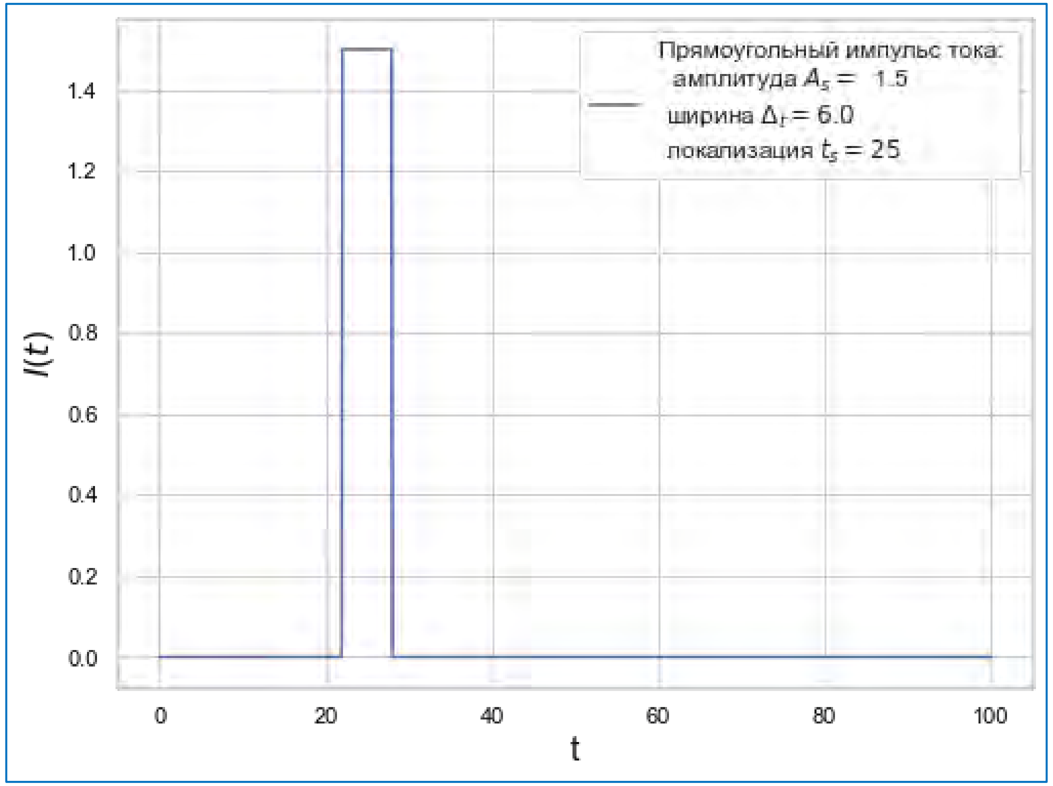
Периодичность появления интервалов обращения магнитного момента джозефсоновского φ_0 -перехода

Разработка Jupyter Notebook **для проведения исследований на** Python

Периодичность появления интервалов обращения магнитного момента джозефсоновского $\varphi 0$ -перехода

Физическая постановка задачи





Исследовать временные зависимости компонент магнитного момента ***M*** при различных значениях параметров φ_0-перехода, на основе которых можно установить интервалы параметров, где происходит его переворот от **1** к **-1** .

Математическая постановка задачи

Динамика магнитного момента рассматриваемой системы описывается уравнением Ландау-Лифшица-Гильберта:

$$\frac{dm_x}{dt} = -\frac{1}{1+M^2\alpha^2}\left\{m_y H_z - m_z H_y + \alpha\left[m_x(M,H) - H_x\right]\right\},$$

$$\frac{dm_y}{dt} = -\frac{1}{1+M^2\alpha^2}\left\{m_z H_x - m_x H_z + \alpha\left[m_y(M,H) - H_y\right]\right\},$$

$$\frac{dm_z}{dt} = -\frac{1}{1+M^2\alpha^2}\left\{m_x H_y - m_y H_x + \alpha\left[m_z(M,H) - H_z\right]\right\},$$

$$\frac{d\varphi}{dt} = -\frac{1}{w}\left(\sin(\varphi - rm_y) + r\frac{dm_y}{dt}\right) + \frac{1}{w}I,$$

Начальные условия:

$$m_x(0) = 0, \quad m_y(0) = 0, m_z(0) = \mathbf{1}, \quad \varphi(0) = 0$$

$M = [m_x, m_y, m_z]$– компоненты магнитного момента, компоненты эффективного поля:

$$H_x(t) = 0,$$

$$H_y(t) = Gr\sin(\varphi(t) - rm_y(t)),$$

$$H_z(t) = m_z(t),$$

параметрами модели:
G – отношение энергии Джозефсона к энергии магнитной анизотропии,
r – константа спин-орбитального взаимодействия,
α– диссипация Гилберта,
w =1 в рамках этого исследования.

Экосистема ML/DL/HPC платформы HybriLIT

jupyterhub

hYBRILIT

jupyter

Keras

scikit learn

NumPy

pandas

matplotlib

High Performance Computing

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**]

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

Computation component

Server with NVIDIA Volta [**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

Экосистема для практических занятий

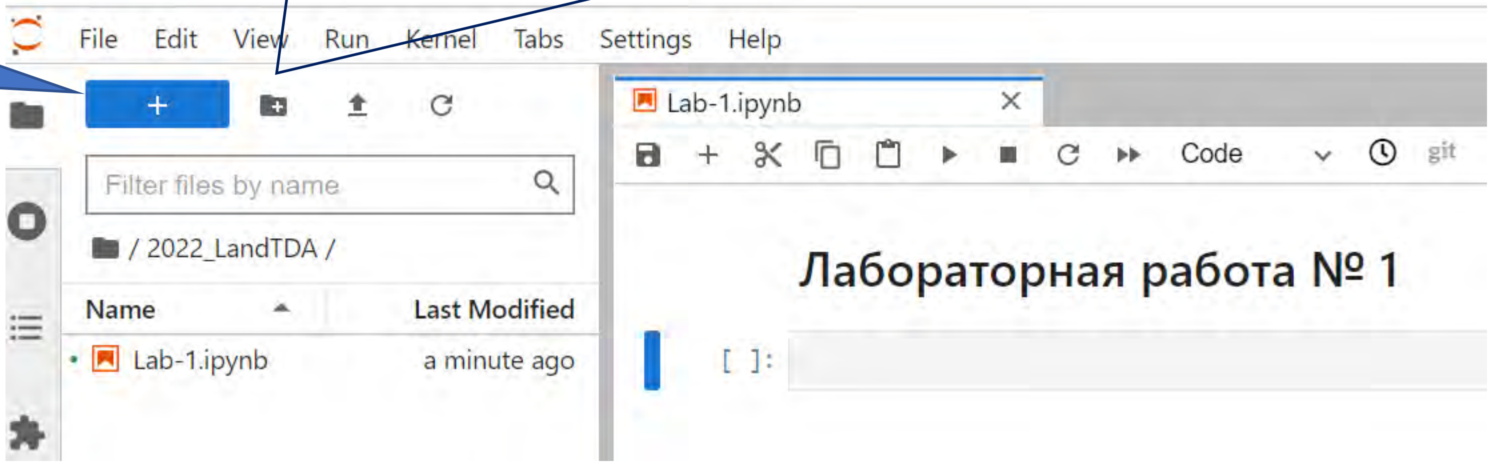
VM https://studhub.jinr.ru
(авторизация через учетную запись GitLab)
установлен JupyterLab

jupyter

Jupyter Notebook представляет собой интерактивную среду для запуска программного кода в браузере.

1. Создайте папку для практических занятий, для этого нажмите на **+** в левой части экрана.

2. Создать новый файл Python 3




```
Login: tut001- tut100
```

hYBRI

Инструментарий для научной визуализации

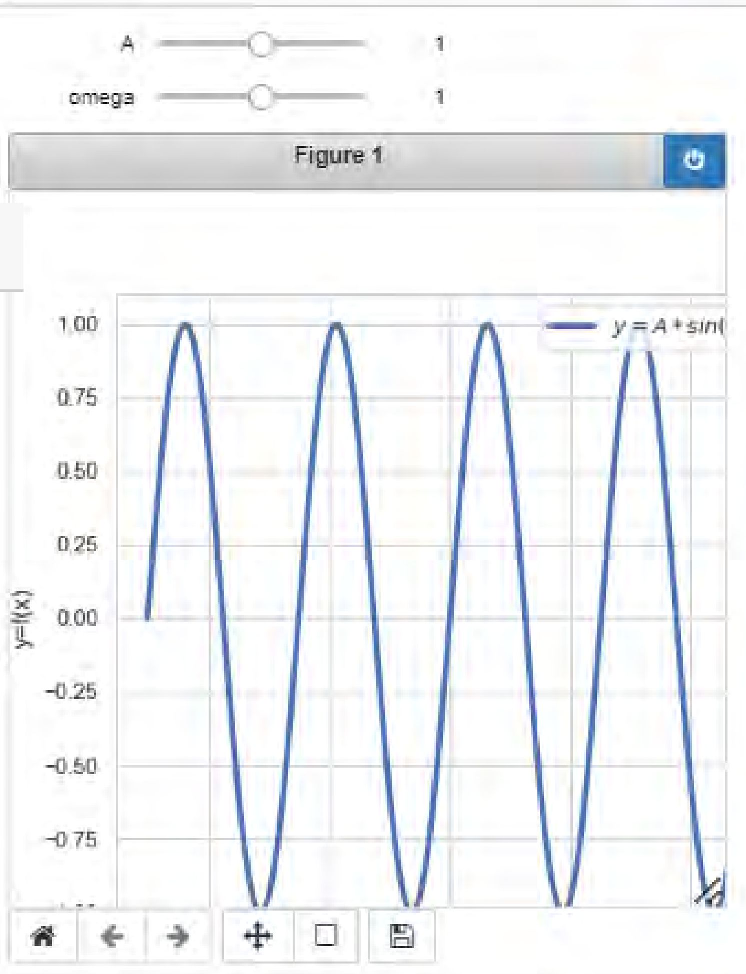
Matplotlib + Jupyter Widgets

```
%matplotlib notebook
```

```
@interact
def show_sin(A=1,omega=1):
    t=np.linspace(-4*np.pi, 4*np.pi, 150 , endpoint=True)
    fig = plt.figure(figsize=(6,6))
 # plot sin
    plt.plot(t, f_sin(t,A,omega),label='$y=A*sin(\omega_t )$ ',linewidth=3.0)
    plt.xlabel('t ')
    plt.ylabel('y=f(x)')

    plt.legend(loc='upper right')

    plt.show()
```



Решение задачи Коши для ОДУ

Численное решение задачи Коши: библиотека SciPy

Задача Коши: Рассмотрим решение начальной задачи (*Intial value problem*) для сисетемы обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, разрешенных ошносительно производной:

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

где $y = (y_1, \ldots, y_n)^T$ - вектор-фукция.

Пример 1: Численно решить задачу Коши:

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

Для сравнения приведем аналитическое решение задачи (2):

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

[Библиотека SciPy]

Решение задачи Коши для ОДУ

Задача 1. Численно решить задачу Коши:

$$\begin{cases} \dfrac{dy(t)}{dt} = y\cos(t)\,, \\ y\big|_{t=0} = y_0. \end{cases}$$

Задача 2. Численно решить задачу Коши:

$$\begin{cases} \dfrac{dy(t)}{dt} = y\cos(\boldsymbol{\omega}\ t)\,, \\ y\big|_{t=0} = y_0. \end{cases}$$

Задача 3. Линеаризованное уравнение на магнитный момент:

$$\frac{d^2 m_y}{dt^2} + 2\alpha\omega_J \frac{dm_y}{dt} + \omega_F^2 m_y = \omega_F^2 G r \sin(\omega_J t)$$

$m_y = y_1$

Система ОДУ:

$$\begin{cases} \dfrac{dy_1}{dt} = y_2, \\ \dfrac{dy_2}{dt} = -2\alpha\omega_J y_2 - \omega_F^2 y_1 + \omega_F^2 G\ r\sin(\omega_J t) \\ y_1\big|_{t=0} = y_{10} \\ y_2\big|_{t=0} = y_{20} \end{cases}$$

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

jupyter {book}

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